

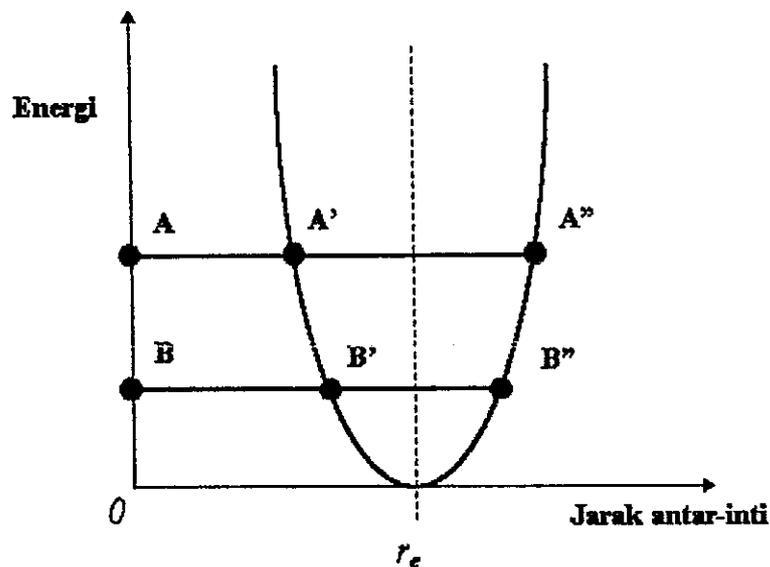
# BAB III

## VIBRASI DAN TINGKAT TENAGA VIBRASIONAL

### MOLEKUL DIATOMIK

#### III.1. Molekul Diatomik sebagai Osilator Harmonik

Terdapat dua jenis gaya yang bekerja pada atom-atom yang menyusun molekul diatomik. Pertama adalah gaya tolak-menolak antara dua inti atom yang bermuatan positif dan antara awan elektron kedua atom yang bermuatan negatif. Kedua adalah gaya tarik-menarik antara inti satu atom dengan awan elektron atom yang lain dan sebaliknya (Banwell dan McCash, 1994). Pada saat tenaga sistem minimum, kedua atom akan diam dan berada pada suatu jarak tertentu sehingga kedua gaya tersebut akan saling mengimbangi. Jika kedua atom didekatkan maka gaya tolak menolak semakin besar sementara jika kedua atom dijauhkan satu dengan yang lain maka gaya tarik-menarik akan membesar untuk mempertahankan ikatan antara kedua atom. Setiap usaha untuk mendekatkan atau menjauhkan kedua atom membutuhkan input tenaga. Pada saat tenaga minimum, jarak antar-inti atom disebut jarak kesetimbangan atau panjang ikatan (*bond length*)  $r_e$ , (Banwell dan McCash, 1994). Semakin besar perubahan jarak antar-inti terhadap jarak kesetimbangannya, semakin besar pula tenaga potensial yang dimiliki kedua atom untuk kembali ke posisi kesetimbangannya.



Gambar 3.1. : Kurva hubungan antara tenaga potensial dengan jarak antar inti pada model pegas yang mematuhi Hk. Hooke (Barwell & McCash, 1994)

Hal ini dapat dianalogikan dengan gerakan pegas pada mekanika klasik yang mematuhi Hukum Hooke. Secara umum dan sederhana dapat dianggap kedua atom penyusun partikel bergerak mendekat dan menjauh dalam gerakan harmonik. Gerak semacam ini dapat disederhanakan menjadi vibrasi harmonik suatu titik massa di sekitar posisi kesetimbangan, atau dengan kata lain menjadi suatu model osilator harmonik.

Secara klasik, osilator harmonik dapat didefinisikan sebagai suatu sistem fisis yang terikat pada suatu titik kesetimbangan oleh suatu gaya lenting (*elastic force*) yang sebanding dengan pergeseran linear atau angular dari posisi kesetimbangan tersebut atau suatu titik massa  $m$  yang dikenai gaya sebesar  $F$  sebanding dengan jarak  $x$  dari posisi kesetimbangan, dengan arah menuju posisi kesetimbangan (Herzberg, 1950).

