

UNIVERSITI SAINS MALAYSIA
Peperiksaan Semester Tambahan
Sidang 1987/88

KUA 275/2 - Pengantar Spektroskopi Molekul

Tarikh: 22 Jun 1988

Masa: 2.15 petang - 4.15 petang
(2 jam)

Jawab EMPAT soalan.

Jawab tiap-tiap soalan di dalam muka surat yang baru.

Kertas ini mengandungi lima soalan semuanya (5 muka surat).

1. (a) Tentukan simbol sebutan keadaan asas bagi atom yang mempunyai konfigurasi elektron $[\] 3s^2 3p^5$. Apakah pula simbol sebutan keadaan teruja jika konfigurasi elektronnya ialah $[\] 3s^2 3p^4 4d^1$? Peralihan ke keadaan teruja yang manakah yang dibenarkan?
(15 markah)
- (b) Tentukan simbol-simbol sebutan keadaan teruja yang mungkin bagi molekul oksigen apabila salah satu elektron valensnya menduduki orbital π_g yang lebih tinggi tenaganya. Adakah peralihan ke keadaan ini dibenarkan? Terangkan jawapan anda.
(10 markah)
2. (a) Huraikan pembentukan spektrum mikrogelombang bagi molekul dwiatom.
(8 markah)

- (b) Kira jarak ikatan molekul HI jika spektrum mikrogelombangnya menunjukkan satu siri jalur yang berjarak 12.8 cm^{-1} antara satu sama lain. Apakah peralihan yang menerbitkan jalur yang berkeamatan maksimum?
(12 markah)
- (c) Lakarkan rupabentuk spektrum inframerah dekat bagi molekul HI dengan mengambil kira maklumat di (b) di atas.
(5 markah)
3. (a) Apakah kaedah atau jenis spektroskopi yang perlu anda gunakan untuk mendapatkan spektrum getaran molekul H_2 . Nyatakan sebab anda gunakan kaedah tersebut.
(7 markah)
- (b) Tenaga penceraian spektroskopi molekul H_2 ialah 34250 cm^{-1} . Jika nombor gelombang getaran asas bagi molekul ini ialah 4395.2 cm^{-1} kira
(i) pemalar ketakhharmonikan,
(ii) nombor gelombang bagi jalur overton yang pertama,
(iii) tenaga penceraian termodinamik.
(10 markah)
- (c) Daripada maklumat di (b) di atas tentukan tenaga penceraian spektroskopi bagi molekul deuterium D_2 jika kedua-dua molekul H_2 dan D_2 mempunyai pemalar daya yang sama.
(8 markah)
4. (a) Spektrum Raman bagi putaran terbit dari peralihan $J \rightarrow J + 2$. Berdasarkan hal ini terbitkan satu ekspresi yang menghubungkan frekuensi peralihan dengan nombor kuantum J keadaan awal.
(10 markah)

- (b) Tenaga penceraian bagi HCl(g) , $\text{H}_2\text{(g)}$ dan $\text{Cl}_2\text{(g)}$ kepada atom biasa yang didapati daripada kajian spektroskopi ialah masing-masingnya 4.431, 4.476 dan 2.476 eV. Kira entalpi pembentukan HCl(g) pada OK dalam unit eV.

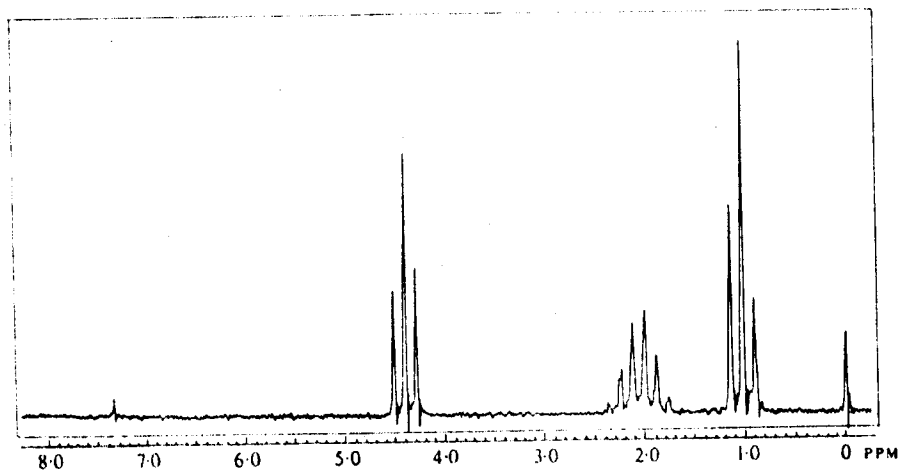
(15 markah)

5. (a) Berdasarkan jadual di bawah

- (i) ramalkan rupabentuk spektrum NMR bagi proton dalam molekul $\text{CH}_3\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CO}_2\text{H}$;
- (ii) tentukan struktur molekul $\text{C}_3\text{H}_7\text{NO}_2$ yang mempunyai spektrum NMR bagi proton seperti dalam Rajah 1.

