No. of Printed Pages : 12 **CHE–10**

BACHELOR OF SCIENCE (B. Sc.)

Term-End Examination

December, 2025

CHE-10 : SPECTROSCOPY

Time : 2 Hours *Maximum Marks : 50*

Note : *(i)* *Answer any* ***five*** *questions.*

(ii) *All questions carry equal marks.*

(iii) *Use of Log tables and Non-programmable/Scientific calculators is allowed.*

(iv) $R_H = 1.09677 \times 10^7 m^{-1}$

$h = 6.626 \times 10^{-34}$ Js

$\beta_e = 9.274 \times 10^{-24}$ JT^{-1}

---

1. (a) Calculate the $\bar{\upsilon}$ for the first spectral line of Balmer series for H atom. 2

(b) Calculate the energy associated with a radiation having $\lambda = 430$ nm. 2

(c) Derive the term-symbol for the *p* state of H atom. 3

(d) What is an *n*-fold axis of symmetry ? Explain using an example. 3

2\. (a) Using VSEPR theory, find the shape of PCl_3 molecule. 2

(b) "Although all transitions with $\Delta J = \pm 1$ have same transition probability, the lines corresponding to these do not have same intensity." Explain. 2

(c) Calculate the moment of inertia of $^{12}C^{16}O$. Given that atomic masses of $^{12}C = 12.0000$ and $^{16}O = 15.9994$; bond length = 1.1 Å. 3

(d) Using the appropriate expressions for a rigid rotor, show that the spectral lines have a spacing (in cm^{-1}) 2B. 3

3. (a) Show that for the vibrational spectrum of HCl and DCl :

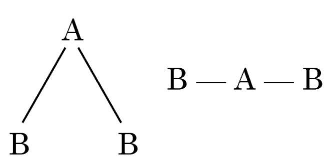
$$\frac{\upsilon_{osc}^{HCl}}{\upsilon_{osc}^{DCl}} = \sqrt{2}$$

Given that atomic masses of H, D and Cl are 1, 2 and 35.5 respectively. 3

(b) Calculate and draw the number of stretching and bending modes of water molecule. 3

(c) Describe the origin of P and R branches in vibrational-rotational spectrum of CO behaving as a rigid rotor and harmonic oscillator. 4

4. (a) How can you differentiate between the following structures using IR and Raman spectroscopy ? 2



(b) Arrange the given molecules in order of decreasing $>C=O$ IR frequency giving reasons : 4

(i) $CH_3-\overset{O}{\overset{\|}{C}}-CH_3$, $CH_3-\overset{O}{\overset{\|}{C}}-CH_2CH_3$, $CH_3-\overset{O}{\overset{\|}{C}}-CH=CH_2$

(ii) $H-\overset{O}{\overset{\|}{C}}-H$, $H_3C-\overset{O}{\overset{\|}{C}}-H$, $CH_3-\overset{O}{\overset{\|}{C}}-CH_3$

(c) For H_2 molecule, the spacing between S-branch lines in the Raman spectrum is 243.2 cm^{-1}. Calculate H–H bond length. Given that mass of a H atom = 1.673×10^{-27} kg. 4

5. (a) Explain the following terms : 2

(i) Hyperchromic shift

(ii) Hyperchromic effect

(b) The IR and Raman spectral data of N_2O is given below. Deduce the structure of N_2O from this information : 4

$\bar{\upsilon}/cm^{-1}$	IR	Raman
589	Strong, PQR band	—
1285	Very strong, PR band	Very strong
2224	Very strong, PR band	Strong

(c) Draw and explain the crystal field splitting of *d*-orbitals of metal ion in complexes having tetrahedral geometry. 4

6. (a) Draw and explain the ^1H-NMR spectrum of acetaldehyde. 4

(b) An inorganic compound having one unpaired electron shows a strong e.s.r. line at the frequency 9.5 GHz. Calculate the *g*-value of the line, $B_z = 0.15$ T. 2

