

UNIVERSITI SAINS MALAYSIA  
Peperiksaan Semester Pertama

Sidang 1988/89

KTE 321/3 - Spektroskopi Takorganik

Tarikh: 2 November 1988

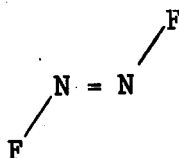
Masa: 9.00 pagi - 12.00  
tengah hari  
(3 jam)

Jawab sebarang LIMA (5) soalan.

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

Kertas soalan ini mengandungi TUJUH soalan semuanya (9 muka surat).

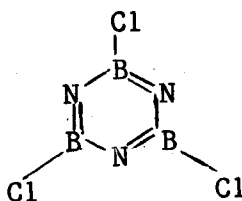
1. (a) Pertimbangkan molekul yang berikut:



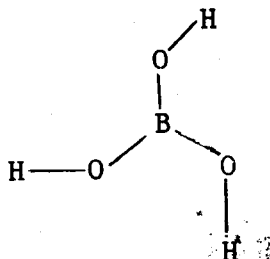
- (i) Senaraikan kesemua operasi simetri yang wujud (3 markah)
- (ii) Cari tertib  $h$  bagi kumpulan titiknya (1 markah)
- (iii) Binalah jadual pendaraban bagi kombinasi operasi simetri (4 markah)

(b) Dapatkan kumpulan titik yang dimiliki oleh tiap-tiap satu molekul yang berikut:

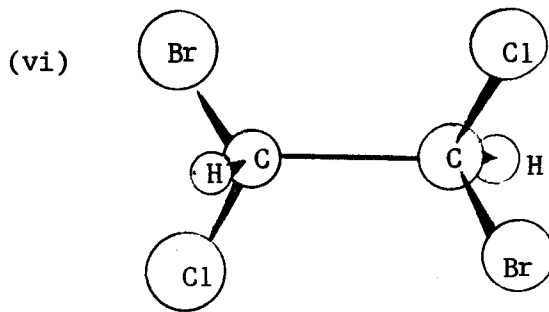
- (i)  $IF_5$  berbentuk trigonal bipiramidal (2 markah)
- (ii)  $B_3N_3Cl_3$  (2 markah)



- (iii) trans-2-butena berbentuk satah (2 markah)
- (iv)  $Fe(CO)_5$  berbentuk piramid persegi (2 markah)
- (v)



(2 markah)



(2 markah)

2. (a) Turunkan  $\Gamma$  berikut kepada perwakilan takterturun untuk kumpulan yang dinyatakan di bawah:

$D_{4h}$	E	$2C_4$	$C_2$	$2C'_2$	$2C''_2$	i	$2S_4$	$\sigma_h$	$2\sigma_h$	$2\sigma_d$
$\Gamma$	+7	-3	-1	-1	+1	-1	+1	-1	-1	+1

(5 markah)

- (b) Apakah perwakilan orbital  $d_{xy}$  dalam simetri  $C_{2v}$ ? Jelaskan.  
(3 markah)
- (c) Apakah operasi setara yang tunggal bagi  $C_2S_4$ ? Gambarkan.  
(4 markah)
- (d) Adakah operasi  $C_2S_4$  dan  $S_4C_2$  bertukar tertib antara satu sama lain? Jelaskan.  
(4 markah)
- (e) Tulislah matriks yang memerikan pembalikan titik (x, y, z) melalui satah xy kepada titik (x', y', z').

(4 markah)

3. (a) Bezakan antara getaran valens dengan getaran normal. Lukiskan getaran valens dan getaran normal bagi molekul  $SO_2$  untuk menjelaskan jawapan anda.

(5 markah)

(Bersambung...)

.../3-

- (b) Tunjukkan dengan menggunakan suatu molekul sederhana, bagaimana frekuensi tertentu dapat diserap olehnya dari suatu jalur sinaran inframerah yang berterusan.

(5 markah)

- (c) Tulis suatu karangan mengenai aplikasi spektroskopi Raman dan spektroskopi inframerah dalam bidang Kimia Takorganik.

(10 markah)

4. (a) Tenaga sesuatu pemutar-bergetar dwiatom adalah diberi oleh persamaan berikut:

$$E_{Jv} = (v + \frac{1}{2})h\nu - (v + \frac{1}{2})^2 h x \nu + BJ(J + 1)$$

Jelaskan maksudnya bagi semua parameter dalam persamaan di atas.

(4 markah)

- (b) Perikanlah ciri am mengenai spektrum Raman. Tunjukkan melalui pengolahan klasikal bagi molekul dwiatom bahawa

$$\frac{\delta\alpha}{\delta q}$$

tidak boleh mempunyai nilai kosong supaya getaran itu menjadi aktif dalam spektrum Raman.

