

No. of Printed Pages : 12

CHE-010

BACHELOR OF SCIENCE (B. SC.)

Term-End Examination

June, 2026

CHE-010 : SPECTROSCOPY

Time : 2 Hours

Maximum Marks : 50

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

1. (a) Why for the ground state of the atom having configuration $1s^2$, triplet state ($S = 1$) is not possible ? 1
- (b) What are the selection rules for atomic spectra for multi electron systems ? 2

- (c) The line spectrum of hydrogen atom is observed in ultraviolet region of electromagnetic waves. Name the series of line spectrum. Find the limiting line and the first line of that series in wave numbers. 5
- (d) What is the value of the orbital angular momentum of an electron in $2p_z$ orbital and its component along z -axis in the case of hydrogen atom ? 2
2. (a) Using VSEPR theory predict the shape of PCl_3 . Draw its structure. 3
- (b) CH_2Cl_2 has the following symmetry elements : E, C_2 and $2 \sigma_v$. 2
- (i) Identify the point group to which CH_2Cl_2 belongs.
- (ii) Will the molecule show permanent dipole moment ?

- (c) What do symbols A_1 , A_2 , B_1 , B_2 and A_g signify in a character table of a point group ? 5

3. (a) Prove that for a rigid diatomic molecule, the moment of inertia, I about an axis through the centre of mass of the molecule and normal to the principal axis of the molecule is given by : 3

$$I = \mu \gamma^2,$$

where μ = reduced mass of the molecule and γ = bond length of the molecule.

- (b) Predict the positions of Raman vibrational lines for the C–H stretching frequency of alkane at 2960 cm^{-1} if Hg radiation of 22946 cm^{-1} is used. 2
- (c) Rotational Raman spectra of $\text{C}^{12}\text{O}_2^{16}(g)$ shows a series of absorption peaks separated by 3.16 cm^{-1} in the S branch. What is the distance between two oxygen atoms if CO_2 molecule is

symmetric linear and axis of rotation passes through carbon atom and is normal to the principal axis of the molecule. 5

4. (a) Sketch the normal modes of vibrations of CO_2 molecule. Predict which mode of vibrations is/are likely to be IR active and which are likely to be Raman active. 4

- (b) The transition from $J = 0$ to $J' = 1$ for $^1\text{H}^{35}\text{Cl}$ takes place at 21.18 cm^{-1} . What is the bond length of $^1\text{H}^{35}\text{Cl}$? 6

5. Discuss the effect of any three of the following on carbonyl frequency in IR spectra with suitable examples : 10

- (i) Inductive effect.
- (ii) Resonance effect.
- (iii) Intermolecular H-bonding
- (iv) Intramolecular H-bonding
- (v) Steric hindrance

6. (a) Sketch the high and low resolution NMR spectrum of CH_3CHO and discuss their origin. 5
- (b) Discuss in detail the E.S.R. spectra of CH_3 free radical. 5
7. (a) The mass spectrum of pentanoic acid shows a peak of $m/z = 60$ involving McLafferty rearrangement. Which are the fragments that are formed ? 3
- (b) A compound having molecular formula $\text{C}_5\text{H}_8\text{O}_3$ shows the following spectroscopic data : 7
- UV : Absorption of $\lambda_{\text{max}} = 262 \text{ nm}$.
- IR : Very broad band from $2300 - 3333 \text{ cm}^{-1}$ and a strong band at 1715 cm^{-1} .

NMR : A signal at δ 1.1 with integrated area of 1 unit, a singlet at δ 2.12 with area of 3 units and another singlet δ 2.60 with area of 4 units.

Mass Spectra : Molecular ion peak at

$\frac{m}{z} = 116$. The base peak appears

at $\frac{m}{z} = 43$.

Deduce the structural formula/structure of the compound.

CHE-010

विज्ञान स्नातक (बी. एस.-सी.)

सत्रांत परीक्षा

जून, 2026

सी.एच.ई.-010 : स्पेक्ट्रमिकी

समय : 2 घण्टे

अधिकतम अंक : 50

नोट : किन्हीं पाँच प्रश्नों के उत्तर दीजिए। सभी प्रश्नों के अंक समान हैं। लॉग सारणी और नॉन-प्रोगामीय/वैज्ञानिक कैलकुलेटर के प्रयोग की अनुमति है।

1. (क) हीलियम की मूल अवस्था, जिसका विन्यास $1s^2$ है, में त्रिक अवस्था ($S = 1$) क्यों सम्भव नहीं है। 1

(ख) बहुइलेक्ट्रॉन निकायों के लिए परमाणु स्पेक्ट्रम का वरण नियम क्या है ? 2

(ग) विद्युत चुम्बकीय के पराबैंगनी क्षेत्र में हाइड्रोजन का रेखा स्पेक्ट्रम देखा जाता है। रेखा स्पेक्ट्रम की श्रेणियों का नाम बताइए। इस श्रेणी में सीमा रेखा और प्रथम रेखा की तरंग संख्या ज्ञात कीजिए। 5

(घ) $2p_z$ कक्षक के कक्षक कोणीय संवेग और हाइड्रोजन के मामले में इसके z अक्ष के घटक का क्या मान होता है ? 2

2. (क) VSEPR सिद्धान्त का उपयोग करके PCl_3 की आकृति का पूर्वानुमान कीजिए। इसकी संरचना बताइए। 3

(ख) CH_2Cl_2 के पास निम्नलिखित सममिति अवयव हैं :

E , C_2 और $2\sigma_v$ 2

(i) CH_2Cl_2 किस बिन्दु समूह से सम्बन्धित है ?
ज्ञात कीजिए।

(ii) क्या अणु स्थायी द्विध्रुव आघूर्ण दर्शाएगा ?

