

UNIVERSITI SAINS MALAYSIA

Peperiksaan Semester Kedua

Sidang Akademik 1995/96

April 1996

KTT 211 Kimia Takorganik I

Masa : [3 jam]

Jawab LIMA soalan sahaja. Soalan 1 hingga soalan 4 adalah wajib.

Pilih sebarang satu soalan daripada soalan 5 hingga soalan 7.

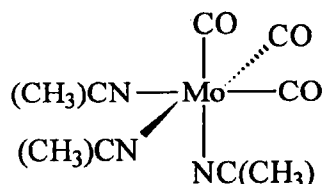
Hanya LIMA jawapan yang pertama sahaja akan diperiksa.

Jawab tiap-tiap soalan pada muka surat yang baru.

Kertas ini mengandungi TUJUH soalan semuanya bersama satu lampiran

Jadual Karakter dan satu Jadual Pemalar (10 muka surat).

1. (a) Bagi kompleks $\text{Mo}(\text{CO})_3(\text{NC}(\text{CH}_3))_3$ dengan struktur di bawah, jawab soalan-soalan berikut:



- i. Berikan kumpulan titik bagi kompleks di atas.
- ii. Dengan menggunakan fungsi dasar ikatan $\text{Mo}-\text{CO}$, $\Gamma_{\text{Mo}-\text{CO}}$, dapatkan perwakilan takterturunkan.
- iii. Berikan bilangan jalur getaran bagi spektrum *infra merah* dan *Raman* yang terdapat pada molekul tersebut.

(15 markah)

- b) Berpandukan molekul yang sesuai, dapatkan perwakilan-perwakilan Γ_{px} , Γ_{py} dan Γ_{pz} bagi kumpulan titik C_{2v} .

(5 markah)

2. (a) Terangkan secara ringkas ungkapan yang berkaitan dengan pemalar-pemalar berikut :

- i. Pemalar putaran, B.
- ii. Pemalar herotan emparan, D.

(6 markah)

- (b) Kedudukan jalur spektrum penyerapan mikrogelombang bagi molekul $H^{79}Br$ pada suhu 300 K adalah seperti berikut :

ν/cm^{-1}	<u>Keamatan</u>
121.63	lemah
138.57	sederhana
155.26	sederhana
171.82	kuat
188.53	sederhana

- i. Tentukan peralihan $J \rightarrow J'$ yang memberikan tiap-tiap jalur di atas.

(5 markah)

- ii. Terangkan perubahan jarak antara jalur dalam spektrum tersebut.

(5 markah)

- iii. Nyatakan faktor-faktor yang menyebabkan perbezaan dalam keamatan bagi tiap-tiap jalur tersebut.

(4 markah)

3. (a) Ramal dan lakarkan kedudukan jalur-jalur bagi getaran untuk CO dan CS di dalam spektrum IR bagi sebatian piramid segiempat sama $\text{Cr}(\text{CO})_4(\text{CS})$.

(5 markah)

- (b) Pemalar daya bagi $\text{C}\equiv\text{O}$ ialah 1600 N m^{-1} dan bagi $\text{C}\equiv\text{Te}$ ialah 400 N m^{-1} . Dapatkan nilai $\bar{\nu}$ untuk getaran $\text{C}\equiv\text{Te}$ di dalam kawasan IR.

(5 markah)

- (c) Berikan penjelasan bagi turutan nilai $\bar{\nu}$ seperti berikut:

$$\bar{\nu}(\text{C-H}) > \bar{\nu}(\text{C}\equiv\text{O}) > \bar{\nu}(\text{C}\equiv\text{Se}) > \bar{\nu}(\text{Re}\equiv\text{Re}) > \bar{\nu}(\text{Re-Re})$$

(5 markah)

- (d) Berikan peraturan yang digunakan bagi menentukan sifat keaktifan optis sesuatu molekul mengikut simetri molekul. Berikan satu contoh.

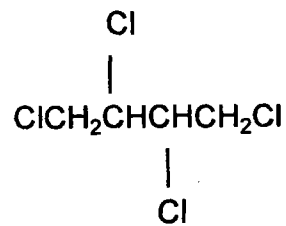
(5 markah)

4. (a) Terangkan maksud bagi istilah-istilah berikut dalam spektroskopi resonans magnetik nukleus (RMN).

- i. Anjakan kimia, δ
- ii. Pengkupelan spin-spin.

