

BACHELOR OF SCIENCE (B.Sc)**Term-End Examination**

June, 2010

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 can be allowed.

$$N_A = 6.022 \times 10^{23}$$

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

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

02480

1. (a) What is meant by spectral terms ? How are the term symbols designated ? An atom in its ground state has a term symbol 2^3P_2 . What do the letter P and the prefix 2 signify ? Also state what do the superscript 3 and subscript 2 in 2^3P_2 denote. 5

- (b) (i) Define the proper axis of symmetry in a molecule and illustrate with suitable example. 5
- (ii) Identify the symmetry elements present in *trans*-1, 2-dichloroethylene. What is its point group ?

2. (a) Give the expression for the rotational energy of a rigid diatomic molecule, in terms of \bar{v} . What do its various terms indicate ? Calculate the term values of first five terms and draw the energy level diagram. 6

- (b) The energy expression for an anharmonic oscillator is given by : 4

$$E = h\nu_{osc} \left(V + \frac{1}{2} \right) - h\nu_{osc} \chi_e \left(V + \frac{1}{2} \right)^2$$

where ν_{osc} is oscillation frequency and χ_e is the anharmonicity constant.

- (i) What is the ground state vibrational energy of the anharmonic oscillator ? Compare it with that of a harmonic oscillator.
- (ii) For an anharmonic oscillator, find the energy difference between the two energy levels corresponding to $V=1$ and $V=0$, respectively.

3. (a) If the rotational constant of $^1\text{H}^{35}\text{Cl}$ is 10.54 cm^{-1} , what is the value of the rotational constant of $^2\text{D}^{35}\text{Cl}$? The atomic masses of ^1H , ^2D and ^{35}Cl are $1.673 \times 10^{-27} \text{ kg}$, $3.344 \times 10^{-27} \text{ kg}$ and $58.06 \times 10^{-27} \text{ kg}$ respectively. 4
- (b) What is meant by normal modes of vibration? What is the total number of normal modes of vibration for linear and non-linear polyatomic molecule? 3
- (c) What do you understand by group frequencies? Explain the effect of hydrogen bonding on the stretching frequency of a carbonyl group. Give an example. 3
4. (a) Explain the following : 3
- (i) Rayleigh scattering.
- (ii) Stokes lines.
- (iii) Anti-stokes lines.
- (b) Draw the block diagram of Raman spectrometer. 3
- (c) The moment of inertia for hydrogen molecule is $4.600 \times 10^{-48} \text{ kg m}^2$. Calculate the spacing between the S-branch lines in its Raman spectrum. 4

5. (a) Draw the molecular orbital energy level diagram for a polyatomic molecule. List the possible electronic transitions. Which transitions will require the highest and the least amounts of energy ? 6
- (b) Explain the difference between $d-d$ transitions and charge transfer transitions. Give one example for each of them. 4
6. (a) A low resolution NMR spectrum of a compound with molecular formula $C_2H_3Cl_3$ shows two signals with intensity ratio of 2 : 1. Another compound with the same formula exhibits only one signal in NMR spectrum. Identify these compounds. 4
- (b) Give the fundamental equation for the resonance condition in ESR spectroscopy. What is the significance of various terms appearing in this equation ? How many lines are observed in the ESR spectrum of a Hydrogenation. 3
- (c) Explain the origin of peaks at m/z 70 and 59 in the mass spectrum of 2-methyl-2-butanol. 3

OR

Name the three methods of ionisation used in mass spectrometry. Discuss any one method in brief.

7. (a) A compound having the molecular formula $C_5H_8O_3$ shows the following spectral data : 6
- UV spectrum- λ_{max} : 262 nm
IR spectrum : $2300 - 3333\text{ cm}^{-1}$ (very broad),
1715 very strong
NMR spectrum (δ) : 2.12 (S, 3H),
2.60 (S, 4H),
11.0 (S, 1H).
Mass spectrum (m/z) : 116 (M^+),
43

Assign the structure of the compound and explain your answer.

