

No. of Printed Pages : 10

CHE-10

BACHELOR OF SCIENCE (B. SC.)

Term-End Examination

December, 2023

(Chemistry)

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 scientific calculators is allowed.*

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

-
-
1. (a) Identify the symmetry elements present in H_2O . Explain each of the elements. 4
 - (b) Using VSEPR theory predict the shape of PCl_3 molecule. 2
 - (c) Derive the term symbol for the ground state of hydrogen atom. 2
 - (d) Calculate the difference in energy (in J units) of energy levels corresponding to two D lines in the atomic spectrum of Na if $\Delta \bar{\nu} = 17.2 \text{ cm}^{-1}$. 2

P. T. O.

2. (a) The distance between two adjacent lines in the rotational spectrum of $^1\text{H}^{35}\text{Cl}$ was found to be 21.1868 cm^{-1} . Given that the masses of ^1H and ^{35}Cl are 1.0078 amu and 34.9688 amu , respectively find the bond length of HCl . 4
- (b) On what factors does the population of rotational energy levels depend ? Also write the relevant equations. 3
- (c) Will the spacing between the rotational energy levels of ^{13}CO molecule be same or different from that in ^{12}CO molecule ? Give reason. 2
- (d) What is the necessary condition for a molecule to be microwave active ? 1
3. (a) Assume that a diatomic molecule behaves as a rigid rotator and as a harmonic oscillator. What are the selection rules for such a vibrating rotor ? Explain the various types of transitions that are possible, with the help of a diagram. Draw a schematic diagram of the expected spectrum. 4

(b) Show that :

$$\frac{\nu_{\text{osc}}^{\text{HCl}}}{\nu_{\text{osc}}^{\text{DCl}}} \cong \sqrt{2}$$

where ν denotes frequency. Given that the atomic masses of ^1H and ^2D are 1 amu and 2 amu respectively. Atomic mass of $\text{Cl} = 35.5$ amu. 3

(c) What are skeletal vibrations and characteristic group vibrations ? Give *two* examples of characteristic group frequency values. 2

(d) Define the term zero point energy. 1

4. (a) Predict the position of Raman vibrational lines corresponding to the C—H stretching of an alkane observed at 2960 cm^{-1} if Hg radiation of 435.8 nm is used as the incident radiation. 3

(b) Obtain the molecular orbital term symbol for the excited state of H_2 molecule $(\sigma_g 1s)^1 (\sigma_g 2s)^1$. 3

(c) Compare and contrast Raman and IR spectra. 2

(d) State mutual exclusion principle. 2

5. (a) Using a suitable diagram, explain the splitting of energy levels of an electron in the presence of the magnetic field. 3
- (b) Discuss the crystal field splitting of *d* orbitals of metal ion in complexes having octahedral geometry. 2
- (c) State the difference between fluorescence and phosphorescence. 2
- (d) Explain the origin of peak at m/z 44 in the mass spectrum of ethanol. 3
6. (a) What are the sources of radiation for the following spectra ? 3

IR, Raman, UV

- (b) Acetone shows absorption maximum at 264.5 nm in aqueous solution while in hexane solution its absorption is at 279 nm. Explain. 3
- (c) Discuss any **one** method of sampling of solids for IR spectra. 2
- (d) Why are electronic transitions called vertical transitions ? 2
7. (a) The chemical shift of protons in a test sample occurs at δ 2 ppm. What is the difference (in Hz) between TMS and test proton resonances when measured in a 100 MHz spectrometer and in a 200 MHz spectrometer ? 2

- (b) Discuss the splitting of lines in the NMR spectrum of ethyl bromide. 2
- (c) Following spectral data is obtained for a non-acidic compound having molecular formula C_7H_8O : 6

UV (nm) : 254, 202

IR (cm^{-1}) : 3420, 3064, 1500, 1455 (broad)

NMR (δ) : 3.85 (s, 1H), 4.55 (s, 2H),

7.25 (s, 5H)

Mass (m/z) : 79 (base peak)

108 (molecular ion peak)

105, 106, 77, 51

Deduce its structure and correlate the spectral data obtained with the structural units present in the molecule.

CHE-10

विज्ञान स्नातक (बी. एस-सी.)

सत्रांत परीक्षा

दिसम्बर, 2023

(रसायन विज्ञान)

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 कैलकुलेटरों के उपयोग की अनुमति है।

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

1. (क) H_2O में उपस्थित सममिति तत्वों को पहचानिए
और उनकी व्याख्या कीजिए। 4
- (ख) वी. एस. ई. पी. आर. सिद्धान्त के उपयोग द्वारा
 PCl_3 अणु की आकृति का अनुमान लगाइए। 2
- (ग) हाइड्रोजन परमाणु की मूल अवस्था के लिए पद
प्रतीक व्युत्पन्न कीजिए। 2

- (घ) यदि $\Delta\bar{\nu} = 17.2 \text{ cm}^{-1}$ हो तो सोडियम के परमाणु स्पेक्ट्रम में दो D रेखाओं के संगत ऊर्जा-स्तरों के बीच ऊर्जा-अन्तर को J मात्रकों में परिकलित कीजिए। 2
2. (क) $^1\text{H}^{35}\text{Cl}$ के घूर्णन स्पेक्ट्रम में दो निकटवर्ती रेखाओं के बीच की दूरी 21.1868 cm^{-1} ज्ञात की गई। HCl की आबन्ध लम्बाई ज्ञात कीजिए यदि ^1H और ^{35}Cl के द्रव्यमान क्रमशः 1.0078 amu और 34.9688 amu हों। 4
- (ख) घूर्णन ऊर्जा स्तरों की समष्टि किन कारकों पर निर्भर करती है ? उचित समीकरण भी लिखिए। 3
- (ग) ^{13}CO अणु के घूर्णन ऊर्जा स्तरों के बीच की दूरी, ^{12}CO अणु के घूर्णन ऊर्जा स्तरों के बीच की दूरी के समान होगी या उससे भिन्न होगी ? कारण दीजिए। 2
- (घ) किसी अणु के सूक्ष्म तरंग सक्रिय होने की क्या आवश्यक शर्त है ? 1
3. (क) मान लीजिए कि एक द्वि-परमाणुक अणु एक दृढ़ घूर्णक और प्रसंवादी दोलक दोनों की तरह व्यवहार करता है। ऐसे कम्पमान घूर्णन के लिए क्या वरण नियम होते हैं ? उचित चित्र की सहायता से

