

MENGENAL TERM SPEKTROSKOPIK DAN CARA PENURUNANNYA

Oleh
K.H. Sugiyarto

Abstrak

Setiap spisies, baik atom, molekul maupun ion, mempunyai konfigurasi elektronik yang karakteristik bagi spisies yang bersangkutan, dengan mana term-term spektroskopik dapat diturunkan menurut model *Russell - Saunders Coupling* atau *L-S coupling*. Dua cara yang ditawarkan untuk penurunan term spektroskopik ini yaitu pertama dengan penyusunan tabel *microstate* dan kedua dengan penyusunan tabel distribusi jumlah *microstate* bagi spisies yang bersangkutan. Selanjutnya, ground term atau ground state dapat ditentukan menurut aturan Hund yang berdasarkan hukum keragaman spin maksimum, sehingga term-term sisanya merupakan term tereksitasi.

1. PENDAHULUAN

Ibarat sidik jari seseorang, spektrum elektronik suatu spisies baik atom, molekul maupun ion merupakan sifat yang karakteristik bagi spisies yang bersangkutan. Dengan makin berkembangnya teknologi, identifikasi suatu spisies berdasarkan spektrum elektroniknya sudah merupakan hal yang lumrah. Untuk menunjang identifikasi tersebut jelas diperlukan pengetahuan yang berkenaan dengan *term* atau *state* spektroskopik yang melukiskan tingkat-tingkat energinya sehingga spektrum spisies yang bersangkutan dapat diterangkan. Sayangnya informasi mengenai term-term spektroskopik ini masih bersifat langka dan hanya dijumpai pada buku-buku tingkat lanjut.

Melalui studi dari berbagai literatur, pemaparan cara penurunan term spektroskopik ternyata kurang menunjukkan sistematika yang mudah untuk dipelajari, misalnya menurut Banwell (1972,179), Day and Selbin (1969,64), Figgis (1966,44), Golding (1969,196), Huheey (1983,A-15), Kaufman (1966,75) dan Royer (1968,71). Dua cara yang dipandang (oleh penulis) cukup informatif-instruktif yaitu pertama yang melibatkan penyusunan *microstate* seperti diungkap oleh Cotton and Wilkinson (1972,80) dan Lever (1968,8), dan kedua yang melibatkan distribusi jumlah *microstate* sebagaimana dikemukakan oleh Douglas and MC Daniel (1965,26) dan diluas lebih lanjut oleh Hyde (1975,87). Kedua cara inilah yang dibahas dalam tulisan ini.

Dengan demikian tulisan ini diharapkan dapat menjawab sejumlah masalah yang berkenaan dengan dasar teoritis munculnya term, arti tata

tulis term dan metode penurunannya serta cara menentukan ground term suatu spicies.

2. RUSSELL - SAUNDERS COUPLING DAN TERM SPEKTROSKOPIK

Konfigurasi elektronik suatu spicies pada dasarnya dapat disusun menurut prinsip *aufbau* (prinsip membangun). Ion Ti^{2+} misalnya, mempunyai konfigurasi elektronik $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^2$. Konfigurasi ini belum memberikan arti apa-apa terutama bila dikaitkan dengan sifat-sifat spektrum elektronik spicies yang bersangkutan. Konfigurasi yang simpel ini ternyata, dengan menggunakan keempat bilangan kuantum individu elektron, memberikan 45 macam kombinasi susunan elektronik (*microstate*) dengan energi yang berbeda-beda. Ke-45 macam susunan ini muncul sebagai akibat adanya dua elektron pada orbital d (masing-masing mempunyai harga $m_s = \pm \frac{1}{2}$) yang mengalami permutasi ke dalam lima orbital d . Dengan kata lain orbital-orbital yang sudah terisi penuh *tidak mempengaruhi* jumlah kombinasi susunan elektron; karenanya identifikasi cukup dikonsentrasikan pada *orbital yang belum penuh*. Karena jarak rata-rata antara kedua elektron d berbeda pada satu kombinasi susunan terhadap kombinasi susunan yang lain, maka rata-rata tolakan elektronik juga berbeda. Akibatnya ke-45 kombinasi susunan elektronik tersebut mengalami pemisahan atau *splitting* menjadi beberapa kelompok tingkatan atau *term-term* spektroskopik dengan energi yang berbeda-beda satu terhadap yang lain. Karenanya, klasifikasi *term* atau *state* jelas diperlukan.