- (b) (i) Name the type of containers used for sampling in infra-red and UV-visible regions. 4
- (ii) Match the items of *Column A* with those of *Column B*.

<i>Column A</i>	<i>Column B</i>
Microwave spectrum	Golay cell
Raman spectrum	Quartz crystal
IR spectrum	Photomultiplier tube

विज्ञान स्नातक (बी.एस सी)

सत्रांत परीक्षा

जून, 2010

रसायन विज्ञान

सी.एच.ई-10 : स्पेक्ट्रमिकी

समय : 2 घण्टे

अधिकतम अंक : 50

नोट : किन्हीं पाँच प्रश्नों के उत्तर दीजिए। सभी प्रश्नों के अंक समान हैं।
लॉग सारणियों तथा नन प्रोग्रामेबल साईटिफिक कैल्कुलेटर्स के प्रयोग की अनुमति दी जा सकती है।

$$N_A = 6.022 \times 10^{23}$$

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

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

1. (a) 'स्पेक्ट्रमी पदों' का क्या अर्थ है? पद प्रतीकों को किस प्रकार निरूपित किया जाता है? किसी परमाणु की उसकी मूलावस्था में 2^3P_2 पद-प्रतीक है। इसमें P और पूर्वलग्न 2 क्या व्यक्त करते हैं? साथ ही यह भी बताइए कि मूर्धांक 3 और पादांक 2 क्या दर्शाते हैं? 5
- (b) (i) किसी अणु के लिए सममिति के उचित अक्ष को परिभाषित कीजिए और उसे उचित उदाहरण द्वारा प्रदर्शित कीजिए। 5
- (ii) ट्रांस-1,2-डाइक्लोरोएथिलीन में उपस्थित सममिति तत्व को लिखिए। इसका बिंदु-समूह क्या है?

2. (a) किसी दृढ़ द्विपरमाणुक अणु के लिए घूर्णन ऊर्जा का, \bar{v} के पदों में, व्यंजक लिखिए। इसमें आने वाले विभिन्न पद क्या निरूपित करते हैं? पहले पाँच पदों के लिए पदों के मान परिकल्पित कीजिए और ऊर्जा-स्तर आरेख बनाइए। 6

- (b) एक अप्रसंवादी दोलक के लिए ऊर्जा व्यंजक निम्नलिखित है : 4

$$E = hv_{osc} \left(V + \frac{1}{2} \right) - hv_{osc} \chi_e \left(V + \frac{1}{2} \right)^2$$

यहाँ ν_{osc} दोलन आवृत्ति है और χ_e असंवादिता स्थिरांक है।

- (i) अप्रसंवादी दोलन की मूलावस्था में कंपनिक ऊर्जा क्या है? इसकी तुलना प्रसंवादी दोलक की कंपनिक ऊर्जा से कीजिए।
- (ii) अप्रसंवादी दोलक के लिए $V=1$ और $V=0$ वाले ऊर्जा स्तरों के बीच ऊर्जा अंतर ज्ञात कीजिए।

3. (a) यदि ${}^1\text{H}^{35}\text{Cl}$ का घूर्णन स्थिरांक 10.54 cm^{-1} है तो ${}^2\text{D}^{35}\text{Cl}$ के घूर्णन स्थिरांक का मान क्या होगा? ${}^1\text{H}$, ${}^2\text{D}$ और ${}^{35}\text{Cl}$ के परमाणु द्रव्यमान क्रमशः $1.673 \times 10^{-27} \text{ kg}$, $3.344 \times 10^{-27} \text{ kg}$ और $58.06 \times 10^{-27} \text{ kg}$ हैं। 4

