

Total No. of Printed Pages—8

4 SEM FYUGP CHMC4D

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 উত্তরটো বাচি উলিওৱা : 1×6=6

Choose the correct answer :

(a) হাইজেনবার্গ অনিশ্চয়তা নীতিটো হৈছে

Heisenberg uncertainty principle is

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

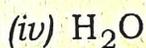
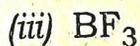
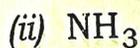
(ii) $\Delta x \Delta p_x \geq \frac{h}{4\pi}$

(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?



(c) কোৱাণ্টাম 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 $\frac{d}{dx}$ অপাৰেটৰৰ এটা আইগেন

ফলন ?

Which of the following functions is an eigenfunction of the operator $\frac{d}{dx}$?

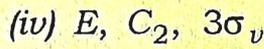
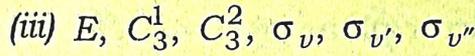
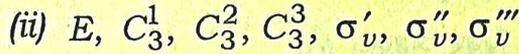
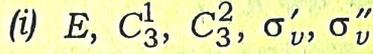
(i) e^{-ax^2}

(ii) $\sin ax$

(iii) e^{-ax}

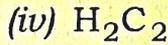
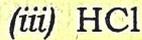
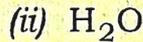
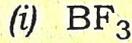
(iv) x^3

(e) C_{3v} পইন্ট গ্ৰুপত থকা ছিমेट্ৰি অপাৰেছনসমূহ হ'ল
The symmetry operations in C_{3v} point group are



(f) তলৰ কোনটো অণুৰ ইনভাৰছন কেন্দ্ৰ আছে?

Which of the following molecules has centre of inversion?

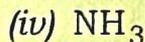
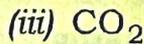
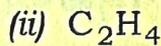
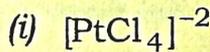


2. তলৰ প্ৰশ্নসমূহৰ যি কোনো তিনিটাৰ উত্তৰ দিয়া : $4 \times 3 = 12$

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 :



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

Write short notes on (any two) :

(i) ঘূৰ্ণনৰ সঠিক অক্ষ (C_n)

Proper axis of rotation (C_n)

(ii) মিৰৰ সমতল (σ)

Mirror plane (σ)

(iii) ইনভাৰছন কেন্দ্ৰ (i)

Centre of inversion (i)

(c) C_{2v} পইন্ট 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 3×3 মেট্ৰিক্স উপস্থাপন 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) 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 : $9 \times 3 = 27$

Answer any *three* of the following questions :

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

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

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

$-a \leq x \leq a$ সীমাত নৰ্মেলাইজেছন ফ্ৰেক N_1 আৰু N_2 ব 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 হ্ৰাস হোৱা ভৰ μ . যদি কৌণিক ভৰবেগ L আৰু জড়তা ভ্ৰামক I হয়, তেন্তে প্ৰমাণ কৰা যে

$$\text{গতিশক্তি, } T = \frac{L^2}{2\mu r^2} \quad 4$$

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 কোৱাণ্টাম 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 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 $[L^2, L_z] = 0$.
