

Total number of printed pages-15

1 (Sem-4/FYUGP) CHE 43 MN/(A)

2026

CHEMISTRY

(Minor)

SET-A

Paper : CHE4400704MN

(Theoretical Chemistry)

Full Marks : 45

Time : 2 hours

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

SET-A

Answer **either** in English **or** in Assamese.

1. Answer the following questions as directed :
1×5=5

নিৰ্দেশ দিয়ামতে তলত দিয়া প্ৰশ্নবোৰৰ উত্তৰ দিয়া :

- (i) What do you mean by the terms 'eigenfunction' and 'eigenvalue'?

আইগেন ফলন আৰু আইগেন মান বুলিলে কি বুজা?

- (ii) Find the eigenvalue for the operator

$$\frac{d^2}{dx^2} \text{ if the function is } \cos 4x.$$

$$\frac{d^2}{dx^2} \text{ অপারেটৰৰ আইগেন মান গণনা কৰা যদি ফলনৰ}$$

মান $\cos 4x$ হয়।

- (iii) Write the value of angular function for s-orbital.

s-অৰবিটেলৰ বাবে কৌণিক ফলনৰ মান লিখা।

- (iv) The momentum operator in one dimension is

$$(a) \frac{h}{2\pi} \frac{\partial}{\partial x}$$

$$(b) \frac{2\pi i}{h} \frac{\partial}{\partial x}$$

$$(c) \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x}$$

$$(d) \frac{2\pi}{h} \frac{\partial}{\partial x}$$

একক মাত্ৰাত ভৰবেগৰ অপারেটৰ হৈছে

$$(a) \frac{h}{2\pi} \frac{\partial}{\partial x}$$

$$(b) \frac{2\pi i}{h} \frac{\partial}{\partial x}$$

$$(c) \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x}$$

$$(d) \frac{2\pi}{h} \frac{\partial}{\partial x}$$

- (v) Which of the following statements about hydrogen atom in ground state is incorrect?

(a) It is described by quantum numbers $n = 1, l = 0, m = 0$.

(b) The electron angular momentum equals $\frac{h}{2\pi}$.

- (c) The radial distribution function has its maximum at the Bohr radius.
- (d) The wave function is spherically symmetrical.

ভূ-অৱস্থাত থকা হাইড্ৰজেন পৰমাণুৰ ক্ষেত্ৰত তলত দিয়া কোনটো বক্তব্য অশুদ্ধ?

- (a) ইয়াক কোৱাণ্টাম সংখ্যা $n = 1, l = 0, m = 0$ ৰ দ্বাৰা বৰ্ণনা কৰা হয়।
- (b) ইলেক্ট্ৰনটোৰ কৌণিক ভৰবেগ $\frac{h}{2\pi}$ ৰ সমান।
- (c) ব্যাসাৰ্দ্ধীয় বিতৰণ ফলনৰ সৰ্বাধিক মান ব'ৰ ব্যাসাৰ্দ্ধত থাকে।
- (d) তৰংগ ফলনটো গোলকীয়ভাবে সমমিত হয়।

2. Answer the following : **(any five)**

$$2 \times 5 = 10$$

তলত দিয়াবোৰৰ উত্তৰ দিয়া : **(যিকোনো পাঁচটা)**

- (i) An electron in a molecule travels at a speed of $40m/s$. The uncertainty in momentum (Δp) of the electron is 10^{-6} of its momentum. Calculate the uncertainty in position (Δx) if the mass of the electron is $9.1 \times 10^{-31}kg$.

এটা অণুত থকা ইলেক্ট্ৰনে $40m/s$ গতিবেগেৰে গতি কৰে। ইলেক্ট্ৰনটোৰ ভৰবেগৰ অনিশ্চয়তা তাৰ ভৰবেগৰ 10^{-6} অংশ। যদি ইলেক্ট্ৰনৰ ভৰ $9.1 \times 10^{-31}kg$ হয়, তেন্তে তাৰ অৱস্থানৰ অনিশ্চয়তা (Δx) গণনা কৰা।

- (ii) What are the significance of ψ and ψ^2 ?
 ψ আৰু ψ^2 ৰ তাৎপৰ্য্য কি?

