

No. of Printed Pages : 12

**CHE-10**

**BACHELOR OF SCIENCE (B. SC.)**

**Term-End Examination**

**December, 2020**

**CHE-10 : SPECTROSCOPY**

*Time : 2 Hours*

*Maximum Marks : 50*

---

**Note :** (i) *Attempt any five questions.*

(ii) *All questions carry equal marks.*

(iii) *Use of Log tables and Non-programmable calculators is allowed.*

---

---

1. (a) If the ratio of mass of electron to mass of nucleus for deuterium is 0.0002715, calculate the value of Rydberg constant for deuterium. Use  $R_{\infty} = 1.09737 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$ . Also calculate the wave number for the first Balmer line for deuterium. 3
- (b) Derive the term symbol for D state of H atom. 3

- (c) Draw the structure of  $\text{PCl}_5$ . List the elements of symmetry present in it . To which point group does it belong ? 4
2. (a) From the rotational spectra of  $^{14}\text{NO}$  and  $^{15}\text{NO}$ , it was found that  $\frac{B}{B'} = 1.0361$ , where B and B' are rotational constants for  $^{14}\text{NO}$  and  $^{15}\text{NO}$ , respectively. Calculate the atomic mass of  $^{15}\text{N}$  if the atomic masses of  $^{14}\text{N}$  and O are 14.004 and 15.9994, respectively. 3
- (b) Name the sources of radiation for the following spectrometers : 2
- (i) Microwave
  - (ii) IR
  - (iii) Raman
  - (iv) UV
- (c) What is the criterion for a molecule to exhibit vibrational spectrum ? How many vibrational degrees of freedom does  $\text{H}_2\text{O}$  molecule have ? Discuss the various normal modes of vibration corresponding to them. 5

3. (a) What are the selection rules for rotational Raman spectrum ? Show that the formula for rotational Raman spectral line is given by :

$$\Delta E_{\text{rot}} = B(4J + 6) \text{ cm}^{-1}$$

for linear molecules. 3

- (b) What is anharmonicity ? Explain its effect on the vibrational spectrum of a diatomic molecule. 3

- (c) The IR and Raman spectral data for  $\text{N}_2\text{O}$  are given below :

$\bar{\nu} / \text{cm}^{-1}$	IR	Raman
589	Strong; PQR band	–
1285	Very strong; PR band	Very strong
2224	Very strong; PR band	Strong

Deduce the structure of  $\text{N}_2\text{O}$  giving appropriate explanation. 4

4. (a) What is Franck-Condon principle ? Discuss its application to the systems, where  $R'_e > R_e$  and  $R'_e \gg R_e$  (where  $R_e$  and  $R'_e$  stand for internuclear distance in the ground and excited states). 4
- (b) Discuss the various types of electronic transitions possible in polyatomic molecules with the help of a suitable diagram. 3
- (c) Give the expression for the vibrational energy for a diatomic molecule behaving as a harmonic oscillator. Also draw its energy levels. 3
5. (a) Discuss the effect of nature of solvent (polar/non-polar) on  $\pi - \pi^*$  and  $n - \pi^*$  transitions in polyatomic molecules. 3
- (b) Discuss the sampling of solids for recording IR spectra. 3

- (c) Explain the origin of peaks at  $m/z$  45, 59 and 73 in the mass spectrum of 2-butanol. Which will be the most abundant peak ? 4
6. (a) Briefly explain the chemical ionisation method used in mass spectrometry. 3
- (b) The chemical shift of protons in a test sample occurs at  $\delta$  2.4 ppm. What is the difference in Hz between TMS and test proton resonances when measured in a 100 MHz spectrometer ? By how much will it increase when measured in a 200 MHz spectrometer ? 3
- (c) Draw and explain the  $^1\text{H-NMR}$  spectrum of ethanal. 4
7. (a) Draw and explain the origin of signals observed in the ESR spectrum of methyl radical. 4
- (b) Deduce the structure of an organic compound having molecular formula,  $\text{C}_9\text{H}_{10}\text{O}_2$  and exhibiting the following spectral data :

IR spectrum : 1740, 1220, 1600-1400, 749  
and 697  $\text{cm}^{-1}$

NMR spectrum :  $\delta$  ( $\text{CDCl}_3$ ) :

1.96 (s, 3H), 5.0 (s, 2H), 7.22 (s, 5H)

Mass spectrum : 150, 91, 43.