(6 markah)

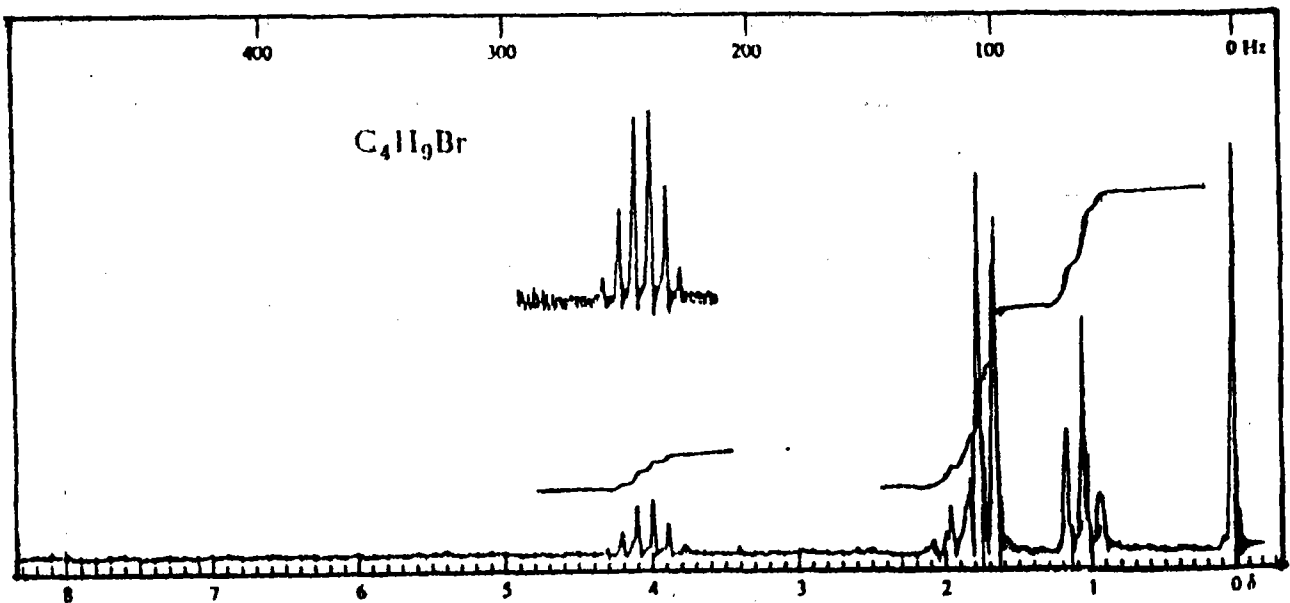
(b) Lakarkan spektrum NMR ^1H yang sesuai bagi molekul berikut :



(4 markah)

(c) Spektrum ^1H NMR bagi sebatian $\text{C}_4\text{H}_9\text{Br}$ ditunjukkan dalam Rajah 1. Cadangkan satu struktur molekul yang sesuai bagi sebatian tersebut dengan memberikan sebab yang menasabah.

(10 markah)



Rajah 1. Spektrum NMR ^1H bagi sebatian $\text{C}_4\text{H}_9\text{Br}$.

5. Pertimbangkan sebatian *trans*-1,2-dikloroetilena, $C_2H_2Cl_2$.
- Berikan semua operasi simetri molekul tersebut.
 - Berikan kumpulan titik sebatian tersebut.
 - Dengan menggunakan Jadual Karakter yang bersesuaian, dapatkan perwakilan terturunkan bagi *trans*-1,2-dikloroetilena, $C_2H_2Cl_2$ dengan menggunakan $3N$ sebagai fungsi dasar.
 - Dapatkan perwakilan takterturunkan bagi perwakilan Γ_{3N} di dalam bahagian (iii).
 - Berikan perwakilan-perwakilan yang menunjukkan aktif inframerah dan/atau Raman.

(20 markah)

6. (a) Huraikan prinsip asas spektroskopi Mössbauer dan nyatakan perbezaannya dengan spektroskopi RMN.

(10 markah)

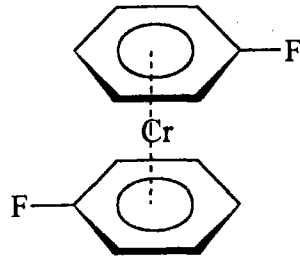
- (b) Lukiskan struktur bagi satu molekul yang mempunyai setiap kumpulan titik berikut.

- | | |
|--------------|---------------|
| (i) D_{4h} | (ii) C_{4v} |
| (iii) C_3 | (iv) D_{2h} |
| (v) C_s | |

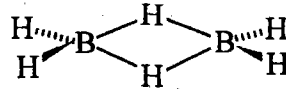
(5 markah)

(c) Berikan kumpulan titik bagi setiap molekul berikut:

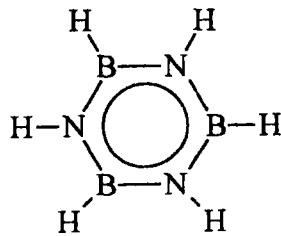
(i)



(ii)



(iii)



(5 markah)

7. (a) i. Tentukan simbol sebutan keadaan teruja bagi molekul CO apabila ia mempunyai konfigurasi elektron $[\dots] 2p\sigma^1$ (3 markah)
- ii. Jika CO digantikan dengan NO, jelaskan sama ada peralihan elektron dari keadaan asas ke keadaan teruja dibenarkan ataupun tidak. (4 markah)

