

BACHELOR OF SCIENCE (B. SC.)

Term-End Examination

June, 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.

1. (a) Derive the term-symbol for the ground state of hydrogen atom. 2
- (b) Define and illustrate the following symmetry elements : 4
 - (i) n -fold axis of symmetry
 - (ii) Plane of symmetry

- (c) Discuss the vector nature of orbital angular momentum. Represent pictorially the allowed directions for angular momentum vector for the case of $l=1$. 4
2. (a) Show that the difference in energy between the successive rotational lines is $2B$; use energy of first three levels. 2
- (b) From the rotational spectra of ^{12}CO and ^{13}CO it was found $\frac{B}{B'} = 1.046$, where B and B' are rotational constants for ^{12}CO and ^{13}CO , respectively. Calculate the reduced mass of ^{13}CO if the reduced mass of ^{12}CO is $6.857/\text{N}_A$, where N_A = Avogadro's No. 2
- (c) Using $m_1 r_1 = m_2 r_2$, derive $r_2 = \frac{m_1 r}{m_1 + m_2}$, r being $r_1 + r_2$. 2

- (d) What is the basic criterion for a molecule to exhibit rotational spectrum ? Which of the following molecules will be rotationally acting and why ? 4

CO_2 , O_2 , CHCl_3 , CO

3. (a) For a harmonic oscillator, show that :

2+1

$$(i) \quad v_{\text{osc}} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{m}}$$

$$(ii) \quad k = 4\pi^2 v_{\text{osc}}^2 m$$

- (b) Explain the following terms : 3

- (i) Fundamental transition
- (ii) First overtone
- (iii) Zero point energy

- (c) What are the selection rules for the following : 2

- (i) A harmonic oscillator to show its vibrational spectrum.

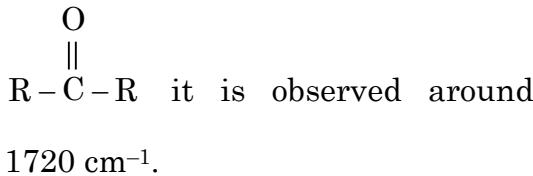
- (ii) An anharmonic oscillator.

- (d) Find the vibrational degrees of freedom of CO_2 and H_2O . 2

4. (a) Which of the following molecules would give pure rotational Raman spectrum and why ? 2



- (b) What are Stokes and anti-Stokes lines ? Predict the position of Raman vibrational lines for C–H stretching of an alkane observed at 2960 cm^{-1} , if Hg radiation of 435.8 nm (22946 cm^{-1}) is used. 4
- (c) Give reason : 4
- (i) The IR spectrum of 1-butanol has single broad band between 3500 – 3200 cm^{-1} . When it is diluted with CCl_4 , it shows an additional band near 3650 cm^{-1} .
- (ii) The $>\text{C}=\text{O}$ frequency of RCHO is observed near 1735 cm^{-1} while for



5. (a) Discuss the effect of polarity of solvents on $\pi \rightarrow \pi^*$ and $n \rightarrow \pi^*$ transitions. 3
- (b) In the ultraviolet absorption spectrum of oxygen, continuum absorption begins at 56876 cm^{-1} . The oxidation energy of oxygen atom is 15868 cm^{-1} . Find the dissociation energy of the O_2 molecule in the ground state in kcal/mol. 3
- (c) Polarized Raman spectrum of CHCl_3 gave the following data for three of the bands : 4

S. No.	Raman band/ cm^{-1}	I_I	I_{II}
1	357	5.8	79.2
2	660	1.3	83.2
3	760	4.7	6.0

Identify those which are polarized.

