

UNIVERSITI SAINS MALAYSIA

Peperiksaan Semester Kedua

Sidang 1986/87

KUA 275/2 - Pengantar Spektroskopi Molekul

Tarikh: 17 April 1987

Masa: 2.45 ptg - 4.45 ptg
(2 jam)

Jawab mana-mana EMPAT soalan.

Jawab setiap soalan dalam muka surat yang baru.

Kertas ini mengandungi enam soalan (5 muka surat).

1. (a) Tentukan simbol sebutan keadaan asas bagi atom merkurium (konfigurasi elektron $[Xe]5f^{10}6s^2$) dan simbol-simbol sebutan keadaan terujanya (konfigurasi elektron $[Xe]5f^{10}6s^16p^1$). Terangkan sama ada perlihan elektron dari keadaan asas ke keadaan-keadaan teruja itu dibenarkan? (13 markah)
- (b) Tentukan bilangan dan jenis mod getaran untuk molekul karbon dioksida yang berbentuk linear. Terangkan sama ada semua mod getaran itu boleh dikesan oleh spektroskopi inframerah. (12 markah)
2. Kedudukan jalur spektrum mikrogelombang bagi molekul $H^{35}Cl$ (g) pada suhu 300 K ialah seperti berikut:

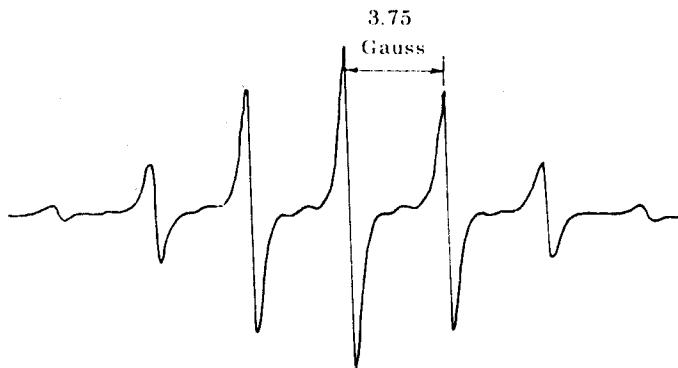
<u>Jalur</u>	<u>\bar{v}/cm^{-1}</u>	<u>Keamatan</u>
1	21.1	minimum
2	42.2	sederhana
3	63.3	maksimum
4	84.4	sederhana
5	105.5	sederhana
6	126.6	sederhana

.../2-

- (a) Tentukan nombor kuantum bagi keadaan putaran selepas penyerapan yang menerbitkan jalur pada 63.3 cm^{-1} . (8 markah)
- (b) Tentukan panjang ikatan bagi molekul HCl. (10 markah)
- (c) Ramalkan frekuensi jalur (dalam unit cm^{-1}) yang keamatannya maksimum bagi spektrum mikrogelombang molekul D^{35}Cl pada suhu ini. (7 markah)
3. (a) Terangkan mengapa terbentuk cabang-P dan cabang-R dalam spektrum inframerah molekul-molekul dwiatom. (7 markah)
- (b) Peralihan getaran asas dan peralihan getaran overton yang pertama bagi molekul $^{14}\text{N}^{16}\text{O}$ masing-masing berlaku pada nombor gelombang 1876.06 cm^{-1} dan 3724.20 cm^{-1} . Kiralah
- (i) nombor gelombang bagi getaran keseimbangan serta pemalar ketakharmonikannya dan
- (ii) tenaga penceraian spektroskopi dan tenaga penceraian keseimbangan bagi molekul ini. (18 markah)
4. (a) Spektroskopi inframerah dan spektroskopi Raman dapat mengukur frekuensi-frekuensi getaran sesuatu molekul. Nyatakan perbezaan di antara dua jenis spektroskopi ini dari segi
- (i) cara kerja
- (ii) syarat untuk berlakunya peralihan antara keadaan. (7 markah)

