

2025

(June)

CHEMISTRY

(Core)

Paper : CHMC4D

(Symmetry and Quantum Chemistry)

Full Marks : 45

Time : 2 hours

*The figures in the margin indicate full marks
for the questions*

1. শুন্ধ উত্তরটো বাটি উলিওৱা : 1×6=6

Choose the correct answer :

(a) হাইজেনবার্গ অনিশ্চয়তা নীতিটো হৈছে

Heisenberg uncertainty principle is

$$(i) \Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{4\pi}$$

$$(ii) \Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{4\pi}$$

$$(iii) \Delta y \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{4\pi}$$

$$(iv) \Delta x \Delta E \geq \frac{\hbar}{4\pi}$$

(2)

(b) তলত দিয়া কোনটো অণুর পাইন্ট গ্রুপ D_{3h} ?Which of the following molecules has D_{3h} point group?

- (i) CH_3Cl
- (ii) NH_3
- (iii) BF_3
- (iv) H_2O

(c) ~~সাম~~ বলবিজ্ঞানত প্রহণযোগ্য তরংগফলনটো হ'ল

The wave function which is acceptable in quantum mechanics is

- (i) $\psi = x$
- (ii) $\psi = x^2$
- (iii) $\psi = \sin x$
- (iv) $\psi = \tan x$

(d) তলৰ কোনটো ফলন $\frac{d}{dx}$ অপারেটৰ এটা আইগেন ফলন ?Which of the following functions is an eigenfunction of the operator $\frac{d}{dx}$?

- (i) e^{-ax^2}
- (ii) $\sin ax$
- (iii) e^{-ax}
- (iv) x^3

(3)

(e) C_{3v} পাইন্ট গ্রুপত থকা ছিমেত্রি অপারেশনসমূহ হ'ল^১
The symmetry operations in C_{3v} point group are

- (i) $E, C_3^1, C_3^2, \sigma_v', \sigma_v''$
- (ii) $E, C_3^1, C_3^2, C_3^3, \sigma_v', \sigma_v'', \sigma_v'''$
- (iii) $E, C_3^1, C_3^2, \sigma_v, \sigma_{v'}, \sigma_{v''}$
- (iv) $E, C_2, 3\sigma_v$

(f) তলৰ কোনটো অণুৰ ইনভাৰচন কেন্দ্ৰ আছে ?

Which of the following molecules has centre of inversion?

- (i) BF_3
- (ii) H_2O
- (iii) HCl
- (iv) H_2C_2

2. তলৰ প্ৰশ্নসমূহ যি কোনো তিনিটাৰ উত্তৰ দিয়া : $4 \times 3 = 12$

Answer any three of the following questions :

(a) তলত দিয়া অণুকেইটাৰ পাইন্ট গ্রুপ নিৰ্ণয় কৰা : $1 \times 4 = 4$
Determine the point group of the following molecules :

- (i) $[\text{PtCl}_4]^{-2}$
- (ii) C_2H_4
- (iii) CO_2
- (iv) NH_3

(4)

(b) চমু টোকা লিখা (যি কোনো দুটা) : $2 \times 2 = 4$

Write short notes on (any two) :

(i) ঘূর্ণন সঠিক অক্ষ (C_n)Proper axis of rotation (C_n)(ii) মিবর সমতল (σ)Mirror plane (σ)

(iii) ইনভারছন কেন্দ্র (i)

Centre of inversion (i)

(c) C_{2v} পটিট গ্রুপ বাবে কেবেষ্টাৰ তালিকা গঠন কৰা। 4Construct the character table for C_{2v} point group.(d) (i) x, y আৰু z ক ভিত্তি হিচাপে লৈ নিম্নলিখিত অপাৰেছনৰ 3×3 মেট্রিক্স উপহাপন লিখা (যি কোনো দুটা) : $1 \times 2 = 2$ Write down the 3×3 matrix representation of the following operations taking x, y and z as bases (any two) :(1) σ_{xy} (2) E (3) $C_{2(z)}$ (ii) মেট্রিক্স বীজগণিত ব্যৱহাৰ কৰি $\sigma_{xy} C_{2(z)}$ ৰ মান উলিওৱা। 2Evaluate $\sigma_{xy} C_{2(z)}$ using matrix algebra.