(8 markah)

- (c) Takrifkan nisbah depengutuban,  $\rho$ .

Terangkan mengapa nisbah depengutuban itu mengenai mod simetrik mempunyai nilai zero manakala nilainya bagi mod taksimetrik itu adalah lebih kurang  $\frac{6}{7}$ .

(8 markah)

.../4-

5. (a) Faktor-faktor apakah yang mempengaruhi pemisahan garisan dalam spektrum Raman putaran molekul dwiatom? Jelaskan.

(4 markah)

(b) Tunjukkan bahawa perbezaan tenaga di antara paras-paras getaran berturut-turut menjadi lebih rendah semakin nilai  $v$  itu meningkat.

(4 markah)

(c) Terangkan secara jelasnya maksud itu mengenai perkara-perkara yang berikut:

(i) perwakilan terturunkan dan perwakilan degenerat

(ii) peraturan saling penyingkiran

(iii) mod putaran yang aktif dalam spektrum inframerah.

(12 markah)

6. (a) Apakah bilangan mod getaran normal bagi molekul  $SO_3$  itu? Lukislah semua mod normal tersebut dan tunjukkan (dengan penjelasan) yang manakah daripadanya akan menjadi aktif dalam spektrum inframerah.

(10 markah)

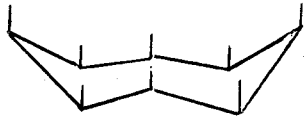
(b) Apakah perubahan spektrum yang dijangkakan bagi spektrum getaran mengenai molekul  $SO_3$  jika koordinatan dengan logam berlaku pada satu atom oksigen? Bincangkan perkara ini secara terperinci.



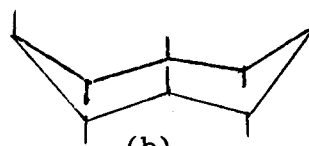
(10 markah)

.../5-

7. Seorang penuntut telah menyediakan sebatian oktaklorosiklooktana. Hasil itu mungkin berbentuk isomer trans atau cis seperti berikut:



(a)



(b)

Bagaimanakah anda dapat simpulkan struktur yang betul daripada pertimbangan simetri serta spektrum IR dan Raman sebatian itu?

(20 markah)

ooo0000ooo

**JADUAL KARAKTER.**

Kumpulan  $C_{2v}$

$C_{2v}$	E	$C_2$	$\sigma_v(xz)$	$\sigma_v'(yz)$		
$A_1$	1	1	1	1	$z$	$x^2, y^2, z^2$
$A_2$	1	1	-1	-1	$R_z$	$xy$
$B_1$	1	-1	1	-1	$x, R_y$	$xz$
$B_2$	1	-1	-1	1	$y, R_x$	$yz$

$C_{3v}$	E	$2C_3$	$3\sigma_v$		
$A_1$	1	1	1	$z$	$x^2 + y^2, z^2$
$A_2$	1	1	-1	$R_z$	
E	2	-1	0	$(x, y)(R_x, R_y)$	$(x^2 - y^2, xy)(xz, yz)$

$C_{4v}$	E	$2C_4$	$C_2$	$2\sigma_v$	$2\sigma_d$		
$A_1$	1	1	1	1	1	$z$	$x^2 + y^2, z^2$
$A_2$	1	1	1	-1	-1	$R_z$	
$B_1$	1	-1	1	1	-1		$x^2 - y^2$
$B_2$	1	-1	1	-1	1		$xy$
E	2	0	-2	0	0	$(x, y)(R_x, R_y)$	$(xz, yz)$

$C_{5v}$	E	$2C_5$	$2C_5^2$	$5\sigma_v$		
$A_1$	1	1	1	1	$z$	$x^2 + y^2, z^2$
$A_2$	1	1	1	-1	$R_z$	
$E_1$	2	$2 \cos 72^\circ$	$2 \cos 144^\circ$	0	$(x, y)(R_x, R_y)$	$(xz, yz)$
$E_2$	2	$2 \cos 144^\circ$	$2 \cos 72^\circ$	0		$(x^2 - y^2, xy)$

$C_{6v}$	E	$2C_6$	$2C_3$	$C_2$	$3\sigma_v$	$3\sigma_d$		
$A_1$	1	1	1	1	1	1	$z$	$x^2 + y^2, z^2$
$A_2$	1	1	1	1	-1	-1	$R_z$	
$B_1$	1	-1	1	-1	1	-1		
$B_2$	1	-1	1	-1	-1	1		
$E_1$	2	1	-1	-2	0	0	$(x, y)(R_x, R_y)$	$(xz, yz)$
$E_2$	2	-1	-1	2	0	0		$(x^2 - y^2, xy)$