6. (a) “ HgS , KMnO_4 and K_2CrO_4 are all intensely coloured though there is no possibility of $d-d$ transition in them.” Explain. 2

- (b) Explain the origin of peaks at m/z 114, 85, 71, 57 in the mass spectrum of *n*-octane. 4
- (c) Using a suitable diagram, discuss the splitting of $3d$ orbitals in presence of an octahedral crystal field. 4
7. (a) Discuss the techniques for handling liquids for measuring IR spectrum. 2
- (b) Draw and explain the block diagram of a Raman spectrometer. 3
- (c) A compound with molecular formula $C_5H_8O_3$ exhibits the following spectral data : 5
- IR spectrum : 2300 – 3333 (broad),
 (cm^{-1}) 1715 (intense)
- $^1\text{HNMR}$ spectrum : 11 (1H), 2.60 (*s*, 4H),
 (δ, CDCl_3) 2.12 (*s*, 3H)
- Mass spectrum : 116, 43
 (m/z)
- Arrive at the structure of the compound on the basis of the above spectral data.

CHE-10

विज्ञान स्नातक

(बी. एस-सी.)

सत्रांत परीक्षा

जून, 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।

1. (क) हाइड्रोजन परमाणु की मूल अवस्था के लिए पद-प्रतीक व्युत्पन्न कीजिए। 2

(ख) निम्नलिखित सममिति तत्वों को परिभाषित कीजिए

और उन्हें चित्र द्वारा दर्शाइए :

4

(i) सममिति का n -गुना अक्ष

(ii) सममिति तल

(ग) कक्षीय कोणीय संवेग की सदिश प्रकृति की चर्चा

कीजिए। $l=1$ परिस्थिति के लिए कोणीय संवेग की

अनुमत दिशाओं को चित्र द्वारा दर्शाइए।

4

2. (क) दर्शाइए कि क्रमिक घूर्णन रेखाओं के बीच $2B$ अंतर

होता है। पहले तीन ऊर्जा स्तरों की ऊर्जा का उपयोग

कीजिए।

2

(ख) ^{12}CO और ^{13}CO के घूर्णन स्पेक्ट्रमों से ज्ञात हुआ

कि $\frac{B}{B'} = 1.046$ है, जहाँ B और B' क्रमशः

^{12}CO और ^{13}CO के घूर्णन स्थिरांक हैं। यदि

^{12}CO का समानीत द्रव्यमान $6.857 / N_A$ हो, तो

^{13}CO का समानीत द्रव्यमान परिकलित कीजिए। यहाँ

N_A आवोगाद्रो संख्या है।

2

(ग) $m_1 r_1 = m_2 r_2$ का उपयोग करके निम्नलिखित को

व्युत्पन्न कीजिए :

2

$$r_2 = \frac{m_1 r}{m_1 + m_2}, \quad r = r_1 + r_2$$

(घ) किसी अणु के लिए घूर्णन स्पेक्ट्रम को दर्शाने के लिए

क्या मूल आवश्यकता है ? निम्नलिखित में से कौन-से

अणु घूर्णन दर्शाते हैं और क्यों ?

4



3. (क) किसी प्रसंवादी दोलक के लिए दर्शाइए कि : 2+1

$$(i) \quad v_{\text{osc}} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{m}}$$

$$(ii) \quad k = 4\pi^2 v_{\text{osc}}^2 m$$

(ख) निम्नलिखित पदों की व्याख्या कीजिए : 3

(i) मूल संक्रमण

(ii) प्रथम अधिस्वरक

(iii) शून्य बिन्दु ऊर्जा

(ग) निम्नलिखित के लिए क्या वरण नियम हैं ? 2

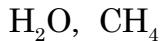
(i) एक आवर्ती दोलक के लिए कम्पनिक स्पेक्ट्रम

दर्शाना

(ii) एक अप्रसंवादी दोलक

(घ) CO_2 और H_2O के लिए कम्पनिक स्वतंत्रता की
कोटियाँ ज्ञात कीजिए। 2

4. (क) निम्नलिखित अणुओं में से कौन-से शुद्ध धूर्णन रमन
स्पेक्ट्रम दर्शाएँगे और क्यों ? 2