Munculnya interaksi tolakan antar elektron dapat diasosiasikan dengan adanya induksi medan magnetik yang ditimbulkan oleh revolusi elektron dalam orbitalnya dan rotasi elektron pada sumbunya, yang tidak hanya berinteraksi dengan medan magnetik luar saja, tetapi yang berinteraksi satu sama lain. Untuk sistem konfigurasi elektronik d^2 dengan masing-masing elektron ditandai oleh bilangan kuantum orbital dan spin l_1, s_1 dan l_2, s_2 misalnya, maka kemungkinan interaksi tersebut yaitu antara (1) l_1 dengan l_2 (2) s_1 dengan s_2 , (3) l_1 dengan s_1 , (4) l_2 dengan s_2 , (5) l_1 dengan s_2 dan (6) l_2 dengan s_1 .

Dapat diasumsikan bahwa interaksi (5) dan (6) terlalu kecil bila dibandingkan dengan yang lain, karenanya dapat diabaikan. Interaksi (1) dan (2) masing-masing menghasilkan resultante vektor momentum sudut orbital, L dan resultante vektor momentum sudut spin, S ; sedangkan interaksi (3) dan (4) masing-masing memberikan resultante vektor momentum sudut j_1 dan j_2 . Kopling antara resultante (1) dan (2) atau $L - S$ Coupling menghasilkan total momentum sudut J , demikian juga kopling antara resultante (3) dan (4) atau $j - j$ coupling.

Russell - Saunders coupling mengasumsikan bahwa $L - S$ coupling jauh lebih besar dari pada $j - j$ coupling atau *spin-orbit coupling* sebagaimana hal ini dapat diaplikasikan pada senyawa-senyawa logam transisi pertama. Tetapi untuk atom-atom lebih berat, *spin-orbit coupling* menjadi lebih signifikan.

Seperti halnya pada elektron-elektron secara individu, bilangan kuantum untuk seluruh selektron dalam spsies dinyatakan dengan simbol-simbol yang sama tetapi dituliskan dengan huruf-huruf besar. Jadi L dan S masing-masing menunjuk pada bilangan kuantum orbital dan spin spsies. Analog dengan l yang mempunyai komponen-komponen m_l sebanyak $(2l+1)$ macam yaitu $l, (l-1), (l-2), \dots, 0, -1, \dots, -l$, bilangan kuantum L juga mempunyai komponen-komponen M_L sebanyak $(2L+1)$ macam yaitu $L, (L-1), (L-2), \dots, 0, -1, \dots, -L$. Tetapi berbeda dengan bilangan kuantum spin individu elektron, s , yang hanya berharga $\frac{1}{2}$ dan mempunyai komponen m_s sebanyak $(2s+1)$ macam atau 2 macam yaitu $\frac{1}{2}$ dan $-\frac{1}{2}$, bilangan kuantum S berharga positif integral 1 dengan harga terkecil 0 (bila jumlah elektron genap) atau $\frac{1}{2}$ (bila jumlah elektron ganjil).

Untuk spsies yang terdiri dari n elektron ekuivalen, hubungan kedua jenis bilangan kuantum tersebut dapat dinyatakan dengan rumusan sebagai berikut:

$$M_L = \sum m_l = m_l(1) + m_l(2) + m_l(3) + \dots + m_l(n).$$

$$M_S = \sum m_s = m_s(1) + m_s(2) + m_s(3) + \dots + m_s(n).$$

Dengan demikian untuk orbital yang sudah penuh pastilah memberikan $M_L = 0, M_S = 0$ (yang berarti $L = 0$ dan $S = 0$) dan juga $J = 0$. Hal ini berarti tidak memberikan kontribusi apa pun terhadap $L - S$ coupling bagi spsies yang bersangkutan. Itulah sebabnya seperti telah disebutkan di muka bahwa karakteristik spsies hanya ditentukan oleh elektron-elektron pada orbital belum penuh.