Also relate the spectral data to the  
structural features of the compound.      6

## CHE-10

विज्ञान स्नातक ( बी. एस-सी. )

सत्रांत परीक्षा

दिसम्बर, 2020

सी. एच. ई.-10 : स्पेक्ट्रमिकी

समय : 2 घण्टे

अधिकतम अंक : 50

नोट : (i) किन्हीं पाँच प्रश्नों के उत्तर दीजिए।

(ii) सभी प्रश्नों के अंक समान हैं।

(iii) लॉग सारणियों तथा अप्रोग्रामीय कैल्कुलेटरों के उपयोग की अनुमति है।

1. (क) यदि ड्यूटीरियम के नाभिक के द्रव्यमान और उसके इलेक्ट्रॉन के द्रव्यमान का अनुपात 0.0002715 हो, तो ड्यूटीरियम के लिए रिडबर्ग स्थिरांक का मान परिकलित कीजिए।  $R_{\infty} = 1.09737 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$  का उपयोग कीजिए। ड्यूटीरियम की पहली बामर रेखा के लिए तरंग संख्या भी परिकलित कीजिए। 3

(ख) हाइड्रोजन परमाणु की D अवस्था के लिए पद-प्रतीक व्युत्पन्न कीजिए। 3

(ग)  $\text{PCl}_5$  की संरचना आरेखित कीजिए। इसमें उपस्थित सममिति तत्वों को सूचीबद्ध कीजिए। यह किस बिन्दु समूह से संबंधित है ? 4

2. (क)  $^{14}\text{NO}$  और  $^{15}\text{NO}$  के घूर्णन स्पेक्ट्रमों से पाया गया कि  $\frac{B}{B'} = 1.0361$ , जिसमें B और B' क्रमशः  $^{14}\text{NO}$  और  $^{15}\text{NO}$  के घूर्णन स्थिरांक हैं। यदि  $^{14}\text{N}$  और O के परमाणु द्रव्यमान क्रमशः 14.004 और 15.9994 हों, तो  $^{15}\text{N}$  का परमाणु द्रव्यमान परिकलित कीजिए। 3

(ख) निम्नलिखित स्पेक्ट्रममापियों के लिए विकिरण के स्रोत का नाम लिखिए : 2

- (i) सूक्ष्म तरंग
- (ii) अवरक्त
- (iii) रमन
- (iv) पराबैंगनी



(ग) किसी अणु के लिए कम्पनिक स्पेक्ट्रम दर्शाने के लिए क्या आवश्यक शर्त होती है ?  $H_2O$  अणु के लिए कम्पनिक स्वतंत्रता की कोटियों की संख्या कितनी होगी ? उनके संगत विभिन्न सामान्य कम्पन विधाओं की चर्चा कीजिए। 5

3. (क) घूर्णी रमन स्पेक्ट्रम के लिए क्या वरण नियम हैं ? दर्शाइए कि किसी रैखिक अणु के लिए घूर्णी रमन स्पेक्ट्रमी रेखा का सूत्र निम्नलिखित द्वारा व्यक्त किया जाता है :

$$\Delta E_{\text{घूर्णन}} = B (4J + 6) \text{ cm}^{-1}$$

(ख) अप्रसंवादिता क्या होती है ? किसी द्विपरमाणुक अणु के कम्पनिक स्पेक्ट्रम पर इसके प्रभाव की व्याख्या कीजिए। 3

(ग)  $N_2O$  के अवरक्त और रमन स्पेक्ट्रमी आँकड़े नीचे दिए गए हैं :

