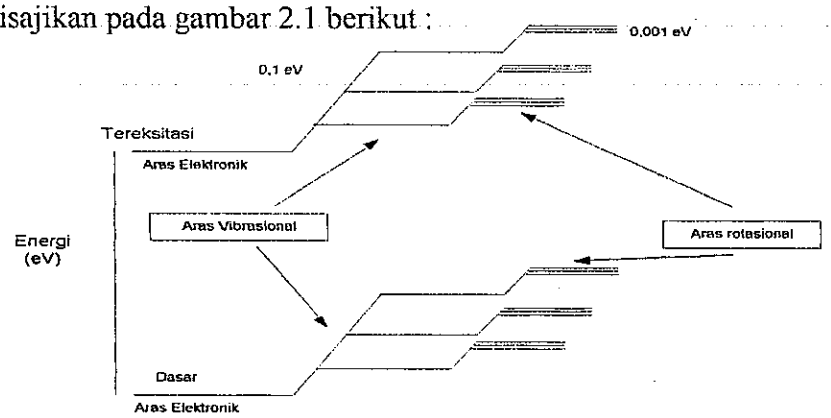
BAB II

DASAR TEORI

2.1 Tingkat Tenaga Molekul Diatomik

Diagram tingkat-tingkat tenaga molekul lebih rumit dibandingkan tingkat tenaga dalam atom. Selain memiliki tingkat tenaga elektronik, molekul juga memiliki tingkat-tingkat tenaga vibrasional dan rotasional. Setiap tingkat tenaga elektronik terbagi menjadi beberapa tingkat vibrasinal m, kemudian tingkat tenaga vibrasional ini terbagi lagi menjadi tingkat-tingkat tenaga rotasional (Beisser,1992).

Tingkat tenaga elektronik terpisah oleh selang beberapa eV dan spektrumnya terdapat dalam daerah cahaya tampak dan ultra ungu. Keadaan vibrasional terpisah oleh selang tenaga sekitar 0,1 eV dan spektrumnya terdapat dalam daerah infra merah dengan panjang gelombang 10.000 Å hingga 0,1 nm. Tingkat tenaga rotasional terpisah oleh selang tenaga sekitar 10^{-3} eV dan spektrumnya terdapat dalam daerah gelombang mikro dengan panjang gelombang diantara 0,1 nm hingga 1cm (Beisser,1992). Skema tingkat tenaga molekul diatomik disajikan pada gambar 2.1 berikut :



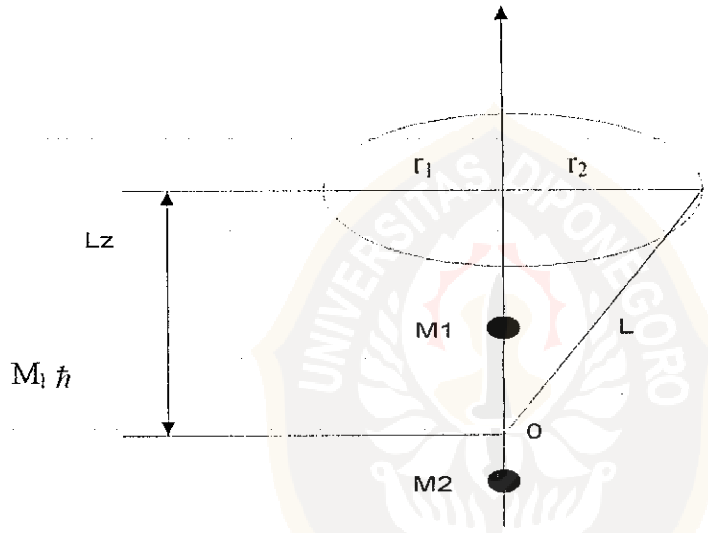
Gambar 2.1 Skema diagram tingkat tenaga molekul diatomik

This document is Undip Institutional Repository Collection. The author(s) or copyright owner(s) agree that UNDIP-IR may, without changing the content, translate the submission to any medium or format for the purpose of preservation. The author(s) or copyright owner(s) also agree that UNDIP-IR may keep more than one copy of this submission for purposes of security, back-up and preservation. (http://eprints.undip.ac.id)

Adapun dalam penelitian ini hanya akan dikaji tenaga rotasionalnya saja.