(c) Discuss all possible electronic transitions in polyatomic molecules using an appropriate diagram. 4

7. (a) Explain McLafferty rearrangement with an example. 3

(b) Explain the term 'band pass width'. 2

(c) The following data is obtained for a compound having molecular formula C_7H_8O. 5

Mol. wt : 108

Nature : Not acidic

IR spectrum : Indicates presence of –OH group

UV : λ_{max} at 254 nm and 202 nm

NMR (δ, $CDCl_3$) : 3.85 (*s*, 1H), 4.55 (*s*, 2H), 7.25 (*s*, 5H)

Mass spectrum : (*m*/*z*) 108, 107, 79, 77, 51.

Deduce the structure of the compound.

CHE–10

विज्ञान स्नातक

(बी. एस-सी.)

सत्रांत परीक्षा

दिसम्बर, 2025

सी.एच.ई.-10 : स्पेक्ट्रमिकी

समय : 2 घण्टे *अधिकतम अंक : 50*

नोट : *(i)* *किन्हीं **पाँच** प्रश्नों के उत्तर दीजिए।*

(ii) *सभी प्रश्नों के समान अंक है।*

(iii) *लॉग सारणियों और नॉन-प्रोग्रामीय कैल्कुलेटरों या साइंटिफिक कैल्कुलेटरों के उपयोग की अनुमति है।*

(iv) $R_H = 1.09677 \times 10^7 m^{-1}$

$h = 6.626 \times 10^{-34}$ Js

$\beta_e = 9.274 \times 10^{-24}$ JT^{-1}

1\. (क) H परमाणु की बामर श्रेणी की प्रथम स्पेक्ट्रमी रेखा के लिए $\bar{\upsilon}$ परिकलित कीजिए। 2

(ख) $\lambda = 430$ nm वाले किसी विकिरण के साथ संबंद्ध ऊर्जा परिकलित कीजिए। 2

(ग) हाइड्रोजन परमाणु की p अवस्था के लिए पद–प्रतीक व्युत्पन्न कीजिए। 3

(घ) सममिति का n-गुना अक्ष क्या होता है ? एक उदाहरण के उपयोग द्वारा व्याख्या कीजिए। 3

2\. (क) VSEPR सिद्धांत के उपयोग द्वारा PCl_3 अणु का आकार ज्ञात कीजिए। 2

(ख) "यद्यपि $\Delta J = \pm 1$ वाले सभी संक्रमणों की संक्रमण प्रायिकता होती है, परन्तु उनके संगत रेखाओं की समान तीव्रता नहीं होती है।" व्याख्या कीजिए। 2

(ग) $^{12}C^{16}O$ का जड़त्व आघूर्ण परिकलित कीजिए। यदि ^{12}C और ^{16}O के परमाणु द्रव्यमान क्रमशः 12.0000 और 15.9994 हैं और आबंध लम्बाई = 1.1 Å हो। 3

(घ) किसी दृढ़ घूर्णक के लिए उपयुक्त व्यंजकों का उपयोग करते हुए दर्शाइए कि स्पेक्ट्रमी रेखाओं के बीच की दूरी (cm^{-1} में) 2B है। 3

3. (क) HCl और DCl के कम्पन स्पेक्ट्रमों के लिए दर्शाइए कि :

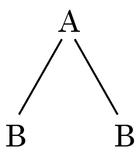
$$\frac{\upsilon_{osc}^{HCl}}{\upsilon_{osc}^{DCl}} = \sqrt{2}$$

दिया गया है : H, D और Cl के परमाणु द्रव्यमान क्रमशः 1, 2 और 35.5 हैं। 3

(ख) जल के अणु के लिए तनन और बंकन विधाओं को परिकलित कीजिए और आरेखित कीजिए। 3

(ग) दृढ़ घूर्णक और आवर्ती दोलक के समान व्यवहार कर रहे CO के कम्पन-घूर्णन स्पेक्ट्रम में P और R शाखाओं की उत्पत्ति का वर्णन कीजिए। 4

