

BACHELOR OF SCIENCE (B.Sc.)

Term-End Examination

December, 2016

03024

CHEMISTRY

CHE-10 : SPECTROSCOPY

Time : 2 hours

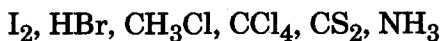
Maximum Marks : 50

Note :

- (i) *Attempt any five questions. All questions carry equal marks.*
- (ii) *Use of log tables and non-programmable scientific calculators is allowed.*

-
1. (a) The CH_3Cl molecule belongs to the point group C_{3v} . List the symmetry elements of the group and locate them in the molecule. 3
- (b) Write the terms and term symbols arising from the excited state configuration of carbon $1s^2 2s^2 2p^1 3p^1$. 4
- (c) Compare the rotational energy level diagrams for a rigid and a non-rigid rotor. 3

2. (a) What is the criterion for a molecule to exhibit IR spectrum ? Which of the following molecules will show IR spectra ? 3



- (b) The fundamental vibrational transition of $^{35}Cl_2$ appears at 565 cm^{-1} . Calculate the force constant of the bond. (Use atomic mass of ^{35}Cl as 35u) 3

- (c) Explain giving reasons : 4

(i) The $>C=O$ frequency in the IR spectrum of acyl halides is higher than that in alkyl esters.

(ii) The $>C=O$ frequency in the IR spectrum of methyl acetate is less than that in phenyl acetate.

3. (a) What are vibrational-rotational spectra ? Draw a typical vibrational-rotational spectrum of a diatomic molecule. 3

- (b) What is the mutual exclusion principle ? 2

- (c) For N_2O , the following spectroscopic data are available :

| cm^{-1} | <i>IR</i> | <i>Raman</i> |
|-----------|--------------|------------------------|
| 589 | Active (PQR) | Inactive |
| 1285 | Active (PR) | Active, polarized |
| 2224 | Active (PR) | Active, depolarized |

- Predict its geometry and assign the bands to various vibrations. 5

4. (a) Draw a schematic diagram indicating the possible electronic transitions in polyatomic molecules. 3
- (b) The limit of continuum of absorption for iodine gas occurs at 499.5 nm. The excitation energy for iodine atom is 0.94 eV. Compute the ground state dissociation energy of I_2 . (1 eV = 1.6×10^{-12} erg) 3
- (c) What is a charge transfer spectrum? Explain with the help of a suitable example. 4
5. (a) How is an ESR spectrum presented? What is the advantage of such a presentation? 3
- (b) What do you understand by the term "chemical shift"? List the various factors affecting chemical shift. 3
- (c) An organic compound with molecular formula C_8H_{10} gives three NMR signals at δ 7 ppm (singlet), 2.4 ppm (quartet) and 1.2 ppm (triplet) with relative intensities 5 : 2 : 3 respectively. Identify the structure of the compound. 4
6. (a) What kind of species give rise to an ESR spectrum? Which of the following would show an ESR spectrum? 3
- (i) $\cdot CH_3$ (ii) N_2 (iii) CO_2 (iv) $\cdot C_6H_6^-$

- (b) Describe any one method of ionization used in mass spectrometry. 3
- (c) The mass spectrum of butanal shows prominent peaks at m/z 72, 57, 44 and 29. Assign these peaks to respective fragments. 4
7. (a) Draw a block diagram of an absorption spectrometer. Name the sources used in any *two* of the following : 4
- (i) Microwave spectrometer
 - (ii) IR spectrometer
 - (iii) Raman spectrometer
- (b) A compound having molecular formula C_2H_7NO showed the following spectral data :
- Mass spectrum : (m/z) 61, 30
- IR spectrum (cm^{-1}) : 3100 – 3400, 2920, 2850
- NMR spectrum : (δ) 2.4 (m, 3H),
2.9 (t, 2H), 3.7 (t, 2H)
- Predict the structure of the compound using the above spectral data. 6
-

विज्ञान स्नातक (बी.एस सी.)

सत्रांत परीक्षा

दिसम्बर, 2016

रसायन विज्ञान

सी.एच.ई.-10 : स्पेक्ट्रमिकी

समय : 2 घण्टे

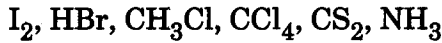
अधिकतम अंक : 50

नोट:

- (i) किन्हीं पाँच प्रश्नों के उत्तर दीजिए । सभी प्रश्नों के अंक समान हैं ।
- (ii) लॉग सारणियों तथा अप्रोग्रामीय वैज्ञानिक कैल्कुलेटरों के प्रयोग करने की अनुमति है ।

1. (क) CH_3Cl अणु C_{3v} बिंदु समूह से संबंधित होता है । इस बिंदु समूह के सममिति तत्त्वों की सूची बनाइए और इन सममिति तत्त्वों को अणु में दर्शाइए । 3
- (ख) कार्बन की उत्तेजित अवस्था में विन्यास $1s^2 2s^2 2p^1 3p^1$ के लिए पद तथा पद-प्रतीक लिखिए । 4
- (ग) किसी दृढ़-घूर्णक और अदृढ़-घूर्णक के घूर्णन ऊर्जा स्तर आरेखों की तुलना कीजिए । 3

2. (क) किसी अणु के लिए अवरक्त स्पेक्ट्रम प्रदर्शित करने के लिए क्या शर्त होती है ? निम्नलिखित में से कौन-से अणु अवरक्त स्पेक्ट्रम प्रदर्शित करेंगे ? 3



