

Mac/April 1992

KUA 275 - Pengantar Spektroskopi Molekul

Masa : (2 jam)

Jawab EMPAT soalan sahaja.

Hanya EMPAT jawapan yang pertama sahaja akan diperiksa.

Jawab tiap-tiap soalan pada muka surat yang baru.

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

1. (a) Tuliskan simbol sebutan keadaan elektron asas bagi atom  $^{30}\text{Zn}$ . Apakah simbol-simbol sebutan bagi keadaan-keadaan teruja yang mungkin apabila salah satu elektron valensinya menduduki orbital 4d? Adakah peralihan dari keadaan asas ke keadaan-keadaan teruja ini dibenarkan? Jelaskan jawapan anda.

(10 markah)

- (b) Tuliskan konfigurasi elektron keadaan asas bagi ion  $\text{OF}^-$ . Apakah simbol sebutan keadaan elektron asas bagi ion ini? Apakah pula simbol sebutan keadaan-keadaan teruja yang mungkin yang diwakili oleh konfigurasi elektron  $[ ] 2p_{\pi}^3 3s_{\sigma}^1$ ? Apakah peralihan dari keadaan asas ke keadaan-keadaan teruja ini dibenarkan? Jelaskan jawapan anda.

(15 markah)

2. (a) Apakah yang dimaksudkan dengan sebutan "tenaga penceraian spektroskopi"? Apakah perbezaannya dengan "tenaga penceraian termodinamik"?

(5 markah)

- (b) Kira tenaga penceraian spektroskopi dan tenaga penceraian termodinamik bagi spesies-spesies berikut:

$$\text{H}^{35}\text{Cl} \quad (\bar{\nu}_0 = 2889 \text{ cm}^{-1})$$

$${}^2\text{D}^{35}\text{Cl} \quad (\bar{\nu}_0 = 2144 \text{ cm}^{-1})$$

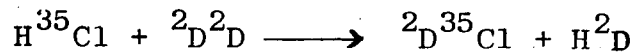
$$\text{H}^2\text{D} \quad (\bar{\nu}_0 = 3817 \text{ cm}^{-1})$$

$${}^2\text{D}^2\text{D} \quad (\bar{\nu}_0 = 2990 \text{ cm}^{-1})$$

Anggap bahawa pemalar ketakharmonikan,  $x_0$ , bagi getaran  $\text{H}^{35}\text{Cl}$  dan  ${}^2\text{D}^{35}\text{Cl}$  adalah sama dan bersamaan dengan 0.0174; begitu juga dengan getaran  $\text{H}^2\text{D}$  dan  ${}^2\text{D}^2\text{D}$  yang mana  $x_0 = 0.0081$ .

(10 markah)

- (c) Berdasarkan kepada jawapan anda di (b) di atas kira tenaga yang terlibat dalam tindak balas



(10 markah)

3. (a) Tiga garis yang berturutan dalam spektrum mikrogelombang bagi  $\text{H}^{79}\text{Br}$  diperhatikan pada 84.544, 101.355 dan 118.112  $\text{cm}^{-1}$ .

(i) Tetapkan jalur-jalur itu kepada peralihan  $J' \longrightarrow J''$  yang sesuai.

(ii) Kira jarak ikatan molekul tersebut.

(12 markah)

- (b) Spektrum mikrogelombang bagi  $^{79}\text{Br}^{19}\text{F}$  menunjukkan satu siri jalur yang terpisah sama jarak sebanyak  $0.7143 \text{ cm}^{-1}$ . Lakarkan spektrum tersebut pada 300 K dengan menunjukkan keamatan relatif dan kedudukan relatif tujuh jalur yang tertinggi keamatannya.

