

BACHELOR OF SCIENCE (B.Sc.)**Term-End Examination****December, 2013****CHEMISTRY****CHE-10 : SPECTROSCOPY***Time : 2 hours**Maximum Marks : 50*

Note : Do any five questions. Use of log tables and non-programmable calculators is allowed.

$$h = 6.626 \times 10^{-34} \text{ Js}$$

$$c = 2.998 \times 10^8 \text{ ms}^{-1}$$

1. (a) Explain hyperfine Interaction in the ESR spectra of organic radical giving a suitable example. 3
- (b) What is chemical shift ? What causes chemical shift in NMR spectroscopy. 3
- (c) Which of the following compounds will show $n \rightarrow \pi^*$ and/or $\pi \rightarrow \pi^*$ transitions ? 4
- (i) Chlorohexane
- (ii) Acetone
- (iii) Ethylene
- (iv) Nitrobenzene
2. (a) Give one example each of an IR - inactive and Raman active molecule. 2
- (b) The rotational Raman spectrum of H_2 gas is found to consist of a series of stokes and anti stoke lines the first of which appears at 3459cm^{-1} relative to the source of excitation. Calculate the bond distance of H_2 . 3

- (c) Which fundamental modes of vibration would you expect to observe in the infrared absorption spectrum of H_2O ? 3
- (d) The ESR spectrum of H atom studied in an ESR spectrometer operating at 9.3 GHz shows two lines at 3770 G and 3044 G. Calculate hyperfine splitting constant (HSC) for H atom. 2
3. (a) The rotational spectrum for HCl shows a series of lines separated by 20.6 cm^{-1} . Find the moment of inertia and the internuclear distance. 4
- (b) Explain the low resolution and high resolutions PMR spectra of pure ethyl alcohol. Discuss the spectra of ethyl alcohol in presence of D_2O . 4
- (c) By drawing appropriate electronic energy diagram, discuss briefly the phenomenon, of phosphorescence. 2
4. (a) A sample of $^{14}\text{N}_2$ was excited by a 540.8 nm, Ar laser in Raman spectrophotometer. Given that $\bar{\omega}_0$ for N_2 is 2330 cm^{-1} for vibration. Evaluate the position of the stokes and antistokes bands in the Raman spectrum. 5
- (b) The $\pi \rightarrow \pi^*$ transition in ethene and butadiene occurs respectively at 170 and 220 nm. Give non-mathematical explanation for this observation. 2
- (c) Which of the following systems will show ESR spectrum ? 3
- (i) H (ii) H_2 (iii) Na^+
 (iv) Cl^- (v) $\cdot\text{CH}_3$ (vi) NO_2

5. (a) Write an expression for vibrational energy of a diatomic molecule taking it as a simple harmonic oscillator. Sketch the vibrational energy levels of such a molecule. 4
- (b) What are the selections rules for rotation-vibration Raman spectra of diatomic molecules ? Describe rotation - vibration Raman spectrum obtained for a diatomic molecule. 4
- (c) Give the block diagram of a microwave spectrometer. 2
6. (a) Derive an expression $\nu_{\text{osc}} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{m}}$ using $f = ma$. 3
- (b) What do the letters *S* and *P* and the numbers 3 and 4 signify in $^4S_{1/2}$ and 3P_2 ? 3
- (c) Discuss the fragmentation of $\text{CH}_3\text{CH}_2\overset{\text{OH}}{\underset{|}{\text{C}}}\text{CH}_3$ and explain the peaks originating in its mass spectrum. 4
7. (a) Explain charge transfer spectra with suitable example. 3
- (b) A non-acidic compound having molecular formula $\text{C}_7\text{H}_8\text{O}$ showed the following spectral data : 7
- UV : λ_{max} 254 and 202 nm
 IR : 3420, 3064, 1500 and 1455 cm^{-1} .
 NMR : $\delta(\text{CDCl}_3)$ 1.85 ($s_1\text{H}$), 4.7 ($s_1\text{2H}$) and 7.25 ($s_1\text{5H}$)
 Deduce the structure of the compound using the above spectral data.

विज्ञान स्नातक (बी. एस.सी.)

सत्रांत परीक्षा

दिसम्बर, 2013

रसायन विज्ञान

सी.एच.ई.-10 : स्पेक्ट्रमिकी

समय : 2 घण्टे

अधिकतम अंक : 50

नोट : किन्हीं पाँच प्रश्नों के उत्तर दीजिए। लॉग सारणियों और नॉन-प्रोग्रामीय कैल्कुलेटर्स की अनुमति है।

$$h = 6.626 \times 10^{-34} \text{ Js}$$

$$c = 2.998 \times 10^8 \text{ ms}^{-1}$$

1. (a) उचित उदाहरण देते हुए किसी कार्बनिक मूलक के इ.एस.आर. स्पेक्ट्रम में अतिसूक्ष्म अन्योन्यक्रिया की व्याख्या कीजिए। 3
- (b) रासायनिक सूती क्या होती है ? एन.एम.आर. स्पेक्ट्रमिकी में रासायनिक सूति किस कारण होती है ? 3
- (c) निम्नलिखित में से कौन-से यौगिक $n \rightarrow \pi^*$ या/ और $\pi \rightarrow \pi^*$ संक्रमण प्रदर्शित करेंगे ? 4
 - (i) क्लोरोहेक्सेन
 - (ii) ऐसीटोन
 - (iii) एथिलीन
 - (iv) नाइट्रोबेन्जीन
2. (a) अवरक्त-निष्क्रिय और रामन-सक्रिय अणुओं का एक-एक उदाहरण दीजिए। 2