(15 markah)

Rajah 1



- (b) Lakarkan rupabentuk spektrum ESR bagi satu elektron tak berpasangan dalam keadaan adanya

- (i) tiga proton yang tak setara
- (ii) tiga proton yang setara

- (iii) tiga proton yang mana dua daripadanya setara dan satu lagi tak setara.

(10 markah)

Jadual Anjakan Kimia

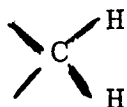
<u>Sebatian</u>	<u>Anjakan Kimia</u>
Proton metil	
$(\text{CH}_3)_4\text{Si}$	0.00
$(\text{CH}_3)_4\text{C}$	0.92
CH_3CH_2^-	1.17
CH_3CO^-	2.07
CH_3O^-	3.38
Proton metilena	
Siklopropana	0.22
Sikloheksana	1.44
$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$	3.59
Proton alkena	
$\text{CH}_2=\text{C}(\text{CH}_3)_2$	4.60
sikloheksena	5.57
Proton alkuna	
$\text{CH}\equiv\text{C}-$	2.33
Proton aromatik	
Benzena	7.27
Naftalena	7.73
Proton aldehid	
CH_3CHO	9.72
$\text{C}_6\text{H}_5\text{CHO}$	9.96

.../5

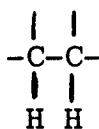
Jadual Pemalar pengkueplan spin-spin

Struktur

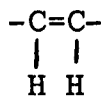
$J(H_2)$



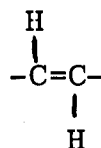
-20 ke +6



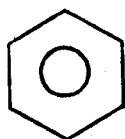
5.5 ke 7.5



7 ke 10



12 ke 19



orto 6 ke 9

meta 0.5 ke 4

para 0 ke 2.5

ooo0ooo

UNIVERSITI SAINS MALAYSIA

Pusat Pengajian Sains Kimia

Pemalar Asas dalam Kimia Fizik

<u>Simbol</u>	<u>Keterangan</u>	<u>Nilai</u>
N_A	Nombor Avogadro	$6.022 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$
F	Pemalar Faraday	96,500 C mol ⁻¹ , atau coulomb per mol, elektron
e	Cas elektron	4.80×10^{-10} esu. 1.60×10^{-19} C atau coulomb
m_e	Jisim elektron	9.11×10^{-28} g 9.11×10^{-31} kg
m_p	Jisim proton	1.67×10^{-24} g 1.67×10^{-27} kg
h	Pemalar Planck	6.626×10^{-27} erg s 6.626×10^{-34} J s
c	Halaju cahaya	3.0×10^{10} cm s ⁻¹ 3.0×10^8 m s ⁻¹
R	Pemalar gas	8.314×10^7 erg K ⁻¹ mol ⁻¹ 8.314 J K ⁻¹ mol ⁻¹ 0.082 l atm K ⁻¹ mol ⁻¹ 1.987 cal K ⁻¹ mol ⁻¹
k	Pemalar Boltzmann	1.380×10^{-16} erg K ⁻¹ molekul ⁻¹ 1.380×10^{-23} J K ⁻¹ molekul ⁻¹
g		981 cm s ⁻² 9.81 m s ⁻²
1 atm		76 cmHg 1.013×10^6 dyn cm ⁻² $101,325$ N m ⁻²
$2.303 \frac{RT}{F}$		0.0591 V, atau volt, pada 25 °C

Berat Atom yang Berguna

H = 1.0	C = 12.0	I = 126.9	Fe = 55.8	As = 74.9
Br = 79.9	Cl = 35.5	Ag = 107.9	Pb = 207.0	
Na = 23.0	K = 39.1	N = 14.0	Cu = 63.5	
O = 16.0	S = 32.0	P = 31.0	Ca = 40.1	