2.1.1 Tingkat Tenaga rotasional

Tingkat tenaga terendah molekul diatomik timbul dari rotasi disekitar pusat masanya (Beiser,1992). Molekul diatomik yang berputar pada porosnya dengan massa masing-masing m_1 dan m_2 yang berjarak r_1 dan r_2 dari pusat massanya ditunjukan pada gambar 2.2 berikut :



Gambar 2.2 Rotasi molekul diatomik

Momen inersia terhadap sumbu yang melalui pusat massa dan tegak lurus pada garis yamg menghubungkan kedua atom adalah (Warren, 1994 dan krane, 1992):

$$I = \left(\frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}\right)(r_1 + r_2)^2 = \mu r^2 \qquad (2.1)$$

This document is Undip Institutional Repository Collection. The author(s) or copyright owner(s) agree that UNDIP-IR may, without changing the content, translate the submission to any medium or format for the purpose of preservation. The author(s) or copyright owner(s) also agree that UNDIP-IR may keep more than one copy of this submission for purposes of security, back-up and preservation. (http://eprints.undip.ac.id)

dengan μ adalah massa tereduksi.

Tingkat tenaga rotasional molekul diatomik adalah (Beiser,1992) :

$$E_j = \frac{J(J+1)}{2I}\hbar^2 \qquad (2.2)$$

dengan E_j adalah tingkat tenaga rotasional, J adalah bilangan kuantum rotasional, $\hbar$ adalah konstanta Planck dan I adalah momen inersia molekul.

2.2 Distribusi Boltzmann Molekul Diatomik

Populasi molekul pada tingkat tenaga rotasional pada umumnya memakai distribusi Boltzmann (Smith, 1982 dan Wilson, 1960). Distribusi Boltzmann memberikan hubungan antara tingkat tenaga, populasi molekul dan suhu molekul pada tingkat tenaga tertentu mengikuti persamaan (Mihalas, 1970) :

$$N_J = \frac{N_0}{g_0}\sum_i g_i \exp\left[-\frac{E_J}{kT}\right] \qquad (2.3)$$

dengan N_J merupakan populasi molekul pada tingkat J, No merupakan populasi molekul pada tingkat dasar, g_0 adalah bobot statistik tingkat dasar, g_i adalah bobot statistik ke i dan T adalah suhu (dalam K).

Dengan memasukan nilai tingkat tenaga rotasional molekul diatomik dan multiplisitas tingkat tenaga rotasional yang besarnya $g_i = (2J + 1)$, maka persamaan distribusi Boltzmann menjadi (Ternov, 1962) :

This document is Undip Institutional Repository Collection. The author(s) or copyright owner(s) agree that UNDIP-IR may, without changing the content, translate the submission to any medium or format for the purpose of preservation. The author(s) or copyright owner(s) also agree that UNDIP-IR may keep more than one copy of this submission for purposes of security, back-up and preservation. (http://eprints.undip.ac.id)

$$N_J = \frac{N_0}{g_0}\sum(2J+1)\exp\left[-\frac{\hbar^2}{2IkT}J(J+1)\right] \tag{2.4}$$

persamaan (2.4) memperlihatkan hubungan antara suhu molekul dengan populasi molekul pada tingkat tenaga rotasional.

2.3 Sifat Simetri Tingkat Rotasional Molekul Diatomik

Molekul diatomik dengan dua atomnya masing-masing memiliki fungsi gelombang yang dapat sama (simetri) ataupun berbeda (antisimetri). Fungsi gelombang kedua atom tersebut ditentukan dari transformasi pencerminan (Herzberg, 1950):

$$\psi(\vartheta,\varphi,x) \xrightarrow[p]{} \psi(\pi-\vartheta,\pi+\varphi,-x)$$

$$= (-1)^J\ \psi(\vartheta,\varphi,x) \tag{2.5}$$

dengan p menunjukkan transformasi pencerminan

Adapun fungsi gelombang rotasional (fungsi eigennya) sebagai hasil dari solusi persamaan adalah:

$$\psi_r(\vartheta,\varphi,x) = \theta_{J\bar{\lambda}M}(\vartheta)\,e^{i\bar{\lambda}\psi}\ e^{iM\varphi} \tag{2.6}$$

dengan $\vartheta, \varphi,$ dan χ disebut sebagai sudut Eulerian. ϑ adalah sudut sumbu badan ujung dengan sumbu z tertentu, φ adalah sudut azimuth sumbu z dan χ adalah