Kumpulan  $C_{nh}$

$C_{2h}$	$E$	$C_2$	$i$	$\sigma_h$		
$A_g$	1	1	1	1	$R_z$	$x^2, y^2, z^2, xy$
$B_g$	1	-1	1	-1	$R_x, R_y$	$xz, yz$
$A_u$	1	1	-1	-1	$z$	
$B_u$	1	-1	-1	1	$x, y$	

$C_{3h}$	$E$	$C_3$	$C_3^2$	$\sigma_h$	$S_3$	$S_3^5$		$e = \exp(2\pi i/3)$
$A'$	1	1	1	1	1	1	$R_z$	$x^2 + y^2, z^2$
$E'$	1	$e$	$e^*$	1	$e$	$e^*$	$(x, y)$	$(x^2 - y^2, xy)$
$A''$	1	1	1	1	1	1	$z$	
$E''$	1	$e$	$e^*$	-1	$e$	$e^*$	$(R_x, R_y)$	$(xz, yz)$

$C_{4h}$	$E$	$C_4$	$C_2$	$C_4^3$	$i$	$S_4^3$	$\sigma_h$	$S_4$		
$A_g$	1	1	1	1	1	1	1	1	$R_z$	$x^2 + y^2, z^2$
$B_g$	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1		$x^2 - y^2, xy$
$E_g$	1	$i$	-1	$-i$	1	$i$	1	$-i$	$(R_x, R_y)$	$(xz, yz)$
$A_u$	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	$z$	
$B_u$	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1		
$E_u$	1	$i$	-1	$-i$	-1	$-i$	-1	$i$	$(x, y)$	

$C_{5h}$	$E$	$C_5$	$C_5^2$	$C_5^3$	$C_5^4$	$\sigma_h$	$S_5$	$S_5^7$	$S_5^3$	$S_5^9$		$e = \exp(2\pi i/5)$
$A'$	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	$R_z$	$x^2 + y^2, z^2$
$E_1'$	1	$e$	$e^2$	$e^{2*}$	$e^*$	1	$e$	$e^2$	$e^{2*}$	$e^*$	$(x, y)$	
$E_2'$	1	$e^2$	$e^*$	$e$	$e^{2*}$	1	$e^2$	$e$	$e^*$	$e^{2*}$		$(x^2 - y^2, xy)$
$A''$	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	$z$	
$E_1''$	1	$e$	$e^2$	$e^{2*}$	$e^*$	-1	$-e$	$-e^2$	$-e^{2*}$	$-e^*$	$(R_x, R_y)$	$(xz, yz)$
$E_2''$	1	$e^2$	$e^*$	$e$	$e^{2*}$	-1	$-e^2$	$-e$	$-e^*$	$-e^{2*}$		

$C_{6h}$	$E$	$C_6$	$C_3$	$C_2$	$C_3^2$	$C_6^5$	$i$	$S_6^5$	$S_6^5$	$\sigma_h$	$S_6$	$S_3$		$e = \exp(2\pi i/6)$
$A_g$	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	$R_z$	$x^2 + y^2, z^2$
$B_g$	1	-1	1	1	-1	1	1	-1	-1	1	1	1		
$E_{1g}$	1	$e$	$e^*$	1	$e$	$e^*$	1	$e$	$e^*$	1	$e$	$e^*$	$(R_x, R_y)$	$(xz, yz)$
$E_{2g}$	1	$e^*$	$e$	-1	$e^*$	$e$	1	$e^*$	$e$	1	$e^*$	$e$		$(x^2 - y^2, xy)$
$A_u$	1	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	$z$	
$B_u$	1	-1	1	1	-1	1	1	-1	-1	1	1	1		
$E_{1u}$	1	$e$	$e^*$	1	$e$	$e^*$	1	$e$	$e^*$	1	$e$	$e^*$	$(x, y)$	
$E_{2u}$	1	$e^*$	$e$	-1	$e^*$	$e$	-1	$-e$	$-e^*$	-1	$-e$	$-e^*$		

