No. of Printed Pages : 11 **CHE–10**

BACHELOR OF SCIENCE (B. Sc.)

Term-End Examination

December, 2024

CHE-10 : SPECTROSCOPY

Time : 2 Hours *Maximum Marks : 50*

Note : *Answer any* ***five*** *questions. All questions carry equal marks. Use of Log tables and Non-programmable/Scientific calculators is allowed.*

---

1. (a) Derive term-symbols for carbon atom in its electronic configuration $1s^2\ 2s^2 2p^2$. 4

   (b) Define improper axis of rotation. 2

   (c) What are the selection rules for pure rotational Raman spectra ? 2

   (d) Which lines in Raman spectrum are more intense and why ? 2

2. (a) Define symmetry elements. Write the symmetry elements present in the following molecules : 7

   (i) PCl_3

   (ii) H_2O

(b) For an A_2B_2 type molecule, the following spectroscopic data are available : 3

Wave number (cm^{-1})	IR	Raman
3374	Inactive	Active (polarized)
1974	Inactive	Active (polarized)
3287	Active (PR)	Inactive
612	Inactive	Active (weak)
729	Active (PQR)	Inactive

Deduce its structure.

3. (a) Define chemical shift. Give its expression. List the factors which affect the chemical shift. 4

(b) Sketch low resolution and high resolution NMR spectrum of ethanol. 3

(c) Explain charge transfer spectra with a suitable example. 3

4. (a) Why is $K_2Cr_2O_7$ intensely coloured ? 2

(b) Which of the following species can show ESR spectra ? 2

(i) $CH_3CH_2\dot{C}H_2$

(ii) NO

(iii) H_2

(iv) NaCl

(c) Why is highly intense source of radiation used for recording Raman spectra ? 2

(d) Draw the block diagram of microwave spectrometer and explain the role of each unit. 4

5. (a) What are *two* commonly used methods of ionisation in mass spectrometry ? Give the merits and demerits of the methods. 4

(b) What are the fragments expected in the mass spectrum of $CH_3COCH_2CH_3$? 2

(c) Draw ESR spectrum of $\dot{C}H_3$ methyl radical. 2

(d) What causes hyperfine splitting in ESR spectrum of $H^\bullet$? 2

6. (a) Discuss the effect of solvent on $\pi - \pi^*$ transitions in electronic spectra. 4

(b) Write short notes on the following : 6

(i) Franck-Condon's principle

(ii) Pre-dissociation spectra

(iii) Bathochromic shift

7. (a) What are fundamental transitions ? If the fundamental transition for O – H species is observed at 3735 cm^{-1}, then what would be the position of corresponding transition for O – D species ? 4

Given that :

$$m_O = 15.9949 \times 10^{-3} \text{ kg}$$

$$m_H = 1.007825 \times 10^{-3} \text{ kg}$$

$$m_D = 2.014101 \times 10^{-3} \text{ kg}$$

(b) The following spectral data is exhibited by an organic compound : 6

Mol. wt. : 108 (not acidic in nature)

UV-λ_{max} : 254 and 202 nm

IR : 3420, 3064, 1500 and 1455 cm^{-1}

NMR $(\delta, CDCl_3)$: 3.85 (*s*, 1H), 4.55 (*s*, 2H)

and 7.25 (*s*, 5H)

Mass (*m*/*z*) : 108, 107 and 77

Arrive at the structure of the compound using the above spectral data. Also assign the signals to various structural units present in the molecule.

CHE–10

विज्ञान स्नातक (बी. एस-सी.)

सत्रांत परीक्षा

दिसम्बर, 2024

सी.एच.ई.-10 : स्पेक्ट्रमिकी

समय : 2 घण्टे *अधिकतम अंक : 50*

नोट : *किन्हीं* ***पाँच*** *प्रश्नों के उत्तर दीजिए। सभी प्रश्नों के अंक समान हैं। लॉग सारणियों तथा नॉन-प्रोग्रामीय/वैज्ञानिक कैल्कुलेटरों के प्रयोग की अनुमति है।*

1. (क) कार्बन परमाणु के लिए इसकी इलेक्ट्रॉनिक अवस्था $1s^2 2s^2 2p^2$ के लिए पद-प्रतीक व्युत्पन्न कीजिए। 4

   (ख) घूर्णन के व्यामिश्र अक्ष की परिभाषा दीजिए। 2

   (ग) शुद्ध घूर्णन रामन स्पेक्ट्रम के लिए क्या वरण नियम हैं ? 2

(घ) रामन स्पेक्ट्रम में कौन-सी रेखाएँ अधिक तीव्र होती हैं और क्यों ? 2

2. (क) सममिति तत्वों को परिभाषित कीजिए। निम्नलिखित अणुओं में उपस्थित सममिति तत्वों को बताइए : 7