Selanjutnya analog dengan simbol orbital, $s, p, d, f, g, h, i, \dots$, yang masing-masing untuk menyatakan harga $l = 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, \dots$, simbol term atau *state* yaitu $S, P, D, F, G, H, I, \dots$, yang masing-masing untuk menyatakan harga $L = 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, \dots$. Secara umum term atau *state* ditulis sebagai :

$$(2S+1)_L J$$

dalam mana (1). $(2S+1)$ menyatakan keanekaragaman spin atau *spin multiplicity*; untuk $(2S+1) = 1, 2, 3, 4, 5, \dots$, masing-masing dikatakan *singlet, doublet, triplet, quartet, quintet, \dots* (2). J berharga $(L+S), (L+S-1), (L+S-2), \dots, |L-S|$, dan ini hanya signifikan bagi spi-

sies-spisies di mana *spin-orbit coupling* lebih dominan ketimbang *L—S coupling*. Sebagai contoh misalnya, simbol term untuk $L = 4$, dan $S = \frac{1}{2}$ yaitu *doublet* 2G ; untuk $L = 3$ dan $S = 1$ yaitu *triplet* 3F ; untuk $L = 2$ dan $S = 2$ yaitu *quintet* 5D dan seterusnya.

3. CARA MENENTUKAN TERM ATAU STATE

Sebegitu jauh kita baru diperkenalkan pada dasar pemikiran munculnya *term*, berbagai simbol serta tata tulisnya. Masalah yang utama kemudian yaitu bagaimana cara menentukan term-term suatu spisies. Untuk mempermudah pembicaraan diambil contoh spisies dengan konfigurasi elektronik nd^2 yang akan diselesaikan dengan metode A yaitu dengan penyusunan *microstate* dan konfigurasi nd^3 yang akan diselesaikan dengan metode B yaitu dengan penyusunan distribusi jumlah *microstate*.

3.1. Metode A

Metode ini mengikuti langkah-langkah seperti diuraikan berikut.

3.1.1. Menentukan harga-harga M_S yang mungkin

Kombinasi harga-harga $m_s (= \pm \frac{1}{2})$ bagi elektron (1) dan elektron (2) menghasilkan 2 kelompok M_S yaitu $M_S = 0$ (berarti $S = 0$) dan $M_S = 1, 0, -1$ (berarti $S = 1$) seperti ditunjukkan oleh Tabel 1.

Tabel 1. Pengelompokan harga-harga M_S

$m_s(1)$ \ $m_s(2)$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$
$\frac{1}{2}$	1	0
$-\frac{1}{2}$	0	-1

Tabel 2. Pengelompokan harga-harga M_L

$m_l(1)$ \ $m_l(2)$	2	1	0	-1	-2
2	4	3	2	1	0
1	3	2	1	0	-1
0	2	1	0	-1	-2
-1	1	0	-1	-2	-3
-2	0	-1	-2	-3	-4

3.1.2. Menentukan harga-harga M_L yang mungkin

Untuk orbital d ada lima macam harga m_l yaitu 2, 1, 0, -1, -2. Dengan cara seperti pada langkah pertama di atas, kombinasi harga-harga m_l bagi kedua elektron (1) dan (2) dapat disusun sebagaimana ditunjukkan oleh Tabel 2; hasilnya yaitu diperoleh lima kelompok M_L yang masing-masing merupakan komponen-komponen dari $L = 0, 1, 2, 3, \text{ dan } 4$.

3.1.3. Menyusun microstate yang mungkin

Microstate yaitu fungsi gelombang elektron-elektron yang disusun menurut harga bilangan kuantum m_l dan m_s ; harga m_s , $+\frac{1}{2}$ dan $-\frac{1}{2}$, masing-masing dinyatakan sebagai superskrip $+$ dan $-$. Sebagai contoh misalnya, 2 elektron ekuivalen yang masing-masing mempunyai harga $m_l = 2$ dan -1 , dan $m_s = \frac{1}{2}$ dan $-\frac{1}{2}$, persamaan *microstatenya* dapat dituliskan sebagai $(2^+, -1^-)$. Karena kedua elektron ini ekuivalen, maka urutan penulisan lambang tidak berpengaruh, artinya $(2^+, -1^-) = (-1^-, 2^+)$. Perlu diperhatikan bahwa di dalam penyusunan *microstate* harus diingat prinsip Pauli yang dalam hal ini dapat diartikan bahwa setiap *microstate* harus tidak terdapat dua buah lambang yang persis sama; tambahan pula banyaknya lambang dalam tiap *microstate* sama dengan banyaknya elektron yang dikombinasikan.