Maka dengan membandingkan Hukum Hooke dan Hukum Newton II, dapat dituliskan:

$$F = -kx = m \frac{d^2 x}{dt^2} \quad (3.1)$$

dengan  $k$  adalah konstanta gaya. Penyelesaian persamaan differensial (3.1) di atas dapat dituliskan dalam bentuk :

$$x = x_0 \sin(2\pi\nu_{osc}t + \varphi) \quad (3.2)$$

dengan  $x_0$  menyatakan amplitudo vibrasi dan  $\varphi$  adalah tetapan fase yang bergantung pada kondisi awal. Frekuensi vibrasional  $\nu_{osc}$  dinyatakan dalam bentuk (Barrow,1964):

$$\nu_{osc} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{m}} \quad (3.3)$$

Karena gaya adalah turunan negatif tenaga potensial  $V$ , maka dari pers.(3.1) dapat ditulis hubungan :

$$V = \frac{1}{2} kx^2 = 2\pi^2 m \nu_{osc}^2 x^2 \quad (3.4)$$

Osilator harmonik merupakan suatu sistem yang memiliki tenaga potensial yang sebanding dengan kuadrat jarak posisi kesetimbangannya, sehingga kurva tenaga potensialnya berbentuk parabola.

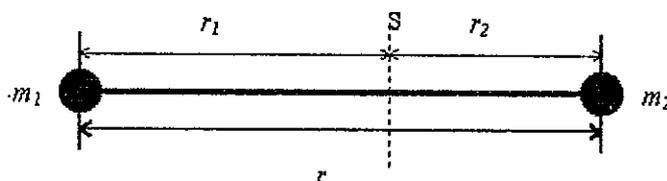
Pada pers.(3.1) tampak bahwa gaya berbanding lurus dengan perubahan jarak antar-inti  $x=r-r_e$ . Jika ditinjau masing-masing atom, maka untuk atom pertama dapat dituliskan :

$$m_1 \frac{d^2 r_1}{dt^2} = -k(r - r_e) \quad (3.5a)$$

dan untuk atom kedua :

$$m_2 \frac{d^2 r_2}{dt^2} = -k(r - r_e) \quad (3.5b)$$

dengan  $r_1$  dan  $r_2$  adalah jarak atom pertama dan kedua dari pusat gravitasi,  $r$  adalah jarak antar kedua atom dan  $r_e$  adalah jarak kesetimbangan.



Gambar 3.2 : Skema susunan atom pada molekul diatomik (Herzberg,1950)

Hubungan antara  $r_1$  dan  $r_2$  dengan  $r$  dapat dinyatakan sebagai berikut :

$$r_1 = \frac{m_2}{m_1 + m_2} r \quad (3.6a)$$

$$r_2 = \frac{m_1}{m_1 + m_2} r \quad (3.6b)$$

Substitusi pers.(3.6a) dan (3.6b) ke pers.(3.5a) dan (3.5b) akan menghasilkan :

$$\frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \frac{d^2 r}{dt^2} = -k(r - r_e) \quad (3.7)$$

substitusi pers.(2.10) ke dalam pers.(3.7) menghasilkan :

$$\mu \frac{d^2(r - r_e)}{dt^2} = -k(r - r_e) \quad (3.8)$$

yang sama dengan pers.(3.1) dengan  $x$  diganti oleh  $(r - r_e)$  yaitu perubahan jarak antar inti terhadap jarak kesetimbangannya. Tampak bahwa persamaan vibrasi dua atom penyusun molekul diatomik telah tereduksi menjadi vibrasi satu titik massa  $\mu$ ,

yang amplitudonya sama dengan amplitudo perubahan jarak antar-inti dalam molekul. Dengan demikian frekuensi vibrasi secara klasik mengikuti menjadi:

$$v_{osc.} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}} \quad (3.9)$$

Reduksi ini menjadi penting untuk mencari nilai tingkat-tingkat tenaga vibrasional dalam molekul diatomik dengan menerapkan penyelesaian secara mekanika kuantum. Dengan mengasumsikan gerakan satu partikel bermassa tereduksi  $\mu$  yang memiliki pergeseran  $x$  sama dengan perubahan jarak antar-inti molekul  $r-r_e$  dan mensubstitusikan persamaan tenaga potensial (3.4) ke dalam persamaan Schrödinger satu dimensi yang sesuai dengan derajat kebebasan gerak vibrasi molekul diatomik, maka (Eisberg dan Resnick, 1985) :

