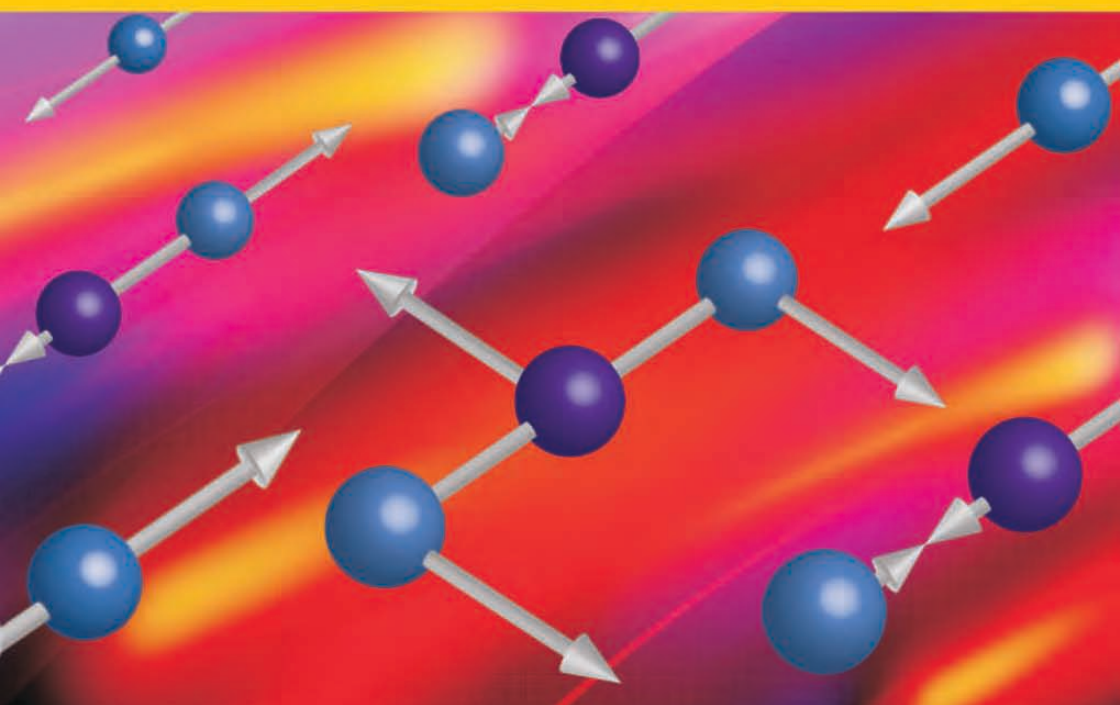




EFEK ISOTOP KARBON

PADA SPEKTRUM INTERAKSI VIBRASI-ROTASI
MOLEKUL KARBONDIOKSIDA



ASAN DAMANIK

**EFEK ISOTOP KARBON
PADA SPEKTRUM INTERAKSI VIBRASI-ROTASI
MOLEKUL KARBONDIOKSIDA**

Asan Damanik



**Penerbit
Universitas Sanata Dharma**

EFEK ISOTOP KARBON PADA SPEKTRUM INTERAKSI VIBRASI-ROTASI MOLEKUL KARBONDIOKSIDA

Copyright © 2011

PENERBIT UNIVERSITAS SANATA DHARMA

Jl. Affandi (Gejayan), Mrican

Tromol Pos 29 Yogyakarta 55281

Telp. (0274) 513301, 515253 Ext.1527/1513

Fax (0274) 562383

e-mail: publisher@usd.ac.id

Diterbitkan oleh:

Penerbit Universitas Sanata Dharma

Jl. Affandi (Gejayan), Mrican

Tromol Pos 29 Yogyakarta 55281

Telp. (0274) 513301, 515253;

Ext.1527/1513

Fax (0274) 562383

e-mail: publisher@usd.ac.id



Penerbit USD

Asan Damanik

Edit Bahasa:

Aluysia Vicka T.S.

Harris H. Setiajidi

Desain Sampul:

Alexander Beny P.

Tata Letak:

Thoms

Universitas Sanata Dharma berlambangkan daun teratai coklat bersudut lima dengan sebuah obor hitam yang menyala merah, sebuah buku terbuka dengan tulisan "*Ad Maiorem Dei Gloriam*" dan tulisan "Universitas Sanata Dharma Yogyakarta" berwarna hitam di dalamnya. Adapun artinya sebagai berikut.

Teratai: kemuliaan dan sudut lima: Pancasila; Obor: hidup dengan semangat yang menyala-nyala; Buku yang terbuka: ilmu pengetahuan yang selalu berkembang; Teratai warna coklat: sikap dewasa yang matang; "*Ad Maiorem Dei Gloriam*": demi kemuliaan Allah yang lebih besar.

Cetakan Pertama

x, 70 hlm.; 148 x 210 mm.

ISBN: 978-979-1088-70-1

EAN: 9-789791-088701

Hak Cipta Dilindungi Undang-Undang.

Dilarang memperbanyak karya tulis ini dalam bentuk dan dengan cara apa pun, termasuk fotokopi, tanpa izin tertulis dari penerbit.

PENGANTAR

Buku ilmiah ini ditulis berdasarkan hasil penelitian yang penulis pernah lakukan yang kemudian menimbulkan keinginan penulis untuk ikut memberikan sumbangan dalam penyebaran hasil penelitian dan pengembangan ilmu pengetahuan khususnya Fisika. Penulis memilih topik kajian efek isotop karbon terhadap spektrum molekul karbondioksida dengan pertimbangan bahwa buku ilmiah tentang efek isotop karbon pada spektrum molekul karbondioksida belum ada. Dengan demikian, buku ini diharapkan dapat mengisi kekosongan referensi tentang efek isotop karbon terhadap spektrum molekul karbondioksida.

Penulis menyadari bahwa buku ini sangat jauh dari sempurna. Hasil yang disajikan dalam buku ini sebagian besar hasil studi pustaka yang kemudian dianalisis secara teoretis. Oleh karena itu, kritik dan saran yang konstruktif dari pembaca akan diterima dengan senang hati. Semoga buku ini dapat membangkitkan kegairahan peneliti dan penulis yang lain untuk menerbitkan hasil-hasil penelitian mereka sehingga dapat disempurnakan dan dikembangkan oleh peneliti lain.

Yogyakarta, Desember 2010

Penulis,

Asan Damanik

DAFTAR ISI

Kata Pengantar	iii
Daftar Isi	v
Daftar Tabel.....	vii
Daftar Gambar	ix
Bab 1 Pendahuluan.....	1
1.1 Isotop Karbon dan Kelimpahannya	2
1.2 Efek Isotop dan Bilangan Gelombang Molekul Karbondioksida	4
1.3 Momen Inersia Molekul Karbondioksida	7
Bab 2 Simetri, Grup Titik, dan Spesies Aras Vibrasi	
Molekul	11
2.1 Simetri dan Operasi Simetri	11
2.2 Grup Titik	15
2.3 Spesies Aras Vibrasi Molekul Karbondioksida	16
Bab 3 Struktur dan Spektrum Molekul	
Karbondioksida.....	19
3.1 Struktur dan Bilangan Gelombang Molekul Karbondioksida	20
3.2 Spektrum Rotasi Raman Molekul Karbondioksida	26

3.3	Spektrum Interaksi Vibrasi-Rotasi Molekul Karbondioksida	31
Bab 4	Efek Isotop Karbon Pada Spektrum Molekul Karbondioksida	41
4.1	Efek Isotop Karbon terhadap Bilangan Gelombang Frekuensi Fundamental	41
4.2	Hasil Analisis Data Interaksi Vibrasi-Rotasi Molekul Karbondioksida	45
Bab 5	Penutup	55
Daftar Pustaka		57
Lampiran A	: Faktor Konversi Satuan Tenaga	59
Lampiran B	: Resonansi Fermi Aras Vibrasi Molekul Karbondioksida	61
Lampiran C	: Bilangan Gelombang Transisi Interaksi Vibrasi-Rotasi Molekul Karbondioksida	63
Indeks		66
Biografi Penulis		69

DAFTAR TABEL

Tabel 1.1	Kelimpahan dan waktu paro isotop karbon	2
Tabel 1.2	Bilangan gelombang frekuensi fundamental CO ₂	5
Tabel 1.3	Hasil pengukuran bilangan gelombang frekuensi fundamental isotop molekul CO ₂	6
Tabel 3.1	Nilai tetapan rotasi, momen inersia, dan jarak antar atom dalam molekul CO ₂	30
Tabel 3.2	Nilai Tetapan Rotasi B Untuk Berbagai Arus Vibrasi CO ₂	40
Tabel 4.1	Hasil perhitungan bilangan gelombang frekuensi fundamental molekul karbondioksida CO ₂ berdasarkan persamaan (3.12)	43
Tabel 4.2	Perbandingan nilai bilangan gelombang frekuensi fundamental molekul CO ₂ hasil perhitungan teoretis (T) dengan hasil eksperimen (E)	43
Tabel 4.3	Bilangan gelombang transisi vibrasi-rotasi molekul CO ₂ pita I dalam satuan cm ⁻¹	45
Tabel 4.4	Bilangan gelombang transisi vibrasi-rotasi molekul CO ₂ pita II dalam satuan cm ⁻¹	47

Tabel 4.5	Nilai rata-rata B dalam satuan cm^{-1} pita I	48
Tabel 4.6	Nilai rata-rata B dalam satuan cm^{-1} pita II	49
Tabel B.1	Pergeseran aras vibrasi akibat resonansi Fermi pada molekul CO_2 dalam satuan cm^{-1}	62
Tabel C.1	Bilangan gelombang transisi vibrasi-rotasi molekul CO_2 pada pita I dalam satuan cm^{-1}	63
Tabel C.2	Bilangan gelombang transisi vibrasi-rotasi molekul CO_2 pada pita II dalam satuan cm^{-1}	64

DAFTAR GAMBAR

Gambar 1.1 Struktur molekul CO ₂	8
Gambar 2.1 Bidang simetri molekul tak-linear AB ₂	12
Gambar 2.2 Molekul A ₂ B ₄ yang memiliki pusat simetri i ...	13
Gambar 2.3 Molekul A ₂ B ₂ C ₂ yang memiliki sumbu simetri rotasi-pencerminan kelipatan dua (S ₂)	14
Gambar 2.4 Molekul CO ₂ sebagai anggota grup titik	15
Gambar 2.5 Presisi momentum sudut melalui sumbu simetri Z	17
Gambar 3.1 Ragam getaran normal molekul CO ₂	21
Gambar 3.2 Skema garis transisi rotasi Raman molekul CO ₂	29
Gambar 3.3 Spektrum vibrasi-rotasi kalau nilai B sama pada kedua keadaan vibrasi	35
Gambar 3.4 Spektrum vibrasi-rotasi kalau nilai B lebih kecil Pada keadaan aras vibrasi yang lebih tinggi	36
Gambar 3.5 Diagram transisi vibrasi-rotasi untuk pita I dan pita II molekul CO ₂	38
Gambar 3.6 Spektrum serapan molekul CO ₂ untuk pita I dan pita II	39

Gambar 4.1	Ragam vibrasi molekul CO ₂	44
Gambar 4.2	Ragam vibrasi dan molekul CO ₂	45
Gambar 4.3	Grafik bilangan gelombang transisi sebagai fungsi bilangan kuantum rotasi (J) pada pita I molekul CO ₂	46
Gambar 4.4	Grafik bilangan gelombang transisi sebagai fungsi bilangan kuantum rotasi (J) pada pita II molekul CO ₂	47
Gambar 4.5	Grafik tetapan rotasi B sebagai fungsi J pada pita I molekul CO ₂	49
Gambar 4.6	Grafik tetapan rotasi B sebagai fungsi J pada pita II molekul CO ₂	49

Bab 1

PENDAHULUAN

Berdasarkan data yang dikeluarkan oleh *Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics Volume 33 Edisi Juli 2006*, jumlah unsur yang ada sebanyak 112 unsur. Sebuah unsur atom X dengan nomor atom Z dan nomor massa A sering dituliskan secara singkat sebagai berikut:

$${}^A_Z X.$$

Nomor atom Z adalah jumlah proton¹ yang ada dalam inti atom, sedangkan nomor massa A adalah jumlah proton dan neutron² yang ada dalam inti atom.

Sebagian besar unsur-unsur yang ada di alam berupa isotop-isotop, yakni unsur-unsur atom yang dapat mempunyai beberapa nomor massa dengan nomor atom yang sama. Keberadaan isotop-isotop tersebut berupa isotop stabil dan tidak stabil (radioaktif). Demikian juga kelimpahan (*abundance*) isotop stabil di alam berbeda dari satu kelompok ke kelompok yang lain. Unsur-unsur atom yang berupa isotop sering juga dituliskan dengan menuliskan nama atom secara lengkap (atau lambang resmi atom) diikuti dengan angka yang menyatakan nomor massa atom, misalnya atom karbon dengan nomor massa $A = 12$ dan nomor atom $Z = 6$ sering dituliskan karbon-12 atau C-12 atau ${}^{12}_6 C$.

¹ Proton bermuatan positif dengan besar muatan sama dengan muatan elektron. Proton dilambangkan dengan huruf p .

² Neutron tidak bermuatan (netral) dilambangkan dengan huruf n .

1.1 Isotop Karbon dan Kelimpahannya

Unsur atau atom karbon banyak dijumpai dalam kehidupan sehari-hari dalam bentuk senyawa dengan atom lain. Unsur karbon memiliki beberapa isotop, dan isotop-isotop tersebut pada umumnya dalam bentuk senyawa organik. Sebagai contoh senyawa karbon dengan unsur lain yang banyak dijumpai dalam kehidupan sehari-hari adalah karbondioksida (CO_2) yang merupakan senyawa karbon dengan oksigen.

Atom karbon mempunyai tujuh buah isotop, yaitu: 9_6C , ${}^{10}_6C$, ${}^{11}_6C$, ${}^{12}_6C$, ${}^{13}_6C$, ${}^{14}_6C$, dan ${}^{15}_6C$. Kelimpahan isotop dan waktu paro³ untuk ketujuh isotop karbon tersebut dapat dilihat di Tabel 1.1.

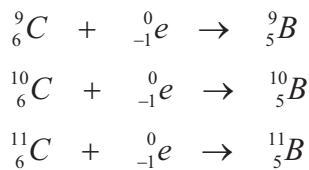
**Tabel 1.1 Kelimpahan dan Waktu Paro Isotop Karbon
(Krane, 1998)**

Isotop Karbon	Kelimpahan (%)	Waktu Paro
9_6C	-	0,13 detik
${}^{10}_6C$	-	19,2 detik
${}^{11}_6C$	-	20,4 menit
${}^{12}_6C$	98,89 %	Stabil
${}^{13}_6C$	1,11 %	Stabil
${}^{14}_6C$	-	5.730 tahun
${}^{15}_6C$	-	2,45 detik

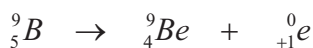
³ Waktu paro (*half life*) adalah waktu yang diperlukan sebuah unsur radioaktif sehingga aktivitasnya tinggal setengah dari aktivitas mula-mula.

Dari Tabel 1.1 terlihat bahwa isotop karbon $^{12}_6C$ dan $^{13}_6C$ merupakan isotop karbon yang stabil dengan kelimpahan di alam masing-masing 98,89 % dan 1,11 % berturut-turut. Isotop-isotop karbon yang lain tidak stabil (radioaktif) dengan waktu paro tertentu sehingga kelimpahannya di alam tidak dapat ditentukan secara pasti.

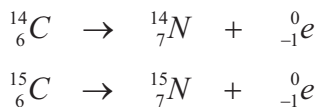
Sebagaimana kita ketahui dari Fisika Nuklir yang membahas tentang radioaktivitas, unsur atau isotop yang stabil adalah unsur atau isotop yang memiliki jumlah proton dan jumlah neutron yang sama atau hampir sama. Isotop-isotop karbon tidak stabil itu akan menjadi isotop stabil melalui dua cara yaitu melalui tangkapan elektron (*electron capture*) untuk isotop karbon yang jumlah protonnya lebih besar dari jumlah neutron atau melalui pancaran (emisi) elektron untuk isotop-isotop karbon yang jumlah protonnya lebih kecil dari jumlah neutronnya. Dengan demikian, isotop-isotop karbon 9_6C , $^{10}_6C$, dan $^{11}_6C$ akan menjadi isotop-isotop boron (*B*) stabil melalui proses tangkapan elektron sebagai berikut:



Isotop-isotop boron $^{10}_5B$ dan $^{11}_5B$ adalah isotop boron stabil, sedangkan boron 9_5B kemudian meluruh menjadi berelium (9_4Be) stabil dengan cara memancarkan elektron positif (positron, $^0_{+1}e$) sebagai berikut:



Pada isotop-isotop karbon $^{14}_6\text{C}$ dan $^{15}_6\text{C}$ terjadi emisi elektron (peluruhan β^-) sebagai berikut:



dengan $^{14}_7\text{N}$ dan $^{15}_7\text{N}$ adalah isotop-isotop nitrogen yang stabil.