विभिन्न प्रकार के सम्भव संक्रमणों की व्याख्या कीजिए। अपेक्षित स्पेक्ट्रम के लिए उचित चित्र भी आरेखित कीजिए। 4

(ख) दर्शाइए कि :

$$\frac{\nu_{\text{osc}}^{\text{HCl}}}{\nu_{\text{osc}}^{\text{DCl}}} \cong \sqrt{2}$$

जहाँ ν आवृत्ति को व्यक्त करता है। दिया गया है कि ^1H और ^2D के परमाणु द्रव्यमान क्रमशः 1 amu और 2 amu हैं। Cl का परमाणु द्रव्यमान 35.5 amu है। 3

(ग) ढाँचा कम्पन और अभिलाक्षणिक समूह कम्पन क्या होते हैं ? अभिलाक्षणिक समूह आवृत्ति मानों के दो उदाहरण दीजिए। 2

(घ) शून्य बिन्दु ऊर्जा पद की परिभाषा दीजिए। 1

4. (क) यदि स्रोत विकिरण के रूप में 435.8 mmHg विकिरण का उपयोग किया गया हो, तो किसी ऐल्केन के लिए 2960 cm^{-1} पर प्रदर्शित C-H तनन के संगत रामन कम्पनिक रेखाओं की स्थिति का अनुमान लगाइए। 3

(ख) H_2 अणु की उत्तेजित अवस्था, $(\sigma_g 1s)^1 (\sigma_g 2s)^1$ के लिए अणु पद प्रतीक ज्ञात कीजिए। 3

- (ग) रामन और अवरक्त स्पेक्ट्रमों की तुलना कीजिए और उनमें अन्तर बताइए। 2
- (घ) परस्पर अपवर्जन सिद्धान्त लिखिए। 2
5. (क) उचित चित्र द्वारा चुम्बकीय क्षेत्र की उपस्थिति में इलेक्ट्रॉन के ऊर्जा स्तरों के विपाटन की व्याख्या कीजिए। 3
- (ख) अष्टफलकीय ज्यामिति वाले संकुलों में धातु आयन के d कक्षकों के क्रिस्टल क्षेत्र विपाटन की चर्चा कीजिए। 2
- (ग) प्रतिदीप्ति और स्फुरदीप्ति में अन्तर बताइए। 2
- (घ) एथेनॉल के द्रव्यमान स्पेक्ट्रम में m/z 44 पर प्राप्त शिखर की उत्पत्ति की व्याख्या कीजिए। 3
6. (क) निम्नलिखित स्पेक्ट्रमों को रिकॉर्ड करने के लिए विकिरण के किन स्रोतों का उपयोग किया जाता है ? 3

अवरक्त, रामन, पराबैंगनी

- (ख) ऐसीटोन जलीय माध्यम में 264.5 nm पर अवशोषण अधिकतम प्रदर्शित करती है जबकि हेक्सेन विलयन में अवशोषण अधिकतम 279 nm पर होता है। व्याख्या कीजिए। 3
- (ग) अवरक्त स्पेक्ट्रमों के लिए ठोसों के प्रतिचयन की किसी एक विधि की व्याख्या कीजिए। 2

- (घ) इलेक्ट्रॉनिक संक्रमणों को ऊर्ध्वाधर संक्रमण क्यों कहा जाता है ? 2
7. (क) किसी परीक्षण प्रतिदर्श में प्रोटॉनों की सूति $\delta 2$ ppm पर होती है। 100 MHz स्पेक्ट्रममापी और 200 MHz स्पेक्ट्रममापी में मापने पर टी. एम. एस. और परीक्षण प्रतिदर्श के प्रोटॉनों के अनुसार के बीच कितना अन्तर (Hz में) होता है ? 2
- (ख) एथिल ब्रोमाइड के एन. एम. आर. स्पेक्ट्रम में प्रदर्शित संकेतों के विपाटन की चित्र सहित चर्चा कीजिए। 2
- (ग) C_7H_8O अणु सूत्र वाले एक ऐसे पदार्थ के लिए जो अम्लीय नहीं है, निम्नलिखित स्पेक्ट्रमी आँकड़े प्राप्त हुए : 6
- पराबैंगनी (nm) : 254, 202
 अवरक्त (cm^{-1}) : 3420 (विस्तृत), 3064,
 1500, 1455
 एन. एम. आर. (δ) : 3.85 (एकक, 1H),
 4.55 (एकक, 2H), 7.25 (एकक, 5H)
 द्रव्यमान (m/z) : 79 (विस्तृत शिखर), 108 (अणु आयन शिखर), 106, 105, 77, 51
 इसकी संरचना निर्धारित कीजिए और प्राप्त स्पेक्ट्रमी आँकड़ों को अणु में उपस्थित संरचनात्मक इकाइयों के साथ सम्बन्धित कीजिए।