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left( E - \frac{1}{2} kx^2 \right) \psi = 0 \quad (3.10)$$

dengan mensubstitusikan pers.(3.9), didapatkan:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \left[ \frac{2\mu E}{\hbar^2} - \left( \frac{2\pi\mu v}{\hbar} \right)^2 x^2 \right] \psi = 0 \quad (3.11)$$

Jika diketahui parameter sebagai berikut

$$\alpha = 2\pi\mu v/\hbar \quad \text{dan} \quad \beta = 2\mu E/\hbar^2$$

maka;

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + (\beta - \alpha^2 x^2) \psi = 0 \quad (3.12)$$

Pers.(3.12) kemudian dinyatakan dalam variabel tak berdimensi:

$$u = \sqrt{\alpha} x = \left[ \frac{2\pi\mu}{\hbar 2\pi} \left( \frac{k}{\mu} \right)^{\frac{1}{2}} \right]^{\frac{1}{2}} x = \frac{(\hbar\mu)^{\frac{1}{4}}}{\hbar^{\frac{1}{2}}} x \quad (3.13)$$

menjadi:

$$\frac{d^2\psi}{du^2} + \left(\frac{\beta}{\alpha} - u^2\right)\psi = 0 \quad (3.14)$$

Penyelesaian pers.(3.14) harus memenuhi syarat bahwa  $\psi(u)$  dan turunan pertamanya harus bernilai tunggal, kontinu dan terhingga untuk semua nilai  $u$  dari  $-\infty$  sampai  $+\infty$ , untuk itu dilakukan metode penyelesaian asimtotik terhadap nilai  $|u|$  yang sangat besar (Pauling dan Wilson,1985). Sehingga pers. (3.14) menjadi:

$$\frac{d^2\psi}{du^2} = u^2\psi \quad , \quad |u| \rightarrow \infty \quad (3.15)$$

Penyelesaian umum pers.(3.15) adalah:

$$\psi = Ae^{-u^2/2} + Be^{u^2/2} \quad (3.16)$$

Karena eigenfungsi tersebut harus tetap terhingga pada saat  $|u| \rightarrow \infty$ , maka pada pers.(3.16) terlihat bahwa  $B$  harus sama dengan 0 sehingga bentuk eigenfungsi-nya menjadi:

$$\psi(u) = Ae^{-u^2/2} ; |u| \rightarrow \infty \quad (3.17)$$

Langkah berikutnya adalah mencari penyelesaian untuk pers.(3.14) dalam bentuk:

$$\psi(u) = Ae^{-u^2/2} f(u) \quad (3.18)$$

dengan  $f(u)$  adalah fungsi yang akan dicari.

Dengan menurunkan pers.(3.18) ke turunan kedua kemudian disubstitusikan ke pers.(3.14) dan dibagi dengan  $Ae^{-u^2/2}$  akan didapatkan bentuk:

$$\frac{d^2f}{du^2} - 2u \frac{df}{du} + \left(\frac{\beta}{\alpha} - 1\right)f = 0 \quad (3.19)$$

Pers. (3.19) dapat diselesaikan dengan metode deret pangkat  $u$  dalam bentuk:

$$f(u) = a_0 + a_1u + a_2u^2 + a_3u^3 + \dots = \sum_{n=0}^{\infty} a_n u^n \quad (3.20)$$

Dengan mengambil bentuk turunan pertama dan kedua kemudian disubstitusikan ke pers.(3.19), didapatkan:

$$\sum_{n=0}^{\infty} [(n+2)(n+1)a_{n+2} + (\beta/\alpha - 1 - 2n)a_n] u^n = 0 \quad (3.21)$$

Supaya persamaan ini berlaku untuk setiap nilai  $u$ , maka kuantitas dalam tanda kurung harus nol untuk setiap harga  $n$ , sehingga akan didapatkan hubungan sebagai berikut:

$$a_{n+2} = \frac{(2n+1 - \beta/\alpha)}{(n+1)(n+2)} a_n \quad (3.22)$$

Pers. (3.22) disebut juga sebagai rumus rekursi (*recursion formula*).