1.2 Efek Isotop dan Bilangan Gelombang Molekul Karbondioksida

Kandungan relatif isotop karbon $^{14}_6\text{C}$ terhadap isotop karbon $^{12}_6\text{C}$ di alam hampir tetap, yaitu sekitar 10^{-12} dengan laju peluruhan kira-kira 15 peluruhan tiap menit untuk satu gram karbon dengan waktu paro 5.730 tahun (Krane, 1998). Walaupun isotop karbon $^{14}_6\text{C}$ bersifat radioaktif, kandungan relatifnya terhadap isotop karbon $^{12}_6\text{C}$ di alam tidak berubah karena terjadi pembentukan $^{14}_6\text{C}$ akibat radiasi sinar kosmis dan dari reaksi nuklir buatan manusia seperti peledakan bom nuklir. Jadi, isotop-isotop karbon yang dapat mempengaruhi sifat-sifat kimia dan fisika suatu bahan atau molekul dalam jangka waktu yang relatif lama yang melibatkan atom karbon hanyalah isotop-isotop karbon $^{12}_6\text{C}$, $^{13}_6\text{C}$, dan $^{14}_6\text{C}$. Pengaruh isotop terhadap sifat-sifat kimia dan fisika suatu bahan atau molekul disebut *efek isotop*.

Efek isotop merupakan bahan kajian (penelitian) yang sangat menarik baik penelitian teoretis maupun eksperimen karena dapat memberikan sejumlah informasi yang berguna untuk mengadakan

pendekatan sifat-sifat elektronik suatu atom atau molekul. Dalam spektroskopi molekul, efek isotop dapat diketahui dari bentuk spektrum molekul yang dimanifestasikan oleh pergeseran puncak-puncak serapan pada spektrum vibrasinya atau pergeseran garis-garis Stokes (*Stokes lines*) dan anti-Stokes (*anti-Stokes lines*) pada spektrum rotasi Raman maupun spektrum interaksi vibrasi-rotasinya. Dari bentuk spektrum vibrasi dan rotasi suatu molekul dapat ditentukan besaran-besaran fisisnya seperti frekuensi fundamental, jarak antar inti atom dalam molekul, dan tetapan rotasi.

Pengukuran terhadap bilangan gelombang frekuensi fundamental molekul karbondioksida (CO_2) telah dilaporkan oleh Herzberg (1948), Davies (1963), Decius dan Hexter (1977), Banwell (1983), Sindhu (1985), dan Wittman (1987), seperti diperlihatkan Tabel 1.2. Frekuensi fundamental molekul CO_2 ada 3 buah yaitu ν_1 , ν_2 , dan ν_3 . Frekuensi fundamental akan dijelaskan di Bab 2.

Tabel 1.2 Bilangan Gelombang Frekuensi Fundamental CO_2

Bilangan gelombang (cm^{-1})			Sumber
ν_1	ν_2	ν_3	
1337	667	2349	Herzberg (1949)
1388,7	667,3	2349,3	Davies (1963)
1285	667	2349	Decius dan Hexter (1977)
1330	667,3	2349,3	Banwell (1983)
1340	667	2349	Sindhu (1985)
1351,2	672,2	2396,3	Wittman (1987)

Data tentang bilangan gelombang untuk frekuensi fundamental karbondioksida pada Tabel 1.2 tanpa penjelasan jenis isotop karbon

yang terlibat pada atom oksigen apakah isotop karbon-12, karbon-13, karbon-14 ataupun campuran dari ketiga isotop tersebut sesuai dengan kelimpahannya di alam.

Data vibrasional khususnya data tentang bilangan gelombang frekuensi fundamental molekul karbondioksida dengan isotop karbon yang berbeda diperoleh dari eksperimen spektroskopi inframerah yang telah dilaporkan oleh Taylor *et al* untuk isotop karbon-12 dan karbon-13 dalam molekul karbondioksida ($^{12}\text{CO}_2$ dan $^{13}\text{CO}_2$) serta oleh Nielsen *et al* untuk karbon-14 dalam molekul karbondioksida ($^{14}\text{CO}_2$) (Wentik Jr, 1959). Bilangan gelombang masing-masing molekul karbondioksida dalam satuan cm^{-1} disajikan pada Tabel 1.3.

Tabel 1.3 Hasil Pengukuran Bilangan Gelombang Frekuensi Fundamental Isotop Molekul CO_2 (Wentik Jr, 1959)

Isotop Molekul	Bilangan gelombang (cm^{-1})		
	ν_1	ν_2	ν_3
$^{12}\text{CO}_2$	1354,42	672,20	2396,40
$^{13}\text{CO}_2$	1354,42	653,07	2328,20
$^{14}\text{CO}_2$	1354,42	636,23	2268,33

Dari Tabel 1.3 terlihat bahwa berdasarkan hasil eksperimen spektroskopi inframerah ada efek isotop karbon terhadap bilangan gelombang frekuensi fundamental molekul karbondioksida, khususnya terhadap bilangan gelombang dengan frekuensi fundamental ν_2 dan ν_3 . Efek isotop tersebut berupa penurunan nilai bilangan gelombang frekuensi fundamental ν_2 dan ν_3 terhadap kenaikan massa isotop

karbon yang ada dalam molekul karbondioksida. Bilangan gelombang untuk frekuensi fundamental ν_1 (untuk regangan setangkep/simetris) pada ketiga molekul isotop tersebut bernilai tetap.

Spektrum rotasional molekul CO_2 hasil eksperimen telah dilaporkan oleh Houston dan Lewis (Herzberg, 1949), Sindhu (1985), dan Bradley *et al* (Wittman, 1987). Salah satu informasi yang sangat penting yang dapat diperoleh dari hasil spektrum rotasional itu adalah *tetapan rotasi* (B). Tetapan rotasi B dapat dihitung secara teoretis dengan menggunakan konsep mekanika kuantum yang menghasilkan relasi (Svanberg, 1991):

$$E_J = BJ(J+1), \quad J = 1, 2, 3, \Lambda \quad (1.1)$$

dengan E_J tenaga rotasi aras yang ke- J , J adalah bilangan kuantum rotasi, dan B adalah tetapan rotasi yang diberikan oleh:

$$B = \frac{h}{8\pi^2 cI}, \quad (1.2)$$

dengan h adalah tetapan Planck, c adalah kecepatan cahaya dalam vakum, dan I adalah momen inersia molekul.

1.3 Momen Inersia Molekul Karbondioksida

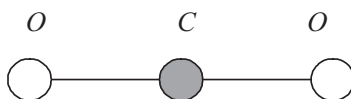
Dari persamaan (1.2) terlihat bahwa tetapan rotasi B bergantung pada nilai momen inersia molekul. Momen inersia molekul (I) dapat dihitung dengan menggunakan relasi (Davies, 1963):

$$I = \sum_i m_i r_i^2 \quad (1.3)$$

dengan m_i adalah massa atom ke- i , dan r_i adalah jarak normal atom yang ke- i terhadap sumbu rotasi molekul. Jadi, nilai momen inersia

suatu molekul bergantung pada massa atom-atom pembentuk molekul dan jaraknya ke sumbu rotasi molekul.

Molekul karbondioksida yang memiliki struktur linear setangkup (simetris) dengan atom *C* sebagai pusat rotasi (Gambar 1.1). Kondisi demikian akan menghasilkan nilai momen inersia yang sama untuk semua isotop karbon. Dengan kata lain, perhitungan momen inersia molekul CO_2 menggunakan persamaan (1.3), dengan menganggap bahwa atom oksigen yang terikat pada atom *C* adalah isotop oksigen $^{16}_8O$, tidak dapat memberikan informasi tentang efek isotop karbon pada spektrum rotasinya. Perhitungan teoretis berdasarkan persamaan (1.2) dengan momen inersia yang tidak berubah akan menghasilkan tetapan rotasi yang sama walaupun isotop karbon yang terlibat dalam molekul karbondioksida sudah berubah.



Gambar 1.1 Struktur Molekul CO_2

Seandainya pengaruh jari-jari atom diperhitungkan juga tidak dapat menghasilkan efek yang berarti sebab sangat kecil pengaruhnya. Jari-jari sebuah atom atau isotop dapat dihitung secara teoretis menggunakan relasi (Kaplan, 1964):

$$r = r_0 A^{1/3} \quad (1.4)$$

dengan r_0 bernilai $1,4 - 1,5 \times 10^{-13}$ cm, dan A adalah massa atom. Jadi pengaruh jari-jari isotop terhadap hasil perhitungan akhir momen inersia molekul sangat kecil sehingga dapat diabaikan.

Berdasarkan pembahasan sebelumnya akan dilakukan perhitungan secara teoretis terhadap bilangan gelombang frekuensi

fundamental untuk ketiga buah isotop molekul karbondioksida dari data hasil eksperimen Bradley *et al* (Witteman, 1987) untuk mengetahui efek isotop karbon pada spektrum interaksi vibrasi-rotasi molekul CO_2 khususnya terhadap tetapan rotasi B pada pita I dan pita II. Hasil kajian ini dapat memberikan informasi yang berguna tentang efek isotop karbon pada spektrum molekul karbondioksida. Isotop karbon yang ditinjau hanyalah karbon-12, karbon-13, dan karbon-14, demikian juga isotop atom oksigen yang digunakan adalah oksigen-16 dengan kelimpahan di alam sekitar 99,76 %.

Secara garis besar kajian teoretis tentang efek isotop karbon pada spektrum molekul karbondioksida memerlukan pengetahuan tentang simetri, grup titik, dan spesies aras vibrasi. Oleh karena itu pada Bab 2 akan ditinjau simetri dan elemen simetri molekul, grup titik, dan spesies molekul. Pada Bab 3 ditinjau landasan teoretis struktur dan bilangan gelombang frekuensi fundamental molekul karbondioksida, spektrum rotasi Raman, dan spektrum interaksi vibrasi-rotasi. Pada Bab 4 ditinjau efek isotop karbon terhadap bilangan gelombang frekuensi fundamental molekul CO_2 dan hasil analisis data spektroskopi interaksi vibrasi-rotasi molekul karbondioksida. Hasil kajian teoretis efek isotop karbon terhadap spektrum molekul karbondioksida dirangkum pada Bab 5 yang merupakan kesimpulan dan saran.

Bab 2

SIMETRI, GRUP TITIK, DAN SPESIES ARAS VIBRASI MOLEKUL

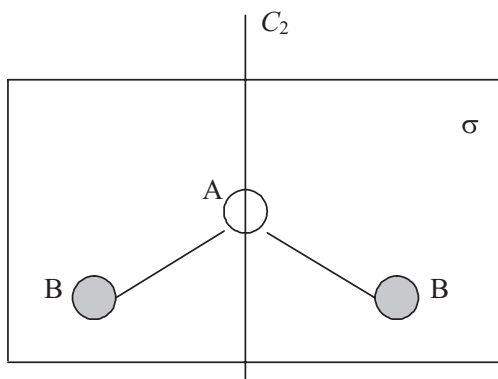
Ada banyak sistem fisis yang dinamikanya ditopang oleh sebuah atau beberapa simetri (Jones, 1996). Sebagai contoh, pertukaran atom karbon dalam molekul karbondioksida tidak akan mengakibatkan perubahan tenaga sistem. Demikian juga, jika molekul karbondioksida itu diputar (dirotasikan) 180° melalui sumbu molekul tidak akan mengakibatkan perubahan struktur dan geometri molekul sehingga kita tidak dapat membedakan molekul karbondioksida sebelum dan setelah dirotasikan sebesar 180° . Secara matematis, molekul karbondioksida memiliki simetri rotasi. Simetri yang lain adalah simetri translasi, pencerminan, dan sebagainya. Nilai besaran-besaran fisis yang tidak mengalami perubahan ketika mengalami transformasi koordinat (translasi, rotasi, pencerminan, dan sebagainya) disebut invarian. Walaupun transformasi-transformasi itu berbeda tipe, namun semuanya mempunyai sifat yang sama yaitu membentuk grup. Sifat utama grup adalah adanya produk sebagai hasil dua buah transformasi yang merupakan anggota grup itu juga, ada transformasi identitas, dan masing masing transformasi memiliki invers.

2.1 Simetri dan Operasi Simetri

Sebuah molekul sebagai objek geometri dapat mempunyai satu atau lebih elemen simetri, misalnya bidang simetri, pusat simetri, dan sumbu

simetri-rotasi pencerminan kelipatan bilangan bulat p . Masing-masing elemen simetri berkaitan dengan suatu operasi simetri, misalnya transformasi koordinat berupa pencerminan atau rotasi yang mengakibatkan suatu konfigurasi inti atom dalam sebuah molekul tidak terbedakan dengan konfigurasi molekul sebelum dilakukan transformasi.

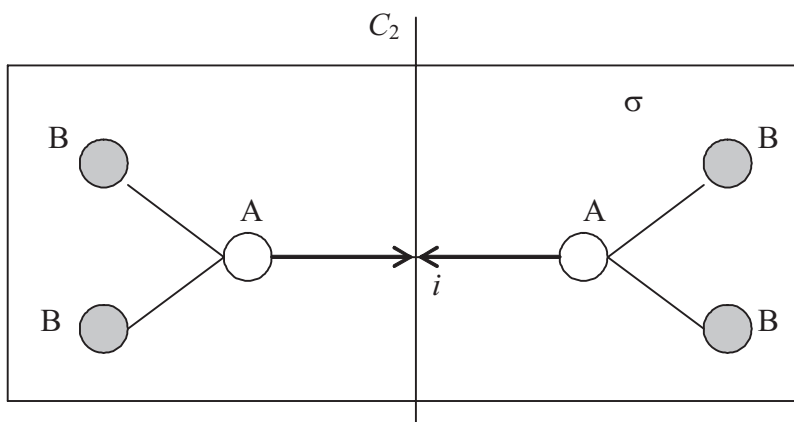
Bidang simetri biasanya dilambangkan dengan σ . Jika molekul dicerminkan terhadap bidang simetri, maka hasil pencerminannya tidak terbedakan dengan konfigurasi molekul sebelum dilakukan pencerminan. Sebagai contoh ditinjau molekul triatomik tidak linear AB_2 dengan jarak antar inti atom A-B adalah sama seperti dilukiskan pada Gambar 2.1. Bidang tegaklurus terhadap bidang molekul yang membagi dua sama besar sudut BAB adalah bidang simetri, demikian juga halnya bidang tempat ketiga buah atom tersebut terletak juga merupakan bidang simetri.



Gambar 2.1 Bidang Simetri Molekul Tidak Linier AB_2

Sebuah molekul juga dapat memiliki pusat simetri. Pusat simetri molekul biasanya dilambangkan dengan huruf i . Molekul dikatakan memiliki pusat simetri jika hasil pencerminan terhadap pusat

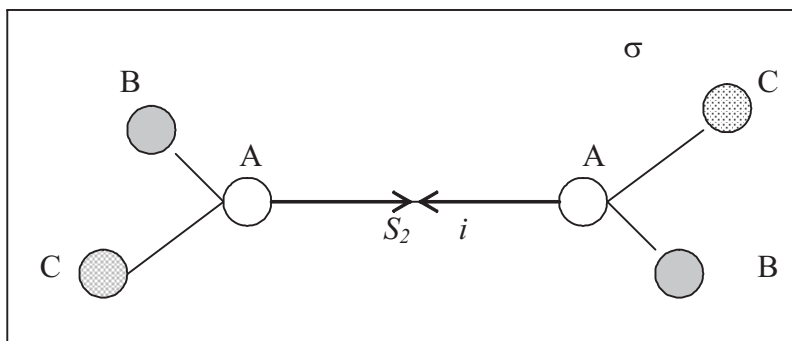
simetri tersebut menghasilkan konfigurasi molekul yang tidak dapat dibedakan dengan konfigurasi molekul sebelum dilakukan operasi pencerminan. Untuk menjelaskan pengertian lebih lanjut tentang pusat simetri molekul, kita meninjau sebuah molekul A_2B_4 seperti dilukiskan pada Gambar 2.2.



Gambar 2.2 Molekul A₂B₄ yang Memiliki Pusat Simetri i

Sumbu simetri yang merupakan kelipatan p dinotasikan dengan C_p , dengan $p = 1, 2, 3, \dots$. Jika dilakukan rotasi molekul dengan sudut $360^\circ/p$ maka konfigurasi molekul yang dihasilkan oleh rotasi tersebut tidak terbedakan dengan konfigurasi molekul sebelum rotasi. Dengan demikian, molekul yang dilukiskan pada Gambar 2.1 dan 2.2 yang memiliki C_2 (berarti $p = 2$) jika dirotasikan melalui sumbu simetrinya sebesar $360^\circ/2 = 180^\circ$ maka konfigurasi molekul yang dihasilkan rotasi tersebut tidak terbedakan dengan konfigurasi molekul sebelum rotasi 180° .

