

UNIVERSITI SAINS MALAYSIA

Peperiksaan Semester Kedua
Sidang Akademik 1994/95

April 1995

KUA 275 - Pengantar Spektroskopi Molekul

Masa : (2 jam)

Jawab sebarang EMPAT soalan.

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) Jelaskan maksud anjakan kimia dalam spektroskopi NMR dan berikan sebab mengapa nukleus pada sekitaran yang berbeza mempunyai anjakan kimia yang berbeza.

(5 markah)

- (b) Pemalar pengkupelan selalu disebut dalam kajian spektroskopi NMR dan ESR. Jelaskan maksud sebutan tersebut bagi kedua-dua spektroskopi itu.

(5 markah)

- (c) Lakarkan spektrum NMR yang anda jangka bagi molekul yang mempunyai tiga jenis proton yang tak setara dari segi kimia dan kemagnetannya yang ditulis sebagai AMX yang mana anjakan kimia berbeza iaitu $\delta_A = 100$, $\delta_B = 200$ dan $\delta_C = 700$ Hz dan pemalar pengkupelannya ialah $J_{AB} = 9$, $J_{AX} = 7$ dan $J_{BX} = 3$ Hz.

(8 markah)

- (d) Lakarkan spektrum ESR bagi radikal $\text{CH}_3\text{CH}_2\bullet$ yang anda jangka dengan menunjukkan dua pemalar pengkupelan yang berbeza.

(7 markah)

2. (a) Pemalar putaran B bagi molekul dwiatom berubah dengan perubahan keadaan getaran dan keadaan elektron. Jelaskan mengapa demikian.

(7 markah)

- (b) Mengikut hukum taburan Boltzmann pendudukan relatif suatu aras tenaga E_l diberi sebagai

$$g_l \exp(-E_l/kT).$$

yang mana g_l ialah kegandaan aras yang ke l , k pemalar Boltzmann dan T suhu mutlak. Kira pendudukan relatif aras-aras $J = 1$ dan $J = 2$ bagi molekul N_2 pada suhu-suhu 4 K dan 300 K. Pemalar putaran bagi N_2 dalam keadaan asas ialah 2.010 cm^{-1} .

(10 markah)

- (c) Bandingkan jarak antara nukleus bagi CO pada keadaan elektron asas (pemalar putaran, 1.9314 cm^{-1}) dan keadaan elektron teruja (pemalar putaran, 1.6116 cm^{-1}).

(8 markah)

3. (a) Jelaskan pengwujudan jalur-jalur cabang -P dan cabang -R dalam spektrum inframerah molekul-molekul dwiatom. Bagi kebanyakan molekul dwiatom cabang-cabang P dan R ini bertindihan sehingga menerbitkan spektrum yang berkepala dan berekor jalur. Jelaskan fenomena ini.

(10 markah)

- (b) Jalur-jalur penyerapan getaran bagi HCL^{35} pada keadaan elektron asas ialah seperti berikut:

\underline{v}	$\underline{\bar{v}} \text{ (cm}^{-1}\text{)}$
1	2885.9
2	5668.0
3	8346.9
4	20923.1
5	13396.5

v ialah nombor kuantum keadaan getaran selepas penyerapan $v = 0 \rightarrow v = v$. Kira frekuensi getaran asas $\bar{\nu}_0$, pemalar ketakharmonikan tenaga penceraian spektroskopik dan tenaga penceraian keseimbangan.

(15 markah)

4. (a) Tentukan bilangan mod getaran bagi asetilena dan lukiskan mod-mod getaran tersebut. Jika regangan C-H yang simetrik dan tak simetrik masing-masing berada pada 3374 cm^{-1} dan 3287 cm^{-1} , regangan yang manakah aktif Raman? Berapakah jarak gelombang Raman yang diukur bagi regangan ini jika menggunakan cahaya tuju 4358 \AA ?
(8 markah)
- (b) Ramalkan rupabentuk spektrum inframerah bagi HCl pada 3000 K jika pemalar putarannya ialah 10.5909 cm^{-1} . Tunjukkan peralihan-peralihan J-J' bagi setiap jalurnya.
(10 markah)
- (c) Spektrum mikrogelombang bagi HBr berupa jalur-jalur halus yang terpisah antara satu sama lain sebanyak 16.94 cm^{-1} . Kira momen inertia dan jarak ikatan bagi DBr.
(7 markah)
5. (a) Tentukan simbol sebutan keadaan asas bagi atom merkuri (konfigurasi elektron $[]6s^2$). Apakah simbol-simbol sebutan keadaan teruja yang mungkin jika elektron valensinya melompat ke orbital 6p. Adakah semua peralihan dari keadaan asas ke keadaan-keadaan teruja itu dibenarkan? Jelaskan jawapan anda.
(8 markah)

- (b) Tentukan simbol sebutan keadaan asas bagi molekul N_2 . Apakah simbol-simbol sebutan keadaan teruja apabila elektron valensinya mengalami pengujaan ke orbitalan $2p\pi_g$. Adakah peralihan ini boleh diukur dengan spektroskopi penyerapan ultralembayung. Jelaskan.

(8 markah)

- (c) Jelaskan rupabentuk spektrum ultralembayung - ternampakan sesuatu molekul dengan menggunakan prinsip Frank-Condon.

(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 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 dyne 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	Sn = 118.7
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	Pa = 40.1	Mg = 24.0	