

Handout Bab 10: Spin Elektron dan Teorema Spin-Statistik

Departemen Kimia
(Dikonversi dari materi HTML)

30 Oktober 2025

Ringkasan

Dokumen ini merangkum konsep-konsep kunci dalam mekanika kuantum yang berkaitan dengan spin elektron, teorema spin-statistik, dan konsekuensinya terhadap struktur atomik. Pembahasan mencakup pengenalan operator spin, prinsip ketidakterbedaan partikel identik (fermion dan boson), dan penerapan persyaratan antisimetri pada atom Helium. Prinsip Eksklusi Pauli dijelaskan sebagai konsekuensi langsung dari teorema spin-statistik, yang kemudian mengarah pada konstruksi fungsi gelombang antisimetris menggunakan Determinan Slater. Terakhir, dibahas pula hubungan antara spin dan momen magnetik, yang menjadi dasar spektroskopi NMR dan ESR.

Daftar Isi

1	Konsep Spin Elektron	3
1.1	Operator dan Nilai Eigen Spin	3
1.2	Fungsi Eigen Spin (α dan β)	3
2	Teorema Spin-Statistik	4
2.1	Operator Pertukaran (Permutasi)	4
2.2	Fungsi Simetris dan Antisimetris	4
2.3	Teorema Spin-Statistik	5
2.4	Konsekuensi Antisimetri untuk Fermion	5
3	Aplikasi pada Atom Helium	5
3.1	Fungsi Spin Dua Elektron	6
3.1.1	Fungsi Spin Simetris (Total 3)	6
3.1.2	Fungsi Spin Antisimetris (Total 1)	6
3.2	Fungsi Gelombang Atom Helium	6
3.2.1	Keadaan Dasar (Ground State, $1s^2$)	6
3.2.2	Keadaan Tereksitasi (Excited State, $1s2s$)	6
4	Prinsip Eksklusi Pauli	7
4.1	Masalah dengan Konfigurasi $1s^3$	7
4.2	Penjelasan: Antisimetri	7
4.3	Spin-Orbital dan Prinsip Eksklusi	7
4.4	Konfigurasi Ground State Lithium (Li)	8

5	Determinan Slater	8
5.1	Sifat Determinan Slater	8
5.2	Contoh Determinan Slater	8
5.2.1	Ground State Helium ($1s^2$)	8
5.2.2	Ground State Lithium ($1s^2 2s$)	9
5.3	Notasi Singkat (Shorthand)	9
6	Momen Magnetik Spin & NMR	9
6.1	Momen Magnetik Elektron (ESR)	9
6.2	Momen Magnetik Inti (NMR)	10
6.2.1	Prinsip Dasar NMR	10
6.2.2	Geseran Kimia (Chemical Shift)	10
6.2.3	Pemecahan Spin-Spin (Spin-Spin Coupling)	11
7	Soal Latihan	11

1 Konsep Spin Elektron

Spektrum natrium (Na) menunjukkan garis D yang sebenarnya terdiri dari dua garis yang sangat berdekatan (doublet). Fenomena ini, yang dikenal sebagai *fine structure* (struktur halus), menunjukkan adanya penggandaan jumlah keadaan yang diharapkan untuk elektron valensi.

Pada tahun 1925, Uhlenbeck dan Goudsmit mengusulkan bahwa elektron memiliki **momentum sudut intrinsik (bawaan)**, sebagai tambahan dari momentum sudut orbital. Momentum sudut intrinsik ini disebut sebagai **spin**.

Penting: Gambaran elektron sebagai bola bermuatan yang "berputar" pada porosnya hanyalah analogi makroskopik dan **tidak memiliki realitas fisik**. Spin adalah murni efek mekanika kuantum relativistik yang tidak memiliki padanan di dunia klasik. Dalam mekanika kuantum non-relativistik, spin harus diperkenalkan sebagai hipotesis tambahan.

1.1 Operator dan Nilai Eigen Spin

Sama seperti momentum sudut orbital ($\hat{L}^2, \hat{L}_z$), kita mendefinisikan operator momentum sudut spin yang linier dan Hermitian: $\hat{S}^2, \hat{S}_x, \hat{S}_y$, dan $\hat{S}_z$.