Sumbu simetri yang lain adalah sumbu simetri rotasi-pencerminan. Sumbu simetri rotasi-pencerminan dilambangkan dengan S_p . Sebuah molekul dikatakan memiliki sumbu simetri rotasi-pencerminan kelipatan bilangan bulat p jika dan hanya jika molekul yang mengalami rotasi $360^\circ/p$ kemudian dilanjutkan dengan pencerminan terhadap bidang yang tegak lurus sumbu rotasi menghasilkan konfigurasi molekul yang tidak terbedakan dengan konfigurasi sebelum dilakukan operasi rotasi-pencerminan. Sebagai contoh, ditinjau molekul $A_2B_2C_2$ yang mengalami rotasi-pencerminan seperti dilukiskan pada Gambar 2.3. Sumbu rotasi-pencerminan pada Gambar 2.3 berada pada garis yang menghubungkan atom A-A dan yang satu lagi adalah garis yang tegak lurus terhadap garis A-A dalam bidang molekul sedangkan bidang cermin adalah bidang yang tegak lurus terhadap sumbu rotasinya.

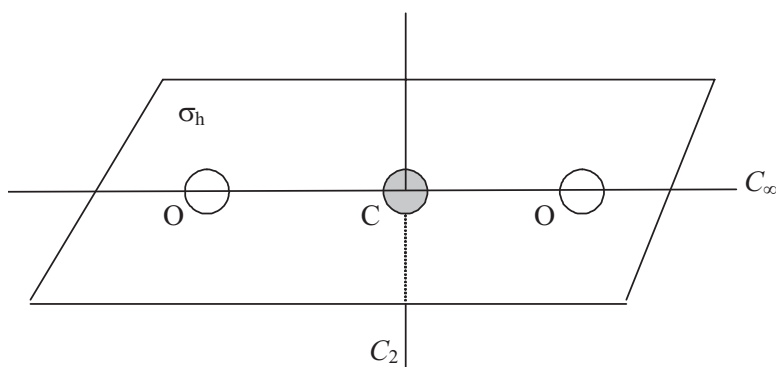


Gambar 2.3 Molekul $A_2B_2C_2$ yang Memiliki Sumbu Simetri Rotasi-Pencerminan Kelipatan Dua (S_2)

2.2 Grup Titik

Secara umum, sebuah molekul dapat memiliki beberapa elemen simetri. Dengan menggabungkan elemen simetri yang satu dengan elemen simetri yang lain dapat dihasilkan suatu sistem yang memiliki simetri yang lebih tinggi. Kombinasi sebuah elemen simetri dengan elemen simetri yang lain tidak semuanya dapat terjadi, tetapi kombinasi tersebut dapat terjadi jika ada sekurang-kurangnya satu buah titik tetap yang disebut sebagai grup titik (*point group*). Dengan kata lain, keberadaan grup titik menjamin dapat terjadinya kombinasi sebuah elemen simetri dengan elemen simetri yang lain.

Sebagai contoh, molekul karbondioksida (CO_2) yang memiliki struktur linear, dengan atom karbon sebagai pusat simetri masuk kelompok grup titik $D_{\infty h}$, seperti dilukiskan pada Gambar 2.4. Notasi D merupakan singkatan dari dihedral, notasi ∞ menyatakan ada sejumlah putaran melalui sumbu simetri C_2 yang dapat menghasilkan konfigurasi molekul yang tidak terbedakan dengan konfigurasi molekul sebelum mengalami rotasi, dan h menyatakan bahwa bidang simetri molekul adalah horizontal.



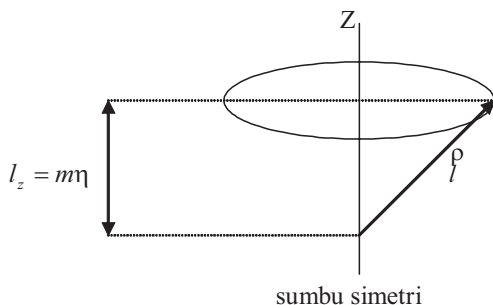
Gambar 2.4 Molekul CO_2 sebagai Anggota Grup Titik $D_{\infty h}$

Berdasarkan Gambar 2.4 tersebut terlihat bahwa grup titik $D_{\infty h}$ merupakan kombinasi dari C_{∞} dengan bidang σ_h . Dengan demikian, molekul karbondioksida memiliki pusat simetri dan ada sejumlah tak-berhingga sumbu C_2 yang tegak lurus terhadap bidang σ_h .

2.3 Spesies Aras Vibrasi Molekul Karbondioksida

Sesuai dengan konvensi, orbital elektronik ditandai dengan lambang σ , π , δ , ... sesuai dengan nilai bilangan kuantum proyeksi momentum sudut orbital (m_l) ke arah sumbu simetri. Keadaan (*state*) sebuah molekul yang memiliki pusat simetri dikelompokkan berdasarkan paritas (*parity*) fungsi gelombang, yaitu paritas genap (g) dan paritas gasal (u), misalnya orbital elektronik σ_g , σ_u , π_g , π_u , dan sebagainya. Indeks g dan u merupakan singkatan kata yang berasal dari bahasa Jerman yakni *gerade* (genap) dan *ungerade* (gasal).

Momentum sudut total elektron dalam suatu molekul bukan merupakan tetapan gerak karena elektron dalam molekul tidak berada dalam medan sentral sehingga momentum sudut elektron dalam molekul berbeda dengan pada kasus atom bebas. Dalam molekul, hanya komponen momentum sudut orbital ke arah sumbu simetri yang memiliki nilai tetap. Momentum sudut orbital $\overset{\rho}{l}$ akan berpresisi melalui sumbu simetri Z seperti dilukiskan pada Gambar 2.5.



Gambar 2.5 Presisi Momentum Sudut Melalui Sumbu Simetri Z

Komponen proyeksi momentum sudut l terhadap sumbu simetri biasanya dilambangkan dengan m_l yang memiliki nilai

$$m_l = l, l-1, \Lambda, \dots, -l. \quad (2.1)$$

Karena medan antar inti atom dalam molekul pada dasarnya adalah medan listrik maka tenaga tidak berubah walaupun nilai m_l berubah menjadi $-m_l$. Jika medan listrik sangat kuat maka terjadi pemisahan tenaga antar keadaan m_l . Nilai mutlak m_l biasanya dilambangkan dengan Λ sehingga

$$\Lambda = |m_l| = 0, 1, 2, \Lambda, l \quad (2.2)$$

Dan masing-masing keadaan m_l memiliki spesies yang diberi lambang $\Sigma, \Pi, \Delta, \Phi, \dots$ untuk nilai $\Lambda = 0, 1, 2, 3, \dots$ secara berturut-turut.

Molekul CO_2 memiliki struktur linear dengan ragam vibrasi ν_1, ν_2 , dan ν_3 . Ragam vibrasi ν_1 dan ν_3 mempunyai nilai $\Lambda = 0$ sehingga aras vibrasi ν_1 dan ν_3 termasuk ke dalam spesies Σ , sedangkan ragam vibrasi ν_2 yang terdegenerasi ganda dapat memiliki nilai

$$\Lambda = v_2, v_2 - 2, v_2 - 4, \Lambda, 1 \text{ atau } 0 \quad (2.3)$$

Dengan v_2 adalah bilangan kuantum vibrasi ragam ν_2 . Dengan demikian, untuk aras vibrasi tereksitasi pertama ragam ν_2 dengan $v_2 = 1$ termasuk ke dalam spesies Π .

Pada ragam vibrasi ν_2 , jika nilai bilangan kuantum vibrasi $v_2 = 1$ maka nilai yang mungkin untuk adalah $\Lambda = 0$ atau 2 . Jika nilai $\Lambda = 0$, misalnya pada aras vibrasi $(0 \ 2^0 \ 0)$ maka spesies molekul masuk ke dalam kelompok spesies Σ . Jika dihubungkan dengan sifat simetri fungsi gelombang molekul dan aturan seleksi transisi vibrasi-rotasi dengan aras-aras rotasi molekul linear dapat bernilai positif (+) atau negatif (-) bergantung pada tanda fungsi eigen ψ_t total sebagai berikut:

$$\psi_t = \psi_e \psi_v \psi_r \quad (2.4)$$

Yang dapat berubah atau tetap pada operasi pembalikan (inversi), dengan ψ_e adalah fungsi eigen elektronik, ψ_v adalah fungsi eigen vibrasi, dan ψ_r adalah fungsi eigen rotasi. Berdasarkan sifat fungsi eigen total, paritas fungsi gelombang, dan nilai mutlak m_l (yang sering dilambangkan dengan Λ) mengakibatkan ragam vibrasi ν_1 memiliki spesies Σ_g^+ , ragam vibrasi ν_2 masuk ke dalam kelompok spesies Π_u , dan ragam vibrasi ν_3 masuk ke dalam kelompok spesies Σ_u^+ .

Bab 3

STRUKTUR DAN SPEKTRUM MOLEKUL KARBONDIOKSIDA

Metode spektroskopi adalah salah satu cara untuk mempelajari interaksi antara sinar-sinar radiasi dengan materi. Informasi yang diperoleh dari hasil spektroskopi dapat berupa informasi tentang struktur molekul meliputi simetri molekul, jarak antar-inti atom dalam molekul, sudut ikatan molekul, sifat-sifat kimia meliputi tagihan elektronik, kuat ikatan, reaksi intramolekular dan intermolekular, dan sifat-sifat termodinamik molekul (Sindhu, 1985).

Pemilihan metode spektroskopi bergantung pada kisaran tenaga dari sistem yang akan dipelajari. Transisi-transisi antar-orbital elektron dalam (*inner electron orbital*) terjadi pada tenaga berorde kilo elektron volt (keV), misalnya sinar-X, sedangkan transisi-transisi antar-orbital elektron luar (*outer electron orbital*) pada energi berorde elektron volt (eV) seperti cahaya tampak atau dekat ultraviolet atau dekat inframerah. Struktur halus (*fine structure*) atom berorde kira-kira 10^{-3} eV (sekitar 10^{-1} cm), sedangkan struktur hiperhalus (*hyperfine structure*) 10^{-6} eV (mendekati 300 MHz). Pemecahan aras tenaga vibrasi molekul berorde 10^{-1} eV (daerah inframerah), sedangkan pemecahan aras tenaga rotasi molekul berorde 10^{-3} eV (daerah gelombang mikro). Batas-batas tenaga tersebut merupakan pendekatan secara umum dalam spektroskopi (Svanberg, 1991).

Sebagai contoh, untuk mempelajari tenaga vibrasi molekul CO_2 digunakan spektroskopi inframerah dan spektroskopi Raman, sedangkan untuk mempelajari spektrum rotasi molekul CO_2 tidak dapat digunakan spektroskopi gelombang mikro sebab molekul CO_2 tidak mempunyai momen dipol listrik permanen. Dengan demikian, untuk mempelajari spektrum rotasi CO_2 digunakan spektroskopi Raman. Pada spektroskopi Raman, spektrum pancaran terjadi akibat rotasi dipol listrik, sedangkan spektrum serapan akibat interaksi dipol listrik dengan medan listrik radiasi yang datang, dan untuk mempelajari spektrum elektroniknya digunakan spektroskopi cahaya tampak (Eisberg dan Resnick, 1985).

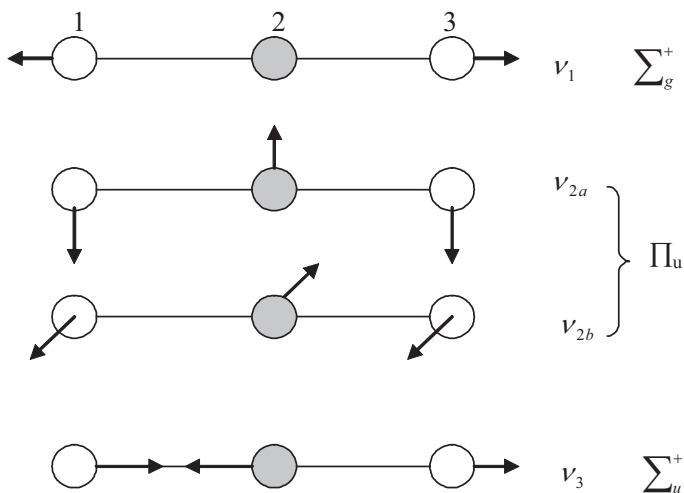
3.1 Struktur dan Bilangan Gelombang Molekul Karbondioksida

Molekul karbondioksida (CO_2) tersusun atas tiga buah atom, yaitu dua buah atom oksigen (O) dan satu buah atom karbon (C). Struktur molekul karbondioksida adalah linear dengan jarak antar atom pada kesetimbangan sejauh $1,1615 \times 10^{-8}$ cm (Herzberg, 1949). Secara skematis struktur molekul karbondioksida telah diperlihatkan pada Gambar 1.1.

Gerak vibrasi suatu molekul poliatomik digambarkan oleh frekuensi fundamentalnya yang sesuai dengan jenis (tipe) vibrasi. Setiap atom dalam molekul memiliki tiga derajat kebebasan (dalam ruang tiga dimensi) sehingga kalau ada sejumlah N atom pembentuk sebuah molekul, akan ada sebanyak $3N$ derajat kebebasan. Dari sejumlah $3N$ derajat kebebasan tersebut, tiga buah derajat kebebasan merupakan gerak rotasi melalui pusat massa molekul yang tidak berkaitan dengan gerak vibrasi molekul. Jadi, secara umum untuk

sebuah molekul yang tersusun atas sejumlah N atom mempunyai $3N-6$ ragam vibrasi.

Molekul poliatomik linear masih memiliki satu lagi modulus ragam vibrasi (getaran) karena hanya ada dua gerak rotasi yang saling bebas, sehingga jumlah maksimum frekuensi frekuensi fundamental poliatomik linear tersebut ada sejumlah $3N-5$. Jadi, untuk molekul CO_2 sebagai anggota kelompok molekul triatomik linear dengan $N = 3$ mempunyai 4 jenis bilangan gelombang frekuensi fundamental. Keempat bilangan gelombang frekuensi fundamental itu terdiri dari bilangan gelombang frekuensi fundamental untuk regangan setangkup (ν_1), lengkung setangkup (ν_2) yang terdegenerasi ganda, dan regangan tak-setangkup (ν_3). Keempat getaran vibrasi normal molekul CO_2 itu dilukiskan secara skematis pada Gambar 3.1.



Gambar 3.1 Ragam Getaran Normal Molekul CO_2

Pemberian notasi ν_1 , ν_2 , dan ν_3 sesuai dengan konvensi bahwa urutan dimulai dari bilangan gelombang frekuensi fundamental tertinggi (dalam satuan cm^{-1}) ke bilangan gelombang frekuensi fundamental terendah. Sedangkan sifat setangkup (simetri) ragam vibrasi (getaran) dimulai dari ragam vibrasi yang simetris ke ragam vibrasi yang tidak simetris. Faktor konversi tenaga yang sering digunakan dalam spektroskopi dapat dilihat pada Lampiran A.

Molekul karbondioksida (CO_2) termasuk kelompok molekul linear setangkup tipe ABA grup titik (*point group*) $D_{\infty h}$ (Tinkham, 1964). Jadi molekul karbondioksida mempunyai sumbu simetri C_{∞} dan bidang simetri yang tegak lurus terhadap sumbu simetri. Menurut Levine dan DeMaria (1971) molekul CO_2 mempunyai tiga ragam vibrasi dengan bilangan gelombang frekuensi fundamental ν_1 , ν_2 , dan ν_3 yang masing-masing bersesuaian dengan spesies Σ_g^+ , Π_u , dan Σ_u^+ . Koordinat setangkup (simetri) identik dengan koordinat normal. Pada molekul linear, pergeseran dalam koordinat kartesian dapat dinyatakan dalam bentuk koordinat setangkup. Jika atom dalam molekul linear diberi nomor 1, 2, dan 3 mulai dari kiri ke kanan dan sumbu-X adalah sumbu antar-atom (sumbu yang melewati ketiga inti atom) seperti ditunjukkan pada Gambar 3.1 maka koordinat untuk masing-masing atom pembentuk molekul CO_2 dapat dengan mudah dinyatakan dalam koordinat kartesian (x,y,z) sebagai berikut:

$$x_1 = -s_1 - \frac{m_C}{2m_O} s_3$$

$$y_1 = -\frac{m_C}{2m_O} s_{2a}$$

$$z_1 = -\frac{m_C}{2m_O} s_{2b}$$

$$\begin{aligned}
x_2 &= +s_3 \\
y_2 &= +s_{2a} \\
z_2 &= +s_{2b} \\
x_3 &= +s_1 - \frac{m_C}{2m_O} s_3 \\
y_3 &= -\frac{m_C}{2m_O} s_{2a} \\
z_3 &= -\frac{m_C}{2m_O} s_{2b}
\end{aligned} \tag{3.1}$$

Dengan m_O adalah massa isotop oksigen, m_C adalah massa isotop karbon, s_1 adalah pergeseran atom oksigen paling kanan pada ragam vibrasi dengan bilangan gelombang frekuensi fundamental ν_1 , sedangkan s_{2a} , s_{2b} , dan s_3 adalah pergeseran atom karbon pada ragam vibrasi dengan bilangan gelombang frekuensi fundamental pada masing-masing ν_{2a} , ν_{2b} , dan ν_3 .

