

No. of Printed Pages : 15

**CHE-10****BACHELOR OF SCIENCE (B. SC.)****Term-End Examination****December, 2021****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.

(iv) Electronic charge,  $e = 1.6 \times 10^{-19} \text{C}$ ,Mass of electron =  $9.1 \times 10^{-31} \text{kg}$ , $h = 6.626 \times 10^{-34} \text{Js}$ , $\epsilon_0 = 8.854 \times 10^{-12} \text{C}^2 \text{N}^{-1} \text{m}^{-2}$ , $c = 3 \times 10^8 \text{ms}^{-1}$ .

1. (a) Derive the term symbol for the excited state of Helium atom with electronic configuration  $1s^1 2p^1$ . How many lines do you expect in the atomic spectrum of He for transition from ground state to this excited state ? Give reasons. 4
- (b) Write the symmetry elements present in  $\text{NH}_3$  molecule. Draw suitable diagrams. 3
- (c) Discuss the effect of conjugation on the electronic transitions in a carbonyl group with suitable energy level diagram. 3
2. (a) The spacing between the lines in rotational spectrum of  $^1\text{H}^{35}\text{Cl}$  is found to be  $21.18 \text{ cm}^{-1}$ . Calculate the bond length of HCl. Consider the atomic masses of H and Cl to be 1 and 35, respectively. 4
- (b) Which of the following molecule(s) will have a net dipole moment ? Give reasons for your answer : 2
  - (i)  $\text{SF}_6$
  - (ii)  $\text{NH}_3$

[ 3 ]

CHE-10

- (c) Which of the following molecules are microwave active ? Why ? 2

CHCl<sub>3</sub>, CH<sub>4</sub>, CO<sub>2</sub> and H<sub>2</sub>O.

- (d) Aldehydes, in general, have higher carbonyl frequency in IR spectra than corresponding ketones. Give reason. 2

3. (a) SiF<sub>2</sub> vapour belongs to C<sub>2v</sub> group. The frequencies for its symmetric stretching, symmetric bending and antisymmetric stretching modes are 855 cm<sup>-1</sup>, 345 cm<sup>-1</sup> and 872 cm<sup>-1</sup> respectively. Calculate its total zero point energy. 3

- (b) Show that the ratio of vibrational frequencies of fundamental absorption is given by  $\frac{\nu_{\text{HCl}}}{\nu_{\text{DCl}}} = \sqrt{2}$ . Given that atomic masses of H, D and Cl are 1, 2 and 35.5, respectively. 3

P. T. O.

[ 4 ]

CHE-10

- (c) Draw a block diagram of an IR spectrometer and describe in brief the role of each component. 4

4. (a) Calculate the position of Raman vibrational lines for C-H stretching of an alkane at 2900 cm<sup>-1</sup>, if Hg radiation of 435.8 nm is used. 2

- (b) C<sub>2</sub>H<sub>2</sub> exhibits two IR bands and three Raman bands, none of them occur at the same wave-number. One of the IR bands shows a simple PR structure. Comment on the structure of C<sub>2</sub>H<sub>2</sub> giving reason. 3

- (c) With the help of suitable diagrams, explain the following : 5

- (i) Predissociation  
(ii) Phosphorescence

[ 5 ]

CHE-10

5. (a) The dissociation energy for chlorine molecule in the ground state is 239.42 kJ mol<sup>-1</sup>. If the excitation energy for chlorine is 881 cm<sup>-1</sup>, compute the continuum vibrational wave-number for chlorine molecule. 4
- (b) What do you understand by the term 'band pass width' ? 2
- (c) Why are e.s.r. spectra presented as derivative spectra ? 2
- (d) Which of the following will have higher  $\lambda_{\max}$  and why ? 2
- 1, 3-butadiene and 1, 5-hexadiene.
6. (a) Calculate the value of nuclear magneton for proton. Given : 3
- Mass of proton =  $1.672 \times 10^{-27}$  kg.
- (b) Explain the origin of peaks at  $m/z$  114, 85, 71 and 57 in mass spectrum of *n*-octane. 4

[ 6 ]

CHE-10

- (c) Give reasons : 3
- (i) Mercury (II) iodide is brick red in colour.
- (ii) The aqueous solution of NiSO<sub>4</sub> which is pale green turns deep blue on addition of ethylene diamine.
7. (a) Derive the following formula :  $2\frac{1}{2}$
- $$h\nu = g_N \beta_N B_Z \text{ starting from}$$
- $$\nu = \frac{\gamma B_Z}{2\pi}$$
- (b) Draw and explain the e.s.r. spectrum of H atom.  $2\frac{1}{2}$
- (c) Using the following data for a compound, arrive at its structure : 5
- Molecular weight : 108 (not an acidic compound)
- UV spectrum :  $\lambda_{\max}$  at 254 nm and 202 nm