Operator-operator ini mematuhi hubungan komutasi yang sama dengan momentum sudut orbital, misalnya:

$$[\hat{S}_x, \hat{S}_y] = i\hbar\hat{S}_z$$
$$[\hat{S}^2, \hat{S}_z] = 0$$

Karena hubungan komutasi ini, kita dapat menemukan nilai eigen (eigenvalue) untuk $\hat{S}^2$ dan $\hat{S}_z$:

- Nilai eigen $\hat{S}^2$ adalah: $s(s+1)\hbar^2$
- Nilai eigen $\hat{S}_z$ adalah: $m_s\hbar$, dimana $m_s = -s, -s+1, \dots, +s$

Eksperimen menunjukkan bahwa untuk **elektron** (dan juga proton serta neutron), nilai bilangan kuantum spin adalah $s = 1/2$.

Dengan $s = 1/2$, kita dapatkan:

1. Besar (magnitude) total momentum sudut spin adalah:

$$\left[\left(\frac{1}{2} \right) \left(\frac{1}{2} + 1 \right) \hbar^2 \right]^{1/2} = \left[\frac{3}{4} \hbar^2 \right]^{1/2} = \frac{\sqrt{3}}{2} \hbar$$

2. Komponen-z dari momentum sudut spin (m_s) hanya memiliki dua kemungkinan nilai:

- $m_s = +1/2$ (disebut "spin up")
- $m_s = -1/2$ (disebut "spin down")

1.2 Fungsi Eigen Spin (α dan β)

Dua kemungkinan keadaan spin m_s ini memiliki fungsi eigen (eigenfunction) masing-masing, yang kita sebut α dan β .

Fungsi-fungsi ini adalah fungsi eigen dari $\hat{S}^2$ dan $\hat{S}_z$:

$$\hat{S}_z \alpha = +\frac{1}{2} \hbar \alpha$$
$$\hat{S}_z \beta = -\frac{1}{2} \hbar \beta$$

$$\hat{S}^2 \alpha = \frac{3}{4} \hbar^2 \alpha$$

$$\hat{S}^2 \beta = \frac{3}{4} \hbar^2 \beta$$

Variabel untuk fungsi spin ini adalah bilangan kuantum diskrit m_s itu sendiri. Tidak seperti fungsi gelombang spasial (yang diintegrasikan), fungsi spin dinormalisasi menggunakan penjumlahan pada dua nilai m_s yang mungkin (+1/2 dan -1/2).

Kondisi ortonormalitasnya adalah:

- **Normalisasi:**

$$\sum_{m_s=-1/2}^{1/2} |\alpha(m_s)|^2 = 1 \quad \text{dan} \quad \sum_{m_s=-1/2}^{1/2} |\beta(m_s)|^2 = 1$$

- **Ortogonalitas:** (Karena mereka adalah eigenfunction dari operator Hermitian $\hat{S}_z$ dengan nilai eigen berbeda)

$$\sum_{m_s=-1/2}^{1/2} \alpha^*(m_s) \beta(m_s) = 0$$

2 Teorema Spin-Statistik

Dalam mekanika klasik, partikel identik (seperti bola biliard) dapat dibedakan dengan cara melacak jalur (lintasan) unik mereka.

Dalam mekanika kuantum, Prinsip Ketidakpastian melarang kita mengetahui lintasan partikel secara pasti. Jika partikel-partikel tersebut identik (massa, muatan, dan spin yang sama), maka **tidak ada cara** untuk membedakan satu dengan yang lainnya.

Oleh karena itu, fungsi gelombang untuk sistem partikel identik tidak boleh membedakan antar partikel tersebut.

2.1 Operator Pertukaran (Permutasi)

Kita mendefinisikan **operator permutasi** $\hat{P}_{12}$, yang menukar semua koordinat (spasial dan spin) dari partikel 1 dan 2.

$$\hat{P}_{12} f(q_1, q_2, \dots) = f(q_2, q_1, \dots)$$

Jika kita menerapkan operator ini dua kali, kita akan kembali ke fungsi semula: $\hat{P}_{12} \hat{P}_{12} f = f$. Ini berarti $\hat{P}_{12}^2 = \hat{I}$ (operator identitas).

Karena kuadratnya adalah 1, nilai eigen (eigenvalue) dari $\hat{P}_{12}$ hanya bisa **+1** atau **-1**.