Banyaknya *microstate* secara keseluruhan bagi suatu spesies dengan n elektron ekuivalen dalam orbital belum penuh dapat dihitung menurut rumusan kombinasi-permutasi:

$$\begin{pmatrix} l \\ n \end{pmatrix} = \frac{(4l + 2)!}{(4l + 2 - n)! \cdot n!}$$

dalam mana l = bilangan kuantum orbital atau azimut. Jadi konfigurasi d^2 mempunyai 45 *microstate* dengan distribusi sebagaimana ditunjukkan oleh Tabel 3. Harga-harga M_L (Tabel 2) dan M_S (Tabel 1) yang dikombinasikan yaitu dari kelompok yang terbesar saja, karena kelompok-kelompok lainnya sudah tercakup di dalamnya.

3.1.4. Menyusun term atas dasar microstate bagi L dan S yang cocok

Pada langkah pertama telah diperoleh dua macam harga S yaitu $S = 0$ dan $S = 1$ (Tabel 1) sedangkan pada langkah kedua diperoleh lima macam harga L (Tabel 2) yaitu $L = 0, 1, 2, 3, \text{ dan } 4$. Langkah selanjutnya yaitu menjodohkan kombinasi yang cocok antara L dengan S atas dasar distribusi *microstate* (Tabel 3) dengan dimulai dari harga L terbesar hingga selesai seperti berikut ini.

Untuk $L = 4$ (komponen $M_L = 4, 3, \dots, -4$)

Kelompok komponen ini ternyata mempunyai microstate hanya pada kolom $M_S = 0$ (yang berarti $S = 0$) yang seluruhnya ada 9 *microstate*. Jadi kombinasi ini memberikan term *singlet* 1G . Untuk mempermudah identifikasi selanjutnya, ke-9 *microstate* dari term 1G ini yang dapat diambil dari *microstate* yang mana saja pada tiap komponen M_L dan kolom $M_S = 0$, dapat dihilangkan atau dicoret.

Untuk $L = 3$ (komponen $M_L = 3, 2, \dots, -3$)

Setelah term 1G diturunkan, dari tabel *microstate* yang tertinggal dapat diperiksa bahwa kelompok komponen untuk $L = 3$ mempunyai *microstate* pada semua kolom $M_S = 1, 0, -1$ (berarti $S = 1$), yang secara keseluruhan ada 21 *microstate*. Jadi dengan demikian term 3F dapat diturunkan. Lagi-lagi ke-21 *microstate* ini dapat dihilangkan dengan mengambil *microstate* pada kolom-kolom yang sesuai untuk memudahkan identifikasi selanjutnya.

Tabel 3 : Distribusi *microstate* untuk konfigurasi d^2 (*Microstate* bagi M_L yang berharga negatif merupakan bayangan cermin dari M_L positif)

$M_S \backslash M_L$	1	0	-1
4		$(2^+, 2^-)$	
3	$(2^+, 1^+)$	$(2^+, 1^-); (2^-, 1^+)$	$(2^-, 1^-)$
2	$(2^+, 0^+)$	$(2^-, 0^+); (2^+, 0^-); (1^+, 1^-)$	$(2^-, 0^-)$
1	$(2^+, -1^+); (1^+, 0^+)$	$(2^-, -1^+); (2^+, -1^-); (1^+, 0^-)$ $(1^-, 0^+)$	$(2^-, -1^-); (1^-, 0^-)$
0	$(1^+, -1^+)$ $(2^+, -2^+)$	$(1^-, -1^+); (1^+, -1^-); (0^+, 0^-)$ $(2^-, -2^+); (2^+, -2^-)$	$(1^-, -1^-)$ $(2^-, -2^-)$
-1			
-2		dan seterusnya	

Untuk $L = 2$ (komponen $M_L = 2, 1, \dots, -2$)

Dengan cara yang sama seperti langkah-langkah terdahulu dapat ditunjukkan bahwa kelompok M_L ini dapat dikombinasikan dengan $M_S = 0$ (berarti $S = 0$) dan memberikan 5 macam *microstate* dengan mana term *singlet* 1D dapat diturunkan.

