

KUA 275/2 - Pengantar Spektroskopi Molekul

Tarikh: 26 Jun 1987

Masa: 2.45 petang - 4.45 petang
(2 jam)

Jawab EMPAT soalan sahaja.

Jawab setiap soalan dalam muka surat yang berasingan.

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

1. (a) Lampu merkuri, Hg, memancarkan cahaya yang tinggi keamatannya pada panjang gelombang 1849 Å dan 2537 Å, masing-masing terbit dari peralihan elektron $6^1P_1 \longrightarrow 6^1S_0$ dan $6^3P_1 \longrightarrow 6^1S_0$. Apakah konfigurasi elektron bagi tiap-tiap simbol keadaan teruja yang disebutkan itu? Konfigurasi elektron keadaan asasnya ialah $[Xe] 6s^2 4f^{14} 5d^{10}$.

(8 markah)

- (b) Keadaan elektron asas bagi molekul nitrogen, N_2 (nombor atom N, 7), bersimetri $^1\Sigma_g$ dan lima keadaan teruja yang terendah tenaganya bersimetri $^1\pi_g$, $^1\Sigma_u$, $^1\pi_u$, $^1\Sigma_u$ dan $^1\pi_u$. Peralihan dari keadaan asas ke keadaan teruja yang manakah yang dibenarkan? Tuliskan konfigurasi elektron molekul nitrogen bagi tiap-tiap keadaan di atas.

(17 markah)

.../2

2. (a) Tentukan bilangan jalur asas dalam spektrum inframerah dekat bagi molekul-molekul yang disenaraikan di bawah (jika ada),



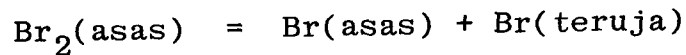
Dua dari molekul-molekul tersebut adalah linear manakala yang dua lagi tak linear.

(8 markah)

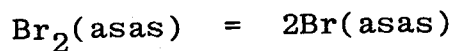
- (b) Terangkan mengapa getaran molekul yang sebenar merupakan pengayun yang tak harmonik.

(5 markah)

- (c) Spektrum berjalur bagi Br_2 menumpu (converge) pada 19750 cm^{-1} . Penceraian yang berlaku ialah



Peralihan atom bromin dari keadaan asas ke keadaan teruja yang berkenaan memerlukan tenaga yang sejajar dengan nombor gelombang 3685 cm^{-1} . Kira tenaga yang diperlukan untuk proses



(12 markah)

3. (a) Bagaimanakah anda boleh mendapatkan spektrum putaran tulen bagi molekul hidrogen, H_2 . Terangkan mengapa anda pilih cara tersebut.

(7 markah)

.../3

(b) Jika panjang ikatan untuk molekul H_2 ialah 7.417×10^{-11} m, berapakah jarak pemisahan antara jalur dalam spektrum di (a) di atas?

(9 markah)

(c) Dengan menganggap panjang ikatan dalam molekul H_2 dan HD adalah sama berapakah jarak pemisahan antara jalur dalam spektrum di atas bagi molekul HD?

(9 markah)

4. (a) Jarak antara jalur terdekat dalam spektrum inframerah dekat bagi gas HBr pada 300 K ialah 16.94 cm^{-1} . Lukiskan rupabentuk spektrum tersebut, sebagaimana yang anda jangka, dengan menunjukkan peralihan-peralihan $J \rightarrow J'$ bagi setiap jalur dan keamatan relatifnya. Anggap yang putaran molekul adalah tegar dan getarannya harmonik.

(15 markah)

(b) Berdasarkan kepada maklumat di (a) di atas cadangkan rupabentuk spektrum Raman bagi getaran-putaran molekul HBr pada suhu 300 K.

(10 markah)

5. (a) Terangkan mengapa pemalar putaran B bagi molekul dwiatom berbeza untuk nombor kuantum getaran, v , yang berbeza walau pun kedua-dua keadaan getaran dan putaran berada dalam keadaan elektron yang sama.

(5 markah)

.../4

(b) Huraikan pembentukan kepada jalur dan ekor jalur dalam spektrum inframerah dekat bagi setengah-tengah molekul dwiatom. (12 markah)

(c) Pemalar putaran bagi H₂ dan D₂ keadaan asas ialah masing-masing 60.809 cm⁻¹ dan 30.429 cm⁻¹. Adakah jarak keseimbangan antara nukleus, R₀, bagi kedua-dua molekul itu berbeza atau pada dasarnya sama? (8 markah)

6. (a) Berdasarkan kepada Jadual 1 dan Jadual 2 di bawah, ramalkan rupabentuk spektrum NMR bagi etil asetat (CH₃CO₂CH₂CH₃),

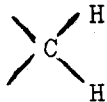
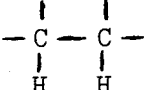
Jadual 1

Anjakan kimia bagi proton

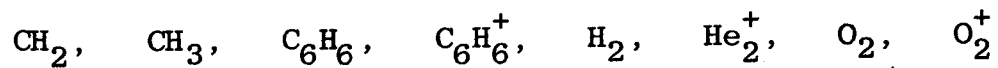
Sebatian	Anjakan kimia δ/ppm
Proton metil (CH ₃) ₄ Si	0.00
CH ₃ CH ₂ OH	1.17
CH ₃ COCH ₃	2.07
Proton metilena CH ₃ CH ₂ OH	3.59

Jadual 2

Pemalar pengkupelan spin-spin bagi proton

Struktur	J (H ₂)
	-20 hingga +6
	5.5 hingga 7.5

(b) Yang mana di antara spesies kimia yang berikut boleh dikesan oleh spektroskopi ESR?



Ramalkan rupabentuk spektrum ESR yang dijangka bagi setiap spesies tersebut dengan menganggap bahawa semua nukleus adalah dari isotop yang lebih banyak kelimpahannya.

(10 markah)

ooo0ooo

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	$8.314 \times 10^7 \text{ erg K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ $8.314 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ $0.082 \text{ l atm K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ $1.987 \text{ cal K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$
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	
O = 16.0	S = 32.0	P = 31.0	Ca = 40.1	