Tenaga potensial (V) dan tenaga kinetik (T) molekul dapat dinyatakan sebagai berikut:

$$V = \frac{1}{2} (c_{11}s_1^2 + c_{22}[s_{2a}^2 + s_{2b}^2] + c_{33}s_3^2) \tag{3.2}$$

$$T = \frac{1}{2} (d_{11}s_1^2 + d_{22}[s_{2a}^2 + s_{2b}^2] + d_{33}s_3^2) \tag{3.3}$$

Dengan c_{ii} dan d_{ii} adalah konstanta, dan notasi s menyatakan turunan s terhadap waktu (t). Jika persamaan (3.2) dan (3.3) dituliskan sebagai

$$V_{ij} - \lambda_i T_{ij} = 0$$

Dengan λ_i adalah nilai eigen, dan $i, j = 1, 2, 3$ maka akan diperoleh tiga buah persamaan:

$$\begin{aligned}
c_{11} - d_{11}\lambda_1 &= 0 \\
c_{22} - d_{22}\lambda_2 &= 0 \\
c_{33} - d_{33}\lambda_3 &= 0
\end{aligned} \tag{3.4}$$

Dengan $\lambda_i = 4\pi^2\nu_i^2 c^2$. Mengingat tenaga kinetik (T) molekul dalam koordinat kartesian dinyatakan sebagai

$$T = \frac{1}{2} \sum_i m_i [x_i^2 + y_i^2 + z_i^2] \tag{3.5}$$

Maka nilai koefisien d_{11} , d_{22} , dan d_{33} dapat diperoleh dengan cara membandingkan persamaan (3.3) dengan (3.5) yang menghasilkan

$$\begin{aligned}
d_{11} &= 2m_O \\
d_{22} = d_{33} &= m_C + \frac{m_C^2}{2m_O}
\end{aligned} \tag{3.6}$$

Jika tenaga potensial dinyatakan sebagai fungsi Q_1 dan Q_2 yang menyatakan perubahan jarak antara dua atom dalam molekul, dan sudut deviasi dari bentuk linear (garis lurus) di bidang XY dan YZ dinyatakan dengan φ_a dan φ_b yang sering disebut sebagai koordinat valensi maka:

$$\begin{aligned}
Q_1 &= x_2 - x_1 \\
Q_2 &= x_3 - x_2, \\
\varphi_a &= \frac{y_1 + y_3 - 2y_2}{r} \\
\varphi_b &= \frac{z_1 + z_3 - 2z_2}{r}
\end{aligned} \tag{3.7}$$

Dengan r adalah jarak kesetimbangan antara atom O dan C . Jika persamaan (3.1) dimasukkan ke dalam persamaan (3.7) maka diperoleh

$$\begin{aligned}
Q_1 &= s_1 + (1 + \mu)s_3 \\
Q_2 &= s_1 - (1 + \mu)s_3 \\
\varphi_a &= \frac{2}{r}(1 + \mu)s_{2a} \\
\varphi_b &= \frac{2}{r}(1 + \mu)s_{2b}
\end{aligned} \tag{3.8}$$

Dengan $\mu = m_c/2m_o$. Jadi tenaga potensial molekul dapat dituliskan dalam bentuk Q_1 , Q_2 , φ_a , dan φ_b sebagai berikut:

$$V = \frac{1}{2} \left(a_{11}Q_1^2 + 2a_{12}Q_1Q_2 + a_{22}Q_2^2 + a_{33}\varphi_a^2 + a_{44}\varphi_b^2 \right) \tag{3.9}$$

Karena tenaga potensial invarian pada operasi pencerminan terhadap pusat simetri (seperti telah dijelaskan sebelumnya bahwa molekul karbondioksida memiliki pusat simetri) dan terhadap rotasi sudut 90° melalui sumbu tersebut maka implikasi sifat invariant tersebut mengharuskan

$$\begin{aligned}
a_{11} &= a_{22} \\
a_{33} &= a_{44}
\end{aligned} \tag{3.10}$$

Jika persamaan (3.8) dimasukkan ke dalam persamaan (3.9) kemudian hasilnya dibandingkan terhadap persamaan (3.2) maka diperoleh

$$\begin{aligned}
c_{11} &= 2(a_{11} + a_{12}) \\
c_{22} &= a_{33} \frac{4(1 + \mu)^2}{r^2} \\
c_{33} &= 2(1 + \mu)^2(a_{11} - a_{12})
\end{aligned} \tag{3.11}$$

Dari persamaan (3.4), (3.6), dan (3.11) diperoleh frekuensi vibrasi normal (frekuensi fundamental) untuk molekul karbondioksida sebanyak empat buah, yaitu frekuensi regangan setangkup dengan ragam vibrasi ν_1 , frekuensi regangan lengkung setangkup yang

terdegenerasi ganda dengan ragam vibrasi ν_2 , dan frekuensi regangan tidak setangkup dengan ragam vibrasi ν_3 . Kaitan antara bilangan gelombang frekuensi fundamental dengan massa isotop karbon dan oksigen dalam molekul karbondioksida diberikan oleh:

$$4\pi^2\nu_1^2c^2 = \lambda_1 = \frac{a_{11} + a_{12}}{m_O} \quad (3.12a)$$

$$4\pi^2\nu_2^2c^2 = \lambda_2 = \frac{2(m_C + 2m_O)}{m_Cm_O} \frac{a_{33}}{r^2} \quad (3.12b)$$

$$4\pi^2\nu_3^2c^2 = \lambda_3 = \frac{m_C + 2m_O}{m_Cm_O} (a_{11} - a_{12}) \quad (3.12c)$$

dengan a_{11} adalah tetapan gaya ikat $C-O$ untuk molekul karbondioksida, a_{12} tetapan gaya interaksi dua ikatan, dan a_{33} tetapan gaya untuk molekul dalam keadaan lengkung (*bending*).

Dari persamaan (3.12) dapat diketahui bahwa frekuensi vibrasi ν_2 hanya bergantung pada tetapan a_{33} sebagaimana diharapkan, sedangkan frekuensi vibrasi ν_1 dan ν_3 bergantung pada tetapan a_{11} dan a_{12} . Nilai tetapan-tetapan gaya tersebut dapat dihitung kalau bilangan gelombang frekuensi fundamental (normal) diketahui. Demikian juga jarak kesetimbangan (r) antar atom dalam molekul dapat dihitung sehingga momen inersia molekul dapat ditentukan secara teoretis.

3.2 Spektrum Rotasi Raman Molekul Karbondioksida

Polarisabilitas molekul linear ke arah sumbu molekul (sumbu yang melalui semua inti atom pembentuk molekul) berbeda dengan polarisabilitas ke arah tegaklurus sumbu molekul. Rotasi molekul

melalui sumbu molekul tidak akan menyebabkan perubahan polarisabilitas, sedangkan rotasi melalui sumbu yang tegak lurus sumbu molekul akan menyebabkan perubahan polarisabilitas. Jadi, suatu molekul poliatomik anggota kelompok grup titik $C_{\infty v}$ atau $D_{\infty h}$ selalu mempunyai suatu spektrum rotasi Raman.

Ditinjau dari rotasi murni sebuah molekul poliatomik linear dengan mengabaikan efek interaksi vibrasi dan elektroniknya. Jika momentum sudut melalui sumbu molekul dapat dianggap nol maka momen inersia melalui sumbu tersebut juga dapat dianggap nol. Dengan demikian, aras-aras tenaga rotasi molekul diberikan oleh (Sindhu, 1985)

$$\begin{aligned}\frac{E_J}{hc} &= F(J) \\ &= BJ(J+1) - DJ^2(J+1)^2 + \Lambda\end{aligned}\quad (3.13)$$

dengan E_J adalah aras tenaga rotasi (dalam satuan *erg*), $F(J)$ nilai suku rotasi (dalam satuan cm^{-1}), B adalah tetapan rotasi dengan nilai sebesar (Herzberg, 1949)

$$\begin{aligned}B &= \frac{h}{8\pi^2 c I_B} \\ &= \frac{27,994 \times 10^{-40}}{I_B} \text{ cm}^{-1}\end{aligned}\quad (3.14)$$

Dengan h adalah tetapan Planck, c adalah kecepatan cahaya dalam vakum, dan I_B adalah momen inersia molekul, sedangkan D adalah tetapan distorsi sentrifugal, dan J adalah bilangan kuantum rotasi. Nilai tetapan D untuk molekul setangkup linear diberikan oleh (Sindhu, 1985):

$$D = \frac{4B^3}{\nu_i^2}$$

dengan ν_i adalah bilangan gelombang frekuensi fundamental ragam vibrasi regangan setangkup. Menurut Banwell (1983), bilangan gelombang frekuensi vibrasi fundamental biasanya berorde 10^{-3} cm^{-1} dan tetapan rotasi B biasanya berorde 10 cm^{-1} sehingga kalau dihitung nilai tetapan D berorde 10^{-3} cm^{-1} .

Untuk molekul poliatomik linear, momen inersia yang melalui sumbu tegak lurus sumbu molekul diberikan oleh

$$I_B = \sum_i m_i r_i^2 \quad (3.15)$$

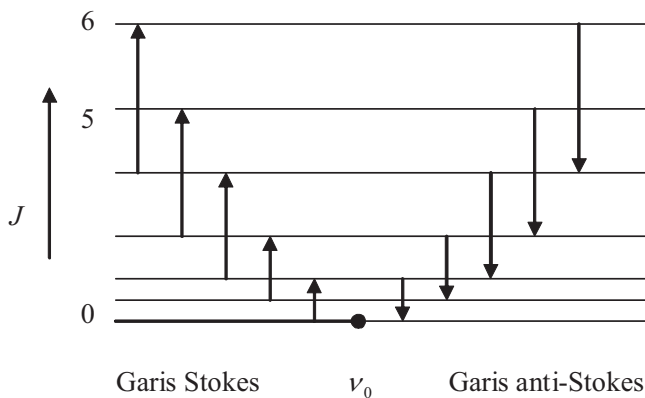
Spektroskopi gelombang mikro tidak dapat digunakan untuk meneliti aras rotasi molekul karbondioksida karena molekul karbondioksida tidak memiliki momen dipol listrik permanen. Walaupun molekul karbondioksida tidak dapat diteliti dengan spektroskopi gelombang mikro, spektrum rotasi molekul karbondioksida masih dapat diteliti dengan spektroskopi Raman rotasi jika ada perubahan polarisabilitas terhadap suatu arah yang tetap selama gerak rotasi molekul. Kaidah seleksi untuk spektroskopi rotasi Raman diberikan oleh (Levine, 1975)

$$\Delta J = 0, \pm 2 \quad (3.16)$$

Dengan ΔJ adalah selisih bilangan kuantum rotasi ($\Delta J = J_{n+1} - J_n$).

Untuk rotasi murni, bilangan kuantum rotasi J pada keadaan yang lebih tinggi harus lebih besar dibandingkan terhadap keadaan yang lebih rendah. Dengan demikian $\Delta J = -2$ tidak ada pada aturan seleksi rotasi murni. Karena yang ada dalam rotasi murni hanya $\Delta J = 2$, dan sesuai dengan aturan penamaan internasional bahwa $\Delta J = -2, -1, 0, +1, +2$ masing-masing bersesuaian dengan cabang (*branch*) O, P, Q, R, dan S. Jadi pada spektrum rotasi Raman untuk molekul CO_2 yang ada hanya cabang S yang menghasilkan dua deret garis spektrum yang dikenal sebagai garis stokes dan garis anti-Stokes.

Garis Stokes adalah radiasi yang terhambur dari suatu bahan yang dikenai radiasi foton berfrekuensi ν dengan frekuensi terhambur ν' yang lebih kecil dari frekuensi foton datang. Sedangkan garis anti-Stokes adalah foton yang terhambur dengan frekuensi ν' yang lebih besar dari frekuensi foton datang. Transisi dan garis spektrum rotasi Raman diperlihatkan secara skematis pada Gambar 3.2.



Gambar 3.2 Skema Garis Transisi Rotasi Raman Molekul CO_2

Jika $J = J + 2$ didistribusikan ke dalam persamaan (3.13) dan didefinisikan pergeseran bilangan gelombang

$$|\Delta \nu| = F(J'') - F(J')$$

Dengan $J' = J$ dan $J'' = J + 2$ maka akan diperoleh pergeseran bilangan gelombang sebesar

$$|\Delta \nu| = (4B - 6D)\left(J + \frac{3}{2}\right) - 8D\left(J + \frac{3}{2}\right)^2 \quad (3.17)$$

Jika nilai D dianggap jauh lebih kecil dari B maka persamaan (3.17) dapat dituliskan menjadi

$$|\Delta \nu| = 4B\left(J + \frac{3}{2}\right). \quad (3.18)$$

Dari persamaan (3.18) dapat ditentukan tetapan rotasi B jika pergeseran gelombang $|\Delta \nu|$ dan bilangan kuantum rotasi J diketahui. Pergeseran bilangan gelombang tersebut dikenal sebagai pergeseran Raman (*Raman shift*). Berdasarkan uraian tersebut, spektrum rotasi Raman dapat digunakan untuk menentukan tetapan rotasi B suatu molekul.

Nilai tetapan rotasi (B) untuk molekul karbondioksida berdasarkan hasil analisis spektrum rotasi Raman telah dilaporkan oleh Houston dan Lewis (Herzberg, 1949), yaitu sebesar $B = 0,3937 \text{ cm}^{-1}$. Nilai tetapan rotasi untuk molekul karbondioksida tersebut tanpa menyebutkan perincian isotop karbon dan isotop oksigen yang ada dalam molekul karbondioksida. Menurut Sindhu (1985) nilai tetapan rotasi B dari hasil analisis spektrum rotasi Raman molekul $^{12}\text{CO}_2$ memberikan nilai sebesar $B = 0,3925 \text{ cm}^{-1}$.

Dari hasil nilai tetapan rotasi B yang diperoleh oleh Herzberg (1949) dan Sindhu (1985) dapat dihitung momen inersia (I) molekul dan jarak antar atom dalam molekul karbondioksida seperti disajikan pada Tabel 3.1.

Tabel 3.1 Nilai Tetapan Rotasi, Momen Inersia, dan Jarak Antar Atom dalam Molekul CO_2

Besaran	Herzberg (1949)	Sindhu (1985)
$B \text{ (cm}^{-1}\text{)}$	0,3937	0,3925
$I \text{ (g cm}^2\text{)}$	$71,1 \times 10^{-40}$	$71,69 \times 10^{-40}$
$r_{\text{C-O}} \text{ (cm)}$	$1,157 \times 10^{-8}$	$1,162 \times 10^{-8}$

Perlu diketahui bahwa nilai-nilai tetapan dalam Tabel 3.1 yang diperoleh dari hasil analisis data hasil spektroskopi rotasi Raman bukan nilai pada kesetimbangan molekul melainkan pada keadaan vibrasi terendah.

3.3 Spektrum Interaksi Vibrasi-Rotasi Molekul Karbondioksida

Pendekatan pertama terhadap tenaga total suatu molekul adalah dengan menyatakan tenaga total sebagai jumlah tenaga rotasi dan vibrasi sebagai berikut:

$$\begin{aligned} T_{vr} &= \frac{E_{vr}}{hc} \\ &= G(v_1, v_2, \Lambda) + F_{(v)}(J) \end{aligned} \quad (3.19)$$

Dengan $G(v_1, v_2, \Lambda)$ sebagai pernyataan umum aras-aras tenaga vibrasi, dan $F_{(v)}(J)$ menyatakan aras-aras tenaga berkaitan dengan keadaan rotasi. Bilangan $v_1, v_2, \dots$ adalah bilangan kuantum vibrasi, dan J adalah bilangan kuantum rotasi molekul. Dengan menggunakan persamaan Schrödinger dan potensial Morse (Banwell, 1983)

$$V = D_{eq} \left(1 - e^{\alpha(r_{eq} - r)} \right)^2$$

Dengan α adalah tetapan yang bergantung pada jenis molekul, D_{eq} adalah tenaga disosiasi molekul, r_{eq} adalah jarak kesetimbangan antar inti atom dalam molekul, dan r jarak antar inti atom dalam molekul maka tenaga vibrasi molekul diberikan oleh

$$G(v_1, v_2, \Lambda) = \sum_i v_i (v_i + d_i/2) - \sum_i v_i x_i (v_i + \frac{1}{2})$$

Dengan d_i sebagai derajat kemerosotan (degenerasi), dan x_i tetapan tidak harmonis. Dengan mengabaikan efek Tidak harmonis, aras-aras tenaga molekul dengan getaran terdegenerasi diberikan oleh:

$$G(v_1, v_2, \Lambda) = \sum_i v_i (v_i + d_i/2) \quad (3.20)$$

Sedangkan nilai suku rotasi untuk molekul linear diberikan oleh:

$$F_{(v)}(J) = B_{(v)}J(J+1) \quad (3.21)$$

Dengan $B_{(v)}$ adalah tetapan rotasi yang bergantung pada bilangan kuantum vibrasi v .