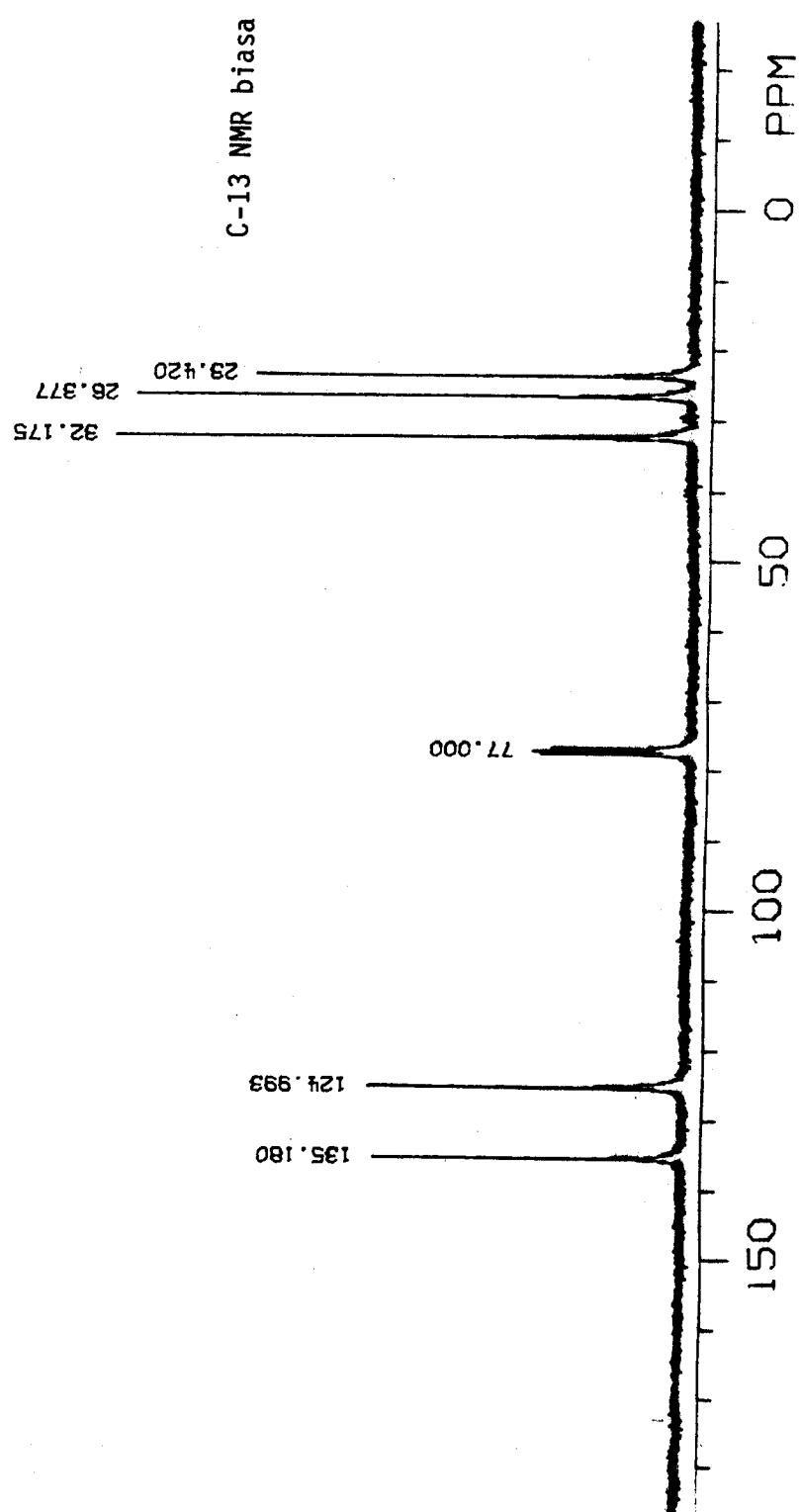
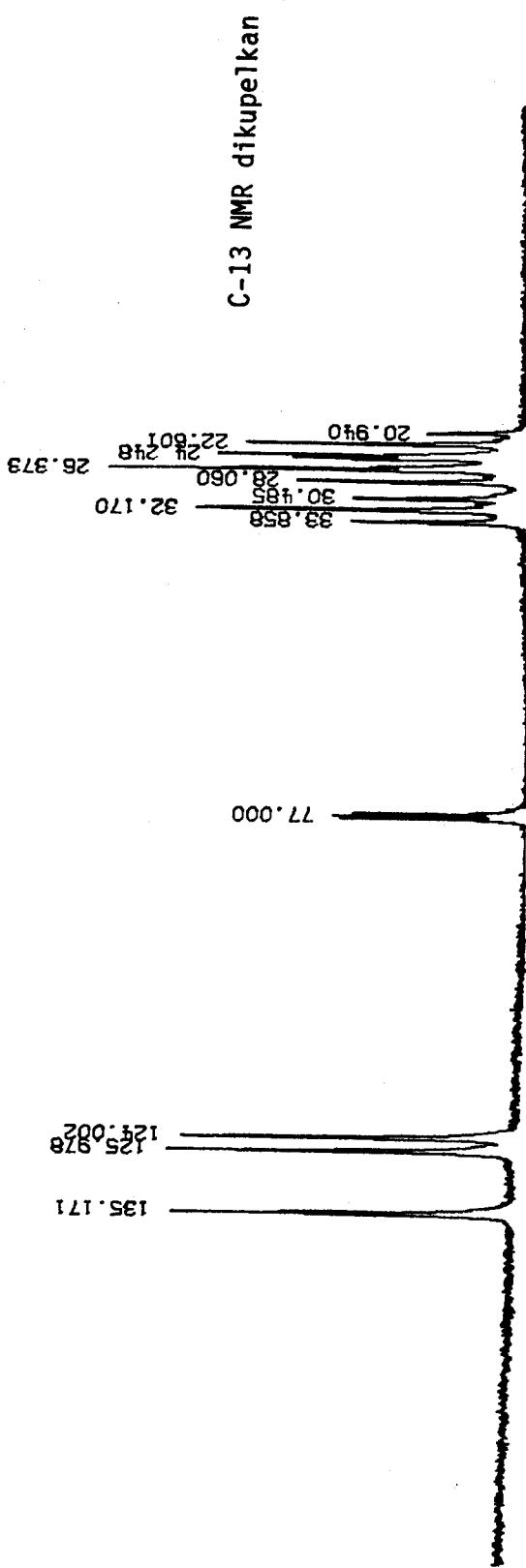
- (b) Spektrum mikrogelombang bagi molekul A_2B terdiri dari jalur-jalur yang berjarak 0.838 cm^{-1} antara jalur-jalur terhampir. Tiga frekuensi getarannya, iaitu 2223.76 cm^{-1} , 1284.91 cm^{-1} dan 588.78 cm^{-1} , adalah aktif inframerah dan aktif Raman. Apakah struktur molekul A_2B yang secocok dengan pemerhatian ini? (18 markah)