(13 markah)

4. (a) Spektrum inframerah dekat bagi gas  $\text{H}^{79}\text{Br}$  menunjukkan dua siri jalur yang simetrik dengan pemisahan antara jalur sebanyak  $16.9 \text{ cm}^{-1}$ . Pusat jalur-jalur ini terletak pada  $2645 \text{ cm}^{-1}$ . Dengan menganggap  $\text{D}^{79}\text{Br}$  mempunyai pemalar daya yang sama dengan  $\text{H}^{79}\text{Br}$  kira kedudukan pusat jalur bagi spektrum inframerah dekat  $\text{D}^{79}\text{Br}$  serta pemisahan antara jalur-jalurnya.

(10 markah)

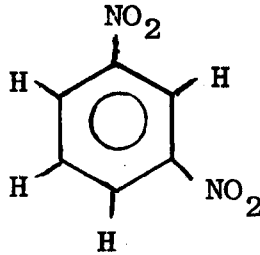
- (b) Spektrum Raman bagi  $\text{H}_2$  menggunakan laser 488 nm menerbitkan jalur-jalur Stokes pada 355, 588, 815 dan  $1033 \text{ cm}^{-1}$ . Berdasarkan kepada peralihan yang dibenarkan ialah peralihan  $J \longrightarrow J + 2$ , tunjukkan bahawa pada umumnya frekuensi-frekuensi jalur itu diberi oleh persamaan

$$\bar{\nu} = 4\bar{B} (J + 3/2)$$

yang mana  $\bar{B}$  ialah pemalar putaran dan  $J$  ialah nombor kuantum putaran sebelum berlaku peralihan. Seterusnya kira jarak ikatan dalam molekul  $\text{H}_2$ .

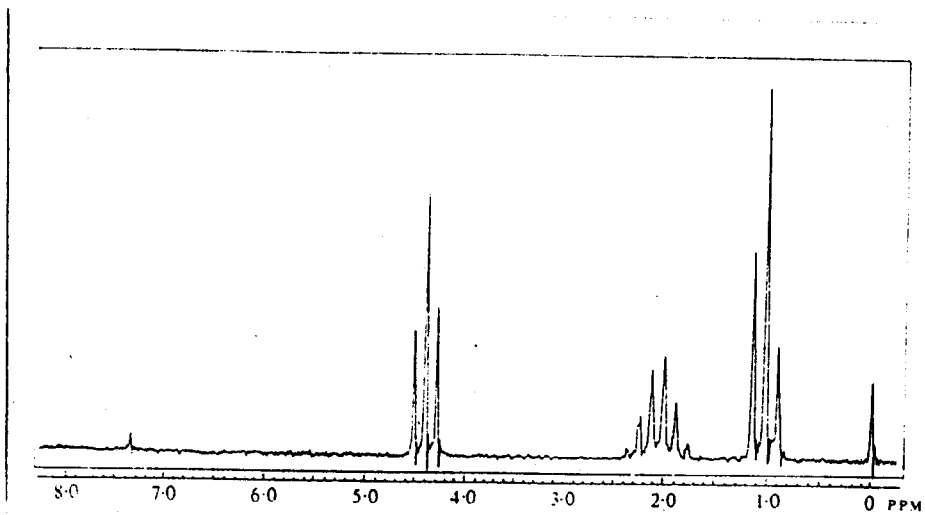
(15 markah)

5. (a) Jelaskan rupabentuk spektrum NMR yang anda jangka bagi molekul



(8 markah)

- (b)



Spektrum NMR - proton di atas ialah untuk sebatian  $C_7H_5NO_2$ . Apakah struktur molekul sebatian tersebut? Jelaskan bagaimana struktur itu menerbitkan spektrum di atas.

(8 markah)

.../5

- (c) Ramalkan rupabentuk spektrum ESR bagi ion negatif benzena dan radikal etil klorida. Jelaskan asas-asas yang anda gunakan dalam ramalan itu.

(9 markah)

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

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 | Xe = 131.1 |
| Na = 23.0 | K = 39.1  | N = 14.0   | Cu = 63.5  | F = 19.0   |
| O = 16.0  | S = 32.0  | P = 31.0   | Ca = 40.1  |            |