Kebergantungan nilai tetapan rotasi $B_{(v)}$ terhadap bilangan kuantum vibrasi dapat dipahami, mengingat molekul yang tereksitasi ke keadaan rotasi yang lebih tinggi mengakibatkan regangan ikatan yang lebih besar akibat gaya sentrifugal yang semakin besar. Akibat adanya gaya sentrifugal maka timbul reaksi berupa gaya vibrasi yang melawan gaya sentrifugal. Jadi pada setiap keadaan vibrasi jarak antar inti atom dalam molekul berubah jika keadaan vibrasi berubah. Menurut Herzberg (1949), berdasarkan data empiris nilai tetapan rotasi $B_{(v)}$ diberikan oleh

$$B_{(v)} = B_{eq} - \sum_i \alpha_i \left(v_i + \frac{d_i}{2} \right) \quad (3.22)$$

Dengan α_i tetapan yang nilainya jauh lebih kecil dari nilai B_{eq} , B_{eq} nilai tetapan rotasi pada kesetimbangan, dan d_i derajat kemerosotan.

Untuk molekul CO_2 , nilai tetapan α_i telah dihitung oleh Adel dan Denison (Herzberg, 1949) yang menghasilkan nilai

$$\begin{aligned}
\alpha_1 &= 0,00056 \text{ cm}^{-1} \\
\alpha_2 &= -0,00062 \text{ cm}^{-1} \\
\alpha_3 &= 0,0029 \text{ cm}^{-1} \\
B_{eq} &= 0,3906 \text{ cm}^{-1}
\end{aligned} \tag{3.23}$$

Dan nilai momen inersi molekul CO_2 untuk nilai B_{eq} dan $B_{(0)}$ yang bersesuaian sebesar

$$I_{eq} = 71,69 \times 10^{-40} \text{ g cm}^2, \tag{3.24a}$$

Dengan I_{eq} nilai momen inersia molekul karbondioksida pada kesetimbangan, dan

$$I_{(0)} = 71,87 \times 10^{-40} \text{ g cm}^2, \tag{3.24b}$$

dengan $I_{(0)}$ adalah nilai momen inersia molekul karbondioksida pada aras vibrasi terendah.

Dari persamaan (3.19), (3.20), (3.21), (3.22), dan frekuensi fundamental untuk molekul karbondioksida diperoleh tenaga total molekul sebesar

$$\begin{aligned}
T_{vr} &= 1337\left(v_1 + \frac{1}{2}\right) + 667\left(v_2 + 1\right) + 2349\left(v_3 + \frac{1}{2}\right) + (0,3906 \\
&\quad - \{0,00056\left(v_1 + \frac{1}{2}\right) - 0,00062\left(v_2 + 1\right) \\
&\quad + 0,0029\left(v_3 + \frac{1}{2}\right)\})J(J+1)
\end{aligned} \tag{3.25}$$

Dalam satuan cm^{-1} . Dari persamaan (3.19) bilangan gelombang frekuensi transisi untuk serapan dari suatu keadaan yang lebih rendah (v, J) ke keadaan yang lebih tinggi $(v+1, J+1)$ serta aturan seleksi $\Delta v = +1$, diberikan oleh (Wang dan Xia, 1991)

$$\nu = \nu_0 + B_1(J+1)(J+2) - B_0J(J+1)$$

Dengan B_0 adalah tetapan rotasi pada keadaan v , B_1 adalah tetapan rotasi pada keadaan $v+1$, dan ν_0 adalah selisih bilangan gelombang frekuensi fundamental antara aras yang lebih tinggi dengan aras yang lebih rendah.

Jika kaidah seleksi untuk transisi interaksi vibrasi-rotasi diberikan oleh:

$$\Delta v = \pm 1$$

$$\Delta J = \pm 1$$

Maka transisi dari keadaan yang lebih rendah (v) dengan tetapan rotasi B_0 ke keadaan yang lebih tinggi ($v+1$) dengan tetapan rotasi B_1 menghasilkan dua deret garis spektrum. Jika $\Delta J = +1$, artinya terjadi transisi tenaga dari aras J ke $J+1$ sehingga diperoleh tenaga transisi interaksi vibrasi-rotasi sebesar

$$\begin{aligned} R(J) &= \nu(J+1) - \nu(J) \\ &= \nu_0 + B_1(J+1)(J+2) - B_0J(J+1) \\ &= \nu_0 + 2B_1 + (3B_1 - B_0)J + (B_1 - B_0)J^2 \end{aligned} \quad (3.26)$$

Dengan $J = 0, 1, 2, \dots$ disebut sebagai cabang R. Untuk nilai $\Delta J = -1$, transisi tenaga terjadi dari aras $J+1$ ke aras J sehingga tenaga transisi interaksi vibrasi-rotasi pada transisi ini diberikan oleh

$$\begin{aligned} P(J) &= \nu(J-1) - \nu(J) \\ &= \nu_0 + B_1(J-1)J - B_0J(J+1) \\ &= \nu_0 - (B_1 + B_0)J + (B_1 - B_0)J^2 \end{aligned} \quad (3.27)$$

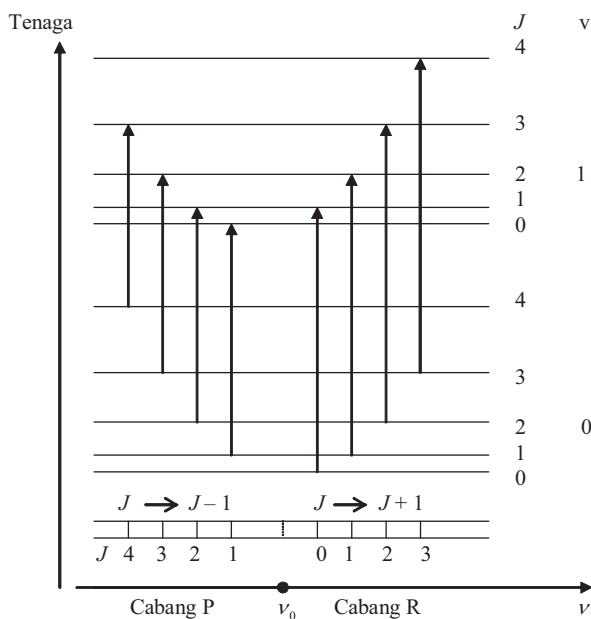
Dengan $J = 0, 1, 2, \dots$ disebut sebagai cabang P. Jika nilai tetapan rotasi B_0 sama dengan nilai tetapan rotasi B_1 , misalnya dinotasikan dengan B maka untuk cabang R tenaga transisi interaksi vibrasi-rotasi menjadi

$$R(J) = \nu_0 + 2B(J+1) \quad J = 0, 1, 2, \dots \quad (3.28)$$

Dan untuk cabang P diberikan oleh

$$P(J) = \nu_0 - 2BJ \quad J = 0, 1, 2, \dots \quad (3.29)$$

Transisi pertama cabang R terjadi dari aras $J = 0$ untuk keadaan vibrasi dasar ($v = 0$) ke aras $J = J + 1$ pada keadaan vibrasi yang lebih tinggi ($v = 1$). Sedangkan untuk cabang P tidak mungkin terjadi transisi dari $J = 0$ ke $J = J + 1$, tetapi transisi dari $J = 1$ pada aras vibrasi yang lebih rendah ($v = 0$) ke $J = 0$ dengan aras vibrasi yang lebih tinggi ($v = 1$). Dari persamaan (3.28) dan (3.29) terlihat bahwa tidak ada transisi yang bersesuaian dengan ν_0 seperti yang ditunjukkan pada Gambar 3.3.

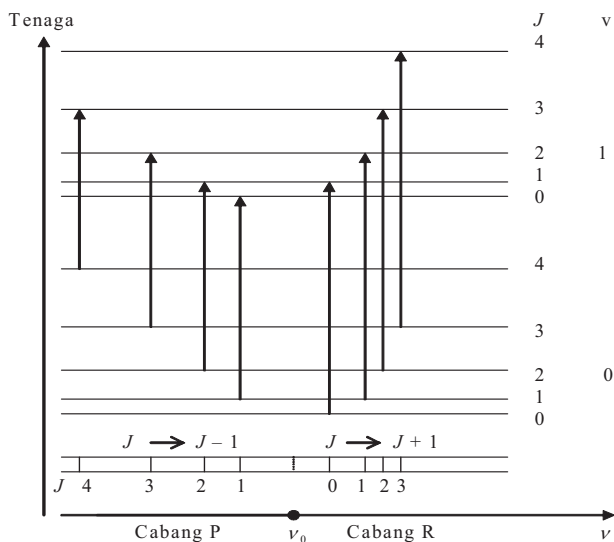


Gambar 3.3 Spektrum Vibrasi-Rotasi kalau Nilai B Sama pada Kedua Keadaan Vibrasi

Jika transisi $\Delta J = 0$ diperbolehkan terjadi, maka garis spektrum akan teramati sebagai garis tajam (disebut cabang Q) pada frekuensi ν_0 .

Transisi $\Delta J = 0$ terjadi pada molekul linear jika dan hanya jika aras vibrasi mempunyai momentum sudut melalui sumbu C_∞ misalnya molekul yang mempunyai jumlah elektron ganjil pada keadaan dasar sehingga momentum sudut melalui sumbu C_∞ tidak sama dengan nol.

Dari persamaan (3.28) dan (3.29), jika nilai $B_1 < B_0$ maka jarak antargaris spektrum pada cabang R menurun sesuai dengan pertambahan bilangan kuantum rotasi J , sedangkan untuk cabang P jarak antargaris spektrum bertambah besar dengan pertambahan nilai bilangan kuantum rotasi J (Davies, 1963). Keadaan garis-garis spektrum transisi tersebut diperlihatkan secara skematis pada Gambar 3.4.



Gambar 3.4 Spektrum Vibrasi-Rotasi kalau Nilai B Lebih Kecil pada Keadaan Aras Vibrasi yang Lebih Tinggi

Jika suatu molekul adalah anggota dari grup titik $D_{\infty h}$ maka fungsi gelombang rotasi dapat setangkup atau tidak setangkup terhadap pertukaran inti identik yang ada pada molekul. Jadi karakter aras-aras rotasi dapat setangkup atau tidak setangkup dan bobot statistik yang berbeda sesuai dengan pasangan inti identik yang ada. Inti atom yang mempunyai *spin* mempengaruhi bobot statistik dan populasi atom pada suatu aras setangkup dan tidak setangkup. Jika semua inti atom, kecuali inti atom pada pusat simetri, mempunyai spin inti nol maka aras-aras tidak setangkup tidak ada (Davies, 1963). Dengan demikian pada keadaan dasar elektronik, molekul dengan aras-aras vibrasi setangkup hanya mempunyai bilangan kuantum rotasional J genap (fungsi gelombang setangkup) pada spektrum rotasi, sedangkan aras-aras vibrasi tidak setangkup hanya memiliki bilangan kuantum rotasi J ganjil (fungsi gelombang tidak setangkup).

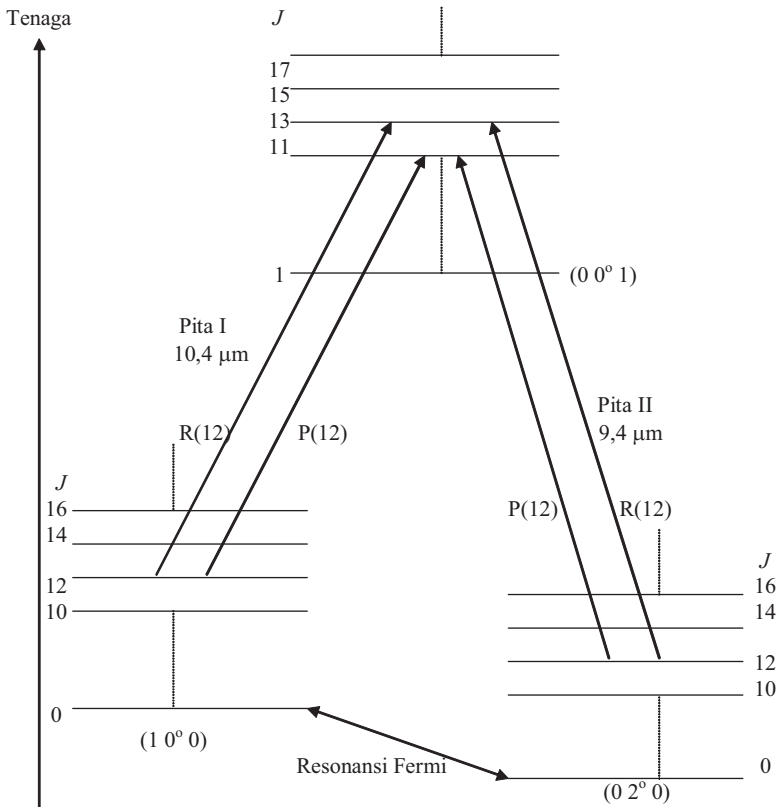
Untuk molekul linear karbondioksida, sifat setangkup dan tidak setangkup bergantung pada isotop inti atom oksigen yang terikat pada isotop karbon dan ragam vibrasi molekul. Karena molekul karbondioksida mempunyai pusat simetri (setangkup) dan *spin* oksigen $^{16}_8\text{O}$ adalah nol, maka aras-aras rotasi tidak setangkup untuk ragam vibrasi ν_1 dan ν_2 tidak ada, sedangkan pada ragam vibrasi ν_3 yang tidak setangkup hanya ada aras-aras rotasi J ganjil. Ragam vibrasi molekul karbondioksida sering juga dilambangkan dengan (ν_1, ν_2^l, ν_3) sedangkan ν_1 , ν_2 , dan ν_3 adalah bilangan kuantum vibrasi, dan l adalah bilangan kuantum sudut.

Transisi antararas vibrasi $(0\ 0^0\ 1)$ yang mempunyai ragam vibrasi ν_3 dengan aras vibrasi $(1\ 0^0\ 0)$ dengan ragam vibrasi ν_1 memiliki ujung pita pada $10,4\ \mu\text{m}$ yang disebut sebagai Pita I. Sedangkan transisi antararas vibrasi $(0\ 0^0\ 1)$ yang memiliki ragam

Efek Isotop Karbon

Pada Spektrum Interaksi Vibrasi-Rotasi Molekul Karbondioksida

vibrasi ν_3 dan aras vibrasi $(0\ 2^0\ 0)$ dengan ragam vibrasi $2\nu_2$ yang mempunyai ujung pita pada $9,4\ \mu\text{m}$ disebut Pita II seperti dilukiskan pada Gambar 3.5.

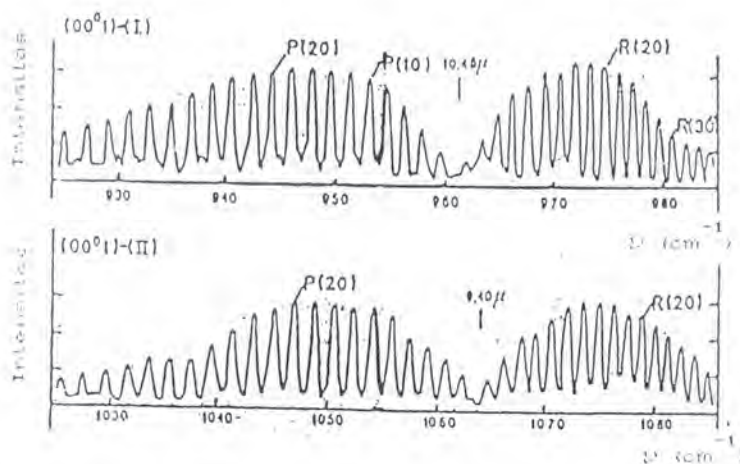


Gambar 3.5 Diagram Transisi Vibrasi-Rotasi untuk Pita I dan Pita Molekul CO_2

Antara aras vibrasi $(1\ 0^0\ 0)$ dengan aras vibrasi $(0\ 2^0\ 0)$ terjadi resonansi yang dikenal sebagai resonansi Fermi (*Fermi resonance*). Resonansi Fermi terjadi antara dua aras yang memiliki spesies yang sama dengan tenaga yang hampir sama. Sebagai akibat resonansi

Fermi tersebut akan terjadi kenaikan tenaga aras vibrasi ($1\ 0^0\ 0$), sedangkan aras vibrasi ($0\ 2^0\ 0$) mengalami penurunan tenaga. Penjelasan detail resonansi Fermi dapat dilihat pada Lampiran B.

Menurut Wittman (1987), tenaga transisi rotasi biasanya dinyatakan sebagai fungsi bilangan kuantum rotasi (J) aras terendah. Hasil spektrum serapan molekul karbondioksida untuk Pita I dan Pita II dapat dilihat pada Gambar 3.6.



Gambar 3.6 Spektrum serapan molekul CO_2 untuk Pita I dan Pita II

Dari persamaan (3.28) dan (3.29) dapat ditentukan nilai tetapan rotasi B untuk cabang R maupun cabang P asalkan nilai-nilai $R(J)$, $P(J)$, dan ν_0 diketahui. Untuk cabang R, nilai tetapan rotasinya diberikan oleh

$$B_R = \frac{R(J) - \nu_0}{2(J+1)} \quad (3.30)$$

Sedangkan untuk cabang P diberikan oleh

$$B_P = \frac{\nu_0 - P(J)}{2J} \quad (3.31)$$

Jika nilai $B_0 \neq B_1$ maka dari persamaan (3.26) dan (3.27) dapat ditentukan nilai-nilai B_0 dan B_1 yaitu sebesar

$$B_0 = \frac{R(J) - P(J+2)}{2(2J+3)} \quad (3.32)$$

Dan

$$B_1 = \frac{R(J) - P(J)}{2(2J+1)} \quad (3.33)$$

Nilai tetapan rotasi molekul karbondioksida berdasarkan hasil analisis spektrum rotasi-vibrasinya untuk beberapa aras vibrasi (ν_1, ν_2^l, ν_3) dengan l adalah bilangan kuantum sudut disajikan pada Tabel 3.2.

