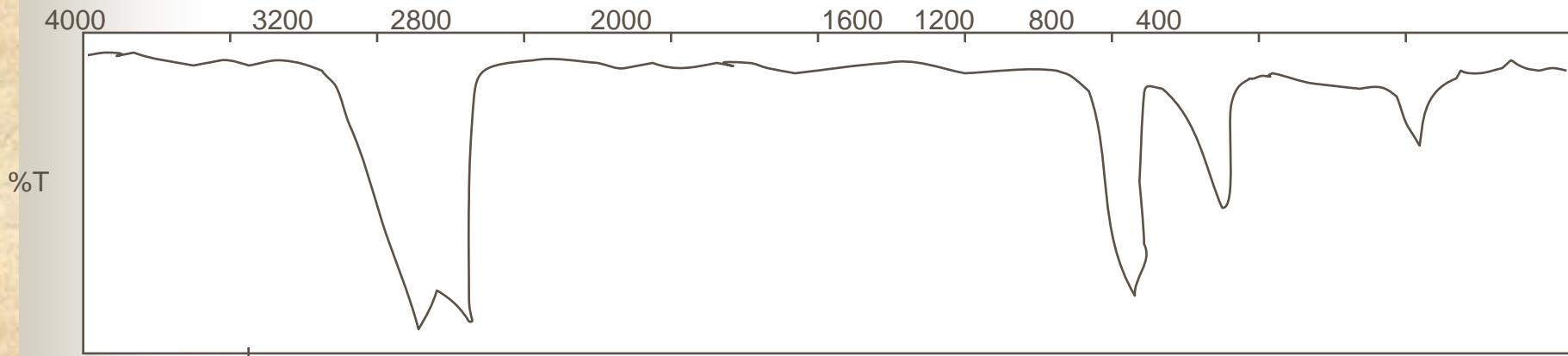


# SPEKTROFOTOMETRI INFRA MERAH

Pengukuran searapan IR oleh suatu molekul sebagai fungsi dari frekuensi (bil. Gelombang)

Alat: Spektrofotometer IR



Sinar IR : Sir William Herschell (1800)

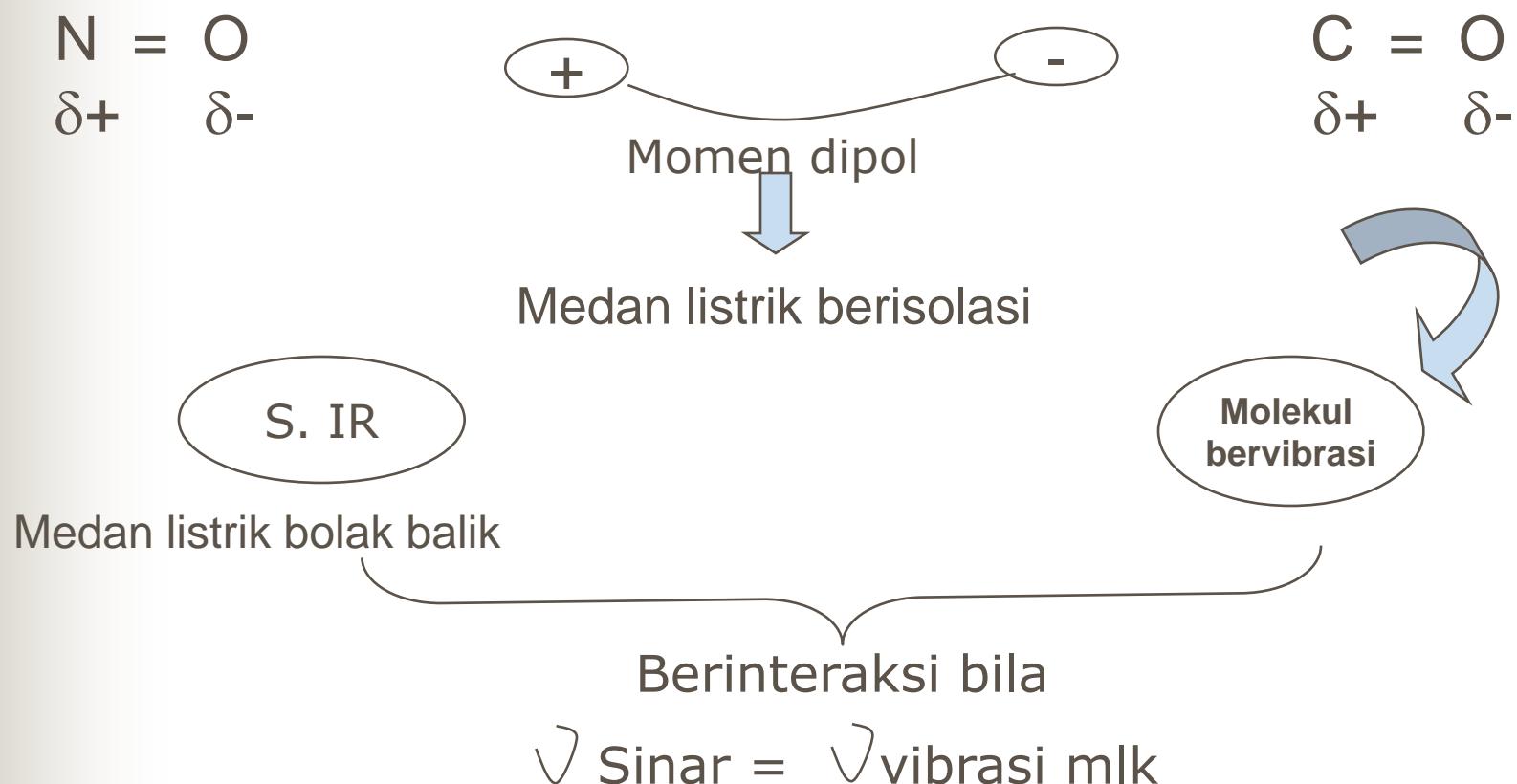
Daerah IR : 0,75 – 300  $\mu\text{m}$  atau  $13000$  –  $33 \text{ cm}^{-1}$  ( $\nu$ )