Rumus rekursi dapat digunakan untuk mencari koefisien  $a_2, a_4, a_6, \dots$  yang dinyatakan dalam  $a_0$  dan koefisien  $a_3, a_5, a_7, \dots$  dalam  $a_1$ . Tampak bahwa penyelesaian pers.(3.19) akan memiliki dua konstanta sembarang yaitu  $a_0$  dan  $a_1$ , yang sesuai karena pers.(3.19) merupakan persamaan diferensial orde kedua (Beiser, 1987). Penyelesaian umum tersebut kemudian disajikan dalam bentuk deret sebagai berikut:

$$f(u) = a_0 \left( 1 + \frac{a_2}{a_0} u^2 + \frac{a_4}{a_2} \frac{a_2}{a_0} u^4 + \frac{a_6}{a_4} \frac{a_4}{a_2} \frac{a_2}{a_0} u^6 + \dots \right) \\ + a_1 \left( u + \frac{a_3}{a_1} u^3 + \frac{a_5}{a_3} \frac{a_3}{a_1} u^5 + \frac{a_7}{a_5} \frac{a_5}{a_3} \frac{a_3}{a_1} u^7 + \dots \right) \quad (3.23)$$

Tampak bahwa deret pertama merupakan fungsi genap  $u$  dan deret kedua adalah fungsi gasal  $u$ .

Dengan menggunakan hubungan rekursi (3.22) didapatkan perbandingan  $a_{n+2}/a_n$ :

$$\frac{a_{n+2}}{a_n} = \frac{(2n + 1 - \beta/\alpha)}{(n + 1)(n + 2)} \quad (3.24)$$

Dari pers.(3.24) dapat dibuktikan bahwa eigenfungsi yang memenuhi syarat didapatkan jika:

$$\frac{\beta}{\alpha} = 2n + 1 \quad (3.25)$$

Dengan memasukkan nilai parameter-parameter  $\beta$  dan  $\alpha$  ke dalam pers.(3.25) dan mengganti  $n$  dengan  $v$  akan didapatkan (penjelasan lebih rinci lihat Lampiran B) :

$$E = h\nu\left(v + \frac{1}{2}\right) \quad (3.26)$$

dengan  $\nu$  adalah frekuensi osilasi secara klasik dan  $v$  adalah bilangan kuantum vibrasional yang merupakan bilangan utuh = 0, 1, 2, 3,....

Nilai tenaga dari pers.(3.26) adalah nilai yang diijinkan oleh mekanika kuantum untuk molekul yang bervibrasi secara harmonik. Dari pers.(3.26) tampak bahwa pada tingkat tenaga terendah yaitu pada saat  $v=0$ ,  $E$  tidak sama dengan nol melainkan  $E(0)=1/2 h\nu_{osc}$ . Jadi pada tingkat vibrasional terendah, tenaga vibrasionalnya tetap ada, tidak bernilai nol seperti prediksi mekanika klasik sehingga atom-atom penyusun pada setiap molekul tidak pernah benar-benar dalam keadaan diam satu dengan yang lain (Banwell dan McCash,1994). Tenaga vibrasional terendah ini disebut tenaga titik nol (*zero point energy*).