Tabel 3.2 Nilai Tetapan Rotasi B untuk Berbagai Aras Vibrasi CO_2

ν_1	ν_2^l	ν_3	$B_v \text{ (cm}^{-1}\text{)}$
0	0^0	0	0,38950
0	1^1 (PR)	0	0,38995
0	2^0	0	0,38996
1	0^0	0	0,38971
0	0^0	1	0,38660

Bab 4

EFEK ISOTOP KARBON PADA SPEKTRUM MOLEKUL KARBONDIOKSIDA

Efek penggantian isotop karbon terhadap spektrum vibrasi molekul karbondioksida (CO_2) dapat diketahui dari nilai bilangan gelombang frekuensi fundamental sebagaimana dapat dilihat pada persamaan (3.12). Efek isotop karbon pada spektrum transisi vibrasi-rotasi molekul CO_2 secara sepintas teramati dari data yang dilaporkan oleh Bradley *et al.* (Wittman, 1987). Efek isotop karbon yang berupa penurunan nilai bilangan gelombang transisi pada masing-masing Pita I dan Pita II jika isotop karbon yang terikat pada molekul CO_2 bertambah besar nomor massanya (Lampiran C).

4.1 Efek Isotop Karbon terhadap Bilangan Gelombang Frekuensi Fundamental

Sebagaimana telah diuraikan pada Bab 1 bahwa efek isotop karbon terhadap bilangan gelombang frekuensi fundamental molekul CO_2 dapat diketahui dari data hasil eksperimen seperti yang disajikan pada Tabel 1.2. Efek isotop karbon terhadap bilangan gelombang frekuensi fundamental molekul karbondioksida secara teoretis juga dapat dihitung dengan menggunakan persamaan (3.12) jika tetapan-tetapan α_{11} , α_{22} , dan α_{33}/r^2 diketahui nilainya.

Jika dimasukkan, misalnya nilai-nilai bilangan gelombang frekuensi fundamental ν_1 , ν_2 , dan ν_3 untuk molekul isotop $^{12}\text{CO}_2$ dari Tabel 1.2 ke persamaan (3.12) serta massa isotop-isotop karbon dan oksigen sebagai berikut (Krane, 1988):

$$\begin{aligned}m(^{12}\text{C}) &= 2,004 \times 10^{-23} \text{ g} \\m(^{13}\text{C}) &= 2,171560258 \times 10^{-23} \text{ g} \\m(^{14}\text{C}) &= 2,338541414 \times 10^{-23} \text{ g} \\m(^{16}\text{O}) &= 2,671150805 \times 10^{-23} \text{ g}\end{aligned}\tag{4.1}$$

Maka diperoleh nilai tetapan-tetapan:

$$\begin{aligned}\alpha_{11} + \alpha_{12} &= 17,386 \times 10^5 \text{ dyne/cm} \\ \alpha_{11} - \alpha_{12} &= 14,848 \times 10^5 \text{ dyne/cm} \\ \frac{\alpha_{33}}{r^2} &= 0,584 \times 10^5 \text{ dyne/cm}\end{aligned}\tag{4.2}$$

Jika nilai-nilai yang telah diperoleh pada persamaan (4.1) dan (4.2) dimasukkan ke dalam persamaan (3.12) maka diperoleh nilai bilangan gelombang frekuensi fundamental isotop molekul karbondioksida seperti disajikan pada Tabel 4.1.

Tabel 4.1 Hasil Perhitungan Bilangan Gelombang Frekuensi Fundamental Molekul Karbondioksida CO_2 Berdasarkan Persamaan (3.12)

Isotop Molekul	Bilangan gelombang frekuensi fundamental (cm^{-1})		
	ν_1	ν_2	ν_3
$^{12}CO_2$	1354,42	672,20	2396,40
$^{13}CO_2$	1354,42	653,01	2328,25
$^{14}CO_2$	1354,42	636,21	2268,38

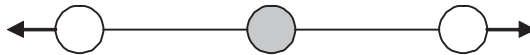
Hasil perhitungan teoretis seperti ditunjukkan pada Tabel 4.1 jika dibandingkan terhadap hasil eksperimen yang telah dilaporkan untuk $^{12}CO_2$, $^{13}CO_2$, dan $^{14}CO_2$ menunjukkan hasil yang sangat sesuai. Hasil perbandingan perhitungan teoretis dengan hasil eksperimen disajikan pada Tabel 4.2.

Tabel 4.2. Perbandingan Nilai Bilangan Gelombang Frekuensi Fundamental Molekul CO_2 Hasil Perhitungan Teoretis (T) dengan Hasil Eksperimen (E)

Isotop Molekul	Bilangan Gelombang Frekuensi Fundamental (cm^{-1})					
	ν_1		ν_2		ν_3	
	T	E	T	E	T	E
$^{12}CO_2$	1354,42	1354,42	672,20	672,20	2396,40	2396,40
$^{13}CO_2$	1354,42	1354,42	653,01	653,07	2328,25	2328,20
$^{14}CO_2$	1354,42	1354,42	636,21	636,23	2268,38	2268,33

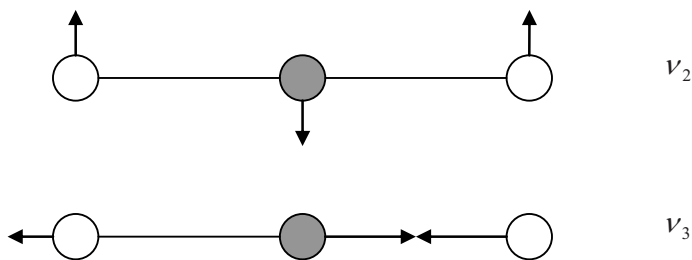
Dari Tabel 4.2 terlihat bahwa ada efek penggantian isotop karbon terhadap spektrum molekul karbondioksida khususnya terhadap bilangan gelombang frekuensi fundamental ragam ν_2 dan ν_3 baik secara teoretis maupun berdasarkan hasil eksperimen. Efek isotop karbon tersebut berupa penurunan nilai bilangan gelombang frekuensi fundamental ν_2 dan ν_3 , jika massa isotop karbon yang terikat pada dua atom oksigen semakin besar. Bilangan gelombang frekuensi fundamental ν_1 tidak terpengaruh oleh penggantian isotop karbon.

Nilai bilangan gelombang frekuensi fundamental ν_1 yang tidak berubah walaupun isotop karbon yang terikat pada dua atom oksigen berbeda dapat dipahami dengan meninjau ragam vibrasi ν_1 seperti ditunjukkan pada Gambar 4.1. Pada ragam vibrasi ν_1 tidak ada timbul momen dipol listrik sebab vibrasi terjadi secara simetris pada arah sumbu molekul.



Gambar 4.1 Ragam Vibrasi ν_1 molekul CO_2

Pada ragam vibrasi ν_2 dan ν_3 seperti terlihat pada Gambar 4.2, massa isotop karbon terlibat dalam gerak vibrasi sehingga mempengaruhi nilai bilangan frekuensi fundamental.



Gambar 4.2 Ragam Vibrasi ν_2 dan ν_3 Molekul CO_2

4.2. Hasil Analisis Data Interaksi Vibrasi-Rotasi Molekul Karbondioksida

Sebagian dari data spektroskopi transisi interaksi vibrasi-rotasi molekul karbondioksida Pita I yang dilaporkan oleh Bradley *et al* (Wittman, 1987) diperlihatkan pada Tabel 4.3.

Tabel 4.3 Bilangan Gelombang Transisi Vibrasi-Rotasi Molekul CO_2 Pita I dalam Satuan cm^{-1}

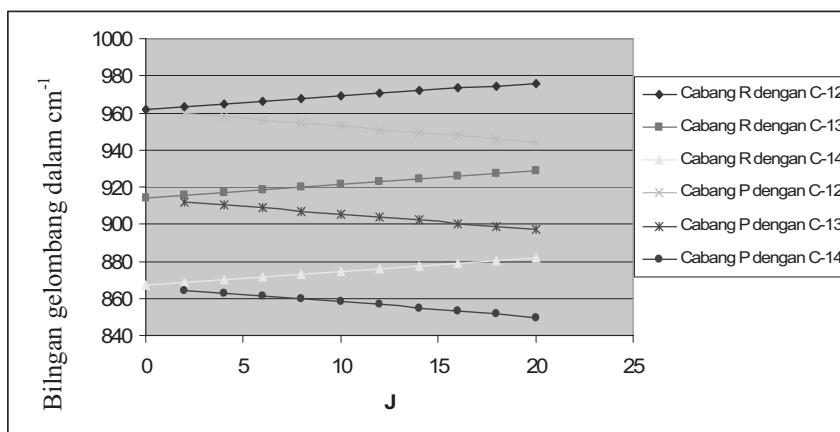
J	$R(J) : J \rightarrow J + 1$			$P(J) : J \rightarrow J - 1$		
	$^{12}\text{CO}_2$	$^{13}\text{CO}_2$	$^{14}\text{CO}_2$	$^{12}\text{CO}_2$	$^{13}\text{CO}_2$	$^{14}\text{CO}_2$
0	961.73	914.20	866.90			
2	963.26	915.73	868.44	959.39	911.88	864.57
4	964.77	917.25	869.96	957.80	910.28	862.99
6	966.25	918.74	871.47	956.18	908.68	861.40
8	967.71	920.22	872.96	954.55	907.05	859.79
10	969.14	921.66	874.43	952.88	905.41	858.16
12	970.55	923.11	875.88	951.19	903.75	856.52

Efek Isotop Karbon

Pada Spektrum Interaksi Vibrasi-Rotasi Molekul Karbondioksida

14	971.93	924.53	877.32	949.48	902.07	854.86
16	973.29	925.92	878.74	947.74	900.37	853.18
18	974.62	927.30	880.15	945.98	898.65	851.49
20	975.93	928.66	881.54	944.19	896.91	849.78

Dari Tabel 4.3 terlihat bahwa nilai bilangan gelombang transisi interaksi vibrasi-rotasi molekul CO_2 untuk bilangan kuantum rotasi, cabang, dan pita yang sama, semakin berkurang jika massa isotop karbon yang terlibat semakin besar (Gambar 4.3).



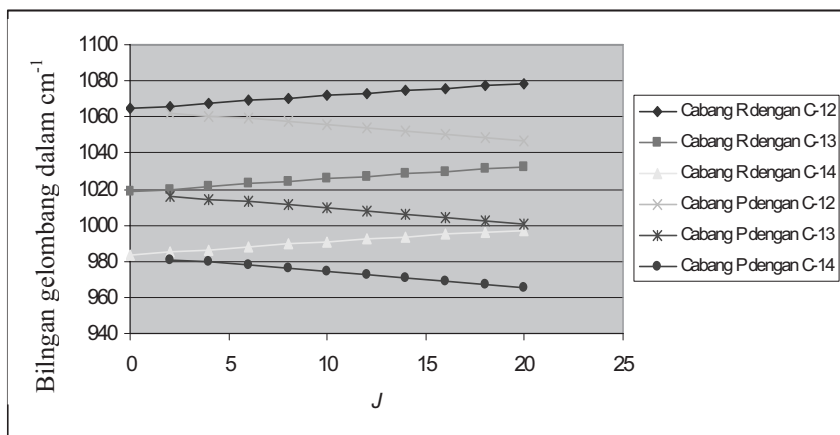
Gambar 4.3 Grafik Bilangan Gelombang Transisi Sebagai Fungsi Bilangan Kuantum rotasi (J) pada pita I molekul CO_2 .

Untuk Pita II, data spektrum transisi interaksi vibrasi-rotasi molekul karbondioksida diperlihatkan pada Tabel 4.4.

Tabel 4.4 Bilangan Gelombang Transisi Vibrasi-Rotasi Molekul CO_2 Pita II dalam Satuan cm^{-1}

J	$R(J) : J \rightarrow J + 1$			$P(J) : J \rightarrow J - 1$		
	$^{12}CO_2$	$^{13}CO_2$	$^{14}CO_2$	$^{12}CO_2$	$^{13}CO_2$	$^{14}CO_2$
0	1064.51	1018.43	983.45			
2	1066.06	1019.96	984.98	1062.17	1016.09	981.11
4	1067.54	1021.46	986.48	1060.57	1014.49	979.51
6	1069.01	1022.93	987.94	1058.95	1012.86	977.87
8	1070.46	1024.37	989.38	1057.30	1011.20	976.21
10	1071.88	1025.78	990.79	1055.63	1009.51	974.52
12	1073.28	1027.16	992.16	1053.92	1007.80	972.79
14	1074.65	1028.51	993.51	1052.20	1006.05	971.04
16	1075.99	1029.84	994.82	1050.44	1004.28	969.26
18	1077.30	1031.13	996.11	1048.66	1002.48	967.45
20	1078.59	1032.39	997.36	1046.85	1000.65	965.60

Grafik dari data Tabel 4.4 ditampilkan pada Gambar 4.4.



Gambar 4.4 Grafik Bilangan Gelombang Transisi Sebagai Fungsi Bilangan Kuantum Rotasi (J) pada Pita II Molekul CO_2 .

Jadi dapat dikatakan bahwa efek isotop karbon terhadap bilangan gelombang transisi interaksi vibrasi-rotas molekul karbondioksida adalah berupa penurunan nilai bilangan gelombang transisi pada pita dan bilangan kuantum yang sama kalau massa isotop karbon yang terlibat dalam molekul karbondioksida bertambah besar.

Tetapan rotasi B_0 untuk aras vibrasi terendah, dan B_1 untuk aras vibrasi yang lebih tinggi pada masing-masing nilai J pada pita yang sama untuk setiap isotop molekul karbondioksida dengan menggunakan persamaan (3.32) dan (3.33) dapat dilihat pada Lampiran B. Nilai rata-rata tetapan rotasi untuk setiap nilai bilangan kuantum J jika dihitung dengan menggunakan rumus

$$B = \frac{B_0 + B_1}{2} \quad (4.3)$$

Maka hasilnya dapat dilihat pada Tabel 4.5 dan 4.6.

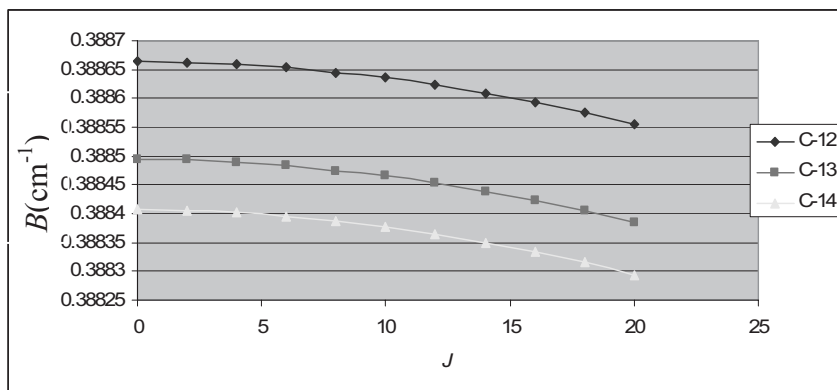
Tabel 4.5 Nilai Rata-rata B dalam satuan cm^{-1} Pita I

J	$B(12)$	$B(13)$	$B(14)$
0	0.388665	0.388495	0.388408
2	0.388663	0.388493	0.388406
4	0.388659	0.388489	0.388402
6	0.388653	0.388483	0.388396
8	0.388645	0.388475	0.388387
10	0.388637	0.388465	0.388377
12	0.388623	0.388453	0.388365
14	0.388609	0.388439	0.388350
16	0.388594	0.388422	0.388334
18	0.388576	0.388404	0.388315
20	0.388556	0.388384	0.388294

Tabel 4.6 Nilai Rata-rata B dalam satuan cm^{-1} Pita II

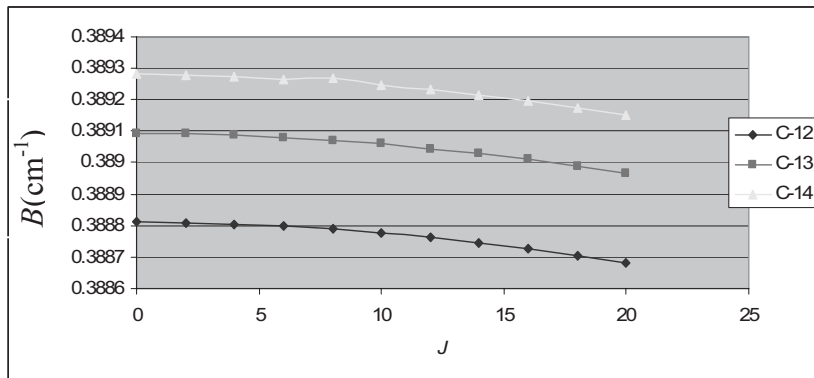
J	$B(12)$	$B(13)$	$B(14)$
0	0.388811	0.389094	0.389281
2	0.388809	0.389092	0.389278
4	0.388804	0.389087	0.389274
6	0.388797	0.389080	0.389266
8	0.388788	0.389071	0.389267
10	0.388776	0.389059	0.389245
12	0.388762	0.389045	0.389231
14	0.388746	0.389028	0.389215
16	0.388727	0.389010	0.389196
18	0.388705	0.388989	0.389175
20	0.388683	0.388965	0.389151

Jika tetapan rotasi B rata-rata digambarkan sebagai fungsi bilangan kuantum rotasi J , maka terlihat bahwa efek isotop karbon terhadap nilai B untuk pita I dan Pita II berbeda. Pada Pita I, efek isotop karbon terhadap tetapan rotasi B berupa penurunan nilai tetapan rotasi jika massa isotop karbon yang ada dalam molekul karbondioksida semakin besar (Gambar 4.5).