Untuk $L = 1$ dan $L = 0$

Langkah seperti tersebut di atas diteruskan hingga semua *microstate* habis teridentifikasi. Hasilnya yaitu bahwa $L = 1$ dapat dikombinasikan dengan $S = 1$ untuk memberikan 9 *microstate* yang sesuai dengan term *triplet* 3P . Satu *microstate* sisa merupakan kombinasi $L = 0$ dengan $S = 0$ dengan mana term *singlet* 1S dapat diturunkan.

Dengan demikian konfigurasi elektronik d^2 memberikan term-term 1G , 1D , 1S , 1F dan 3P . Adapun jumlah *microstate* seluruhnya dapat dikontrol kembali melalui masing-masing term seperti berikut ini:

Term	L	S	Turunan L = $(2L+1)$	Turunan S = $(2S+1)$	Total <i>microstate</i> = $(2L+1)(2S+1)$
1G	4	0	9	1	9
3F	3	1	7	3	21
1D	2	0	5	1	5
3P	1	1	3	3	9
1S	0	0	1	1	1
					Total = 45

Untuk sistem konfigurasi lebih dari 2 elektron ekivalen, misalnya d^3 , d^4 dan seterusnya, diperlukan langkah kombinasi bertahap. Harga-harga M_L dan M_S untuk sistem ini diperoleh dengan cara kombinasi 2 elektron pertama yang kemudian hasilnya dikombinasikan dengan elektron ke-3 (untuk sistem d^3 , p^3) atau dengan hasil kombinasi 2 elektron kedua (untuk d^4), demikian seterusnya.

3.2. Metode B

Dalam metode ini tidak perlu menuliskan fungsi gelombang *microstate* yang tentulah sangat melelahkan, melainkan cukup menentukan jumlah *microstate* dan distribusinya pada tiap-tiap kelompok kombinasi harga M_L dengan M_S dan akhirnya mengidentifikasi kelompok L dengan S yang cocok seperti halnya pada metode A.

Untuk lebih memudahkan penjelasan metode ini, dikemukakan contoh konfigurasi d^3 , yang terdiri dari 120 *microstate*, dengan langkah-langkah penyelesaian seperti berikut ini.

3.2.1. Menentukan harga S yang mungkin

Dengan mudah dapat ditentukan bahwa konfigurasi d^3 hanya mem-

punyai 2 macam harga S yaitu $S = 3/2$ (bila ke-3 elektron tidak berpasangan) dan $S = 1/2$ (bila 1 elektron tidak berpasangan dan 2 elektron lain berpasangan); sebenarnya hal ini dapat ditentukan dengan kombinasi bertahap untuk harga-harga m_s ke-3 elektron, tetapi jelas terlalu lama. Adapun macam dan banyaknya harga-harga M_S untuk pengelompokan distribusi jumlah *microstate* dapat diperiksa pada Tabel 4 (tabel segitiga pascal) untuk baris $n = 1$ dan $n = 3$ ($n =$ banyaknya elektron tidak berpasangan).

Tabel 4. Harga-harga M_S yang mungkin untuk pengelompokan distribusi jumlah *microstate* atas dasar jumlah elektron tidak berpasangan

n^*	Harga M_S untuk kelompok **	$2^{n^{***}}$
0	0	1
1	$1/2, -1/2$	2
2	1, 0(2), -1	4
3	$3/2, 1/2(3), -1/2(3), -3/2$	8
4	2, 1(4), 0(6), -1(4), -2	16
5	$5/2, 3/2(5), 1/2(10), -1/2(10), -3/2(5), -5/2$	32
6	3, 2(6), 1(15), 0(20), -1(15), -2(6), -3	64
7	$7/2, 5/2(7), 3/2(21), 1/2(35), -1/2(35), -3/2(21), -5/2(7), -7/2$	128