(i) PCl_3

(ii) H_2O

(ख) किसी A_2B_2 प्रकार के अणु के लिए निम्नलिखित स्पेक्ट्रमी आँकड़े प्राप्त हुए : 3

तरंग संख्या $\left(cm^{-1}\right)$	अवरक्त	रामन
3374	अक्रिय	सक्रिय (ध्रुवित)
1974	अक्रिय	सक्रिय (ध्रुवित)
3287	सक्रिय (PR)	अक्रिय
612	अक्रिय	सक्रिय (दुर्बल)
729	सक्रिय (PQR)	अक्रिय

इसकी संरचना ज्ञात कीजिए।

3. (क) रासायनिक सृति की परिभाषा दीजिए। इसका व्यंजक लिखिए। रासायनिक सृति को प्रभावित करने वाले कारकों की सूची बनाइए। 4

(ख) एथेनॉल के निम्न विभेदन और उच्च विभेदन एन. एम. आर. स्पेक्ट्रमों को आरेखित कीजिए। 3

(ग) उचित उदाहरण सहित आवेश स्थानांतरण स्पेक्ट्रम की व्याख्या कीजिए। 3

4. (क) $K_2Cr_2O_7$ का रंग गहरा क्यों होता है ? 2

(ख) निम्नलिखित में से कौन-सी स्पीशीज़ ई. एस. आर. स्पेक्ट्रम प्रदर्शित कर सकती हैं ? 2

(i) $CH_3CH_2\dot{C}H_2$

(ii) NO

(iii) H_2

(iv) NaCl

(ग) रामन स्पेक्ट्रमों के अभिलेखन के लिए विकिरण के उच्च तीव्रता वाले स्रोत की आवश्यकता क्यों होती है ? 2

(घ) सूक्ष्म तरंग स्पेक्ट्रममापी का खण्ड आरेख बनाइए और उसके प्रत्येक घटक के कार्य की व्याख्या कीजिए। 4

5. (क) द्रव्यमान स्पेक्ट्रमिकी में आयनन के लिए प्रयुक्त सबसे सामान्य तौर पर कौन-सी **दो** विधियाँ प्रयुक्त की जाती हैं ? इन दोनों विधियों के लाभ और हानियाँ दीजिए। 4

(ख) $CH_3COCH_2CH_3$ के द्रव्यमान स्पेक्ट्रम में कौन-से खण्ड प्राप्त होंगे ? 2

(ग) मेथिल मूलक $^{\bullet}CH_3$ का ई. एस. आर. स्पेक्ट्रम आरेखित कीजिए। 2

(घ) $H^{\bullet}$ के इ. एस. आर. स्पेक्ट्रम में अतिसूक्ष्म विपाटन किस कारण होता है ? 2

6. (क) इलेक्ट्रॉनिक स्पेक्ट्रम में $\pi - \pi^*$ संक्रमणों पर विलायक के प्रभाव की चर्चा कीजिए। 4

(ख) निम्नलिखित पर संक्षिप्त टिप्पणियाँ लिखिए : 6

(i) फ्रैंक-कोण्डान का सिद्धान्त

(ii) पूर्व-वियोजन स्पेक्ट्रम

(iii) वर्णोत्कर्षी सृति

7. (क) मूल संक्रमण क्या होते हैं ? यदि O – H स्पीशीज़ का मूल संक्रमण 3735 cm^{-1} पर प्रदर्शित होता हो, तो O – D स्पीशीज़ के लिए संगत समीकरण किस स्थिति पर प्रदर्शित होगा ? 4

दिया गया है :

$$m_O = 15.9949 \times 10^{-3} \text{ kg}$$

$$m_H = 1.007825 \times 10^{-3} \text{ kg}$$

$$m_D = 2.014101 \times 10^{-3} \text{ kg}$$

(ख) किसी कार्बनिक यौगिक के लिए निम्नलिखित स्पेक्ट्रमी आँकड़े प्राप्त हुए : 6

अणुभार : 108 (यह अम्लीय प्रकृति का नहीं है।)

पराबैंगनी λ_{max} : 254 और 202 nm

अवरक्त : 3420, 3064, 1500 और 1455 cm^{-1}

एन.एम.आर. $(\delta, CDCl_3)$: 3.85 (एकक, 1H), 4.55 (*s*, 2H) और 7.25 (एकक, 5H)

द्रव्यमान (m/z): 108, 107 और 77

ऊपर दिए गए स्पेक्ट्रमी आँकड़ों के आधार पर यौगिक की संरचना निर्धारित कीजिए। संकेतों को अणु में उपस्थित विभिन्न संरचनात्मक इकाइयों के साथ संबंधित कीजिए।

× × × × × × ×