Pengukuran lazim :  $2,5$  –  $15 \mu\text{m}$  atau  $4000$  –  $667 \text{ cm}^{-1}$

*Kegunaan*

- Identifikasi senyawa, spektra khas
- Analisis kuantitatif  
(kurang populer, rumit)

### *Penyerapan sinar IR oleh molekul*



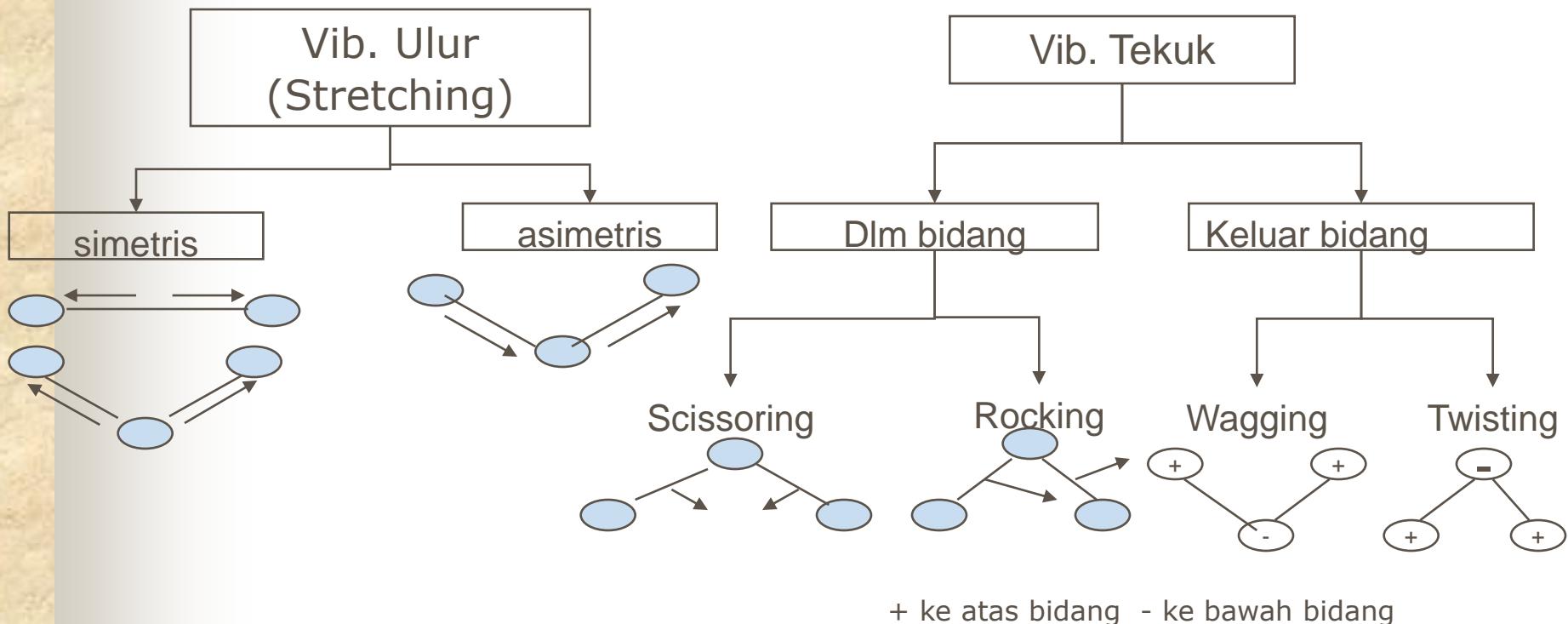
Energi sinar diserap oleh molekul



Amplitudo vibrasi berubah

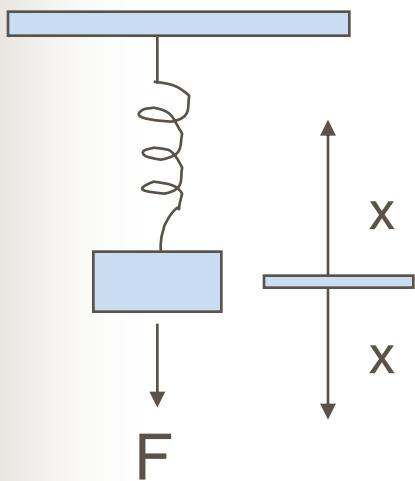
Molekul N<sub>2</sub>, Cl<sub>2</sub>, O<sub>2</sub> dapat menyerap sinar IR ???

## Jenis-jenis vibrasi molekul



## Teori vibrasi molekul

Dasar: Hk. Hooke ----- Osilator Harmonis



Benda yang melakukan  
vibrasi harmonis

$F = -kx$  -----> vibrasi harmonis

Contoh : vibrasi ulur

$E_{\text{pot}}$ . Osilator harmonis

$$E = \frac{1}{2} k x^2$$

Frek. Vib. Harmonis:

$$\nu_m = \frac{1}{\tau} \sqrt{\frac{k}{m}}$$

$\nu_m$  = frekuensi       $\tau$  = periode       $k$  = tetapan gaya (ikatan)

M = massa

Untuk 2 massa,  $m_1$  dan  $m_2$ :

$m \rightarrow \mu$  (massa tereduksi)

$$\nu_m = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k(m_1 + m_2)}{m_1 + m_2}}$$