(ख) स्टोक्स और प्रति-स्टोक्स रेखाएँ क्या होती हैं ? किसी
ऐल्केन के लिए 2960cm^{-1} C – H तनन के लिए
शमन कम्पन रेखाओं की स्थिति की प्रागुक्ति कीजिए,
यदि 435.8nm (22946cm^{-1}) Hg विकिरण का
उपयोग किया जाए। 4

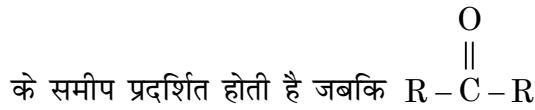
(ग) कारण बताइए :

4

(i) 1-ब्यूटेनॉल का अवरक्त स्पेक्ट्रम 3500 – 3200

 cm^{-1} के बीच केवल एक विस्तृत बैंड प्रदर्शितकरता है। यदि इसे CCl_4 के साथ तनु कियाजाए, तो 3650 cm^{-1} के निकट एक अतिरिक्त

बैंड प्रदर्शित होता है।

(ii) RCHO की $>\text{C=O}$ आवृत्ति 1735 cm^{-1} के लिए यह 1720 cm^{-1} के पास प्रदर्शित होती

है।

5. (क) $\pi \rightarrow \pi^*$ और $n \rightarrow \pi^*$ संक्रमणों पर विलायकों की

ध्युवता के प्रभाव के बारे में चर्चा कीजिए।

3

(ख) ऑक्सीजन के पराबैंगनी अवशोषण स्पेक्ट्रम में,

सांतत्यक अवशोषण 56876cm^{-1} से आरम्भ होता है। ऑक्सीजन परमाणु की उत्तेजन ऊर्जा 15868 cm^{-1} है। मूल अवस्था में O_2 अणु की वियोजन ऊर्जा kcal/mol में ज्ञात कीजिए। 3

(ग) CHCl_3 के ध्रुवित रमन स्पेट्रम से तीन बैंडों के लिए निम्नलिखित आँकड़े प्राप्त होते हैं : 4

क्रमांक	रमन बैंड/ cm^{-1}	I_{II}	I_{III}
1	357	5.8	79.2
2	660	1.3	83.2
3	760	4.7	6.0

ध्रुवित बैंडों का अभिनिर्धारण कीजिए।

6. (क) “ HgS , KMnO_4 और $\text{K}_2\text{Cr O}_4$ सभी गहरे रंगों वाले होते हैं जबकि इनमें $d-d$ संक्रमणों की कोई संभावना नहीं होती है।” व्याख्या कीजिए। 2

(ख) n -ऑक्टेन के द्रव्यमान स्पेक्ट्रम में m/z 114, 85,

71 और 57 पर प्रदर्शित शिखरों की उत्पत्ति की
व्याख्या कीजिए। 4

(ग) उचित चित्र की सहायता से, अष्टफलकीय
क्रिस्टल क्षेत्र में उपस्थित $3d$ कक्षकों के विपाटन की
चर्चा कीजिए। 4

7. (क) अवरक्त स्पेक्ट्रम को मापने के लिए द्रवों के प्रतिचयन
की तकनीकों की चर्चा कीजिए। 2

(ख) रमन स्पेक्ट्रममापी का खण्ड आरेख आरेखित कीजिए
और उसकी व्याख्या कीजिए। 3

(ग) एक यौगिक जिसका अणु सूत्र $C_5H_8O_3$ है,
निम्नलिखित स्पेक्ट्रमी आँकड़े दर्शाता है : 5

अवरक्त स्पेक्ट्रम : 2300 – 3333 (विस्तृत),

(cm^{-1}) 1715 (तीव्र)

¹H -एन. एम. आर. : 11(1H), 2.60 (s, 4 H)

स्पेक्ट्रम 2.12 (s, 3H)

(δ , CDCl₃)

द्रव्यमान स्पेक्ट्रम : 116, 43

(m/z)

ऊपर दिए गए स्पेक्ट्रमी आँकड़ों के आधार पर यौगिक की संरचना निर्धारित कीजिए।

× × × × ×