- (b) Tentukan sebutan keadaan elektron bagi molekul HCl,
- i. pada keadaan asas (konfigurasi elektron [...] $3s\sigma_g^2$);
 - ii. pada keadaan teruja (konfigurasi elektron [...] $3s\sigma_u^1$).
- (5 markah)
- (c) Huraikan prinsip asas dalam spektroskopi resonans spin elektron (RSE).
- (8 markah)

oooOOOooo

► The D_{nh} Groups

KTT2-11

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		x^2, y^2, z^2
B_{1g}	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	R_z	xy
B_{2g}	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	R_y	xz
B_{3g}	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	R_x	yz
A_u	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1		
B_{1u}	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	z	
B_{2u}	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	y	
B_{3u}	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	x	

D_{2h}	E	$2C_2$	$3C_2$	σ_h	$2S_6$	$3\sigma_v$	(x axis coincident with C_2)				
A_1'	1	1	1	1	1	1					$x^2 + y^2, z^2$
A_2'	1	1	-1	1	1	-1	R_z				
E'	2	-1	0	2	-1	0	(x, y)				$(x^2 - y^2, xy)$
A_1''	1	1	1	-1	-1	-1					
A_2''	1	1	-1	-1	-1	1	z				
E''	2	-1	0	-2	1	0	(R_x, R_y)				(xz, yz)

D_{6h}	E	$2C_6$	C_2	$2C_3$	$2C_2'$	$2C_2''$	i	$2S_6$	σ_h	$2\sigma_v$	$2\sigma_d$	(x axis coincident with C_2')	
A_{1g}	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1		$x^2 + y^2, z^2$
A_{2g}	1	1	1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	R_z	
B_{1g}	1	-1	1	1	-1	1	1	-1	1	1	-1		$x^2 - y^2$
B_{2g}	1	-1	1	-1	1	1	1	-1	1	-1	1		xy
E_g	2	0	-2	0	0	0	2	0	-2	0	0	(R_x, R_y)	(xz, yz)
A_{1u}	1	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1		
A_{2u}	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	z	
B_{1u}	1	-1	1	1	-1	-1	-1	1	-1	-1	1		
B_{2u}	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	-1		
E_u	2	0	-2	0	0	0	-2	0	2	0	0	(x, y)	

D_{6h}	E	$2C_6$	$2C_3$	C_2	$3C_2'$	$3C_2''$	i	$2S_6$	$2S_6$	σ_h	$3\sigma_v$	$3\sigma_d$	(x axis coincident with C_2')	
A_{1g}	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1		$x^2 + y^2, z^2$
A_{2g}	1	1	1	1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	R_z	
B_{1g}	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1		$x^2 - y^2$
B_{2g}	1	-1	1	-1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1		xy
E_{1g}	2	1	-1	-2	0	0	2	1	-1	-2	0	0	(R_x, R_y)	(xz, yz)
E_{2g}	2	-1	-1	2	0	0	2	-1	-1	2	0	0		$(x^2 - y, xy)$
A_{1u}	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	z	
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		

► The D_{nd} Groups

D_{2d}	E	$2S_4$	C_2	$2C_2'$	$2\sigma_d$	(x axis coincident with C_2')					
A_1	1	1	1	1	1						$x^2 + y^2, z^2$
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	z					xy
E	2	0	-2	0	0	(x, y), (R_x, R_y)					(xz, yz)

D_{3d}	E	$2C_3$	$3C_2$	i	$2S_6$	$3\sigma_d$	(x axis coincident with C_2)				
A_{1g}	1	1	1	1	1	1					$x^2 + y^2, z^2$
A_{2g}	1	1	-1	1	1	-1	R_z				
E_g	2	-1	0	2	-1	0	(R_x, R_y)				$(x^2 - y^2, xy); (xz, yz)$
A_{1u}	1	1	1	-1	-1	-1					
A_{2u}	1	1	-1	-1	-1	1	z				
E_u	2	-1	0	-2	1	0	(x, y)				

THE AXIAL GROUPS

► The C_n Groups

C_2	E	C_2		
A	1	1	z, R_z	x^2, y^2, z^2, xy
B	1	-1	x, y, R_x, R_y	yz, xz

► The C_{nv} Groups

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_{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		$(x^2 - y^2, xy)$

► The C_{nh} Groups

C_{2h}	E	C_2	i	σ_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	

T_d	E	$8C_3$	$3C_2$	$6S_4$	$6\sigma_d$		
A_1	1	1	1	1	1		$x^2 + y^2 + z^2$
A_2	1	1	1	-1	-1		
E	2	-1	2	0	0		$(2z^2 - x^2 - y^2, x^2 - y^2)$
T_1	3	0	-1	-1	-1	(R_x, R_y, R_z)	
T_2	3	0	-1	-1	1	(x, y, z)	(xy, xz, yz)

LAMPIRAN 2

Pemalar Asas dalam Kimia Fizik

Simbol	Keterangan	Nilai
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	Te = 128.0		