- (ख) $^{35}Cl_2$ के लिए मूल कम्पनिक संक्रमण 565 cm^{-1} पर प्रदर्शित होता है । आबंध का बल-नियतांक परिकलित कीजिए । (^{35}Cl का परमाणु द्रव्यमान = $35u$ प्रयोग कीजिए) 3

- (ग) कारण सहित व्याख्या कीजिए : 4

(i) ऐल्किल एस्टर्स की अपेक्षा ऐसिल हैलाइडों की अवरक्त स्पेक्ट्रम में $>C=O$ आवृत्ति अधिक होती है ।

(ii) फ़ेनिल ऐसीटेट की अपेक्षा मेथिल ऐसीटेट की अवरक्त स्पेक्ट्रम में $>C=O$ आवृत्ति कम होती है ।

3. (क) कम्पनिक-घूर्णन स्पेक्ट्रम क्या होते हैं ? किसी द्वि-परमाणुक अणु के लिए प्रारूपिक कम्पनिक-घूर्णन स्पेक्ट्रम आरेखित कीजिए । 3

- (ख) परस्पर अपवर्जन सिद्धांत क्या है ? 2

- (ग) N_2O के लिए, निम्नलिखित स्पेक्ट्रमी आँकड़े प्राप्त हुए :

| cm^{-1} | अवरक्त | रामन |
|-----------|--------------|-------------------|
| 589 | सक्रिय (PQR) | अक्रिय |
| 1285 | सक्रिय (PR) | सक्रिय, ध्रुवित |
| 2224 | सक्रिय (PR) | सक्रिय, विध्रुवित |

इस अणु की ज्यामिति (आकृति) का अनुमान लगाइए और बैंडों को विभिन्न कम्पनों से संबंधित कीजिए । 5

4. (क) बहुपरमाणुक अणुओं में संभावित इलेक्ट्रॉनिक संक्रमणों का व्यवस्था आरेख बनाइए । 3
- (ख) आयोडीन गैस के लिए सांतत्यक अवशोषण सीमा 499.5 nm पर प्राप्त होती है । आयोडीन परमाणु के लिए उत्तेजन ऊर्जा 0.94 eV है । I₂ के लिए मूल-अवस्था वियोजन ऊर्जा अभिकलित कीजिए ।
(1 eV = 1.6 × 10⁻¹² erg) 3
- (ग) आवेश स्थानांतरण स्पेक्ट्रम क्या होता है ? एक उपयुक्त उदाहरण की सहायता से व्याख्या कीजिए । 4
5. (क) ई.एस.आर. स्पेक्ट्रम को किस प्रकार प्रस्तुत किया जाता है ? इस प्रकार के प्रस्तुतीकरण के क्या लाभ हैं ? 3
- (ख) “रासायनिक सूति” पद से आप क्या समझते हैं ? रासायनिक सूति को प्रभावित करने वाले विभिन्न कारकों की सूची बनाइए । 3
- (ग) C₈H₁₀ अणु सूत्र वाला एक कार्बनिक यौगिक तीन एन.एम.आर. संकेत, δ 7 ppm (एकक), 2.4 ppm (चतुष्क) और 1.2 ppm (त्रिक) पर प्रदर्शित करता है जिनकी आपेक्षिक तीव्रताएँ क्रमशः 5 : 2 : 3 हैं । यौगिक की संरचना की पहचान कीजिए । 4
6. (क) किस प्रकार की स्पीशीज़ ई.एस.आर. स्पेक्ट्रम प्रदर्शित करती हैं ? निम्नलिखित में से कौन-से ई.एस.आर. स्पेक्ट्रम प्रदर्शित करते हैं ? 3
- (i) [•]CH₃ (ii) N₂ (iii) CO₂ (iv) [•]C₆H₆⁻

- (ख) द्रव्यमान स्पेक्ट्रममिति में प्रयुक्त आयनन की किसी एक विधि का वर्णन कीजिए । 3
- (ग) ब्यूटेनैल के द्रव्यमान स्पेक्ट्रम में m/z 72, 57, 44 और 29 पर प्रमुख शिखर प्राप्त होते हैं । इन शिखरों को संबंधित खंडों से संबद्ध कीजिए । 4
7. (क) किसी अवशोषण स्पेक्ट्रममापी का खंड आरेख बनाइए । निम्नलिखित में से किन्हीं दो में प्रयुक्त स्रोतों के नाम बताइए : 4
- (i) सूक्ष्मतरंग स्पेक्ट्रममापी
(ii) अवरक्त स्पेक्ट्रममापी
(iii) रामन स्पेक्ट्रममापी
- (ख) C_2H_7NO अणु सूत्र वाले एक यौगिक के लिए निम्नलिखित स्पेक्ट्रमी आँकड़े प्राप्त हुए :
द्रव्यमान स्पेक्ट्रम : (m/z) 61, 30
अवरक्त स्पेक्ट्रम (cm^{-1}) : 3100 – 3400, 2920, 2850
एन.एम.आर.स्पेक्ट्रम : (δ) 2.4 (बहुक, 3H),
2.9 (त्रिक, 2H), 3.7 (त्रिक, 2H)
उपर्युक्त स्पेक्ट्रमी आँकड़ों के आधार पर यौगिक की संरचना का अनुमान लगाइए । 6