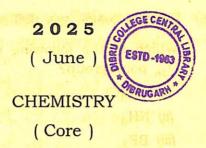
4 SEM FYUGP CHMC4D



Paper: CHMC4D

(Symmetry and Quantum Chemistry)

Full Marks: 45

Time: 2 hours

The figures in the margin indicate full marks for the questions

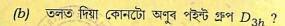
1. শুদ্ধ উত্তৰটো বাচি উলিওৱা :

1×6=6

Choose the correct answer:

- (a) হাইজেনবার্গ অনিশ্চয়তা নীতিটো হৈছে

 Heisenberg uncertainty principle is
 - (i) $\Delta x \, \Delta p \ge \frac{h}{4\pi}$
 - (ii) $\Delta x \, \Delta p_x \ge \frac{h}{4\pi}$
 - (iii) $\Delta y \, \Delta p_x \geq \frac{h}{4\pi}$
 - (iv) $\Delta x \ \Delta E \ge \frac{h}{4\pi}$



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

- (i) CH₃Cl
- (ii) NH₃
- (iii) BF₃
- (iv) H₂O

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
$$\frac{d}{dx}$$
 অপাৰেটৰৰ 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) $C_{3\nu}$ পইণ্ট গ্ৰুপত থকা ছিমেত্ৰি অপাৰেছনসমূহ হ'ল

The symmetry operations in $C_{3\nu}$ 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 , σ_v' , σ_v'' , σ_v''

(iii)
$$E, C_3^1, C_3^2, \sigma_{\nu}, \sigma_{\nu'}, \sigma_{\nu''}$$

- (iv) E, C_2 , $3\sigma_v$
- (f) তলৰ কোনটো অণুৰ ইনভাৰছন কেন্দ্ৰ আছে?
 Which of the following molecules has centre of inversion?
 - (i) BF₃
 - (ii) H₂O
 - (iii) HCl
 - (iv) H2C2

তলৰ প্ৰশ্নসমূহৰ যি কোনো তিনিটাৰ উত্তৰ দিয়া : 4×3=12
 Answer any three of the following questions :

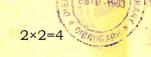
(a) তলত দিয়া অণুকেইটাৰ পইণ্ট ফ্ৰপ নিৰ্ণয় কৰা : 1×4=4

Determine the point group of the following molecules :

- (i) [PtCl₄]⁻²
- (ii) C₂H₄
- (iii) CO₂
- (iv) NH₃



চমু টোকা निখा (यि কোনো দুটা) :



Write short notes on (any two):

- (i) ঘূৰ্ণনৰ সঠিক অক্ষ (Cn) Proper axis of rotation (C_n)
- (ii) মিবৰ সমতল (o) Mirror plane (σ)
- (iii) ইনভাৰছন কেন্দ্ৰ (i) Centre of inversion (i)
- C2,, পইণ্ট গ্ৰুপৰ বাবে কেৰেক্টাৰ তালিকা গঠন কৰা। Construct the character table for C_{2n} point group.
- (i) x, y আৰু zক ভিত্তি হিচাপে লৈ নিম্নলিখিত (d) অপাৰেছনৰ 3×3 মেট্ৰিক্স উপস্থাপন লিখা (यि कात्ना पर्णे): $1 \times 2 = 2$ Write down the 3x3 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) মেট্রক্স বীজগণিত ব্যৱহাৰ কৰি $\sigma_{xy}C_{2(z)}$ ৰ মান উলিওৱা। Evaluate $\sigma_{xy}C_{2(z)}$ using matrix algebra.

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

Answer any three of the following questions:

(i) x = -a আৰু x = +a সীমাত ফলনসমূহ তলত (a) **पिया धवरण সং**ख्वा पिया देरह :

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

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

 $-a \le x \le a$ সীমাত নর্মেলাইজেছন N1 আৰু N2ৰ মান নিৰ্ণয় কৰা।

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

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

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

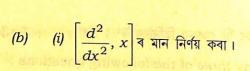
Calculate the value of normalization constant N_1 and N_2 in the range $-a \le x \le a$.

(ii) দেখওৱা যে ওপৰত উল্লেখ কৰা $F_1(x)$ আৰু F2(x) অর্থগ'নেল।

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

2

6





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

- (ii) ভৰবেগ আৰু গতিশক্তিক বুজুৱা অপাৰেটৰ দুটা উলিওৱা। 1½×2=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 অপাৰেট্ৰৰ
 নন-ডিজেনেৰেট আইগেনফলনসমূহ এটা আনটোৰ
 লগত অৰ্থগ'নেল।

 Prove that non-degenerate eigenfunctions of a Hermitian operator are orthogonal to each other.
- (c) (i) এটা ঘনকীয় ত্রিমাত্রিক বাকচত মুক্তভাৱে গতি কৰা কণিকাৰ বাবে স্ক্রুডিংগাৰ তবংগ সমীকৰণ সমাধান কৰা। আইগেনফলনসমূহ আৰু শক্তি নির্ণয় 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) $10^{-8}~{
m cm}$ 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।

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 হ্ৰাস হোৱা ভৰ μ. যদি কৌণিক ভৰবেগ L আৰু জড়তা ভ্ৰামক I হয়, তেন্তে প্ৰমাণ কৰা যে

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

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

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 ψ^2 ৰ গ্ৰাফ আঁকা :

3

P25/1537

(Continued)

ESTD 1963

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

- (1) v = 0
- (2) v = 1
- (3) v = 2
- (iii) Li প্ৰমাণুৰ বাবে স্ক্ৰডিংগাৰ ত্ৰংগ 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 $[L^2,L_z]=0.$