Kumpulan  $D_{nh}$

$D_{2h}$	$E$	$C_2(z)$	$C_2(y)$	$C_2(x)$	$i$	$\sigma(xy)$	$\sigma(xz)$	$\sigma(yz)$			
$A_g$	1	1	1	1	1	1	1	1	$R_2$	$x^2, y^2, z^2$	
$B_{1g}$	1	1	1	1	1	1	-1	-1		$R_1$	$xy$
$B_{2g}$	1	1	1	1	1	1	-1	1		$R_3$	$xz$
$B_{3g}$	1	1	1	1	1	1	1	-1		$yz$	
$A_u$	1	1	1	1	1	1	1	1		$z$	
$B_{1u}$	1	1	1	1	1	1	1	-1		$y$	
$B_{2u}$	1	1	1	1	1	1	1	1		$x$	
$B_{3u}$	1	1	1	1	1	1	1	1			

$D_{3h}$	$E$	$2C_3$	$3C_2$	$\sigma_h$	$2S_6$	$3\sigma_v$		
$A_1'$	1	1	1	1	1	1		$x^2 + y^2, z^2$
$A_2'$	1	1	1	1	1	1	$R_2$	
$E'$	2	1	0	2	1	0	$(x, y)$	$(x^2 - y^2, xy)$
$A_1''$	1	1	1	1	1	1		$z$
$A_2''$	1	1	1	1	1	1		
$E''$	2	1	0	2	1	0	$(R_3, R_1)$	$(xz, yz)$

$D_{3d}$	$E$	$2C_3$	$C_2$	$2C_2'$	$2C_2''$	$i$	$2S_6$	$\sigma_h$	$2\sigma_v$	$2\sigma_d$		
$A_{1g}$	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	$R_2$	
$A_{2g}$	1	1	1	1	1	1	1	1	1	-1		$x^2 + y^2$
$B_{1g}$	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1		$z^2$
$B_{2g}$	1	1	1	1	1	1	1	1	1	-1	$xy$	
$E_g$	2	0	2	0	0	2	0	2	0	0	$(xz, yz)$	
$A_{1u}$	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	$z$	
$A_{2u}$	1	1	1	1	1	1	1	1	1	-1		
$B_{1u}$	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1		
$B_{2u}$	1	1	1	1	1	1	1	1	1	-1		
$E_u$	2	0	2	0	0	2	0	2	0	0	$(x, y)$	

$D_{3h}$	$E$	$2C_3$	$2C_3^2$	$3C_2$	$\sigma_h$	$2S_6$	$2S_6^5$	$5\sigma_v$	
$A_1'$	1	1	1	1	1	1	1	1	$x^2 + y^2, z^2$
$A_2'$	1	1	1	1	1	1	1	1	$R_2$
$E'$	2	$2 \cos 72$	$2 \cos 144$	0	2	$2 \cos 72$	$2 \cos 144$	0	$(x, y)$
$E_2'$	2	$2 \cos 144$	$2 \cos 72$	0	2	$2 \cos 144$	$2 \cos 72$	0	$(x^2 - y^2, xy)$
$A_1''$	1	1	1	1	1	1	1	1	$z$
$A_2''$	1	1	1	1	1	1	1	1	
$E_1''$	2	$2 \cos 72$	$2 \cos 144$	0	2	$2 \cos 72$	$2 \cos 144$	0	$(R_3, R_1)$
$E_2''$	2	$2 \cos 144$	$2 \cos 72$	0	2	$2 \cos 144$	$2 \cos 72$	0	$(xz, yz)$

$D_{6h}$	$E$	$2C_6$	$2C_3$	$C_2$	$3C_2'$	$3C_2''$	$i$	$2S_6$	$2S_6^5$	$\sigma_h$	$3\sigma_v$	$3\sigma_d$		
$A_{1g}$	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	$R_2$	
$A_{2g}$	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	-1		$x^2 + y^2, z^2$
$B_{1g}$	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1		
$B_{2g}$	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	-1		
$E_{1g}$	2	1	1	2	0	0	2	1	1	2	0	0	$(xz, yz)$	
$E_{2g}$	2	1	1	2	0	0	2	1	1	2	0	0	$(x^2 - y^2, xy)$	
$A_{1u}$	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	$z$	
$A_{2u}$	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	-1		
$B_{1u}$	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1		
$B_{2u}$	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	-1		
$E_{1u}$	2	1	1	2	0	0	2	1	1	2	0	0	$(x, y)$	
$E_{2u}$	2	1	1	2	0	0	2	1	1	2	0	0		