- (b) H_2 गैस के घूर्णी रामन स्पेक्ट्रम में स्टोक्स और प्रति स्टोक्स रेखाओं की एक शृंखला प्राप्त होती है जिसमें उत्तेजन के स्रोत के संदर्भ में प्रथम रेखा 3459cm^{-1} पर प्राप्त होती है। H_2 की आबंध लंबाई परिकलित कीजिए। 3
- (c) H_2O के अवरक्त अवशोषण स्पेक्ट्रम में कम्पन की कौन-सी मूल विधाएँ उपस्थित होती हैं? 3
- (d) 9.3 GHz वाले इ.एस.आर. स्पेक्ट्रममापी पर H परमाणु के इ.एस.आर. स्पेक्ट्रम में 3770 G और 3044 G पर दो रेखाएँ प्राप्त होती हैं। H परमाणु के अतिसूक्ष्म विपाटन स्थिरांक (Hyperfine Splitting Constant) परिकलित कीजिए। 2
3. (a) HCl के घूर्णन स्पेक्ट्रम में 20.6cm^{-1} की दूरी वाली रेखाओं की शृंखला प्राप्त होती है। जड़त्व आघूर्ण और अंतरनाभिकीय दूरी ज्ञात कीजिए। 4
- (b) एथानॉल के लिय निम्न विभेदन और उच्च विभेदन वाले एन.एम.आर. स्पेक्ट्रम की व्याख्या कीजिए। D_2O की उपस्थिति में भी एथानॉल के एन.एम.आर. स्पेक्ट्रम की चर्चा कीजिए। 4
- (c) उचित इलेक्ट्रॉनिक ऊर्जा आरेख की सहायता से स्फुरदीप्ति परिघटना की चर्चा कीजिए। 2
4. (a) रामन स्पेक्ट्रममापी में $^{14}N_2$ प्रतिदर्श को 540.8 nm, के ऑर्गन लेसर द्वारा किरणित किया गया। N_2 के लिए कम्पन के लिए $\bar{\omega}_0$ का मान 2330cm^{-1} है। रामन स्पेक्ट्रम में स्टोक्स और प्रति-स्टोक्स रेखाओं की स्थिति ज्ञात कीजिए। 5

- (b) इथीन और ब्यूटाडाईन के लिए $\pi \rightarrow \pi^*$ संक्रमण क्रमशः 170 और 220nm पर प्राप्त होते हैं। इस प्रेक्षण की बिना किसी गणितीय व्यंजक के व्याख्या कीजिए। 2
- (c) निम्नलिखित में से कौन-से निकाय ई.एस.आर. स्पेक्ट्रम प्रदर्शित करेंगे ? 3
- (i) H (ii) H₂ (iii) Na⁺
 (iv) Cl⁻ (v) CH₃ (vi) NO₂
5. (a) किसी द्वि-परमाणुक अणु के प्रसंवादी दोलित्र मानते हुए कम्पनिक ऊर्जा का व्यंजक लिखिए। इस प्रकार के अणु के लिए कम्पनिक ऊर्जा-स्तर भी आरेखित कीजिए। 4
- (b) किसी द्वि-परमाणुक अणु के कम्पन-घूर्णन रामन स्पेक्ट्रम के लिए वरण नियम क्या होते हैं ? किसी द्वि-परमाणुक अणु के कम्पन-घूर्णन रामन स्पेक्ट्रम की व्याख्या कीजिए। 4
- (c) सूक्ष्म-तरंग स्पेक्ट्रममापी का खंड-आरेख बनाइए। 2
6. (a) व्यंजक $f = ma$ से आरंभ करके $\nu_{\text{osc}} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{m}}$ को व्युत्पन्न कीजिए। 3
- (b) $^4S_{1/2}$ और 3P_2 में S और P तथा 3 और 4 क्या निरूपित करते हैं ? 3
- (c) $\text{CH}_3\text{CH}_2\overset{\text{OH}}{\text{CH}}\text{CH}_3$ के लिए विखंडन की चर्चा कीजिए और इससे इसके द्रव्यमान स्पेक्ट्रम में प्राप्त शिखरों की व्याख्या कीजिए। 4

7. (a) आवेश स्थानांतरण स्पेक्ट्रम की उचित उदाहरण देते हुए 3
व्याख्या कीजिए।
- (b) एक यौगिक जिसका अणु सूत्र $C_7H_8O_2$ है और जो 7
अम्लीय नहीं है, निम्नलिखित स्पेक्ट्रमी आंकड़े
दर्शाता है :
पराबैंगनी : λ_{\max} 254 और 202 nm
अवशक्त : 3420, 3064, 1500 और 1455 cm^{-1} .
एन.एम.आर. : $\delta(\text{CDCl}_3)$ 1.85 (एकक, 1H),
4,7 (एकक, 2H) और 7.25 (एकक, 5H).
ऊपर दिए गए स्पेक्ट्रमी आंकड़ों के प्रयोग द्वारा यौगिक
की संरचना निर्धारित कीजिए।
-