2.2 Fungsi Simetris dan Antisimetris

Karena partikel identik tidak dapat dibedakan, menukar label mereka (misalnya, menukar 1 dan 2) tidak dapat mengubah keadaan fisik sistem. Ini berarti fungsi gelombang ψ harus merupakan fungsi eigen dari operator permutasi $\hat{P}_{ik}$.

Ada dua kemungkinan perilaku fungsi gelombang terhadap pertukaran partikel:

1. Simetris (Nilai Eigen +1):

$$\hat{P}_{12} \psi(q_1, q_2) = +1 \psi(q_1, q_2) \Rightarrow \psi(q_2, q_1) = \psi(q_1, q_2)$$

Fungsi gelombang **tidak berubah** saat partikel dipertukarkan.

2. Antisimetris (Nilai Eigen -1):

$$\hat{P}_{12}\psi(q_1, q_2) = -1\psi(q_1, q_2) \Rightarrow \psi(q_2, q_1) = -\psi(q_1, q_2)$$

Fungsi gelombang **berubah tanda** saat partikel dipertukarkan.

Fungsi gelombang untuk sistem n partikel identik harus *sepenuhnya* simetris atau *sepenuhnya* antisimetris terhadap pertukaran *setiap* pasang partikel.

2.3 Teorema Spin-Statistik

Pada tahun 1940, Wolfgang Pauli membuktikan hubungan fundamental antara spin partikel dan statistik (simetri) fungsi gelombangnya. Ini dikenal sebagai **Teorema Spin-Statistik** [4].

- Fermion (misal: Elektron, Proton, Neutron)

- Memiliki spin **setengah-integral** ($s = 1/2, 3/2, 5/2, \dots$).
- Memerlukan fungsi gelombang yang **ANTISIMETRIS**.
- Eksperimen (seperti tabel periodik) membuktikan bahwa elektron adalah fermion.

- Boson (misal: Foton, Pion)

- Memiliki spin **integral** ($s = 0, 1, 2, \dots$).
- Memerlukan fungsi gelombang yang **SIMETRIS**.

2.4 Konsekuensi Antisimetri untuk Fermion

Persyaratan antisimetri untuk fermion (seperti elektron) memiliki konsekuensi yang sangat penting. Jika dua elektron (misalnya 1 dan 2) memiliki set koordinat (spasial dan spin) yang persis sama, kita akan memiliki $q_1 = q_2$.

Persamaan antisimetri menjadi:

$$\psi(q_1, q_1, \dots) = -\psi(q_1, q_1, \dots)$$

Satu-satunya cara agar suatu angka sama dengan negatifnya sendiri adalah jika angka itu nol.

$$2\psi(q_1, q_1, \dots) = 0 \Rightarrow \psi(q_1, q_1, \dots) = 0$$

Ini berarti: **Probabilitas menemukan dua elektron dengan spin yang sama (m_s yang sama) pada titik yang persis sama di ruang adalah nol.** Persyaratan ini memaksa elektron dengan spin yang sama untuk "menjauhi" satu sama lain, yang sering disebut sebagai "Pauli repulsion" (tolakan Pauli).

3 Aplikasi pada Atom Helium

Mari kita terapkan teorema spin-statistik pada atom Helium (He). Elektron adalah fermion, sehingga fungsi gelombang elektronik *total* (termasuk spin) harus **antisimetris** terhadap pertukaran kedua elektron.

Fungsi gelombang total dapat (sebagai aproksimasi) dipisahkan menjadi bagian spasial dan bagian spin:

$$\psi_{\text{total}} = \psi_{\text{spasial}} \times \psi_{\text{spin}}$$

Agar ψ_{total} antisimetris, kita memiliki dua kemungkinan ($S \times A = A$ atau $A \times S = A$):

1. (Fungsi Spasial **Simetris**) $\times$ (Fungsi Spin **Antisimetris**)
2. (Fungsi Spasial **Antisimetris**) $\times$ (Fungsi Spin **Simetris**)

3.1 Fungsi Spin Dua Elektron

Kita perlu membangun fungsi spin untuk dua elektron (1 dan 2) yang merupakan fungsi eigen dari $\hat{P}_{12}$ (yaitu, simetris atau antisimetris). Ada empat kombinasi dasar: $\alpha(1)\alpha(2)$, $\beta(1)\beta(2)$, $\alpha(1)\beta(2)$, $\beta(1)\alpha(2)$.