This document is Undip Institutional Repository Collection. The author(s) or copyright owner(s) agree that UNDIP-IR may, without changing the content, translate the submission to any medium or format for the purpose of preservation. The author(s) or copyright owner(s) also agree that UNDIP-IR may keep more than one copy of this submission for purposes of security, back-up and preservation. (http://eprints.undip.ac.id)

sudut azimuth rotasi sumbu badan, $\overline{\wedge} = \pm \wedge$ yaitu bilangan kuantum momentum sudut elektron yang berkisar pada sumbu antar inti, J adalah bilangan kuantum rotasional dan M adalah bilangan kuantum magnetik. $\theta_{J\overline{\wedge}M}(\vartheta)$ disebut juga polinomial Jacoby (Hipergeometrik) yang memiliki bentuk sebagaimana diperlihatkan pada lampiran.

Kombinasi linear hasil dari pencerminan fungsi gelombang pada persamaan (2.6) oleh persamaan (2.5) diperoleh bahwa untuk J= bilangan genap akan memiliki bentuk :

$$\psi_r^+ = \theta_{J\wedge M}(\vartheta)\, e^{i\wedge\chi}\, e^{iM\varphi} + \theta_{J-\wedge M}\, e^{-i\wedge\chi}\, e^{iM\varphi} \quad , \tag{2.7a}$$

dan untuk J= bilangan gasal akan memiliki bentuk (Herzberg, 1950) :

$$\psi_r^- = \theta_{J\wedge M}(\vartheta)\, e^{i\wedge\chi}\, e^{iM\varphi} - \theta_{J-\wedge M}\, e^{-i\wedge\chi}\, e^{iM\varphi} \tag{2.7b}$$

Persamaan (2.7) merupakan bentuk fungsi gelombang molekul diatomik simetri (ψ_r^+) dan anti simetri (ψ_r^-). Molekul diatomik nitrogen dengan J genap disebut para-nitrogen dan molekul diatomik nitrogen dengan J gasal disebut ortho-nitrogen

Vektor inti i dari dua inti molekul diatomik akan menghasilkan resultan S yang merupakan spin inti total molekul. Menurut aturan tambahan vektor momentum sudut untuk dua inti identik ($i_1 = i_2 = i$) memiliki bilangan kuantum spin inti total yaitu :

This document is Undip Institutional Repository Collection. The author(s) or copyright owner(s) agree that UNDIP-IR may, without changing the content, translate the submission to any medium or format for the purpose of preservation. The author(s) or copyright owner(s) also agree that UNDIP-IR may keep more than one copy of this submission for purposes of security, back-up and preservation. (http://eprints.undip.ac.id)

$$i = 2i, 2i - 1, ..., 0 \tag{2.8}$$

Dalam kajian vektor momentum sudut, state dengan spin molekul total S akan memiliki bobot statistik (2S+1). Untuk molekul S=1 maka spin inti berbentuk paralel (↑↑) disebut juga anti simetri karena menyebabkan bilangan kuantum rotasional J bernilai gasal, sedangkan untuk S=0 maka spin inti akan anti paralel (↑↓) atau disebut juga tingkat simetri karena menyebabkan bilangan kuantum rotasional J bernilai genap (Herzberg, 1950).

2.4 Bose-Einstein Condensation (BEC)

Dalam kajian molekul diatomik pada kondisi suhu mendekati 0 K, maka pembahasannya tidak bisa dilepaskan dengan fenomena fisis yang disebut dengan Bose-Einstein Condensation (BEC). Ketika sistem dalam kondisi suhu mendekati 0 K maka seluruh partikel akan menempati energi terendah dan sistem berada dalam keadaan energi minimum. Partikel akan menempati aras tunggal (partikel Boson) dari energi terendah yang disebut sebagai aras dasar. Kumpulan partikel pada aras terendah dengan momentum nol disebut mengalami kondensasi. Kondensasi pada aras dasar dalam atom ataupun molekul disebut dengan Bose-Einstein Condensation (Kittel, 1980).