Bila molekul menyerap s. IR, maka perubahan energi vibrasinya,

$$\Delta E = h \cdot \nu_m = \frac{h}{2\pi} \sqrt{\frac{k(m_1 + m_2)}{m_1 \cdot m_2}}$$

$$\bar{\nu} = \frac{1}{\lambda} = \frac{\nu_m}{c} \rightarrow \bar{\nu} = \frac{1}{2\pi c} \sqrt{\frac{k(m_1 + m_2)}{m_1 \cdot m_2}}$$

$c$  = kec. Cahaya =  $3 \cdot 10^{10}$  cm/det ;  $m$  = massa (gram)

K = tet. Gaya (dyne/cm ;  $\bar{\nu}$  = bil. Gelombang ( $\text{cm}^{-1}$ )

Contoh soal:

Hitung kira-kira bil. Gel. Dan  $\lambda$  dari serapan fundamental yang disebabkan oleh vibrasi ulur gugus karbonil ?

Jawab:

$$k_{C=O} = 1,2 \cdot 10^6 \text{ dyne/cm} \quad \text{Massa C} = 12/6 \cdot 10^{23} \text{ g/atom} = 2 \cdot 10^{-23} \text{ g}$$

$$\text{Massa O} = 16/6 \cdot 10^{23} \text{ g/atom} = 2,6 \cdot 10^{-23} \text{ g}$$

$$\nu = \frac{1}{2\pi c} \sqrt{\frac{k(m_1 + m_2)}{m_1 \cdot m_2}} = 1,6 \cdot 10^3 \text{ cm}^{-1} \quad \lambda = 6,3 \text{ m}$$

Soal: Hitunglah puncak serapan fundamental yg disebabkan oleh vibrasi ulur ikatan O-H.

$$k_{OH} = 7,7 \cdot 10^5 \text{ dyne/cm}$$

Jumlah jenis vibrasi fundamental:

Molekul linier : (3N-5)

Molekul tak linier : (3N-6)

N = jumlah atom dalam molekul

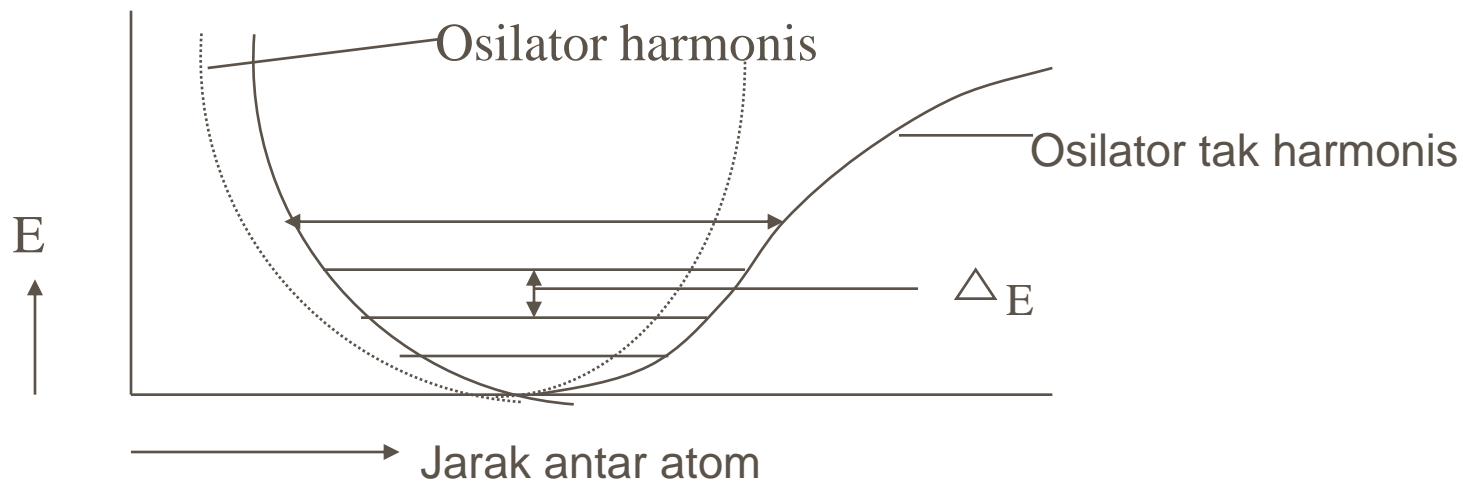
Contoh : C=O , CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O Berapa jumlah vibrasi fundamental ?

## Apakah molekul-molekul selalu mengikuti osilasi harmonis ?

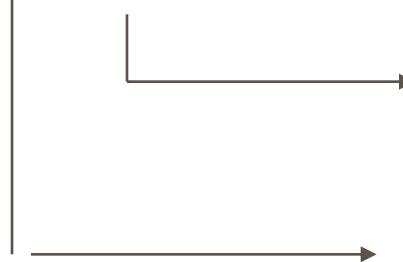
Pada keadaan dasar



Sesuai dengan osilator harmonis



Akibat sifat osilator tak harmonis



Muncul puncak-overtone pada  $\nu$  2-3x lebih besar , tetapi intensitas kecil

**Terjadi “coupling vibrasi, menyebabkan terjadi pergeseran nilai  $\nu$  (>)**

Contoh: molekul CO<sub>2</sub>

$\nu$  perhitungan = 1700 cm<sup>-1</sup>

-

$\nu$  sebenarnya = 2330 dan 667 cm<sup>-1</sup>

Sama dengan spekt. UV/Vis, kecuali sumber sinar, detektor dan sel cuplikan

### **Sumber sinar**



Nernst glower: Lampu dari osida lantanida dengan kawat Pt  
Batang SiC (5x0,5 cm)  
Kawat Ni/Cr

**(semuanya menggunakan sumber arus listrik)**

### **Detektor**

- 1. Fotokonduktor:** bahan semi konduktor PbS, PbSe, Ge  
(diameter 0,8 - 2  $\mu\text{m}$ )

semi konduktor menyerap s.IR ————— eksitasi elektron  
menghantarkan arus

arus listrik sebanding dengan jumlah foton yang mencapai permukaan semikonduktor.

- 2. Thermal detektor :** termokopel, bolometer, det. Golay

Kerja bolometer dan det. Golay : CARI SENDIRI !!!