$\bar{\nu} / \text{cm}^{-1}$	अवरक्त	रामन
589	प्रबल PQR बैंड	—
1285	अत्यंत प्रबल PR बैंड	अत्यंत प्रबल
2224	अत्यंत प्रबल PR बैंड	प्रबल

उचित व्याख्या करते हुए  $N_2O$  की संरचना निर्धारित कीजिए। 4

4. (क) फ्रांक-कॉन्डन सिद्धान्त क्या होता है ? उन निकायों पर इसके अनुप्रयोग की चर्चा कीजिए जिनमें  $R'_e > R_e$  और  $R'_e \gg R_e$  हो। जहाँ  $R_e$  और  $R'_e$  क्रमशः मूल अवस्था और उत्तेजित अवस्था में अंतरानाभिकीय दूरियों को व्यक्त करते हैं। 4
- (ख) उचित चित्र की सहायता से किसी बहुपरमाणुक अणु में संभव विभिन्न प्रकार के इलेक्ट्रॉनिक संक्रमणों की चर्चा कीजिए। 3
- (ग) आवर्ती दोलक के समान व्यवहार करने वाले किसी द्विपरमाणुक अणु के लिए कम्पनिक ऊर्जा का व्यंजक लिखिए। इसके ऊर्जा स्तरों को भी आरेखित कीजिए। 3
5. (क) बहुपरमाणुक अणुओं में  $\pi \rightarrow \pi^*$  और  $n \rightarrow \pi^*$  संक्रमणों पर विलायक की प्रकृति (ध्रुवीय/अध्रुवी) के प्रभाव की चर्चा कीजिए। 3
- (ख) अवरक्त स्पेक्ट्रमों के अभिलेखन के लिए ठोसों के प्रतिचयन की चर्चा कीजिए। 3

- (ग) 2-ब्यूटेनॉल के द्रव्यमान स्पेक्ट्रम में  $m/z$  45, 59 और 73 पर प्रदर्शित शिखरों की उत्पत्ति की व्याख्या कीजिए। इनमें से सबसे अधिक प्रमुख शिखर कौन-सा होगा ? 4
6. (क) द्रव्यमान स्पेक्ट्रममिति में प्रयुक्त रासायनिक आयनन विधि की संक्षिप्त व्याख्या कीजिए। 3
- (ख) किसी परीक्षण प्रतिदर्श में प्रोटॉनों की रासायनिक सूति  $\delta$  2.4 ppm पर होती है। 100 MHz स्पेक्ट्रममापी द्वारा मापने पर टी. एम. एस. और परीक्षण प्रतिदर्श के प्रोटॉनों के अनुनादों के बीच कितना अन्तर होता है ? यदि 200 MHz वाले स्पेक्ट्रममापी द्वारा मापन किया जाए, तो इसमें कितनी वृद्धि होगी ? 3
- (ग) एथेनैल के  $^1\text{H}$ -एन. एम. आर. स्पेक्ट्रम को आरेखित कीजिए और उसकी व्याख्या कीजिए। 4
7. (क) मेथिल मूलक के ई. एस. आर. स्पेक्ट्रम में प्रेक्षित संकेतों को आरेखित कीजिए और उनकी उत्पत्ति की व्याख्या कीजिए। 4

(ख) आण्विक सूत्र,  $C_9H_{10}O_2$  वाले किसी कार्बनिक यौगिक की संरचना निर्धारित कीजिए जो निम्नलिखित स्पेक्ट्रमी आँकड़े प्रदर्शित करता है :

अवरक्त स्पेक्ट्रम : 1740, 1220, 1600-1400,  
749 और  $697\text{ cm}^{-1}$ ।

एन. एम. आर. स्पेक्ट्रम : ( $\delta, CDCl_3$ ) :

1.96 (एकक, 3H), 5.0 (एकक, 2H), 7.22  
(एकक, 5H),

द्रव्यमान स्पेक्ट्रम : 150, 91, 43।

इन स्पेक्ट्रमी आँकड़ों को यौगिक के संरचनात्मक अभिलक्षणों के साथ भी संबंधित कीजिए।