P. T. O.

[ 7 ]

CHE-10

IR spectrum : 3420 (broad), 3064, 1500 and  
1455  $\text{cm}^{-1}$

NMR spectrum : ( $\delta$ ,  $\text{CDCl}_3$ ) : 3, 85 (s, 1H),  
4.55 (s, 2H) and 7.25 (s, 5H)

Mass spectrum :  $m/z$  108 (molecular ion)  
79 (base peak).

Prominent M-1 peak. Large peaks at  $m/z$   
77 and 51.

Also correlate the spectral data with  
structural units present in the compound. 5

[ 8 ]

CHE-10

**CHE-10**

विज्ञान स्नातक ( बी. एस-सी. )

सत्रांत परीक्षा

दिसम्बर . 2021

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 कैल्कुलेटर्स के  
उपयोग की अनमति है।

(iv) इलेक्ट्रॉन आवेश,  $e = 1.6 \times 10^{-19} \text{C}$ ,  
इलेक्ट्रॉन का द्रव्यमान  $= 9.1 \times 10^{-31} \text{kg}$ ,

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

$\epsilon_0 = 8.854 \times 10^{-12} \text{C}^2 \text{N}^{-1} \text{m}^{-2}$

$c = 3 \times 10^8 \text{ms}^{-1}$ ।

P. T. O.

1. (क) इलेक्ट्रॉनिक विन्यास  $1s^1 2s^1$  वाली हीलियम की उत्तेजित अवस्था के लिए पद-प्रतीक व्युत्पन्न कीजिए। हीलियम के परमाणु स्पेक्ट्रम में, मूल अवस्था से इस उत्तेजित अवस्था में संक्रमण के लिए कितनी रेखाएँ अपेक्षित हैं ? कारण बताइए। 4
- (ख)  $\text{NH}_3$  अणु में उपस्थित सममिति तत्वों को बताइए। उचित चित्र बनाइए। 3
- (ग) उचित ऊर्जा-स्तर चित्र की सहायता से कार्बोनिल समूह के इलेक्ट्रॉनिक संक्रमणों पर संयुग्मन के प्रभाव की चर्चा कीजिए। 3
2. (क)  $^1\text{H } ^{35}\text{Cl}$  के घर्षण स्पेक्ट्रम में रेखाओं के बीच की दूरी  $21.18 \text{ cm}^{-1}$  है।  $\text{HCl}$  की आबंध लम्बाई परिकलित कीजिए। H और Cl के लिए परमाणु द्रव्यमान, क्रमशः 1 और 35 लीजिए। 4

- (ख) निम्नलिखित अणुओं में से किस/किनका नेट द्विध्रुव आघर्षण होगा ? अपने उत्तर का कारण दीजिए : 2
- (i)  $\text{SF}_6$   
(ii)  $\text{NH}_3$
- (ग) निम्नलिखित अणुओं में से कौन-से सक्षम तरंग सक्रिय होंगे ? क्यों ? 2
- $\text{CHCl}_3, \text{CH}_4, \text{CO}_2$  और  $\text{H}_2\text{O}$
- (घ) अवरक्त स्पेक्ट्रम में, ऐलिडहाइडों की सामान्यतः संगत कीटोनों की तलना में उच्चतर कार्बोनिल आवृत्ति होती है। इसका कारण बताइए। 2
3. (क)  $\text{SiF}_2$  वाष्प का  $\text{C}_{2v}$  समूह होता है। इसके सममित तनन, सममित बंकन और प्रतिसममित तनन की आवृत्तियाँ क्रमशः  $855 \text{ cm}^{-1}$ ,  $345 \text{ cm}^{-1}$  और  $872 \text{ cm}^{-1}$  हैं। इसकी सम्पूर्ण शून्य बिंदु ऊर्जा परिकलित कीजिए। 3