Dari persamaan distribusi Bose-Einstein , untuk tingkat energi terendah dapat dituliskan (Khana, 1978):

This document is Undip Institutional Repository Collection. The author(s) or copyright owner(s) agree that UNDIP-IR may, without changing the content, translate the submission to any medium or format for the purpose of preservation. The author(s) or copyright owner(s) also agree that UNDIP-IR may keep more than one copy of this submission for purposes of security, back-up and preservation. (http://eprints.undip.ac.id)

$$\frac{Nh^3}{V_g(\pi mkT)} = e^{\frac{\mu}{kT}} + \frac{e^{\frac{2\mu}{kT}}}{2^{\frac{3}{2}}} + \frac{e^{\frac{2\mu}{kT}}}{3^{\frac{3}{2}}} + \ldots \qquad (2.9)$$

dengan N adalah jumlah total populasi molekul, g merupakan bobot statistik, m adalah massa molekul, k adalah Konstanta Boltzmann, T sebagai suhu molekul, dan μ= potensial kimia.

Jika terjadi kondisi suhu molekul sama dengan suhu kondensasi (T=To) maka potensial kimianya sangat kecil sehingga didapat :

$$e^{\frac{\mu}{kT}} = 1 \qquad (2.10)$$

persamaan (2.9) menjadi :

$$\frac{Nh^3}{Vg(2\pi mkT)^{\frac{3}{2}}} = 1 + \left(\frac{1}{2^{\frac{3}{2}}}\right) + \left(\frac{1}{3^{\frac{3}{2}}}\right) + \bullet\bullet\bullet = 2{,}612 \qquad (2.11)$$

dari hasil persamaan (2.11) maka suatu molekul akan dapat ditentukan nilai temperatur kondensasinya (To), untuk kondisi $T \leq To$ adalah :

$$N = No + 2{,}612V\left(\frac{2\pi mkT}{h^2}\right)^{\frac{3}{2}} \qquad (2.12)$$

This document is Undip Institutional Repository Collection. The author(s) or copyright owner(s) agree that UNDIP-IR may, without changing the content, translate the submission to any medium or format for the purpose of preservation. The author(s) or copyright owner(s) also agree that UNDIP-IR may keep more than one copy of this submission for purposes of security, back-up and preservation. (http://eprints.undip.ac.id)

dengan suku pertama atau N_0 adalah populasi pada aras dasar dan suku kedua pada aras tereksitasi, kita substitusi pers (2.12) ke pers (2.11) diperoleh persamaan yang menyajikan populasi pada aras yang berbentuk :

$$N_0 = N\left[1-\left(\frac{T}{T_0}\right)^{\frac{3}{2}}\right] \tag{2.13}$$

Dari persamaan (2.13) tampak bahwa jika suhu molekul T diatas suhu T_0 maka populasi pada aras dasar N_0 akan sangat kecil, sedangkan jika suhu molekul T dibawah suhu T_0 maka populasi pada aras dasar N_0 akan naik. Molekul pada suhu jauh dibawah suhu T_0, maka populasi pada aras dasar N_0 akan sangat mendekati sama dengan jumlah partikel total N gas. Adapun sisanya jikalau ada adalah populasi partikel pada aras tereksitasi, yang dirumuskan (Khana, 1978) :

$$N_n = N - n_0 = N\left(\frac{T}{T_0}\right)^{\frac{3}{2}}, \tag{2.14}$$

dengan N_n adalah populasi partikel pada aras tereksitasi. Untuk keadaan suhu yang mendekati suhu mutlak 0 K, maka gas akan terkondensasi ke keadaan terendah dan tidak ada partikel yang berada pada keadaan tereksitasi, N_n=0.

This document is Undip Institutional Repository Collection. The author(s) or copyright owner(s) agree that UNDIP-IR may, without changing the content, translate the submission to any medium or format for the purpose of preservation. The author(s) or copyright owner(s) also agree that UNDIP-IR may keep more than one copy of this submission for purposes of security, back-up and preservation. (http://eprints.undip.ac.id)