**Gambar 4.5 Grafik Tetapan Rotasi B Sebagai Fungsi J
Pada Pita I Molekul CO_2 .**

Pada Pita II, efek isotop karbon berupa kenaikan nilai tetapan rotasi B jika massa isotop karbon yang terikat dalam molekul karbondioksida semakin besar. Jika data dari Tabel 4.6 digambarkan dengan B sebagai fungsi bilangan kuantum J maka terlihat dengan jelas efek isotop karbon pada spektrum transisi vibrasi-rotasi molekul CO_2 (Gambar 4.6).



Gambar 4.6 Grafik Tetapan Rotasi B Sebagai fungsi J Pada Pita II Molekul CO_2 .

Perbedaan efek isotop karbon terhadap tetapan rotasi rata-rata B pada Pita I dan II secara kualitatif dapat dijelaskan dengan meninjau ragam vibrasi ν_1 , ν_2 , dan ν_3 yang saling berinteraksi. Pita I merupakan interaksi ragam variasi ν_1 dan ν_3 dengan B_0 tetapan rotasi pada aras terendah yaitu pada ragam vibrasi ν_1 , dan B_1 tetapan rotasi pada aras vibrasi yang lebih tinggi yaitu ν_3 . Sementara itu, Pita II merupakan interaksi ragam vibrasi ν_3 dan $2\nu_2$ yang juga

menghasilkan tetapan rotasi B_0 untuk ragam vibrasi ν_2 , dan B_1 untuk ragam vibrasi ν_3 . Nilai B_1 yang terukur pada Pita I dan Pita II untuk setiap bilangan kuantum rotasi J yang sama akan bernilai sama pada molekul CO_2 jika isotop karbon yang ada dalam molekul karbondioksida sama.

Nilai tetapan B_1 yang sama pada Pita I dan Pita II jika bilangan kuantum rotasi J dan isotop karbon yang ada dalam molekul CO_2 sama, serta kecenderungan nilainya yang semakin besar jika massa isotop karbon yang terikat bertambah besar menunjukkan adanya efek isotop karbon terhadap spektrum interaksi vibrasi-rotasi molekul karbondioksida. Tetapi melihat B_0 yang berbeda pada Pita I dan Pita II, yaitu nilai B_0 semakin kecil pada Pita I jika massa isotop karbon yang ada dalam molekul CO_2 bertambah besar tetapi sebaliknya terjadi pada Pita II secara sepintas menunjukkan bahwa efek isotop karbon pada spektrum molekul karbondioksida bergantung pada jalur transisi yang diamati dalam eksperimen.

Dengan meninjau kembali efek yang mungkin timbul dalam transisi interaksi vibrasi-rotasi molekul karbondioksida, khususnya resonansi Fermi (*Fermi resonance*) yang dapat terjadi antara ragam vibrasi ν_1 dan $2\nu_2$, kesulitan dalam menjelaskan kelakuan B_0 atau nilai tetapan rata-rata B yang berbeda pada Pita I dan Pita II. Akibat terjadinya resonansi Fermi antara aras vibrasi $(1\ 0^0\ 0)$ dengan aras vibrasi $(0\ 2^0\ 0)$, tenaga aras vibrasi $(1\ 0^0\ 0)$ dengan ragam vibrasi ν_1 menjadi naik, sedangkan tenaga aras vibrasi $(0\ 2^0\ 0)$ dengan ragam vibrasi $2\nu_2$ turun. Dari analisis data Pita I, kenaikan tenaga aras vibrasi ν_1 untuk isotop molekul $^{13}CO_2$ lebih kecil dari kenaikan molekul $^{12}CO_2$ dan lebih besar dari dari kenaikan tenaga isotop molekul

$^{14}\text{CO}_2$. Dengan demikian, selisih bilangan gelombang transisi antara $R(J)$ dan $P(J+2)$ pada persamaan (3.32) untuk molekul $^{13}\text{CO}_2$ lebih kecil dibandingkan terhadap molekul $^{14}\text{CO}_2$. Sebagai akibatnya, tetapan rotasi rata-rata yang dihitung dengan menggunakan persamaan (4.3) memberikan hasil nilai tetapan rotasi untuk molekul $^{12}\text{CO}_2$ lebih besar dibandingkan terhadap tetapan rotasi rata-rata molekul $^{13}\text{CO}_2$, dan tetapan rotasi rata-rata molekul $^{13}\text{CO}_2$ lebih besar dibandingkan terhadap tetapan rotasi rata-rata molekul $^{14}\text{CO}_2$. Secara matematis, tetapan rotasi rata-rata tersebut dapat dituliskan sebagai berikut:

$$B(12) > B(13) > B(14) \quad (4.4)$$

Pada Pita II, akibat adanya resonansi Fermi menyebabkan terjadinya penurunan tenaga aras vibrasi $2\nu_2$ dengan penurunan tenaga molekul $^{13}\text{CO}_2$ lebih kecil dari penurunan tenaga molekul $^{12}\text{CO}_2$, dan lebih besar dari penurunan tenaga molekul $^{14}\text{CO}_2$. Dengan demikian, selisih bilangan gelombang transisi antara $R(J)$ dan $P(J+2)$ pada persamaan (3.32) untuk molekul $^{13}\text{CO}_2$ lebih besar dibandingkan molekul $^{12}\text{CO}_2$, dan lebih kecil jika dibandingkan terhadap molekul $^{14}\text{CO}_2$. Sebagai akibatnya, tetapan rotasi rata-rata molekul $^{12}\text{CO}_2$ lebih kecil dari tetapan rotasi rata-rata molekul $^{13}\text{CO}_2$ dan tetapan rotasi rata-rata molekul $^{13}\text{CO}_2$ lebih kecil dari tetapan rotasi rata-rata molekul $^{14}\text{CO}_2$. Secara matematis keadaan atau perilaku tetapan rotasi pada Pita II ini dapat dituliskan sebagai berikut:

$$B(12) < B(13) < B(14) \quad (4.5)$$

Pada Pita I dan Pita II sebagaimana diperlihatkan pada Gambar 4.5 dan 4.6 terlihat bahwa nilai tetapan rotasi B berkurang kalau bilangan kuantum rotasi J bertambah besar. Nilai B semakin kecil jika nilai J semakin besar tidak dapat dijelaskan dengan menggunakan persamaan (1.2) dan (1.3) karena dari kedua persamaan tersebut tidak terlihat secara eksplisit kaitan antara nilai B dan nilai J . Namun

demikian, jika dikaji lebih lanjut persamaan (1.2) dan (1.3) memiliki kaitan dengan momen inersia I , yaitu:

$$B \propto \frac{1}{I} \quad (4.6)$$

Atau

$$B \propto \frac{1}{r^2} \quad (4.7)$$

Sehingga nilai B semakin kecil jika nilai J semakin besar dapat dijelaskan secara kualitatif dengan melihat kaitan antara B dan r yang dihubungkan dengan nilai J . Menurut Banwell (1983), penurunan nilai B jika nilai J bertambah besar adalah akibat jarak kesetimbangan r antarinti atom dalam molekul yang bertambah besar jika J bertambah besar. Hal ini terjadi akibat ikatan atom dalam molekul elastis terhadap regangan sehingga jika molekul berotasi lebih cepat (nilai J semakin besar) gaya sentrifugal menjadi lebih besar sehingga jarak antarinti atom dalam molekul bertambah besar pula. Dengan pertambahan jarak kesetimbangan atom dalam molekul mengakibatkan nilai I semakin besar. Jika nilai I semakin besar, maka nilai B semakin kecil, tetapi rumus kaitannya belum dapat ditemukan dalam penelitian ini maupun dalam pustaka yang ada.

Bab 5

PENUTUP

Dengan menggunakan nilai bilangan gelombang molekul isotop karbondioksida $^{12}\text{CO}_2$ hasil eksperimen yang dilaporkan oleh Taylor *et al* (Wittman, 1987) dapat ditentukan tetapan vibrasi molekul karbondioksida. Jika tetapan vibrasi tersebut digunakan untuk menghitung kembali nilai bilangan gelombang frekuensi fundamental isotop molekul karbondioksida, termasuk isotop molekul $^{13}\text{CO}_2$ dan $^{14}\text{CO}_2$, diperoleh hasil yang sangat sesuai dengan hasil eksperimen. Efek isotop karbon terhadap bilangan gelombang frekuensi fundamental karbondioksida adalah berupa penurunan nilai bilangan gelombang untuk ragam vibrasi ν_2 dan ν_3 jika massa isotop karbon yang ada dalam molekul karbondioksida semakin besar, sedangkan untuk ragam vibrasi ν_1 nilai bilangan gelombang frekuensi fundamentalnya tidak terpengaruh massa isotop karbon yang terikat dalam molekul karbondioksida.

Efek isotop karbon terhadap spektrum transisi interaksi vibrasi-rotasi molekul karbondioksida adalah berupa penurunan nilai tetapan rotasi B pada Pita I jika massa isotop karbon yang ada dalam molekul karbondioksida semakin besar, sedangkan pada Pita II nilai tetapan rotasi tersebut akan bertambah besar jika massa isotop karbon yang ada dalam molekul karbondioksida semakin besar. Perbedaan kelakuan tetapan rotasi pada Pita I dan Pita II akibat terjadi resonansi Fermi antara aras vibrasi $(1\ 0^0\ 0)$ dengan ragam vibrasi ν_1 dan aras vibrasi $(0\ 2^0\ 0)$ dengan ragam vibrasi $2\nu_2$. Jadi, jika tidak terjadi resonansi

Fermi, efek isotop karbon terhadap spektrum interaksi vibrasi-rotasi molekul karbondioksida adalah berupa kenaikan nilai tetapan rotasi B jika massa isotop karbon yang terikat dalam molekul karbondioksida bertambah besar.

Dari hasil analisis terhadap data hasil eksperimen yang dilaporkan oleh Bradley *et al* tersebut menunjukkan bahwa ada efek isotop karbon terhadap tetapan rotasi B , yaitu berupa pertambahan nilai tetapan rotasi. Jika massa isotop karbon yang terikat semakin besar. Sedangkan dari persamaan (1.2) dan (1.3) tidak dapat menunjukkan efek tersebut, oleh sebab itu jika persamaan (1.2) dan (1.3) masih digunakan untuk penentuan nilai B , perlu dilakukan penelitian lebih lanjut terhadap efek isotop karbon pada molekul karbondioksida khususnya tentang efek isotop karbon terhadap jarak kesetimbangan atom dalam molekul karbondioksida. Hal ini didasarkan pada fakta bahwa perubahan jarak kesetimbangan atom dalam molekul akan mengakibatkan perubahan nilai momen inersia I . Perubahan nilai momen inersia molekul akan mengakibatkan perubahan nilai tetapan rotasi B . Demikian juga pengaruh tetapan rotasi B terhadap vibrasi atau sebaliknya perlu dilakukan penelitian sebab dari hasil analisis data eksperimen spektrum interaksi vibrasi-rotasi yang telah dilaporkan terlihat adanya efek tersebut pada nilai B_0 untuk ragam vibrasi ν_1 dan $2\nu_2$, serta nilai B_1 untuk ragam vibrasi ν_3 .

DAFTAR PUSTAKA

- Banwell, C. N. 1983. *Fundamentals of Molecular Spectroscopy*, 3rd Ed. London: McGraw-Hill Book Company (UK) Limited.
- Davis, M. 1983. *Infrared Spectroscopy and Molecular Structure: An Outline of principles*. Amsterdam: Elsevier Publishing Company.
- Decius, J. C. dan Hexter R. M. 1977. *Molecular Vibrations in Crystals*. New York: McGraw-Hill International Book Company.
- Eisberg, R. dan Resnick R. 1985. *Quantum Physics of Atoms, Molecules, Solids, Nuclei, and Particles*, 2nd Ed. New York: John Wiley & Sons.
- Herzberg, G. 1949. *Molecular Spectra and Molecular Structure II: Infrared and Raman Spectra of Polyatomic Molecules*, 4th Printing. New York: D. van Nostrand Company, Inc.
- Jones, H. F. 1996. *Groups, Representations, and Physics*. Bristol and Philadelphia Institute of Publishing.
- Kaplan, I. 1964. *Nuclear Physics*, 2nd Ed. Addison-Wesley Publishing Company, Inc. Reading Massachusetts.
- Krane, K. S. 1988, *Introductory Nuclear Physics*. New York: John Wiley & Sons.
- Levine, A. K. dan DeMaria, A. J. 1971. *Laser*, Volume 3, New York: Marcel Decker, Inc.
- Levine, I. N. 1975. *Molecular Spectroscopy*. New York: John Wiley & Sons.

- Particle Data Group. 2006. "Review of Particle Physics". *J. Phys. G: Nucl. Part. Phys.* 33, p. 101.
- Review of Particle Physics. *Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics*, Volume 33, July 2006. Institute of Physics Publishing.
- Sindhu, P. S. 1985, *Molecular Spectroscopy*. New Delhi: Tata McGraw-Hill Publishing Company Limited.
- Svanberg, S. 1991. *Atomic and Molecular Spectroscopy: Basic Aspects and Practical Applications*. Berlin: Springer-Verlag.
- Tinkham, M. 1964. *Group Theory and Quantum Mechanics*. New Yorks: McGraw-Hill Book Company.
- Wang, Z. G. dan Xia. H. R. 1991, *Molecular and Laser Spectroscopy*, Berlin: Springer-Verlag.
- Wentik Jr, T. 1959. "Triatomic Linear Molecules Containing Carbon and Oxygen, Sulfur, Selenium, or Tellurium: II, Potential Constants", *J. Chem. Phys.* 30, p. 105-115.
- Willmott, J. C. 1975. *Atomic Physics*. London: John Wiley & Sons Limited.
- Wittman, W. J. 1987. *The CO₂ Laser*, Berlin: Springer-Verlag.

LAMPIRAN A

FAKTOR KONVERSI SATUAN TENAGA

Dalam spektroskopi atom dan molekul satuan tenaga yang sering digunakan adalah satuan atomik. Oleh sebab itu, perlu diketahui faktor konversi tenaga tersebut secara jelas.

$$1 \text{ eV} = 1.602 \times 10^{-19} \text{ J} \rightarrow 1 \text{ J} = 6.24150 \times 10^{18} \text{ eV}$$

$$\begin{aligned} \eta = 6.63 \times 10^{-34} \text{ Js} \rightarrow 1 \text{ J} &= \frac{\eta}{6.63 \times 10^{-34} \text{ s}} \\ &= 1.50919 \times 10^{33} \eta \text{ Hz} \end{aligned}$$

Dalam sistem satuan atomik nilai tetapan $\eta = c = 1$ sehingga

$$1 \text{ J} = 1.50919 \times 10^{33} \text{ Hz}$$

Satuan tenaga dalam joule (J) dapat juga dinyatakan dalam centimeter (cm), yaitu:

$$\begin{aligned} 1 \text{ J} &= \frac{\eta}{6.63 \times 10^{-34} \text{ s}} \times \frac{c}{3 \times 10^{10} \text{ cm/s}} \\ &= 5.03378 \times 10^{22} \text{ cm}^{-1} \end{aligned}$$

Dari relasi di atas dapat diperoleh kaitan berikut:

$$1 \text{ cm}^{-1} = 2.99792 \times 10^{10} \text{ Hz}$$

$$= 1.23992 \times 10^{-4} \text{ eV}$$

$$1 \text{ Hz} = 4.13567 \times 10^{-15} \text{ eV}$$

LAMPIRAN B

RESONANSI FERMI ARAS VIBRASI

MOLEKUL KARBONDIOKSIDA

Pada molekul karbondioksida, nilai bilangan gelombang frekuensi fundamental ν_1 hampir sama dengan $2\nu_2$. Karena nilai bilangan gelombang frekuensi fundamental yang sama antara ν_1 dan $2\nu_2$ sehingga terjadi resonansi yang disebut resonansi Fermi (*Fermi resonance*) antara aras vibrasi (1 0° 0) dengan aras vibrasi (0 2° 0) dan masing-masing bilangan gelombang:

$$\nu_1 = 1354.42 \text{ cm}^{-1}$$

Dan

$$2\nu_2 = 1272 - 1344.42 \text{ cm}^{-1}$$

Resonansi Fermi tersebut akan menyebabkan gangguan (*perturbation*) aras tenaga (bilangan gelombang) berupa pergeseran salah satu aras tenaga ke tingkat yang lebih tinggi, sedangkan aras tenaga yang lainnya bergeser ke aras yang lebih rendah (Witteman, 1987).