(ग) A_1 , A_2 , B_1 , B_2 और A_g प्रतीक क्या करते हैं, बिन्दु समूह की वर्ण तालिका में इनका क्या महत्व है ? 5

3. (क) दृढ़ द्वि-परमाणुक अणु के लिए सिद्ध कीजिए कि अणु के द्रव्यमान के केन्द्र से गुजरने वाली और अणु के मुख्य अक्ष के सामान्य अक्ष के जड़त्व आघूर्ण I को :

$$I = \mu \gamma^2$$

से व्यक्त करते हैं। यहाँ μ = अणु का समानीत द्रव्यमान और γ = अणु की आबंध लम्बाई है। 3

(ख) यदि 22946 cm^{-1} Hg विकिरण का उपयोग किया जाए तो 2960 cm^{-1} पर ऐल्केन के C-H तनन के लिए रामन कम्पन रेखाओं की स्थिति की प्रागुक्ति कीजिए। 2

(ग) $\text{C}^{12}\text{O}_2^{16}(\text{g})$ के घूर्णी रामन स्पेक्ट्रम में S शाखा में 3.16 cm^{-1} की दूरी वाले अवशोषण शिखरों की श्रेणी प्राप्त होती है। CO_2 अणु के दो ऑक्सीजन परमाणुओं

के बीच की दूरी क्या होगी यदि सममिति रेखीय हो
और घूर्ण का अक्ष कार्बन परमाणु से गुजरता हो और
अणु की प्रमुख अक्ष के सामान्य हो। 5

4. (क) CO_2 अणु की सामान्य कम्पन विधाओं को चित्रित
कीजिए। पूर्वानुमान कीजिए कि इनमें से कौन कम्पन
सम्भवतः IR सक्रिय और कौन रामन सक्रिय है ? 4

(ख) $^1\text{H}^{35}\text{Cl}$ के लिए $J = 0$ से $J' = 1$ संक्रमण 21.18
 cm^{-1} पर होता है। $^1\text{H}^{35}\text{Cl}$ की आबंध लम्बाई क्या
होती है ? 6

5. उपयुक्त उदाहरणों से निम्नलिखित के द्वारा IR स्पेक्ट्रम पर
पड़ने वाले किन्हीं तीन प्रभावों का वर्णन कीजिए : 10

- (i) प्रेरणिक प्रभाव
- (ii) अनुनादी प्रभाव
- (iii) अंतराअणुक हाइड्रोजन आबंधन प्रभाव
- (iv) अंतःअणुक हाइड्रोजन आबंधन प्रभाव
- (v) त्रिविमी बाधा

6. (क) CH_3CHO का उच्च विभेदन और निम्न विभेदन NMR स्पेक्ट्रम में चित्रित कीजिए और उनकी उत्पत्ति की व्याख्या कीजिए। 5

(ख) CH_3 मुक्त मूलक के ESR स्पेक्ट्रम का विस्तार से वर्णन कीजिए। 5

7. (क) पेन्टेनोइक अम्ल का द्रव्यमान स्पेक्ट्रम $m/z = 60$ पर शिखर प्रदर्शित करता है, यह मैकलाफर्टी पुनर्विन्यास द्वारा होता है। कौन-से खण्ड निर्मित होते हैं ? 3

(ख) एक यौगिक का आण्विक सूत्र $\text{C}_5\text{H}_8\text{O}_3$ है जो निम्नलिखित स्पेक्ट्रमिकी आँकड़े दर्शाता है : 7

UV : $\lambda_{\text{max}} = 262 \text{ nm}$ पर अवशोषण

IR : $2300 - 3333 \text{ cm}^{-1}$ के बीच

अत्यंत विस्तृत बैंड और एक तनन बैंड

1715 cm^{-1} पर

NMR : एक संकेत δ 11 पर जिसका समाकलन क्षेत्रफल एक इकाई के तुल्य है, संकेत δ 2.12 का क्षेत्रफल 3 इकाई है और एक और संकेत δ 2.60 जिसका क्षेत्रफल 4 इकाई है।

द्रव्यमान स्पेक्ट्रम : आण्विक शिखर $\frac{m}{z} = 116$ पर;

आधार शिखर $\frac{m}{z} = 43$ पर है। इस यौगिक

का संरचना सूत्र/संरचना ज्ञात कीजिए।

× × × × ×