(5)

3. তলৰ প্ৰশ্নসমূহ যি কোনো তিনিটাৰ উত্তৰ দিয়া : $9 \times 3 = 27$

Answer any three of the following questions :

(a) (i) $x = -a$ আৰু $x = +a$ সীমাত ফলনসমূহ তলত দিয়া ধৰণে সংজ্ঞা দিয়া হৈছে :

$$F_1(x) = N_1(a^2 - x^2)$$

$$F_2(x) = N_2 x(a^2 - x^2)$$

 $-a \leq x \leq a$ সীমাত নৰ্মেলাইজেশন প্ৰক্ৰিয়া N_1 আৰু N_2 ৰ মান নিৰ্ণয় কৰা।The functions given below are defined in the interval $x = -a$ and $x = +a$ as follows :

$$F_1(x) = N_1(a^2 - x^2)$$

$$F_2(x) = N_2 x(a^2 - x^2)$$

Calculate the value of normalization constant N_1 and N_2 in the range $-a \leq x \leq a$.(ii) দেখুওৱা যে ওপৰত উল্লেখ কৰা $F_1(x)$ আৰু $F_2(x)$ অৰ্থগৰ্ভেল। 3Show that the function $F_1(x)$ and $F_2(x)$ in the above problem are orthogonal.

(6)

(b) (i) $\left[\frac{d^2}{dx^2}, x \right]$ ব মান নির্ণয় করা। 2

Calculate the value of $\left[\frac{d^2}{dx^2}, x \right]$.

(ii) ভবেগ আৰু গতিশক্তি বুজুৱা অপাৰেটৰ দুটা
উলিওৱা। $1 \frac{1}{2} \times 2 = 3$

Evaluate the operators corresponding to momentum and kinetic energy.

(iii) তৰংগফলন এটা প্ৰহণযোগ্য হোৱাৰ চৰ্তসমূহ
লিখা। 2

Write down the conditions of acceptability of wave function.

(iv) প্ৰমাণ কৰা যে এটা হার্মিটিয়ান অপাৰেটৰৰ
নন-ডিজেনেৰেট আইগেনফলনসমূহ এটা আনটোৰ
লগত অৰ্থগত নেল। 2

Prove that non-degenerate eigenfunctions of a Hermitian operator are orthogonal to each other.

(c) (i) এটা ঘনকীয় ত্ৰিমাত্ৰিক বাকচত মুক্তভাৱে গতি কৰা
কণিকাৰ বাবে স্ক্ৰিপ্টিংগাৰ তৰংগ সমীকৰণ সমাধান
কৰা। আইগেনফলনসমূহ আৰু শক্তি নিৰ্ণয় কৰা।
 $4+1+1=6$

Solve Schrödinger's wave equation
for a particle moving freely in a
three-dimensional cubic box. Find
the eigenfunctions and energy.

(Continued)

(7)

(ii) 10^{-8} cm দাঁতিৰ দৈৰ্ঘ্যৰ স্ফটিকৰ ঘনকীয় ফুটাত
এটা ইলেক্ট্ৰনৰ বাবে $n_x = n_y = n_z = 1$
অৱস্থাৰ পৰা $n_x = n_y = 1, n_z = 2$ লৈ
পৰিৱৰ্তনৰ বাবে প্ৰয়োজনীয় শক্তি নিৰ্ণয় কৰা। 3

Determine the energy required for a transition from $n_x = n_y = n_z = 1$ to $n_x = n_y = 1, n_z = 2$ state for an electron in a cubic hole of a crystal with 10^{-8} cm edge length.

(d) (i) দিপৰমাণুক অণুৰ পৰমাণুৰ মাজৰ দূৰত্ব r আৰু
হাস হোৱা ভৰ μ . যদি কৌণিক ভবেগ L আৰু
জড়তা আমক I হয়, তেন্তে প্ৰমাণ কৰা যে

$$\text{গতিশক্তি, } T = \frac{L^2}{2\mu r^2}$$

4

The distance between the atoms of a diatomic molecule is r and its reduced mass is μ . If the angular momentum is L and moment of inertia is I , then prove that

$$\text{kinetic energy, } T = \frac{L^2}{2\mu r^2}$$

(ii) তলত দিয়া কোৱাটাম সংখ্যাৰ বাবে এটা 1-D
সৰল পৰ্যাবৃত্ত দোলক হিচাপে আচৰণ কৰা এটা
তন্ত্ৰৰ বাবে ψ^2 ৰ গ্ৰাফ আঁকা : 3

Draw the graph of ψ^2 for a system behaving as a 1-D simple harmonic oscillator with quantum number :

(1) $\nu = 0$

(2) $\nu = 1$

(3) $\nu = 2$

(iii) Li পরমাণু বাবে ক্রিডিংগার তরঙ্গ সমীকরণ লিখা ।

2

Write down the Schrödinger equation for Li atom.

(e) (i) ভেবিয়েছন সূত্রটো লিখা আৰু প্ৰমাণ কৰা।

4

State and prove the variation theorem.

(ii) দেখুওৱা যে $[L^2, L_z] = 0$.

5

Show that $[L^2, L_z] = 0$.

★ ★ ★