

UNIVERSITI SAINS MALAYSIA

Peperiksaan Kursus Semasa Cuti Panjang
Sidang Akademik 1994/95

Jun 1995

KUA 275 - Pengantar Spektroskopi Molekul

Masa : (2 jam)

Jawab sebarang EMPAT soalan.

Hanya EMPAT jawapan yang pertama sahaja akan diperiksa.

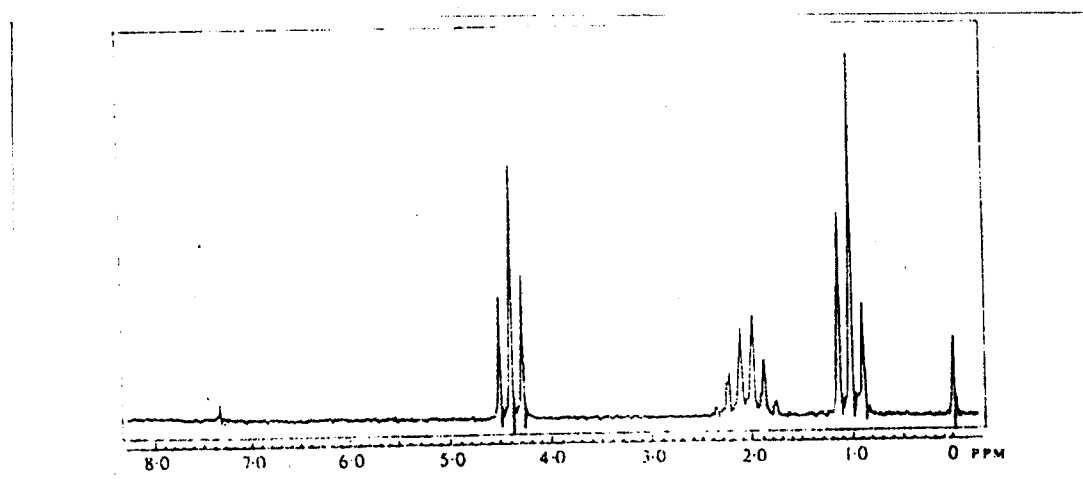
Jawab tiap-tiap soalan pada muka surat yang baru.

Kertas ini mengandungi LIMA soalan semuanya (4 muka surat)

1. (a) Berdasarkan jadual di bawah
- (i) ramalkan rupabentuk spektrum NMR bagi proton dalam molekul $\text{CH}_3\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CO}_2\text{H}$;
 - (ii) tentukan struktur molekul $\text{C}_3\text{H}_7\text{NO}_2$ yang mempunyai spektrum NMR bagi proton seperti dalam Rajah 1.

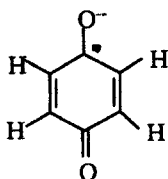
(15 markah)

Rajah 1

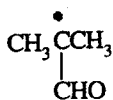


- (b) Lakarkan rupabentuk spektrum ESR yang anda jangka bagi radikal

(i)



(ii)



(10 markah)

2. Spektrum inframerah dekat bagi molekul HI menunjukkan satu siri jalur yang berjarak terhampir 12.8 cm^{-1} pada 25°C . Kira

- momen inertia,
- jarak ikatan,
- frekuensi getaran keseimbangan dan
- pemalar daya

bagi molekul ini. Lakarkan rupabentuk spektrum ini dengan menunjukkan keamatan relatif bagi setiap jalur.

(Jisim atom relatif I = 127)

(25 markah)

3. (a) Peralihan getaran dalam molekul H^{35}Cl berlaku pada 2989.74 cm^{-1} . Kira pemalar dayanya dengan menganggap getaran tersebut merupa seperti pengayun harmonik. Jika molekul D^{35}Cl mempunyai pemalar daya yang sama seperti H^{35}Cl , dimanakah peralihan getarannya akan berlaku?
(8 markah)
- (b) Tentukan bilangan mod getaran bagi molekul CO_2 yang berbentuk linear. Mod-mod getaran yang manakah boleh dikesan dengan spektroskopi inframerah dan mod-mod getaran yang mana pula boleh dikesan dengan spektroskopi Raman? Berikan sebab ke atas pemilihan anda itu.
(9 markah)
- (c) Terangkan bagaimana serakan Raman telah digunakan untuk mengwujudkan spektroskopi Raman yang dapat mengesan mod getaran tertentu dalam sesuatu molekul.
(8 markah)
4. (a) Berikan perbezaan antara spektroskopi inframerah dekat dan inframerah jauh bagi molekul-molekul dwiatom.
(10 markah)

- (b) Kira jarak gelombang bagi jalur-jalur dalam spektrum inframerah H^{35}Cl dan D^{35}Cl bagi peralihan $\Delta v = 1$ dan $J = 0 \rightarrow J' = 1$, $J = 1 \rightarrow J' = 0$, $J = 1 \rightarrow J' = 2$ dan $J = 2 \rightarrow J' = 1$. Anggap bahawa jarak ikatan bagi kedua-dua molekul ialah 1.27 \AA dan frekuensi getaran asas $\nu_0 = 8 \times 10^{13} \text{ saat}^{-1}$ bagi H^{35}Cl .

(15 markah)

5. (a) Tentukan simbol sebutan keadaan asas bagi atom yang mempunyai konfigurasi elektron $[] 3s^2 3p^5$. Apakah pula simbol sebutan keadaan teruja jika konfigurasi elektronnya ialah $[] 3s^2 3p^4 4d^1$? Peralihan ke keadaan teruja yang manakah yang dibenarkan?

(15 markah)

- (b) Tentukan simbol-simbol sebutan keadaan teruja yang mungkin bagi molekul oksigen apabila salah satu elektron valensnya menduduki orbital π_g yang lebih tinggi tenaganya. Adakah peralihan ke keadaan ini dibenarkan? Terangkan jawapan anda.

(10 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
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	Mg = 24.0
Sn = 118.7	Cs = 132.9			