* n menyatakan banyaknya elektron tidak berpasangan

** bilangan dalam tanda kurung menyatakan banyaknya kejadian ulang bagi harga M_S yang bersangkutan.

*** 2^n menyatakan banyaknya macam *microstate* bagi kelompok $S = \frac{n}{2}$

3.2.2. Pengelompokan susunan *microstate* bagi setiap harga S

Untuk $S = 1/2$ (atau $M_S = 1/2$ dan $-1/2$), banyaknya susunan elektron yang mungkin dapat dihitung dengan rumusan permutasi yaitu $\frac{5!}{2! \cdot 3} = 20$

macam seperti ditunjukkan oleh Tabel 5. Jumlah *microstate* yang dapat diturunkan dari kelompok ini yaitu sebanyak turunan M_L (Tabel 5) dikalikan dengan turunan M_S (Tabel 4), ada $20 \times 2 = 40$.

Untuk $S = 3/2$ (atau $M_S = 3/2, 1/2, -1/2, -3/2$), banyaknya susunan elektron yang mungkin dapat dihitung dengan rumusan permutasi yaitu $\frac{5!}{3! \cdot 2} = 10$ macam seperti ditunjukkan oleh Tabel 6. Jumlah *microstate*

yang dapat diturunkan dari kelompok ini yaitu turunan M_L (Tabel 6) dikalikan dengan turunan M_S (Tabel 4), ada $10 \times 8 = 80$. Jadi seluruhnya ada $40 + 80 = 120$ *microstate*.

Tabel 5. Pengaturan konfigurasi elektronik d^3 untuk kelompok $S = \frac{1}{2}$ (X = elektron berpasangan, $/$ = elektron tidak berpasangan)

$M_L \backslash m_q$	2	1	0	-1	-2
5	X	/			
4	X		/		
3	X			/	
2	X				/
4	/	X			
2		X	/		
1		X		/	
0		X			/
2	/		X		
1		/	X		

$M_L \backslash m_q$	2	1	0	-1	-2
-1			X	/	
-2			X		/
0	/			X	
-1		/		X	
-2			/	X	
-4				X	/
-2	/				X
-3		/			X
-4			/		X
-5				/	X

Tabel 6. Pengaturan konfigurasi elektronik d^3 untuk kelompok $S = \frac{3}{2}$ ($/$ = elektron tidak berpasangan)

$M_L \backslash m_q$	2	1	0	-1	-2
3	/	/	/		
2	/	/		/	
1	/	/			/
1	/		/	/	
0	/		/		/

$M_L \backslash m_q$	2	1	0	-1	-2
-1	/			/	/
0		/	/	/	
-1		/	/		/
-2		/		/	/
-3			/	/	/

3.2.3. Pengelompokan banyaknya *microstate* dalam tabel kombinasi M_L dengan M_S

Selanjutnya ke-120 *microstate* dikelompokkan ke dalam tabel kombinasi antara M_L dengan M_S dengan mengingat bahwa harga-harga M_L dikombinasikan dengan $M_S = \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$ dan $M_S = \frac{3}{2}, \frac{1}{2}(3), -\frac{1}{2}(3), \frac{3}{2}$.

Untuk itu diperlukan Tabel 4, 5 dan 6. Misalnya saja untuk $M_L = 2$. Dalam Tabel 5 ($S = 1/2$), harga $M_L = 2$ muncul 3 kali, maka bila dikombinasikan dengan Tabel 4 akan diperoleh distribusi jumlah *microstate* $1/2(3), -1/2(3)$. Sedangkan dalam Tabel 6 ($S = 3/2$), harga $M_L = 2$ muncul 1 kali, maka bila dikombinasikan dengan Tabel 4 akan diperoleh distribusi jumlah *microstate* $3/2(1), 1/2(3), -1/2(3), -3/2(1)$. Dengan demikian distribusi jumlah *microstate* total untuk $M_L = 2$ dapat ditentukan yaitu $3/2(1), 1/2(6), -1/2(6), -3/2(1)$. Dengan cara seperti ini distribusi ke-120 *microstate* dapat diselesaikan sebagaimana ditunjukkan oleh Tabel 7.