Dua fungsi pertama sudah simetris. Dua terakhir tidak simetris atau antisimetris. Kita harus mengambil kombinasi linier dari keduanya. Hasilnya adalah empat fungsi spin yang "sah":

3.1.1 Fungsi Spin Simetris (Total 3)

Fungsi-fungsi ini membentuk keadaan "triplet":

$$\begin{aligned}\alpha(1)\alpha(2) \\ \beta(1)\beta(2) \\ 2^{-1/2}[\alpha(1)\beta(2) + \beta(1)\alpha(2)]\end{aligned}$$

3.1.2 Fungsi Spin Antisimetris (Total 1)

Fungsi ini membentuk keadaan "singlet":

$$2^{-1/2}[\alpha(1)\beta(2) - \beta(1)\alpha(2)]$$

3.2 Fungsi Gelombang Atom Helium

3.2.1 Keadaan Dasar (Ground State, $1s^2$)

Fungsi gelombang spasial orde-nol adalah $\psi_{\text{spasial}} = 1s(1)1s(2)$. Jika kita menukar 1 dan 2, fungsinya menjadi $1s(2)1s(1)$, yang sama saja. Jadi, ψ_{spasial} adalah **Simetris**.

Karena ψ_{spasial} Simetris, ia *harus* dikalikan dengan ψ_{spin} yang **Antisimetris** (hanya ada satu). Fungsi gelombang total orde-nol untuk ground state He adalah:

$$\psi^{(0)} = 1s(1)1s(2) \cdot 2^{-1/2}[\alpha(1)\beta(2) - \beta(1)\alpha(2)]$$

Keadaan ini adalah *singlet* dan nondegenerate (tidak terdegenerasi).

3.2.2 Keadaan Tereksitasi (Excited State, $1s2s$)

Di sini kita memiliki dua kemungkinan fungsi spasial (dari Bab 9):

1. Fungsi Spasial Antisimetris:

$$\psi_{\text{spasial}(-)} = 2^{-1/2}[1s(1)2s(2) - 2s(1)1s(2)]$$

Fungsi ini harus dikalikan dengan salah satu dari tiga (3) fungsi spin **Simetris** (triplet). Ini menghasilkan **level energi yang terdegenerasi tiga (triplet)**. Contohnya:

$$\psi_{\text{triplet}}^{(0)} = 2^{-1/2}[1s(1)2s(2) - 2s(1)1s(2)] \cdot \alpha(1)\alpha(2)$$

2. Fungsi Spasial Simetris:

$$\psi_{\text{spasial}(+)} = 2^{-1/2}[1s(1)2s(2) + 2s(1)1s(2)]$$

Fungsi ini harus dikalikan dengan satu (1) fungsi spin **Antisimetris** (singlet). Ini menghasilkan **level energi singlet (non-degenerate)**.

$$\psi_{\text{singlet}}^{(0)} = 2^{-1/2}[1s(1)2s(2) + 2s(1)1s(2)] \cdot 2^{-1/2}[\alpha(1)\beta(2) - \beta(1)\alpha(2)]$$

4 Prinsip Eksklusi Pauli

Persyaratan antisimetri memiliki konsekuensi dramatis ketika kita beralih ke atom Lithium (Li).

4.1 Masalah dengan Konfigurasi $1s^3$

Jika kita mengabaikan spin dan antisimetri, kita mungkin menebak konfigurasi ground state Li adalah $1s^3$, dengan fungsi gelombang orde-nol $\psi^{(0)} = 1s(1)1s(2)1s(3)$.

Perhitungan energi orde-nol + orde-pertama untuk konfigurasi ini memberikan $E^{(0)} + E^{(1)} = -214.3$ eV. Nilai eksperimental untuk energi ground state Li adalah -203.5 eV.

Hasil perhitungan (-214.3 eV) **lebih rendah** dari nilai sebenarnya (-203.5 eV). Ini adalah **pelanggaran langsung terhadap Prinsip Variasi**, yang menyatakan bahwa energi yang dihitung dari fungsi gelombang aproksimasi tidak boleh lebih rendah dari energi sejati.

Kesimpulan: Konfigurasi $1s^3$ secara fundamental salah dan tidak diizinkan.

4.2 Penjelasan: Antisimetri

Kesalahan kita adalah mengabaikan persyaratan antisimetri.