$D_{8d}$	$E$	$2C_8$	$2C_8^3$	$2C_4$	$C_2$	$4C_2'$	$4C_2''$	$i$	$2S_8$	$2S_8^3$	$2S_4$	$\sigma_8$	$4\sigma_4$	$4\sigma_2$		
$A_{1g}$	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	$R_z$	$x^2 + y^2, z^2$
$A_{2g}$	1	1	1	1	1	-1	-1	1	1	1	1	1	-1	-1		
$B_{1g}$	1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	1	1	1	-1		
$B_{2g}$	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	1	-1		
$E_{1g}$	2	$\sqrt{2}$	$-\sqrt{2}$	0	-2	0	0	2	$\sqrt{2}$	$-\sqrt{2}$	0	-2	0	0	$(R_x, R_y)$	$(xz, yz)$ $(x^2 - y^2, xy)$
$E_{2g}$	2	0	0	-2	2	0	0	2	0	0	-2	2	0	0		
$E_{3g}$	2	$\sqrt{2}$	$\sqrt{2}$	0	-2	0	0	2	$-\sqrt{2}$	$\sqrt{2}$	0	-2	0	0	$z$	
$A_{1u}$	1	1	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1		
$A_{2u}$	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1		
$B_{1u}$	1	1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	1	-1	-1	-1		
$B_{2u}$	1	1	-1	1	1	-1	-1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	$(x, y)$	
$E_{1u}$	2	$\sqrt{2}$	$-\sqrt{2}$	0	-2	0	0	-2	$-\sqrt{2}$	$\sqrt{2}$	0	2	0	0		
$E_{2u}$	2	0	0	-2	2	0	0	-2	0	0	2	-2	0	0		
$E_{3u}$	2	$\sqrt{2}$	$\sqrt{2}$	0	-2	0	0	-2	$\sqrt{2}$	$-\sqrt{2}$	0	2	0	0		

Kumpulan  $D_{nd}$

$D_{2d}$	$E$	$2S_4$	$C_2$	$2C_2'$	$2\sigma_d$		
$A_1$	1	1	1	1	1	$R_z$	$x^2 + y^2, z^2$
$A_2$	1	1	1	-1	-1		
$B_1$	1	-1	1	1	-1		
$B_2$	1	-1	1	-1	1		
$E$	2	0	-2	0	0	$(x, y);$ $(R_x, R_y)$	$xy$ $(xz, yz)$

$D_{3d}$	$E$	$2C_3$	$3C_2$	$i$	$2S_6$	$3\sigma_d$		
$A_{1g}$	1	1	1	1	1	1	$R_z$	$x^2 + y^2, z^2$
$A_{2g}$	1	1	-1	1	1	-1		
$E_g$	2	-1	0	2	-1	0		
$A_{1u}$	1	1	1	-1	-1	-1	$z$	
$A_{2u}$	1	1	-1	-1	-1	1		
$E_u$	2	-1	0	-2	1	0		

$D_{4d}$	$E$	$2S_8$	$2C_4$	$2S_8^3$	$C_2$	$4C_2'$	$4\sigma_d$		
$A_1$	1	1	1	1	1	1	1	$R_z$	$x^2 + y^2, z^2$
$A_2$	1	1	1	1	1	-1	-1		
$B_1$	1	-1	1	-1	1	1	-1		
$B_2$	1	-1	1	-1	1	-1	1		
$E_1$	2	$\sqrt{2}$	0	$-\sqrt{2}$	-2	0	0	$(x, y)$	$(x^2 - y^2, xy)$
$E_2$	2	0	-2	0	2	0	0		
$E_3$	2	$-\sqrt{2}$	0	$\sqrt{2}$	-2	0	0	$(R_x, R_y)$	$(xz, yz)$

$D_{5d}$	$E$	$2C_5$	$2C_5^2$	$5C_2$	$i$	$2S_{10}^3$	$2S_{10}$	$5\sigma_d$		
$A_{1g}$	1	1	1	1	1	1	1	1	$R_z$	$x^2 + y^2, z^2$
$A_{2g}$	1	1	1	1	1	1	1	-1		
$E_{1g}$	2	$2 \cos 72^\circ$	$2 \cos 144^\circ$	0	2	$2 \cos 72^\circ$	$2 \cos 144^\circ$	0		
$E_{2g}$	2	$2 \cos 144^\circ$	$2 \cos 72^\circ$	0	2	$2 \cos 144^\circ$	$2 \cos 72^\circ$	0		
$A_{1u}$	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	$z$	
$A_{2u}$	1	1	1	1	-1	-1	-1	1		
$E_{1u}$	2	$2 \cos 72^\circ$	$2 \cos 144^\circ$	0	-2	$-2 \cos 72^\circ$	$-2 \cos 144^\circ$	0		
$E_{2u}$	2	$2 \cos 144^\circ$	$2 \cos 72^\circ$	0	-2	$-2 \cos 144^\circ$	$-2 \cos 72^\circ$	0		