Tabel 7. Distribusi jumlah *microstate* untuk konfigurasi elektronik d^3

$M_S \backslash M_L$	3 3/2	4 1/2	5 -1/2	6 -3/2	7 Jumlah
5		1	1		2
4		2	2		4
3	1	4	4	1	10
2	1	6	6	1	14
1	2	8	8	2	20
0	2	8	8	2	20
-1	2	8	8	2	20
-2	1	6	6	1	14
-3	1	4	4	1	10
-4		2	2		4
-5		1	1		2
Jumlah	10	50	50	10	120

3.2.4. Menentukan kombinasi L dengan S yang cocok

Langkah terakhir ini pada dasarnya sama dengan langkah terakhir pada metode A, karenanya tidak perlu diuraikan secara detail. Bedanya yaitu terletak pada tabel yang diidentifikasi. Pada metode A Tabel 3 yang diidentifikasi merupakan distribusi *microstate* itu sendiri (yang sudah barang tentu jumlahnya juga dapat dihitung), sedangkan pada metode B Tabel 7 yang diidentifikasi merupakan distribusi banyaknya *microstate*. Identifikasi selalu dimulai dari kelompok M_L tertinggi yaitu untuk $L = 5$ yang ternyata dapat dikombinasikan dengan $S = 1/2$ untuk menghasilkan term *doublet* 2H . Demikianlah seterusnya hingga selesai dan ternyata untuk

$L = 2$ terjadi kombinasi ulang 2 kali dengan $S = \frac{1}{2}$ sehingga menghasilkan 2 term doublet 2D . Hasil keseluruhan berdasarkan urutan identifikasi yaitu: $^2H, ^2G, ^4F, ^2F, ^2D(2), ^4P$ dan 2P .

Jelas bahwa penyusunan persamaan ke-120 *microstate* tentulah sangat melelahkan (bila diselesaikan dengan metode A), apalagi untuk konfigurasi elektronik yang lebih kompleks seperti d^4 (ada 210 *microstate*) dan d^5 (ada 252 *microstate*) misalnya. Namun dengan metode B tersebut penurunan term-term relatif lebih mudah diselesaikan. Tetapi untuk perluasan lebih lanjut yaitu penentuan *urut-urutan energi* semua term dalam mana persamaan fungsi gelombang *microstate mutlak* diperlukan, tak dapat dihindarkan bahwa Tabel 7 kemudian harus dilengkapi lagi dengan tabel *microstate* itu sendiri seperti Tabel 3.

3.3. Perluasan

Menurut *hole formalism rule* - aturan pembentukan lubang, konfigurasi elektronik belum penuh dapat dipandang sebagai konfigurasi lubang sejumlah kurangnya elektron untuk mencapai konfigurasi penuh. Jadi konfigurasi elektronik d^8 dan d^2 misalnya, keduanya memberikan susunan elektronik yang sama sehingga menghasilkan term-term yang sama pula. Secara umum dapat dirumuskan bahwa term-term untuk konfigurasi elektronik p^n, d^n , dan f^n , masing-masing sama dengan term-term untuk konfigurasi elektronik $p^{(6-n)}, d^{(10-n)}$ dan $f^{(14-n)}$.

Term-term untuk konfigurasi elektronik p^n dan d^n dapat diperiksa pada Tabel 8.

Tabel 8. Term spektroskopik konfigurasi elektronik p^n dan d^n

Konfigurasi elektronik	Term atau State
s^2, p^6, d^{10}	1S
$p^1 \text{ \& } p^5$	2P
$p^2 \text{ \& } p^4$	$^3P, ^1D, ^1S$
p^3	$^4S, ^2D, ^2P$
$d^1 \text{ \& } d^9$	2D
$d^2 \text{ \& } d^8$	$^3F, ^3P, ^1G, ^1D, ^1S$
$d^3 \text{ \& } d^7$	$^4F, ^4P, ^2H, ^2G, ^2F, ^2D(2), ^2P$
$d^4 \text{ \& } d^6$	$^5D, ^3H, ^3G, ^3F(2), ^3D, ^3P(2), ^1I, ^1G(2), ^1F, ^1D(2), ^1S(2)$
d^5	$^6S, ^4G, ^4F, ^4D, ^4P, ^2I, ^2H, ^2G(2), ^2F(2), ^2D(3), ^2P, ^2S$