(ख) दर्शाइए कि मल अवशोषण की कम्पनिक आवृत्तियों का अनुपात निम्नलिखित होता है :

$$\frac{\nu_{\text{HCl}}}{\nu_{\text{DCl}}} = \sqrt{2}$$

दिया है कि H, D और Cl के परमाणु द्रव्यमान क्रमशः 1, 2 और 35.5 हैं। 3

(ग) एक अवरोक्त स्पेक्ट्रममापी का खण्ड आरेख बनाइए और उसके प्रत्येक घटक का संक्षिप्त वर्णन कीजिए। 4

4. (क) यदि 435.8 nm का Hg विकिरण उपयोग किया गया हो, तो  $2900 \text{ cm}^{-1}$  पर किसी ऐल्केन के C-H तनन के लिए रमन कम्पनिक रेखाओं की स्थिति परिकलित कीजिए। 2

(ख)  $\text{C}_2\text{H}_2$  दो अवरोक्त बैंड और तीन रमन बैंड प्रदर्शित करता है जिनमें से कोई भी समान तरंग-संख्या पर प्रदर्शित नहीं होता है। अवरोक्त बैंडों में से एक सरल PR संरचना प्रदर्शित करता है।  $\text{C}_2\text{H}_2$  की संरचना के बारे में कारण सहित टिप्पणी कीजिए। 3

(ग) उचित चित्रों की सहायता से निम्नलिखित की व्याख्या कीजिए : 5

(i) पर्व-वियोजन

(ii) स्फुरदीप्ति

5. (क) क्लोरीन अणु के लिए मल अवस्था में वियोजन ऊर्जा  $239.42 \text{ kJ mol}^{-1}$  है। यदि क्लोरीन के लिए उत्तेजन ऊर्जा  $881 \text{ cm}^{-1}$  हो, तब क्लोरीन अणु के लिए सांतत्यक कम्पनिक तरंग-संख्या की गणना कीजिए। 4

(ख) 'बैंड पारण चौडाई' पद से आप क्या समझते हैं ?

2

(ग) ई. एस. आर. स्पेक्ट्रमों को व्यत्पन्न स्पेक्ट्रमों के

रूप में क्यों दर्शाया जाता है ?

2

(घ) निम्नलिखित में से किसका  $\lambda_{\max}$  अधिक होगा

और क्यों ?

2

1, 3-ब्यटाडाईन एवं 1, 5-हैक्साडाईन।

6. (क) प्रोटॉन के लिए नाभिकीय मैग्नेटॉन का मान

परिकलित कीजिए। दिया गया है :

3

प्रोटॉन का द्रव्यमान =  $1.672 \times 10^{-27}$  kg ।

(ख)  $n$ -ऑक्टेन के द्रव्यमान स्पेक्ट्रम में  $m/z$  114,

85, 71 और 57 पर शिखरों की उत्पत्ति की

व्याख्या कीजिए।

4

(ग) कारण दीजिए :

3

(i) मर्करी (II) आयोडाइड का रंग लाल होता है।

(ii)  $\text{NiSO}_4$  का हल्का हरा जलीय विलयन

एथिलीन डाइऐमीन मिलाने पर गहरा नीला हो

जाता है।

7. (क) समीकरण  $\nu = \frac{\gamma B_Z}{2\pi}$  से आरम्भ करके

निम्नलिखित व्यंजक व्यत्पन्न कीजिए :

$$h\nu = g_N \beta_N B_Z$$

(ख) हाइड्रोजन परमाणु के ई. एस. आर. स्पेक्ट्रम

को आरेखित कीजिए और उसकी व्याख्या कीजिए।

$2\frac{1}{2}$

(ग) किसी यौगिक के निम्नलिखित आँकड़ों के उपयोग

द्वारा, उसकी संरचना निर्धारित कीजिए : 5

अणु भार : 108 (यह यौगिक अम्लीय नहीं है।)

पराबैंगनी स्पेक्ट्रम :  $\lambda_{\max}$  254 nm और 202 nm

अवरक्त स्पेक्ट्रम : 3420 (विस्तृत), 3064,  
1500 और 1455  $\text{cm}^{-1}$

एन. एम. आर. स्पेक्ट्रम : ( $\delta$ ,  $\text{CDCl}_3$ ) : 3.85

(s, 1H), 4.55 (s, 2H) और 7.25 (s, 5H)।

द्रव्यमान स्पेक्ट्रम ( $m/z$ ) : 108 (अणु आयन),

79 (आधार शिखर), तीव्र (M - 1) शिखर तथा

77 और 51 पर बड़े शिखर

इन स्पेक्ट्रमी आँकड़ों को अणु में उपस्थित

संरचनात्मक इकाइयों के साथ संबंधित कीजिए।