Besarnya tenaga gangguan akibat terjadinya resonansi Fermi bergantung pada elemen matriks $H_{vv'}$, yang merupakan bagian dari hamiltonian aras vibrasi H_v . Elemen matriks $H_{vv'}$ tersebut diberikan oleh

$$H_{vv'} = \int \psi_v^* H_v \psi_{v'} d\tau \quad (\text{B.1})$$

dengan ψ_v dan $\psi_{v'}$, adalah fungsi gelombang tak-terganggu kedua aras vibrasi yang beresonansi. Sesuai dengan teori gangguan, pergeseran tenaga dapat diperoleh dari determinan matriks

$$\begin{vmatrix} E_v^0 - E & H_{vv'} \\ H_{vv'} & E_{v'}^0 - E \end{vmatrix} = 0, \quad (\text{B.2})$$

Dengan E_v^0 dan $E_{v'}^0$ adalah tenaga tidak terganggu. Dari persamaan (C.2) diperoleh

$$E = \bar{E}_{vv'} \pm \frac{1}{2} \left[4|H_{vv'}|^2 + \delta^2 \right]^{1/2} \quad (\text{B.3})$$

Dengan $\bar{E}_{vv'} = \frac{1}{2}(E_v^0 + E_{v'}^0)$ dan $\delta = E_v^0 - E_{v'}^0$,

Menurut Herzberg (1949), nilai $H_{vv'}$ untuk resonansi aras vibrasi (1 0^o 0) dengan (0 2^o 0) adalah sebesar 50.4 cm⁻¹. Dengan menggunakan nilai tersebut dan dari persamaan (B.3) dapat dihitung pergeseran tenaga aras vibrasi dari nilai E_v^0 dan $E_{v'}^0$. Hasil perhitungan terhadap besarnya pergeseran tenaga aras vibrasi tersebut disajikan pada Tabel B.1.

Tabel B.1 Pergeseran Aras Vibrasi Akibat Resonansi Fermi pada Molekul CO₂ dalam Satuan cm⁻¹

Aras vibrasi	Molekul	Pergeseran tenaga
(1 0 ^o 0)	¹² CO ₂	+45.64
	¹³ CO ₂	+31.74
	¹⁴ CO ₂	+23.98
(0 2 ^o 0)	¹² CO ₂	-45.64
	¹³ CO ₂	-31.74
	¹⁴ CO ₂	-23.98

LAMPIRAN C

BILANGAN GELOMBANG TRANSISI INTERAKSI VIBRASI-ROTASI MOLEKUL KARBONDIOKSIDA

Bilangan gelombang transisi interaksi vibrasi-rotasi molekul karbondioksida pada Pita I dan Pita II Pada molekul karbondioksida, nilai bilangan gelombang frekuensi untuk cabang R dan P disajikan pada Tabel C.1 dan C.2.

**Tabel C.1 Bilangan Gelombang Transisi Vibrasi-Rotasi Molekul
 CO_2 pada Pita I dalam Satuan (cm^{-1})**

J	$R(J) : J \rightarrow J + 1$			$P(J) : J \rightarrow J - 1$		
	$^{12}CO_2$	$^{13}CO_2$	$^{14}CO_2$	$^{12}CO_2$	$^{13}CO_2$	$^{14}CO_2$
0	961,73	914,20	866,90			
2	963,26	915,73	868,44	959,39	911,86	864,57
4	964,77	917,24	869,96	957,80	910,28	862,99
6	966,25	918,74	871,48	956,14	908,68	861,40
8	967,71	920,22	872,96	954,55	907,05	859,79
10	969,14	921,68	874,43	952,88	905,41	858,16
12	970,54	923,11	875,88	951,19	903,75	856,52
14	971,93	924,53	877,32	949,48	902,07	854,86
16	973,29	925,92	878,74	947,74	900,37	853,18
18	974,62	927,30	880,15	945,98	898,65	851,49

Efek Isotop Karbon

Pada Spektrum Interaksi Vibrasi-Rotasi Molekul Karbondioksida

20	975,93	928,66	881,54	944,19	896,91	849,78
22	977,21	929,99	882,91	942,38	895,15	848,06
24	978,47	931,31	884,27	940,55	893,37	846,32
26	979,71	932,61	885,60	938,69	891,57	844,56
28	980,91	933,88	886,93	936,80	889,76	842,79
30	982,10	935,14	888,23	934,89	887,92	841,00
32	983,25	936,37	889,52	932,96	886,06	839,20
34	984,38	937,58	890,79	931,00	884,14	837,37
36	985,49	938,78	892,04	929,02	882,29	835,54
38	986,57	939,95	893,28	927,01	880,37	833,68
40	987,62	941,10	894,50	924,97	878,43	831,81
42	988,65	942,23	895,70	922,91	876,48	829,93
44	989,65	943,34	896,89	920,83	874,50	828,02
46	990,62	944,43	898,05	918,72	872,50	826,11
48	991,57	945,49	899,20	916,58	870,48	824,17
50	992,48	946,54	900,33	914,42	868,45	822,22
52	993,38	947,56	901,45	912,23	866,39	820,25
54	994,24	948,56	902,54	910,02	864,31	818,26
56	995,08	949,54	903,62	907,77	862,21	816,26
58	995,88	950,49	904,68	905,51	860,08	814,24

Tabel C.2 Bilangan Gelombang Transisi Vibrasi-Rotasi Molekul CO_2 pada Pita I dalam satuan (cm^{-1})

J	$R(J) : J \rightarrow J + 1$			$P(J) : J \rightarrow J - 1$		
	$^{12}CO_2$	$^{13}CO_2$	$^{14}CO_2$	$^{12}CO_2$	$^{13}CO_2$	$^{14}CO_2$
0	1064,51	1018,43	983,45			
2	1066,04	1019,96	984,98	1062,16	1016,09	981,11

4	1067,54	1021,46	986,48	1060,57	1014,49	979,51
6	1069,01	1022,93	987,94	1058,95	1012,86	977,87
8	1070,46	1024,37	989,38	1057,30	1011,20	976,21
10	1071,88	1025,78	990,79	1055,63	1009,51	974,52
12	1073,28	1027,16	992,16	1053,92	1007,80	972,79
14	1074,65	1028,52	993,51	1052,20	1006,05	971,04
16	1075,99	1029,84	994,82	1050,44	1004,28	969,26
18	1077,30	1031,13	996,11	1048,66	1002,48	967,45
20	1078,59	1032,39	997,36	1046,85	1000,65	965,40
22	1079,85	1033,63	998,59	1045,02	998,79	963,73
24	1081,08	1034,84	999,78	1043,16	996,90	961,83
26	1082,30	1036,02	1000,95	1041,28	994,99	959,90
28	1083,48	1037,17	1002,08	1039,37	993,04	957,94
30	1084,64	1038,29	1003,19	1037,43	991,07	955,96
32	1085,77	1039,38	1004,27	1035,47	989,07	953,94
34	1086,87	1040,45	1005,31	1033,49	987,05	951,90
36	1087,95	1041,48	1006,33	1031,48	984,99	949,82
38	1089,00	1042,49	1007,32	1029,44	982,91	947,72
40	1090,03	1043,47	1008,28	1027,38	980,81	945,59
42	1091,03	1044,43	1009,21	1025,30	978,67	943,44
44	1092,01	1045,35	1010,11	1023,19	976,51	941,25
46	1092,96	1046,25	1010,98	1021,06	974,32	939,04
48	1093,88	1047,12	1011,84	1018,90	972,11	936,80
50	1094,79	1047,96	1012,66	1016,72	969,87	934,54
52	1095,66	1048,78	1013,45	1014,52	967,61	932,25
54	1096,52	1049,57	1014,21	1012,29	965,32	929,93
56	1097,34	1050,33	1014,94	1010,04	963,00	927,59
58	1098,15	1051,07	1015,65	1007,77	960,66	925,22

INDEKS

A

aturan seleksi, 17, 28, 33

B

besaran-besaran fisis, 5, 10

bidang molekul, 11, 13

bidang simetri, 10, 11, 14, 22

bilangan gelombang, 5, 6, 8, 9, 21, 22, 23, 26, 28, 29, 30, 33, 34, 41, 42, 43, 44, 46, 48, 52, 54, 61, 63

Bilangan Gelombang, 20, 41

bilangan kuantum rotasi, 7, 27, 28, 30, 31, 36, 37, 39, 46, 49, 51, 52

bom nuklir, 4

C

cabang, 28, 34, 35, 36, 39, 40, 46, 63

cahaya tampak, 19, 20

D

derajat kebebasan., 20

E

efek isotop, 4, 5, 6, 8, 9, 41, 48, 49, 50, 51, 55

Efek isotop, 4, 6, 41, 44, 54

Efek Isotop, 41

elektron positif, 3

elektron volt, 19

elemen simetri, 9, 11, 14

F

frekuensi fundamental, 5, 6, 9, 21, 22, 23, 25, 26, 28,

33, 34, 41, 42, 43, 44, 54, 61

fungsi gelombang, 15, 17, 37, 62

G

garis anti-Stokes, 28, 29

garis-garis Stokes, 5

gaya sentrifugal, 32, 53

gelombang mikro, 19, 20

geometri molekul, 10

grup titik, 9, 14, 15, 22, 27, 37

I

infremerah, 19

interaksi vibrasi-rotasi, 9, 34, 45, 46, 51, 54, 55, 63

intermolekular, 19

inti atom, 1, 5, 11, 16, 19, 22, 26, 31, 32, 37, 53

intramolekular, 19

invarian, 10

invers, 10

isotop stabil, 1, 3

isotop-sotop, 1

K

karbondioksida, 5, 6, 8, 9, 10, 14, 15, 20, 22, 25, 26, 28, 30, 33, 37, 39, 40, 41, 42, 43, 44, 45, 46, 48, 49, 50, 51, 54, 55, 61, 63

kecepatan cahaya, 7, 27

kelimpahan, 1, 3, 9

konfigurasi molekul, 11, 12, 13, 14

koordinat valensi, 24

L

lengkung setangkup, 21, 25

M

medan listrik, 16, 20

mekanika kuantum, 7

molekul poliatomik, 20, 27, 28

momen dipol, 20, 28, 44

momen inersia, 7, 8, 26, 27, 28, 30, 33, 53, 55

momentum sudut, 15, 16, 27, 36

Momentum sudut, 15

momentum sudut orbital, 15

N

Neutron, 1

nomor atom, 1

nomor massa, 1

O

objek geometri, 10

operasi simetri, 11

orbital elektronik, 15

P

pancaran (emisi) elektron, 3

paritas, 15, 17

paritas gasal, 15

paritas genap, 15

pencerminan, 10, 11, 13, 25

pergeseran Raman, 30

pita I, 9, 37, 45, 46, 48, 49, 50, 51, 52, 54, 63, 64

Pita I, 39, 41, 50

pita II, 9, 38, 46, 47, 49, 50, 51, 52, 54

polarisabilitas, 26, 28

positron, 3

Proton, 1

pusat simetri, 10, 11, 15, 25

R

radiasi foton, 29

radiasi sinar kosmis, 4

radioaktivitas, 3

ragam vibrasi, 16, 17, 21, 22, 23, 25, 28, 37, 44, 50, 51, 54, 55

Ragam vibrasi, 16, 37

reaksi nuklir, 4

regangan setangkup, 7, 21, 25, 28
 regangan tak-setangkup, 21, 26
 reonansi Fermi, 38

S

senyawa organik, 2
 sifat-sifat kimia, 4, 19
 simetri, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 19, 22, 25, 37
 simetri rotasi, 10, 13
 simetri translasi, 10
 spektroskopi inframerah, 6, 20
 spektroskopi molekul, 5
 spektroskopi Raman, 20, 28
 spektrum molekul, 5, 9, 44, 51
 spektrum rotasi Raman, 5, 9, 27, 28, 29, 30
 spektrum vibrasi dan rotasi, 5
 spesies, 9, 16, 17, 22, 38
 spesies molekul, 9, 17
 Struktur halus, 19
 struktur hiperhalus, 19
 sudut deviasi, 24
 sumbu molekul, 10, 26, 27, 28, 44
 sumbu rotasi, 7, 13
 sumbu simetri, 11, 13, 14, 15, 22

T

tangkapan elektron, 3
 tenaga potensial, 24, 25
 tenaga rotasi, 7, 19, 27, 31
 tetapan Planck, 7, 27
 tetapan rotasi, 5, 7, 8, 9, 27, 28, 30, 32, 34, 39, 40, 48, 49, 50, 52, 54, 55
 tidak stabil, 1
 transformasi identitas, 10
 transformasi koordinat, 10, 11

U

ultraviolet, 19
 unsur atom, 1

V

vakum, 7, 27

W

waktu paro, 2, 3, 4
 Waktu paro, 2

RIWAYAT HIDUP SINGKAT PENULIS



Asan Damanik lahir di Simalungun Sumatera Utara 11 Nopember 1963. Lulus SMA tahun 1983 (SMA Negeri 3 Pematangsiantar), lulus Sarjana (S1) dalam bidang Ilmu Kedokteran Hewan IPB Bogor tahun 1987, lulus Sarjana (S1) dalam bidang Fisika Teoretik FMIPA UGM Yogyakarta tahun 1992, lulus Magister Sains (S2) dalam bidang

Fisika Teoretik dari Pascasarjana UGM tahun 1997, dan memperoleh Doktor (S3) dalam bidang Fisika Teoretik (Fisika Partikel Fundamental Teoretik) dari UGM tahun 2009. Sejak Maret 1992 menjadi dosen di Jurusan Fisika Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam (FMIPA) Universitas Sanata Dharma (USD) Yogyakarta dan sekarang menjadi Fakultas Sains dan Teknologi (FST) USD. Telah melakukan banyak penelitian dalam bidang Fisika Teoretik, seminar dan publikasi dalam Jurnal Nasional dan Internasional. Selama menjadi dosen, penulis memiliki pengalaman mengajar dalam berbagai matakuliah seperti Fisika Matematik, Fisika Kuantum, Fisika Zat Padat, Energi, Teori Relativitas, Fisika Modern, Fisika Nuklir, Mekanika, Mekanika Fluida, Termodinamika, Fisika Dasar, Matematika Dasar, dan

Filsafat Ilmu Pengetahuan. Penulis menjadi anggota Himpunan Fisika Indonesia (HFI) dan Grup Fisikawan Teoretik Indonesia (GFTI).



EFEK ISOTOP KARBON

PADA SPEKTRUM INTERAKSI VIBRASI-ROTASI
MOLEKUL KARBONDIOKSIDA

Secara garis besar, kajian teoretis tentang efek isotop karbon pada spektrum molekul karbondioksida membutuhkan pengetahuan tentang simetri, grup titik, dan spesies aras vibrasi. Buku Efek Isotop Karbon ini meninjau simetri dan elemen simetri molekul, grup titik, dan spesies molekul. Selain itu, dibahas pula landasan teoretis struktur dan bilangan gelombang frekuensi fundamental molekul karbondioksida, spektrum rotasi Raman, dan spektrum interaksi vibrasi-rotasi. Efek isotop karbon terhadap bilangan gelombang frekuensi fundamental molekul CO₂ dan hasil analisis data spektroskopi interaksi vibrasi-rotasi molekul karbondioksida juga akan diketengahkan.

Buku ini dapat digunakan sebagai pedoman bagi mahasiswa maupun masyarakat umum yang berminat melakukan penelitian efek isotop karbon. Ditulis dengan ringkas dan enak dibaca, buku ini melengkapi khazanah penelitian fisika yang masih jarang dilakukan di Indonesia.

ASAN DAMANIK

• Lahir di Simalungun, Sumatra Utara 11 November 1963.

• Pendidikan:

- Sarjana (S1) bidang Ilmu Kedokteran Hewan, IPB Bogor (1987).
- Sarjana (S1) bidang Fisika Teoretik, FMIPA UGM Yogyakarta (1992).
- Magister Sains (S2) bidang Fisika Teoretik, Sekolah Pascasarjana UGM Yogyakarta (1997)
- Doktor (S3) bidang Fisika Teoretik (Fisika Partikel Fundamental Teoretik), Sekolah Pascasarjana UGM Yogyakarta (2009)

• Jabatan:

- Sejak Maret 1992, dosen di Jurusan Fisika FMIPA (sekarang Fakultas Sains dan Teknologi) Universitas Sanata Dharma Yogyakarta.
- Anggota Himpunan Fisika Indonesia (HFI) dan Grup Fisikawan Teoretik Indonesia
- Sejak Oktober 2010, Wakil Ketua LPPM Universitas Sanata Dharma Yogyakarta.



Penerbit USD
Gedung LPPM Universitas Sanata Dharma
Jl. Affandi, Mrican Yogyakarta 55281
e-mail: publisher@usd.ac.id

ISBN 978-979-1088-70-1



9 789791 088701