- (b) कंपन की सामान्य विधाओं का क्या अर्थ है? रेखिक और अरेखिक बहु-परमाणुक अणुओं के लिए कंपन की सामान्य विधाओं की कुल संख्या क्या है? 3
- (c) समूह आवृत्तियों से आप क्या समझते हैं? कार्बोनिल समूह की तनन आवृत्ति पर हाइड्रोजन आबंधन के प्रभाव की व्याख्या कीजिए। इसका एक उदाहरण भी दीजिए। 3
4. (a) निम्नलिखित की व्याख्या कीजिए : 3
- (i) रैले प्रकीर्णन
- (ii) स्टोक्स रेखाएँ
- (iii) प्रति-स्टोक्स रेखाएँ
- (b) रामन स्पेक्ट्रममापी का खंड आरेख बनाइए। 3
- (c) हाइड्रोजन अणु के लिए जड़त्व आघूर्ण $4.600 \times 10^{-48} \text{ kg m}^2$ है। इसके रामन स्पेक्ट्रम में S-शाखा रेखाओं के बीच की दूरी परिकलित कीजिए। 4
5. (a) बहु-परमाणुक अणु के लिए अणु ऊर्जा स्तर आरेख बनाइए। सभी संभव इलेक्ट्रॉनिक संक्रमणों की सूची बनाइए। किस संक्रमण के लिए सर्वाधिक और किसके लिए अल्पतम ऊर्जा की आवश्यकता होगी। 6
- (b) $d-d$ संक्रमणों और आवेश स्थानांतरण संक्रमणों के बीच अंतर बताइए। प्रत्येक के लिए एक-एक उदाहरण दीजिए। 4

6. (a) $C_2H_3Cl_3$ अणु सूत्र वाले यौगिक का निम्न-विभेदन 4
 एन.एम.आर. 2:1 तीव्रता अनुपात वाले दो संकेत प्रदर्शित करता है। समान अणु सूत्र वाले एक अन्य यौगिक के एन.एम.आर. स्पेक्ट्रम में केवल एक संकेत प्रदर्शित होता है। इन यौगिकों की पहचान कीजिए।
- (b) इ.एस.आर. स्पेक्ट्रमिकी में अनुनाद की स्थिति के लिए 3
 मूल समीकरण दीजिए। इस समीकरण के विभिन्न पदों की क्या सार्थकता है? हाइड्रोजन परमाणु के इ.एस.आर. स्पेक्ट्रम में कितनी रेखाएँ प्रदर्शित होती हैं?
- (c) 2-मेथिल-2-ब्यूटेनॉल के द्रव्यमान स्पेक्ट्रम में m/z 70 3
 और 59 पर प्राप्त शिखरों की उत्पत्ति की व्याख्या कीजिए।

या

द्रव्यमान स्पेक्ट्रमिति में प्रयुक्त आयनीकरण की तीन विधियों के नाम बताइए और किसी एक विधि की संक्षिप्त व्याख्या कीजिए।

7. (a) $C_5H_8O_3$ वाला एक यौगिक निम्नलिखित स्पेक्ट्रमी 6
 आंकड़े प्रदर्शित करता है :
- पराबैंगनी स्पेक्ट्रम - λ_{\max} : 262 nm
 अवरक्त स्पेक्ट्रम : 2300–3333 cm^{-1} (अति विस्तृत),
 1715 cm (अति प्रबल)
 एन.एम.आर. स्पेक्ट्रम (δ) : 2.12 (एकक, 3H),
 2.60 (एकक, 4H),
 11.0 (एकक, 1H),
 द्रव्यमान स्पेक्ट्रम (m/z) : 116 (M^+),
 43 यौगिक की संरचना निर्धारित कीजिए और अपने उत्तर की व्याख्या कीजिए।

- (b) (i) अवरक्त और पराबैंगनी-दृश्य क्षेत्रों के प्रतिदर्शों के लिए प्रयुक्त पात्रों के प्रकारों के नाम बताइए। 4
- (ii) नीचे कॉलम-‘क’ और कॉलम-‘ख’ में दी गई जानकारी के सही जोड़े बनाइए :

कॉलम-‘क’	कॉलम-‘ख’
सूक्ष्म तरंग स्पेक्ट्रम	गोले कोष्ठिका
रामन स्पेक्ट्रम	क्वार्ट्ज क्रिस्टल
अवरक्त स्पेक्ट्रम	प्रकाश इलेक्ट्रॉनी संवर्धक नलियाँ
