
UNIVERSITI SAINS MALAYSIA

Peperiksaan Semester Pertama
Sidang Akademik 2001/2002

September 200 1

KAA 503 - Spektroskopi Molekul

[Masa : 3 jam]

Sila pastikan bahawa kertas ini mengandungi **ENAM** muka surat sebelum anda memulakan peperiksaan ini.

Jawab sebarang **LIMA** (5) soalan. Jika calon menjawab lebih daripada lima soalan, hanya lima soalan pertama mengikut susunan dalam skrip jawapan akan diberi markah.

1. (a) Huraikan secara ringkas teori tentang spektroskopi FT-IR dan manfaat spektroskopi tersebut. .

(6 markah)
- (b) (i) Gariskan bahagian-bahagian penting sebuah spektrofotometer inframerah dan huraikan fungsi setiap bahagian tersebut.

(ii) Bagi setiap bahagian spektrofotometer yang disebutkan itu, huraikan bagaimana kemajuan teknologi dan maklumat telah menyumbang kepada pembinaan instrumen yang lebih canggih.

(10 markah)
- (c) Terangkan langkah-langkah yang perlu diambil untuk memastikan bahawa sebuah spektrofotometer inframerah berada dalam keadaan yang baik.

(4 markah)
2. (a) Apakah yang anda fahamkan tentang spektrum inframerah yang baik?

(4 markah)

.../2-

- 2 -

- (b) Huraikan pelbagai teknik yang digunakan untuk menyediakan sampel bagi perakaman spektrum inframerah. Terangkan manfaat dan mudarat setiap teknik yang digunakan.

(4 markah)

- (c) Huraikan secara ringkas satu aplikasi spektroskopi inframerah dalam industri.

(6 markah)

- (d) Berikan penjelasan ringkas bagi pemerhatian berikut:

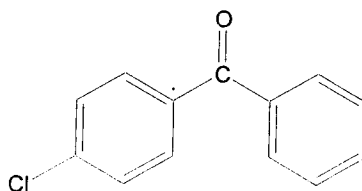
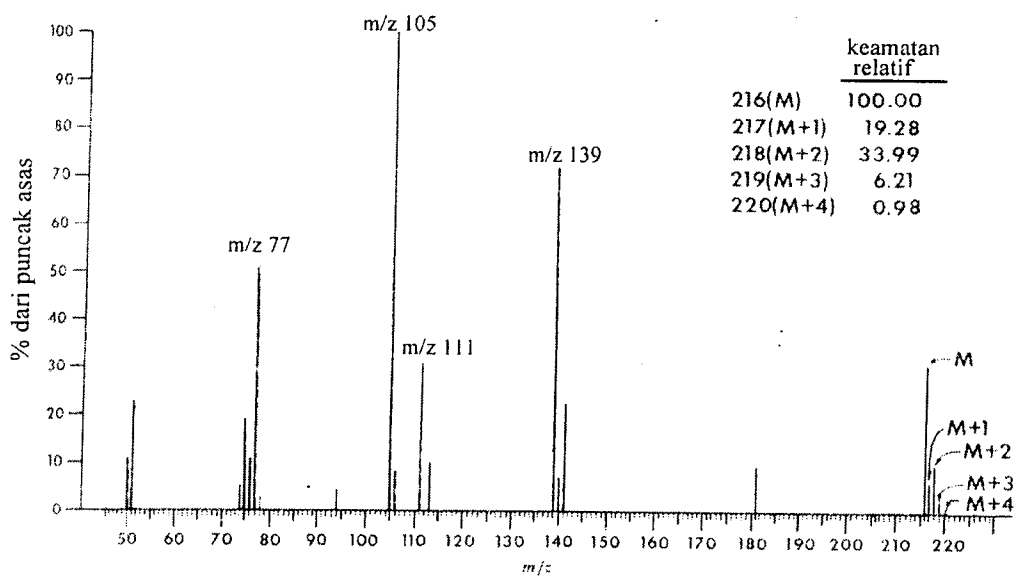
- (i) Spektrum inframerah bis(glisinato)kuprum(II) memperlihatkan tiga puncak di dalam julat nombor gelombang $3300-3200 \text{ cm}^{-1}$ yang menunjukkan kehadiran kumpulan amino, NH_2 . Namun puncak tersebut lesap selepas bis(glisinato)kuprum(II) bertindak balas dengan formaldehid (metanal).
- (ii) Puncak inframerah bagi kumpulan azometina, $\text{C}=\text{N}$, bagi bes Schiff. Pirola-2-karboksianalina terdapat di 1650 cm^{-1} . Apabila bes Schiff tersebut bertindak balas dengan SnCl_2 , spektrum inframerah bagi hasilnya menunjukkan bahawa frekuensi $\text{C}=\text{N}$ telah beranjak ke 1610 cm^{-1} .