5. (a) Spektrum berikut adalah spektrum esr bagi anion benzena. Jelaskan spektrum itu dan juga tentukan pemalar pengkupenan a.



(12 markah)

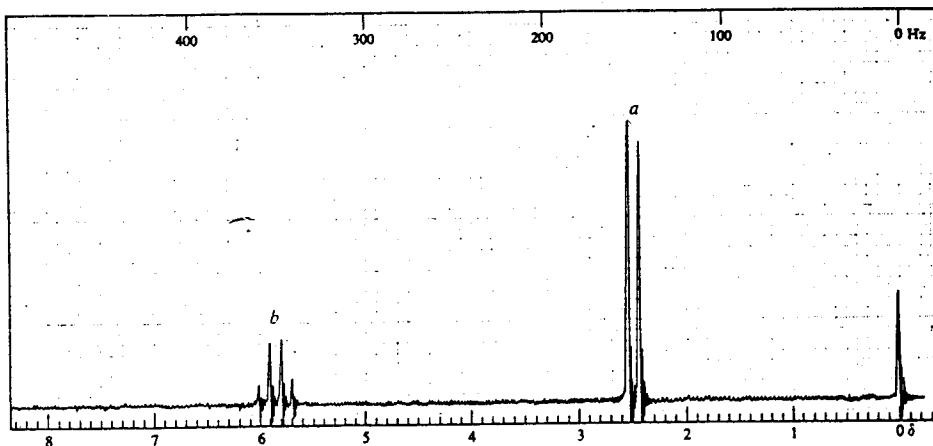
- (b) Getah asli mempunyai unit ulangan isoprena (C_5H_8). Spektrum-spektrum berikut adalah spektrum nmr C-13 biasa dan dikupelkan pada 75.5 MHz. Jelaskan spektrum-spektrum itu dan tentukan struktur C_5H_8 .



(13 markah)

6. Spektrum berikut adalah spektrum nmr proton untuk $C_2H_4Br_2$ pada 60 MHz. Tentukan anjakan kimia (dalam ppm dan Hz) bagi kumpulan jalur a dan jalur b daripada TMS. Berapakah pemalar pengkupelan J_{ab} ?

Jelaskan spektrum ini dan seterusnya tentukan struktur $C_2H_4Br_2$. Jika spektrumnya ditentukan pada 200 MHz, berapakah anjakan kimia dan pemalar pengkupelan (dalam Hz) bagi jalur a dan b?



(25 markah)

-0000000-

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 coulomb per mol, elektron
e	Cas elektron	$4.80 \times 10^{-10} \text{ esu}$ $1.60 \times 10^{-19} \text{ C atau coulomb}$
m_e	Jisim elektron	$9.11 \times 10^{-28} \text{ g}$ $9.11 \times 10^{-31} \text{ kg}$
m_p	Jisim proton	$1.67 \times 10^{-24} \text{ g}$ $1.67 \times 10^{-27} \text{ kg}$
h	Pemalar Planck	$6.626 \times 10^{-27} \text{ erg s}$ $6.626 \times 10^{-34} \text{ J s}$
c	Halaju cahaya	$3.0 \times 10^{10} \text{ cm s}^{-1}$ $3.0 \times 10^8 \text{ m s}^{-1}$
R	Pemalar gas	$8.314 \times 10^7 \text{ erg K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ $8.314 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ $0.082 \text{ } \text{ atm K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ $1.987 \text{ cal K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$
k	Pemalar Boltzmann	$1.380 \times 10^{-16} \text{ erg K}^{-1} \text{ molekul}^{-1}$ $1.380 \times 10^{-23} \text{ J K}^{-1} \text{ molekul}^{-1}$
g		981 cm s^{-2} 9.81 m s^{-2}
1 atm		76 cmHg $1.013 \times 10^6 \text{ dyn cm}^{-2}$ $101,325 \text{ N m}^{-2}$
$2.303 \frac{RT}{F}$		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	
		P = 31.0	Ca = 40.1	