

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. শুদ্ধ উত্তৰটো বাচি উলিওৱা :

1×6=6

Choose the correct answer :

(a) হাইজেনবাৰ্গ অনিশ্চয়তা নীতিটো হৈছে

Heisenberg uncertainty principle is

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

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

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

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



(b) তলত দিয়া কোনটো অণুৰ পইন্ট গ্ৰুপ  $D_{3h}$  ?

Which of the following molecules has  $D_{3h}$  point group?

(i)  $\text{CH}_3\text{Cl}$

(ii)  $\text{NH}_3$

(iii)  $\text{BF}_3$

(iv)  $\text{H}_2\text{O}$

(c) কোৱাৰ্টাম বলবিজ্ঞানত গ্রহণযোগ্য তৰংগফলনটো 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  $\frac{d}{dx}$  অপারেটৰৰ 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)  $x^3$

(e)  $C_{3v}$  পইন্ট গ্ৰুপত থকা ছিমেট্রি অপাৰেছনসমূহ হ'ল  
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 ইনভাৰছন কেন্দ্ৰ আছে ?

Which of the following molecules has centre of inversion?

(i)  $\text{BF}_3$

(ii)  $\text{H}_2\text{O}$

(iii)  $\text{HCl}$

(iv)  $\text{H}_2\text{C}_2$

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

Answer any *three* of the following questions :

(a) তলত দিয়া অণুকেইটাৰ পইন্ট গ্ৰুপ নিৰ্ণয় কৰা :  $1 \times 4 = 4$

Determine the point group of the following molecules :

(i)  $[\text{PtCl}_4]^{-2}$

(ii)  $\text{C}_2\text{H}_4$

(iii)  $\text{CO}_2$

(iv)  $\text{NH}_3$



(b) চমু টোকা লিখা (যি কোনো দুটা) :

2×2=4

Write short notes on (any two) :

(i) ঘূৰ্ণনৰ সঠিক অক্ষ ( $C_n$ )

Proper axis of rotation ( $C_n$ )

(ii) মিবৰ সমতল ( $\sigma$ )

Mirror plane ( $\sigma$ )

(iii) ইনভাৰছন কেন্দ্ৰ (i)

Centre of inversion (i)

(c)  $C_{2v}$  পইণ্ট গ্ৰুপৰ বাবে কেৰেক্টাৰ তালিকা গঠন কৰা। 4

Construct the character table for  $C_{2v}$  point group.

(d) (i)  $x$ ,  $y$  আৰু  $z$ ক ভিত্তি হিচাপে লৈ নিম্নলিখিত অপাৰেছনৰ  $3 \times 3$  মেট্ৰিক্স উপস্থাপন লিখা (যি কোনো দুটা) :

1×2=2

Write down the  $3 \times 3$  matrix representation of the following operations taking  $x$ ,  $y$  and  $z$  as bases (any two) :

(1)  $\sigma_{xy}$

(2)  $E$

(3)  $C_{2(z)}$

(ii) মেট্ৰিক্স বীজগণিত ব্যৱহাৰ কৰি  $\sigma_{xy}C_{2(z)}$ ৰ মান উলিওৱা।

2

Evaluate  $\sigma_{xy}C_{2(z)}$  using matrix algebra.

3. তলৰ প্ৰশ্নসমূহৰ যি কোনো তিনিটাৰ উত্তৰ দিয়া : 9×3=27

Answer any three of the following questions :

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

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

$$F_2(x) = N_2x(a^2 - x^2)$$

$-a \leq x \leq a$  সীমাত নৰ্মেলাইজেছন ফ্ৰেক  $N_1$  আৰু  $N_2$ ৰ মান নিৰ্ণয় কৰা। 6

The functions given below are defined in the interval  $x = -a$  and  $x = +a$  as follows :

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

$$F_2(x) = N_2x(a^2 - x^2)$$

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  $F_2(x)$  অৰ্থগ'নেল। 3

Show that the function  $F_1(x)$  and  $F_2(x)$  in the above problem are orthogonal.





- (b) (i)  $\left[ \frac{d^2}{dx^2}, x \right]$  ৰ মান নিৰ্ণয় কৰা।

2

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

- (ii) ভৰবেগ আৰু গতিশক্তিক বুজুৱা অপাৰেটৰ দুটা উলিওৱা।  $1\frac{1}{2} \times 2 = 3$

Evaluate the operators corresponding to momentum and kinetic energy.

- (iii) তৰংগফলন এটা গ্ৰহণযোগ্য হোৱাৰ চৰ্তসমূহ লিখা।

2

Write down the conditions of acceptability of wave function.

- (iv) প্ৰমাণ কৰা যে এটা হাৰ্মিটিয়ান অপাৰেটৰৰ নন-ডিজেনেৰেট আইগেনফলনসমূহ এটা আনটোৰ লগত অৰ্থগ'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 স্ক্ৰডিঙাৰ 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.

- (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) দ্বিপৰমাণুক অণুৰ পৰমাণুৰ মাজৰ দূৰত্ব  $r$  আৰু ভ্ৰাস হোৱা ভৰ  $\mu$ . যদি কৌণিক ভৰবেগ  $L$  আৰু জড়তা ভ্ৰামক  $I$  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  $\mu$ . 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 কোৱাণ্টাম সংখ্যাৰ বাবে এটা 1-D সৰল পৰ্যাবৃত্ত দোলক হিচাপে আচৰণ কৰা এটা তন্ত্ৰৰ বাবে  $\psi^2$ ৰ গ্ৰাফ আঁকা :

3





Draw the graph of  $\psi^2$  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 পৰমাণুৰ বাবে স্ক্ৰডিঙাৰ তৰংগ সমীকৰণ লিখা।

2

Write down the Schrödinger equation for Li atom.

(e) (i) ভেৰিয়েছন সূত্ৰটো লিখা আৰু প্ৰমাণ কৰা।

4

State and prove the variation theorem.

(ii) দেখুওৱা যে  $[L^2, L_z] = 0$ .

5

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

\*\*\*