(6 markah)

.../3-

- 3 -

3. (a) Spektrum jisim di bawah adalah bagi p-klorobenzofenon.



p-klorobenzofenon

- (i) Tunjukkan struktur bagi empat puncak yang dinyatakan nilai m/z dalam spektrum tersebut.
- (ii) Puncak bagi ion molekul adalah pada m/z 216. Berikan struktur isotop yang memberikan puncak-puncak M+1, M+2, M+3 dan M+4.

(15 markah)

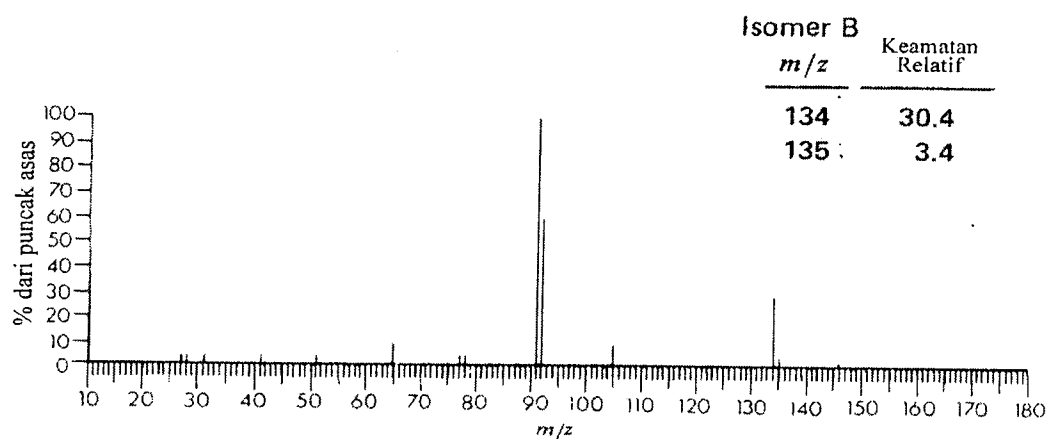
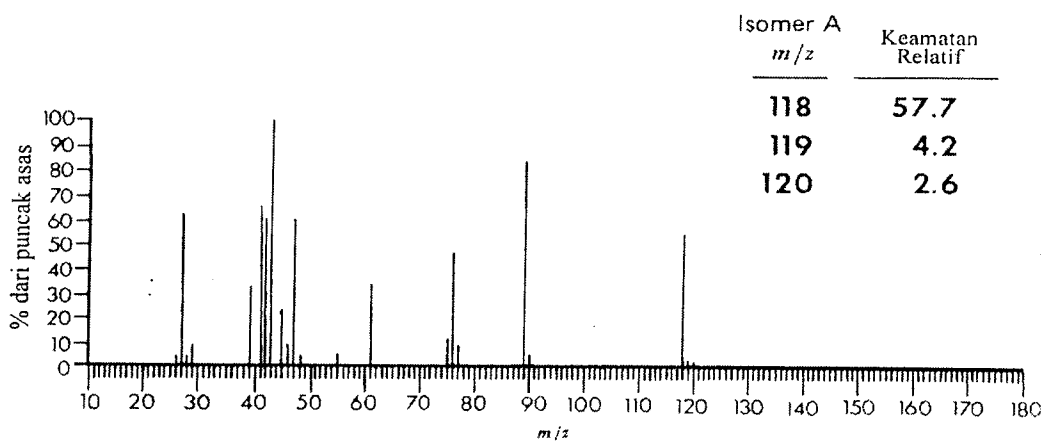
- (b) Kebanyakan sebatian diester ftalat memberikan puncak asas pada m/z 149. Dengan menggunakan suatu contoh, tunjukkan mekanisme pembentukan ion m/z 149 ini.

(5 markah)

.../4-

- 4 -

4. (a) Dua spektrum jisim berikut adalah bagi dua isomer hidrokarbon dengan formula $C_{10}H_{14}$. Berdasarkan spektrum jisim ini, tentukan struktur kedua-dua isomer tersebut.