1. Fungsi spasial $1s(1)1s(2)1s(3)$ adalah **simetris**.
2. Agar ψ_{total} antisimetris, kita perlu mengalikannya dengan fungsi spin tiga elektron yang **antisimetris**.
3. **Masalah Inti:** Ternyata **tidak mungkin** untuk membangun fungsi spin tiga elektron yang sepenuhnya antisimetris dan tidak bernilai nol.

Jika kita mencoba membuatnya (misalnya, menggunakan spin α, β, α), kita akan selalu memiliki setidaknya dua fungsi spin yang identik. Saat dimasukkan ke dalam bentuk determinan (yang akan dibahas di bagian berikutnya), ini akan menghasilkan dua kolom identik, yang membuat determinan (dan fungsi gelombang) bernilai **nol**.

4.3 Spin-Orbital dan Prinsip Eksklusi

Cara yang benar untuk membangun fungsi gelombang antisimetris adalah dengan menggunakan **Spin-Orbital**.

Spin-Orbital: Sebuah fungsi untuk satu elektron yang merupakan produk dari fungsi spasial (orbital) dan fungsi spin. Contoh: $f(1) = 1s(1)\alpha(1)$.

Fungsi gelombang total untuk sistem n -elektron dibangun dari n spin-orbital.

Persyaratan antisimetri mengarah langsung ke **Prinsip Eksklusi Pauli**:

Tidak ada dua elektron yang dapat menempati (ditugaskan ke) spin-orbital yang sama.

Jika kita mencoba memberikan dua elektron spin-orbital yang sama (misal, $1s\alpha$ dan $1s\alpha$), fungsi gelombang antisimetris yang dihasilkan akan menjadi nol.

Ini setara dengan pernyataan yang lebih dikenal:

Tidak ada dua elektron dalam sebuah atom yang boleh memiliki keempat bilangan kuantum yang sama (n, l, m_l , dan m_s).

4.4 Konfigurasi Ground State Lithium (Li)

Berdasarkan Prinsip Pauli:

- Elektron 1 dapat masuk ke spin-orbital $1s\alpha$.
- Elektron 2 dapat masuk ke spin-orbital $1s\beta$.
- Orbital spasial $1s$ sekarang "penuh".
- Elektron 3 **harus** masuk ke orbital spasial berikutnya, yaitu $2s$. Ia bisa mengambil spin-orbital $2s\alpha$ atau $2s\beta$.

Konfigurasi ground state Li yang benar adalah **$1s^2 2s$** . Ini sesuai dengan semua bukti eksperimental [2].

5 Determinan Slater

Pada tahun 1929, John C. Slater menunjukkan bahwa cara sistematis untuk membangun fungsi gelombang orde-nol yang memenuhi persyaratan antisimetri adalah dengan menggunakan **Determinan**.

Untuk sistem n -elektron, fungsi gelombang (disebut Determinan Slater) dibangun dari n spin-orbital yang ditempati (sebut saja $f, g, h, \dots$).

5.1 Sifat Determinan Slater

Determinan Slater untuk 3 elektron (misal, f, g, h) yang dinormalisasi adalah:

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{vmatrix} f(1) & g(1) & h(1) \\ f(2) & g(2) & h(2) \\ f(3) & g(3) & h(3) \end{vmatrix}$$

Determinan ini secara otomatis memenuhi persyaratan fisika kuantum:

1. **Antisimetris:** Jika kita menukar dua elektron (misal, 1 dan 2), itu setara dengan menukar dua **baris** (baris 1 dan 2) dari determinan. Sifat dasar determinan adalah menukar dua baris akan **mengalikan nilainya dengan -1**. Ini adalah persyaratan antisimetri.
2. **Prinsip Eksklusi Pauli:** Jika dua elektron menempati spin-orbital yang sama (misal, $f = g$), maka determinan akan memiliki dua **kolom** yang identik. Sifat dasar determinan adalah jika dua kolom identik, nilai determinan adalah **nol**. Ini berarti keadaan seperti itu tidak ada.

Faktor normalisasi umum untuk determinan Slater orde- n (dengan spin-orbital ortonormal) adalah $1/\sqrt{n!}$.