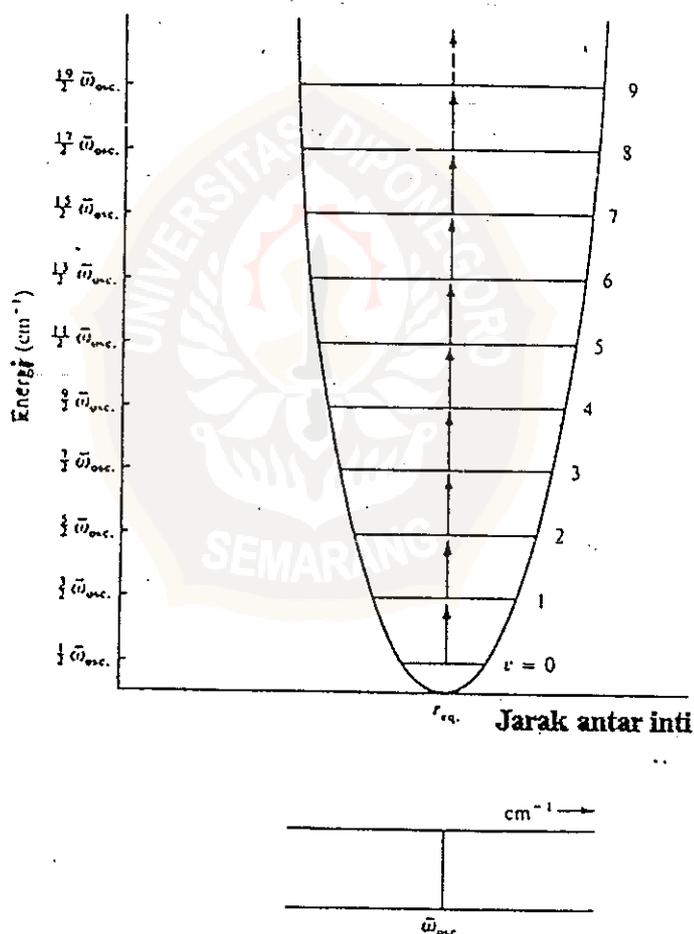
Dengan mengubah persamaan tenaga pada pers.(3.26) ke dalam satuan spektroskopik yang lebih umum digunakan (dalam satuan bilangan gelombang,  $\text{cm}^{-1}$ ) dengan membaginya dengan  $hc$  didapatkan nilai suku (*term values*) dalam bentuk (Herzberg,1950):

$$G(\nu) = \frac{E(\nu)}{hc} = \frac{\nu_{osc.}}{c} \left( \nu + \frac{1}{2} \right) \quad (3.27)$$

Pada spektroskopi,  $\nu_{osc.}/c$  biasanya disingkat dengan  $\bar{\omega}_{osc.}$  atau  $\bar{\omega}$  saja yang menyatakan bilangan gelombang (*wavenumber*) dari molekul dan biasanya dipakai untuk menyatakan frekuensi vibrasi molekul dalam satuan  $\text{cm}^{-1}$ .

Dengan demikian pers.(3.26) dapat ditulis kembali dalam bentuk :

$$G(\nu) = \bar{\omega} \left( \nu + \frac{1}{2} \right) \quad (3.28)$$



Gambar 3.3 : Kurva tenaga potensial dan tingkat-tingkat tenaga osilator harmonik (Banwell & McCash, 1994)

### III.2. Molekul Diatomik sebagai Osilator Anharmonik

Meskipun pendekatan osilator harmonik pada molekul diatomik memberikan hasil yang cukup dekat dengan hasil pengamatan spektroskopi, namun molekul yang sesungguhnya tidak tepat mematuhi pendekatan tersebut. Ikatan antar atom pada molekul yang sesungguhnya, meskipun elastis, tidak homogen dan tidak mematuhi Hukum Hooke. Pada jarak antar atom yang besar, gaya tarik menarik menjadi tidak ada karena ikatan antar atomnya putus dan molekul terdisosiasi menjadi atom-atom sehingga tenaga potensialnya menjadi konstan. Kurva tenaga potensial untuk molekul yang sesungguhnya tampak pada Gb. 2.5. Titik minimum kurva tersebut menunjukkan posisi kesetimbangan. Terlihat bahwa pada daerah sekitar kesetimbangan kurva tersebut mendekati bentuk parabola (garis putus-putus), sehingga menjelaskan bahwa pada perubahan jarak antar inti yang tidak begitu besar, pendekatan osilator harmonik memberikan hasil yang cukup memuaskan.