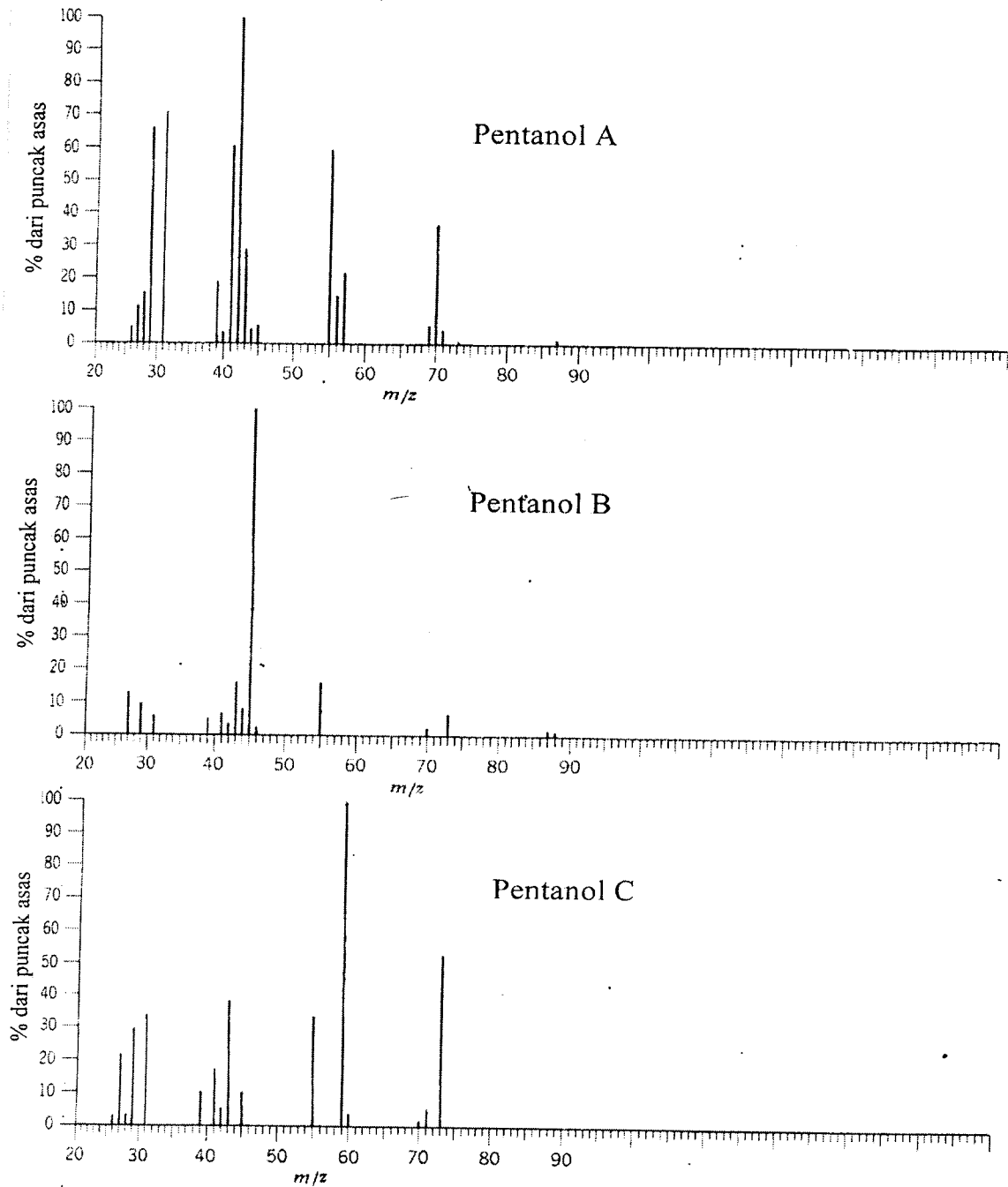


(10 markah)

.../5-

- 5 -

- (b) Tiga spektrum jisim berikut adalah bagi tiga isomer pentanol. Tentukan struktur bagi pentanol A, pentanol B dan pentanol C masing-masing spektrum jisim.

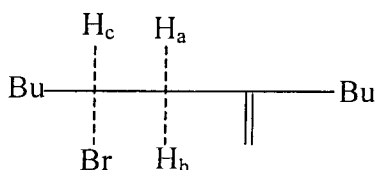


(10 markah)

.../6-

- 6 -

5. Huraikan bagaimana isyarat resonans magnet nukleus ^1H bagi suatu sebatian dapat dikesan dengan menyentuh tentang perkara yang berikut:
- Kesan medan magnet, B_0 ke atas tenaga suatu nukleus. (5 markah)
 - Peliukan dan frekuensi Lamor. (5 markah)
 - Taburan Boltzmann, ketepuan dan masa pengenduran. (5 markah)
 - Kesan medan magnet kedua B_1 tegak kepada medan magnet B_0 ke atas proton di dalam sebatian tersebut. (5 markah)
6. (a) Dengan menggunakan 2-klorobutana sebagai contoh jelaskan bagaimana pengkupelan boleh wujud di antara atom hidrogen yang berhampiran di dalam suatu molekul. (10 markah)
- (b) Spektrum ^1H NMR bagi molekul berikut, $\text{C}_4\text{H}_9\text{CHBrCH}_2\text{COC}_4\text{H}_9$ telah diperolehi:



Nilai anjakan kimia dan pemalar pengkupelan dari spektrum tersebut bagi H_a , H_b dan H_c adalah:

$$\delta\text{H}_a \text{ 2.72, } \delta\text{H}_b \text{ 3.25, } \delta\text{H}_c \text{ 4.38 ppm; } J_{ab} = 18 \text{ Hz, } J_{ac} = 2, J_{bc} = 10 \text{ Hz}$$

Dengan menggunakan perhubungan Karplus berkenaan dengan proton dengan pengkupelan 3J , tentukan konformasi bagi molekul tersebut.

(10 markah)

-oooOooo-