3.4. Cara menentukan *Ground Term*

Satu aspek fundamental setelah identifikasi term-term spektroskopik yaitu penentuan urutan-urutan energi term-term tersebut. Identifikasi urutan-urutan energi term ini cukup sulit (dan tidak dibicarakan pada kesempatan ini), namun pada dasarnya diperoleh dengan menyusun harga persamaan linear variabel-variabel *microstate* bagi masing-masing term menurut tabel *microstate* yang bersangkutan. Misalnya saja energi term 1G dan 3F (Tabel 3), masing-masing ditentukan oleh harga *microstate* ($2^+, 2^-$) dan ($2^+, 1^+$), dan seterusnya.

Namun demikian identifikasi *ground term* atau *ground state* (yaitu term dengan energi terendah) dengan mana elusidasi spektrum suatu spicies dapat ditelusuri, ternyata sangat mudah yaitu dengan mengadopsi aturan Hund seperti berikut ini.

- (1) Term dengan keanekaragaman spin tertinggi (harga S terbesar) mempunyai energi terendah.
- (2) Beberapa term dengan harga S tertinggi yang sama, term dengan harga L terbesar mempunyai energi terendah.
- (3) Untuk sistem konfigurasi kurang dari setengah penuh, term dengan harga J terkecil mempunyai energi terendah, sedangkan untuk konfigurasi lebih dari setengah penuh term dengan harga J terbesar yang mempunyai energi terendah.

Kedua aturan pertama tersebut tidak lain merupakan penjabaran dari prinsip korelasi muatan yaitu distribusi elektron yang saling menjauhi dengan spin paralel untuk menghasilkan rata-rata energi tolakan terendah; sedangkan aturan ketiga hanya valid untuk logam-logam berat khususnya golongan f.

Atas dasar aturan tersebut, maka konfigurasi d^2 dan d^3 masing-masing mempunyai ground term 3F dan 4F .

4. KESIMPULAN

Dari uraian di atas dapat ditunjukkan adanya 2 macam metode penentuan term spektroskopik menurut model *L-S Coupling* yang cukup sistematis. Kedua metode ini yaitu pertama dengan cara penyusunan tabel distribusi *microstate* dan kedua dengan tanpa menyusun *microstate* melainkan dengan cara penyusunan tabel distribusi jumlah *microstate*. Metode kedua jelas lebih simpel dan mudah dikembangkan.

Ground term suatu spicies selanjutnya dapat ditentukan menurut aturan Hund, yaitu merupakan term dengan harga S terbesar untuk L terbesar pula.

KEPUSTAKAAN

- Banwell, C.N., *Fundamentals of Molecular Spectroscopy*, McGraw-Hill Book Company, London, 1972.
- Cotton, F.A. and Wilkinson, F.R.S., *Advanced Inorganic Chemistry*, Interscience Publishers, New York, 1972.
- Day, M.C. and Selbin, J., *Theoretical Inorganic Chemistry*, Van Nostrand Reinhold Company, Melbourne, 1969.
- Douglas, B.E. and MC Daniel, D.H., *Concepts and Models of Inorganic Chemistry*, Blaisdell Publishing Company, London, 1965.
- Figgis, B.N., *Introduction to Ligand Fields*, Interscience Publishers, John Wiley & Sons, Inc., New York, 1966.
- Golding, R.M., *Applied Wave Mechanics*, D. Van Nostrand Company LTD, London, 1969.
- Huheey, J.E., *Inorganic Chemistry*, Harper International SI Edition, Cambridge, 1983.
- Hyde, K.E., Methods for Obtaining Russell - Saunders Term Symbols from Electronic Configurations, *Journal of Chemical Education*, Vol. 52, No.2, 1975, p.87.
- Kaufman, E.D., *Advanced Concepts in Physical Chemistry*, Mc Graw-Hill Book Company, New York, 1966.
- Lever, A.B.P., *Inorganic Electronic Spectroscopy*, Elsevier Publishing Company, Amsterdam, 1968.
- Royer, D.J., *Bonding Theory*, McGraw-Hill Book Company, New York, 1968.