5.2 Contoh Determinan Slater

5.2.1 Ground State Helium ($1s^2$)

Sistem 2-elektron ($n=2$), faktor normalisasi $1/\sqrt{2}$. Spin-orbital yang ditempati: $f = 1s\alpha$ dan $g = 1s\beta$.

$$\psi^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} 1s(1)\alpha(1) & 1s(1)\beta(1) \\ 1s(2)\alpha(2) & 1s(2)\beta(2) \end{vmatrix}$$

Jika kita mengekspansi determinan ini ($ad - bc$):

$$\psi^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2}} [(1s(1)\alpha(1)) \cdot (1s(2)\beta(2)) - (1s(1)\beta(1)) \cdot (1s(2)\alpha(2))]$$

$$\psi^{(0)} = 1s(1)1s(2) \cdot \left\{ \frac{1}{\sqrt{2}} [\alpha(1)\beta(2) - \beta(1)\alpha(2)] \right\}$$

Ini persis sama dengan fungsi (Simetris Spasial $\times$ Antisimetris Spin) yang kita temukan sebelumnya.

5.2.2 Ground State Lithium ($1s^2 2s$)

Sistem 3-elektron ($n=3$), faktor normalisasi $1/\sqrt{6}$. Spin-orbital yang ditempati: $1s\alpha$, $1s\beta$, dan $2s\alpha$.

$$\psi^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{vmatrix} 1s(1)\alpha(1) & 1s(1)\beta(1) & 2s(1)\alpha(1) \\ 1s(2)\alpha(2) & 1s(2)\beta(2) & 2s(2)\alpha(2) \\ 1s(3)\alpha(3) & 1s(3)\beta(3) & 2s(3)\alpha(3) \end{vmatrix}$$

Perhatikan bahwa fungsi ini *bukan* produk sederhana dari bagian spasial dan spin.

5.3 Notasi Singkat (Shorthand)

Menulis determinan penuh sangatlah melelahkan. Ada dua notasi singkat yang umum [3]:

1. **Notasi Bar:** Fungsi *tanpa* bar menyiratkan spin α . Fungsi *dengan* bar (garis di atas) menyiratkan spin β . Contoh Li:

$$\psi^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{vmatrix} 1s(1) & \bar{1}s(1) & 2s(1) \\ 1s(2) & \bar{1}s(2) & 2s(2) \\ 1s(3) & \bar{1}s(3) & 2s(3) \end{vmatrix}$$

2. **Notasi "Ket":** Cukup daftarkan spin-orbital yang terisi di dalam tanda "ket" atau garis vertikal. Ini menyiratkan seluruh determinan yang dinormalisasi.

$$\psi_{\text{Li}}^{(0)} = |1s \bar{1}s 2s|$$

$$\psi_{\text{He}}^{(0)} = |1s \bar{1}s|$$

6 Momen Magnetik Spin & NMR

Momentum sudut (angular momentum) selalu terkait dengan momen magnetik. Sama seperti momentum sudut *orbital* ($\mathbf{L}$) yang menghasilkan momen magnetik orbital ($\mathbf{m}_L$), momentum sudut *spin* ($\mathbf{S}$) juga menghasilkan momen magnetik spin ($\mathbf{m}_S$).

6.1 Momen Magnetik Elektron (ESR)

Hubungan antara momen magnetik spin dan momentum sudut spin adalah:

$$\mathbf{m}_S = -g_e \left(\frac{e}{2m_e} \right) \mathbf{S}$$

Di mana m_e adalah massa elektron, $-e$ adalah muatan elektron, dan g_e adalah "faktor-g" elektron. Teori relativistik Dirac memprediksi $g_e = 2$, tetapi eksperimen dan teori yang lebih akurat menempatkannya sedikit lebih tinggi ($g_e \approx 2.0023$).

Karena spin elektron dapat memiliki dua orientasi ($m_s = +1/2$ atau $-1/2$) dalam medan magnet, ini menciptakan dua level energi. Transisi di antara dua level energi spin elektron ini adalah dasar dari **Spektroskopi ESR (Electron Spin Resonance)**. ESR berguna untuk mempelajari spesies dengan elektron tidak berpasangan, seperti radikal bebas [2].

6.2 Momen Magnetik Inti (NMR)

Banyak inti atom juga memiliki momentum sudut spin, yang dilambangkan dengan $\mathbf{I}$.