4. (क) अवरक्त और रमन स्पेक्ट्रमिकी के उपयोग द्वारा आप निम्नलिखित संरचनाओं में किस प्रकार भेद कर सकते हैं ? 2



$$B — A — B$$

(ख) कारण देते हुए दिए गए अणुओं को $>C = O$ अवरक्त आवृत्ति के घटते क्रम में व्यवस्थित कीजिए : 4

(i) $CH_3—\overset{O}{\overset{||}{C}}—CH_3$, $CH_3—\overset{O}{\overset{||}{C}}—CH_2CH_3$, $CH_3—\overset{O}{\overset{||}{C}}—CH = CH_2$

(ii) $H—\overset{O}{\overset{||}{C}}—H$, $H_3C—\overset{O}{\overset{||}{C}}—H$, $CH_3—\overset{O}{\overset{||}{C}}—CH_3$

(ग) H_2 अणु के लिए, रमन स्पेक्ट्रम की S-शाखा रेखाओं के बीच दूरी 243.2 cm^{-1} है। H–H आबंध लम्बाई परिकलित कीजिए। दिया गया है : H परमाणु का द्रव्यमान $= 1.673 \times 10^{-27}$ kg। 4

5. (क) निम्नलिखित पदों की व्याख्या कीजिए : 2

(i) अववर्णी सृटि

(ii) वर्णातिशायी प्रभाव

(ख) N_2O के अवरक्त और रमन स्पेक्ट्रमी आँकड़े नीचे दिए गए हैं। इस जानकारी के आधार पर N_2O की संरचना निर्धारित कीजिए : 4

$\bar{\upsilon}$ / cm^{-1}	अवरक्त	रमन
589	प्रबल, PQR बैंड	—
1285	अति प्रबल, PR बैंड	अति प्रबल
2224	अति प्रबल, PR बैंड	प्रबल

(ग) चतुष्फलकीय ज्यामिति वाले संकुलों में धातु आयन के d-कक्षकों का क्रिस्टल क्षेत्र विपाटन आरेखित कीजिए और उसकी व्याख्या कीजिए। 4

6. (क) ऐसीटैल्डिहाइड का ^1H–एन.एम.आर. स्पेक्ट्रम आरेखित कीजिए और उसकी व्याख्या कीजिए। 4

(ख) एक अयुग्मित इलेक्ट्रॉन वाला एक अकार्बनिक यौगिक 9.5 GHz आवृत्ति पर एक प्रबल ई.एस.आर. रेखा प्रदर्शित करता है। रेखा के लिए g–मान परिकलित कीजिए। $B_z = 0.15$ T है। 2

(ग) उचित चित्र द्वारा बहुपरमाणुक अणुओं के लिए सभी संभव इलेक्ट्रॉनिक संक्रमणों की चर्चा कीजिए। 4

7. (क) उदाहरण सहित मैक्लाफर्टी पुनर्विन्यास की व्याख्या कीजिए। 3

(ख) 'बैंड पारण चौड़ाई' पद की व्याख्या कीजिए। 2

(ग) C_7H_8O अणु सूत्र वाले यौगिक के लिए निम्नलिखित आँकड़े प्राप्त हुए हैं : 5

अणु भार : 108

प्रकृति : अम्लीय नहीं

अवरक्त स्पेक्ट्रम : –OH समूह की उपस्थिति दर्शाता है।

पराबैंगनी : λ_{max} : 254 nm और 202 nm पर

एन.एम.आर. स्पेक्ट्रम (δ, $CDCl_3$) : 3.85 (एकक, 1H), 4.55 (एकक, 2H), 7.25 (एकक, 5H)

द्रव्यमान स्पेक्ट्रम : (m/z) : 108, 107, 79, 77, 51

यौगिक की संरचना निर्धारित कीजिए।

× × × × ×