Bentuk kurva tenaga potensial untuk osilator anharmonik dinyatakan secara empiris oleh P.M. Morse menurut persamaan berikut (Svanberg,1992) :

$$V(r - r_e) = D_e \left[ 1 - e^{-\alpha(r - r_e)} \right]^2 \quad (3.29)$$

yang disebut Fungsi Morse dengan  $D_e$  adalah tenaga disosiasi yang besarnya adalah (Herzberg,1950):

$$D_e = \frac{\omega^2}{4\alpha x_e} = \frac{\omega}{4x_e} \quad (3.30)$$

dengan  $\alpha$  adalah suatu konstanta yang nilainya berbeda untuk setiap molekul.

Terlihat bahwa fungsi ini memberikan bentuk kurva yang tepat dengan hasil pengamatan untuk molekul yang sesungguhnya. Jika  $r \rightarrow \infty$  maka  $V$  mendekati  $D_e$  dan untuk  $r=r_e$  maka  $V$  memiliki nilai minimum ( $V=0$ ).

Jika fungsi Morse ini disubstitusikan ke dalam persamaan Schrödinger, diperoleh persamaan dalam bentuk:

$$\frac{d^2 \psi}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[ E - D_e \left( 1 - e^{-\alpha(r-r_e)} \right)^2 \right] \psi = 0 \quad (3.31)$$

Jika dikenalkan parameter sebagai berikut:

$$q = \frac{r-r_e}{r_e} \quad (3.32)$$

maka pers.(3.31) dapat dituliskan dalam bentuk yang lebih sederhana (Kondratyev):

$$\frac{d^2 \psi(q)}{dq^2} + \frac{2I_e}{\hbar^2} \left[ E - D_e \left( 1 - e^{-\alpha q} \right)^2 \right] \psi = 0 \quad (3.33)$$

dengan:

$$a = \alpha r_e \quad (3.33a)$$

$$\text{dan } I_e = \mu r_e^2 \quad (3.33b)$$

Langkah penyelesaian pers.(3.33) dimulai dengan mengenalkan variabel baru yaitu :

$y = e^{-\alpha q}$  sehingga pers.(3.33) dapat dituliskan dalam bentuk :

$$\frac{d^2 \psi}{dy^2} + \frac{1}{y} \frac{d\psi}{dy} + \frac{2I_e}{a^2 \hbar^2} \left( \frac{E - D_e}{y^2} + \frac{2D_e}{y} - D_e \right) \psi = 0 \quad (3.34)$$

Fungsi  $\psi$  dinyatakan dalam bentuk :

$$\psi = \frac{f(y)}{\sqrt{y}} \quad (3.35)$$

dan mencari turunan pertama dan kedua dari pers.(3.35), pers.(3.34) dapat dituliskan kembali dalam bentuk:

$$f'' + \lambda^2 \left( \frac{Q}{y^2} + \frac{2D_e}{a^2 y} - \frac{D_e}{a^2} \right) f = 0 \quad (3.36)$$

dengan :

$$\lambda^2 = \frac{2I_e}{\hbar^2} \quad (3.37)$$

dan 
$$Q = \frac{E - D_e}{a^2} + \frac{1}{4\lambda^2} \quad (3.38)$$

Langkah selanjutnya adalah mencari penyelesaian asimptotik dari pers.(3.36) untuk nilai  $y$  yang sangat besar. Dari pers.(3.36) terlihat bahwa untuk nilai  $y$  besar maka suku-suku dengan penyebut  $y$  dapat diabaikan, sehingga pers.(3.36) dapat didekati dengan persamaan:

$$f'' - D \frac{\lambda^2}{a^2} f = 0 \quad (3.39)$$

yang merupakan persamaan differensial orde dua. Penyelesaian umum pers.(3.39) adalah:

$$f = Ae^{-\beta y} + Be^{\beta y} \quad (3.40)$$

dengan : 
$$\beta = \frac{\lambda^2}{a^2} D \quad (3.41)$$

Seperti pada kasus osilator harmonik, suku kedua harus sama dengan nol agar fungsi  $f$  terhingga di seluruh daerah jangkauan  $y$ . Sehingga pers.(3.40) dapat disederhanakan kembali menjadi:

$$f(y) = Ae^{-\beta y} \quad (3.42)$$

Langkah selanjutnya adalah mencari penyelesaian fungsi  $f$  dalam bentuk:

$$f(y) = Ae^{-\beta y} C(y) \quad (3.43)$$

Dengan menghitung turunan pertama dan kedua  $f$ , mensubstitusikan ke dalam pers.(3.39) dan membaginya dengan  $Ae^{-\beta y}$ , akan didapatkan bentuk:

$$C'' - 2\beta C' + \lambda^2 \left( \frac{Q}{y^2} + \frac{2D}{a^2 y} \right) C = 0 \quad (3.44)$$

Sama seperti penyelesaian pers.(3.19) untuk kasus osilator harmonik maka penyelesaian untuk  $C$  akan berbentuk:

$$C = \sum_n b_n y^{k+n} \quad (3.45)$$

Dengan mensubstitusikan pers.(3.45) ke dalam pers.(3.44) akan didapatkan:

$$\begin{aligned} \sum_n b_n (k+n)(k+n-1)y^{k+n-2} - 2\beta \sum_n b_n (k+n)y^{k+n-1} \\ + 2\beta^2 \sum_n b_n y^{k+n-1} + \lambda^2 Q \sum_n b_n y^{k+n-2} = 0 \end{aligned} \quad (3.46)$$

Dengan menyamakan suku-suku dalam pers.(3.46) dalam bentuk  $y^{k+n-1}$ , didapatkan persamaan rekursi untuk koefisien-koefisien polinomial tersebut dalam bentuk:

$$[(k+n+1)(k+n) + \lambda^2 Q] b_{n+1} = [2\beta(k+n) - 2\beta^2] b_n \quad (3.47)$$

Untuk memenuhi syarat polinomial  $C$  bernilai terhingga, ditetapkan syarat batas  $b_0=0$  dan  $b_{n+2}=0$  sehingga dari hubungan rekursi (3.47) didapatkan:

$$k(k + 1) = -\lambda^2 Q \quad (3.48a)$$

dan

$$k + v + 1 = \beta \quad (3.48b)$$

dengan mengeliminasi  $k$  didapatkan:

$$-\lambda^2 Q = (\beta - v)(\beta - v - 1) = \beta^2 - 2\beta(v + \frac{1}{2}) + v(v + 1) \quad (3.49)$$

Langkah selanjutnya, dengan mensubstitusikan nilai  $Q$  dan  $\beta$  sehingga didapatkan:

$$E(v) = 2\beta \frac{a^2}{\lambda^2} (v + \frac{1}{2}) - \frac{a^2}{\lambda^2} (v + \frac{1}{2})^2 \quad (3.50)$$

Dengan memasukkan nilai  $\lambda$  dan memperkenalkan parameter baru yaitu (Kondratyev):

$$x_e = \frac{h\nu}{4D} \quad (3.51)$$

dengan mengingat (Kondratyev):

$$\nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}} = \frac{a}{2\pi} \sqrt{\frac{2D}{I_e}} \quad (3.52)$$

maka didapatkan (penjabaran lebih rinci lihat Lampiran C):

$$E(v) = h\nu(v + \frac{1}{2}) - h\nu x_e (v + \frac{1}{2})^2 \quad (3.53)$$

dengan  $v=0,1,2,3,\dots$  adalah bilangan kuantum vibrasional seperti pada osilator harmonik.