- Bilangan kuantum spin inti (I) bisa berupa $0, 1/2, 1, 3/2, \dots$
- Contoh:
 - $I = 1/2$ untuk ^1H (proton), ^{13}C , ^{19}F
 - $I = 1$ untuk ^2H (deuterium), ^{14}N
 - $I = 0$ untuk ^{12}C , ^{16}O (inti dengan jumlah proton dan neutron genap)

Inti dengan $I \neq 0$ memiliki momen magnetik inti ($\mathbf{m}_I$) yang sebanding dengan spin-nya:

$$\mathbf{m}_I = \gamma \mathbf{I} \quad (\text{dimana } \gamma \text{ adalah rasio magnetogirik})$$

6.2.1 Prinsip Dasar NMR

1. Pemisahan Energi (Splitting): Ketika sebuah inti (seperti proton, ^1H , dengan $I = 1/2$) ditempatkan dalam medan magnet eksternal $\mathbf{B}$ (sumbu-z), energinya bergantung pada orientasinya. Hamiltonian untuk interaksi ini adalah $\hat{H} = -\gamma B \hat{I}_z$. Nilai eigen energinya (level energi) adalah:

$$E = -\gamma \hbar B M_I$$

Untuk proton ($I = 1/2$), M_I bisa $+1/2$ ("spin up") atau $-1/2$ ("spin down"), sehingga menciptakan **dua level energi** yang terpisah.

2. Resonansi (Absorpsi): Jika radiasi elektromagnetik (gelombang radio) dengan frekuensi yang tepat (ν) diterapkan, sistem dapat menyerap energi dan "melompat" dari level energi rendah ke tinggi (transisi $\Delta M_I = \pm 1$). Frekuensi transisi (resonansi) ini adalah:

$$h\nu = |\Delta E| \Rightarrow \nu = \frac{|\gamma|}{2\pi} B$$

6.2.2 Geseran Kimia (Chemical Shift)

Frekuensi ν di atas adalah untuk inti yang terisolasi. Dalam sebuah molekul, inti "dilindungi" atau "diperisai" (*shielded*) dari medan magnet $\mathbf{B}$ oleh awan elektron di sekitarnya. Medan magnet yang "dirasakan" oleh inti (B_{felt}) sedikit lebih lemah:

$$B_{\text{felt}} = B_{\text{eksternal}} - B_{\text{elektronik}} = (1 - \sigma_i)B$$

Dimana σ_i (sigma) adalah **konstanta perisai (shielding)**. Akibatnya, frekuensi resonansi untuk inti i adalah:

$$\nu_i = \frac{|\gamma|}{2\pi} (1 - \sigma_i)B$$

Inti dalam lingkungan elektronik yang berbeda (misalnya, proton di $-\text{CH}_3$ vs proton di $-\text{CH}_2$) akan memiliki nilai σ yang berbeda, sehingga mereka beresonansi pada frekuensi yang sedikit berbeda. Perbedaan frekuensi inilah yang disebut **geseran kimia (chemical shift)** [1].

6.2.3 Pemecahan Spin-Spin (Spin-Spin Coupling)

Puncak NMR sering kali tidak muncul sebagai satu garis tunggal, tetapi sebagai multiplet (doublet, triplet, kuartet, dll.). Ini disebabkan oleh **pemecahan spin-spin**.

- Momen magnetik dari inti tetangga memengaruhi inti target.
- Medan tambahan ini "memecah" (split) level energi inti target.
- **Aturan $n+1$:** Sekelompok n proton tetangga yang ekuivalen akan memecah sinyal proton target menjadi $n+1$ garis.

Contoh: Etanol ($\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$)

- **Sinyal CH_3 :** Memiliki $n = 2$ tetangga (CH_2). Sinyal ini dipecah menjadi $(2+1) = 3$ garis (triplet).
- **Sinyal CH_2 :** Memiliki $n = 3$ tetangga (CH_3). Sinyal ini dipecah menjadi $(3+1) = 4$ garis (kuartet).
- **Sinyal OH:** Seringkali tidak memecah karena pertukaran proton yang cepat.

7 Soal Latihan

1. Sebutkan apakah partikel berikut ini **boson** atau **fermion**: (a) elektron, (b) proton, (c) foton, (d) inti ^{12}C , (e) inti ^{13}C , (f) atom ^4He (2p, 2n, 2e).

Jawaban dan Pembahasan: Kuncinya adalah jumlah total fermion (spin 1/2). Partikel komposit adalah fermion jika mengandung jumlah fermion **ganjil**, dan boson jika mengandung jumlah fermion **genap**.

- (a) **Elektron:** Spin $s = 1/2$. **Fermion**.
 - (b) **Proton:** Spin $s = 1/2$. **Fermion**.
 - (c) **Foton:** Spin $s = 1$. **Boson**.
 - (d) **Inti ^{12}C :** 6 proton + 6 neutron. Total 12 fermion (**genap**). **Boson**.
 - (e) **Inti ^{13}C :** 6 proton + 7 neutron. Total 13 fermion (**ganjil**). **Fermion**.
 - (f) **Atom ^4He :** 2 proton + 2 neutron + 2 elektron. Total 6 fermion (**genap**). **Boson**.
2. Klasifikasikan fungsi dua-elektron berikut sebagai **simetris**, **antisimetris**, atau **bukan keduanya**. Asumsikan f dan g adalah fungsi spasial yang berbeda.
(a) $f(1)f(2)[\alpha(1)\beta(2) - \beta(1)\alpha(2)]$
(b) $[f(1)g(2) - g(1)f(2)]\alpha(1)\alpha(2)$
(c) $f(1)g(2)\alpha(1)\beta(2)$

Jawaban dan Pembahasan: Kita periksa simetri bagian spasial (Spa) dan spin (Spi). (S=Simetris, A=Antisimetris). Aturan: $S \times S = S$, $A \times A = S$, $S \times A = A$.

- (a) Spa: $f(1)f(2) \Rightarrow$ **Simetris**. Spi: $[\dots] \Rightarrow$ **Antisimetris**. Total: $(S) \times (A) =$ **Antisimetris**. (Valid)
- (b) Spa: $[\dots] \Rightarrow$ **Antisimetris**. Spi: $\alpha(1)\alpha(2) \Rightarrow$ **Simetris**. Total: $(A) \times (S) =$ **Antisimetris**. (Valid)

- (c) Sp_a: $f(1)g(2) \Rightarrow$ **Bukan keduanya**. Sp_i: $\alpha(1)\beta(2) \Rightarrow$ **Bukan keduanya**. Total: **Bukan keduanya**. (Tidak valid)

3. Tuliskan empat (4) fungsi spin yang mungkin untuk sistem dua elektron. Kelompokkan mana yang simetris (triplet) dan mana yang antisimetris (singlet).

Jawaban dan Pembahasan: Simetris (Total 3 fungsi, Triplet):

1. $\alpha(1)\alpha(2)$
2. $\beta(1)\beta(2)$
3. $2^{-1/2}[\alpha(1)\beta(2) + \beta(1)\alpha(2)]$

Antisimetris (Total 1 fungsi, Singlet):

1. $2^{-1/2}[\alpha(1)\beta(2) - \beta(1)\alpha(2)]$

4. Tuliskan (dalam notasi shorthand "ket") Determinan Slater untuk keadaan dasar atom Berilium (Be, Z=4) dan atom Neon (Ne, Z=10).

Jawaban dan Pembahasan: Notasi "ket" | ... | menyiratkan determinan lengkap, dengan α (tanpa bar) dan β (dengan bar).

- (a) **Berilium (Be, Z=4):** Konfigurasi $1s^2 2s^2$. Spin-orbital: $1s\alpha, 1s\beta, 2s\alpha, 2s\beta$. Notasi: $\psi_{\text{Be}} = |1s \bar{1}s 2s \bar{2}s|$
- (b) **Neon (Ne, Z=10):** Konfigurasi $1s^2 2s^2 2p^6$. Spin-orbital: $1s\alpha, 1s\beta, 2s\alpha, 2s\beta, 2p_x\alpha, 2p_x\beta, 2p_y\alpha, 2p_y\beta$. Notasi: $\psi_{\text{Ne}} = |1s \bar{1}s 2s \bar{2}s 2p_x \bar{2}p_x 2p_y \bar{2}p_y 2p_z \bar{2}p_z|$

Daftar Pustaka

Pustaka

- [1] Griffiths, David J. (2018). *Introduction to Quantum Mechanics* (3rd ed.). Cambridge University Press.
- [2] Levine, Ira N. (2013). *Quantum Chemistry* (7th ed.). Pearson.
- [3] McQuarrie, Donald A. (2007). *Quantum Chemistry* (2nd ed.). University Science Books.
- [4] Pauli, W. (1940). The Connection Between Spin and Statistics. *Physical Review*, 58(8), 716–722.