Pers.(3.53) menunjukkan tingkat-tingkat tenaga yang diijinkan untuk osilator anharmonik dengan pendekatan empiris yang dilakukan Morse. Parameter  $x_e$  disebut sebagai konstanta anharmonisitas (*anharmonicity constant*) dengan

$$x_e \ll \nu.$$

Jika pers.(3.53) dinyatakan dalam satuan  $\text{cm}^{-1}$  maka didapatkan nilai suku untuk osilator anharmonik berikut ini(Herzberg,1950):

$$G(v) = \omega(v + \frac{1}{2}) - \omega x_e(v + \frac{1}{2})^2 \quad (3.54)$$

dengan  $\omega$  adalah bilangan gelombang (*wavenumber*) molekul.

Persamaan (3.53) dan (3.54) menunjukkan bahwa tingkat-tingkat tenaga untuk osilator anharmonik tidak memiliki selisih yang sama seperti pada osilator harmonik melainkan semakin berkurang dengan bertambahnya  $v$ . Tenaga titik nol untuk osilator anharmonik didapatkan dari pers.(3.54) dengan memasukkan  $v = 0$ :

$$G(0) = \frac{1}{2} \omega - \frac{1}{4} \omega x_e \quad (3.55)$$

Karena jarak antar tingkat tenaga pada osilator anharmonik tidak sama lagi, maka jarak antar tingkat tenaga dinyatakan dalam bentuk (Kondratyev):

$$\Delta G(v) = \omega - 2x_e \omega(v + \frac{1}{2}) \quad (3.56)$$

yang menunjukkan bahwa jarak ini semakin kecil dengan bertambahnya bilangan kuantum  $v$ . Pada pers.(3.56) terlihat bahwa  $\Delta G(v) = 0$  pada nilai batas  $v$  tertentu yang diberikan dalam bentuk (Banwell & McCash,1994):

$$\Delta G(v) = \omega [1 - 2x_e(v_{\max} + 1)] = 0 \quad (3.57a)$$

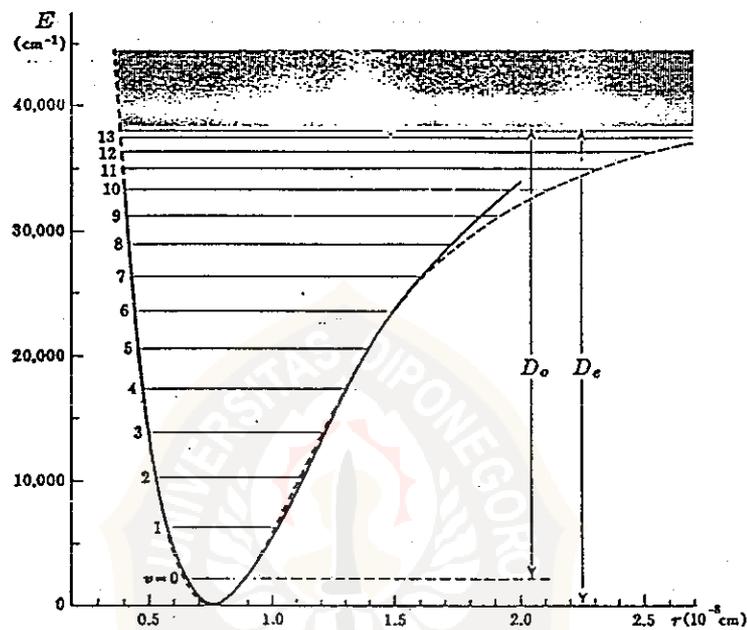
atau,

$$v_{\max} = \frac{1}{2x_e} - 1 \quad (3.57b)$$

Dengan mensubstitusikan pers.(3.57b) ke pers.(3.54) dan memasukkan nilai  $x_e$  akan didapatkan hubungan:

$$G_{\max}(v) = D_e \quad (3.58)$$

yang menunjukkan bahwa tenaga vibrasional suatu molekul diatomik tidak dapat melampaui tenaga disosiasinya. Keakuratan fungsi Morse terhadap hasil eksperimen disajikan dalam Gb. 3.4.



Gambar 3.4. : Bentuk kurva Morse (Garis putus-putus) dibandingkan dengan kurva eksperimen oleh Rydberg (garis tak terputus) untuk molekul  $\text{H}_2$ . (Herzberg, 1950)