- (iii) What do you mean by zero-point energy of a linear harmonic oscillator?

এটা ৰৈখিক হাৰমণিক দোলকৰ শূন্য বিন্দু শক্তি বুলিলে কি বুজা?

- (iv) What will happen if the walls of one dimensional box are suddenly removed?

এটা একমাত্ৰিক বাকচৰ বেৰবোৰ হঠাৎ আতৰালে কি ঘটিব?

- (v) Using the principle of LCAO for the wave function of H_2^+ ion, obtain the normalized wave function for the bonding molecular orbital.

H_2^+ আয়নৰ তৰংগ ফলনৰ বাবে LCAO নীতি ব্যৱহাৰ কৰি, বন্ধনযুক্ত আণৱিক অৰবিটেলৰ বাবে নৰ্মেলাইজড তৰংগ ফলন উপপাদন কৰা।

- (vi) Calculate the probability of a particle in one dimensional box of length 'a' found to be between 0 and $a/2$.

'a' দৈৰ্ঘ্যৰ একমাত্রিক বাকচত থকা এটা কণিকাৰ 0 আৰু $a/2$ ৰ মাজত পোৱা সম্ভাৱনা গণনা কৰা।

- (vii) What are normalized and orthogonal wave functions?

নৰ্মেলাইজড আৰু অৰ্থগনেল তৰংগ ফলন কাক বোলে?

- (viii) Show that if two operators $\hat{A}$ and $\hat{B}$ are Hermitian, then the product $(\hat{A}\hat{B})$ is also Hermitian if and only if $\hat{A}$ and $\hat{B}$ commute.

দেখুৱা যে যদি দুটা অপাৰেটৰ $\hat{A}$ আৰু $\hat{B}$ হাৰমিচিয়ান হয়, তেন্তে সিহঁতৰ পূৰণফল $(\hat{A}\hat{B})$ ও হাৰমিচিয়ান হ'ব যদি আৰু যদিহে $\hat{A}$ আৰু $\hat{B}$ কমিউট কৰে।

- (ix) Show that the function, Ae^{-ax} is an eigenfunction of the operator $\frac{d^2}{dx^2}$.

দেখুৱা যে Ae^{-ax} ফলনটো $\frac{d^2}{dx^2}$ অপাৰেটৰৰ এটা আইগেন ফলন হয়।

- (x) Show that if two operators commute, they would have the same set of eigenfunction.

দেখুৱা যে যদি দুটা অপাৰেটৰে কমিউট কৰে তেন্তে সিহঁতৰ আইগেন ফলনৰ সংহতি একে হয়।

3. Answer the following questions : **(any four)**
5×4=20

তলত দিয়া প্ৰশ্নবোৰৰ উত্তৰ দিয়া : (যিকোনো চাৰিটা)

- (a) (i) Prove that Hermitian operators have real eigenvalues. 3

প্ৰমাণ কৰা যে হাৰমিচিয়ান অপাৰেটৰৰ আইগেন মানবোৰ বাস্তৱ।

- (ii) Mention the properties of acceptable wave functions. 2

গ্রহণযোগ্য তৰংগ ফলনৰ ধৰ্মবোৰ উল্লেখ কৰা।

- (b) (i) What do you mean by degeneracy with respect to the energy levels of a particle inside a three dimensional box? 3

এটা ত্ৰিমাত্ৰিক বাকচৰ ভিতৰত থকা কণিকা এটাৰ সাপেক্ষে ডিজেনেৰেচি বুলিলে কি বুজা যায়?

- (ii) Define with example orthogonal and orthonormal wave functions. 2

উদাহৰণেৰে সৈতে অৰ্থগনেল আৰু অৰ্থনৰ্মেল তৰংগ ফলনৰ সংজ্ঞা দিয়া।

- (c) Write Schrödinger equation for a one dimensional harmonic oscillator and show that the energy levels of the harmonic oscillator are evenly spaced and over in its lowest vibrational state energy is not zero. 4+1=5

একমাত্ৰিক হাৰমোনিক দোলকৰ বাবে স্ক্ৰডিঞ্জাৰ সমীকৰণটো লিখা আৰু দেখুৱা যে হাৰমোনিক দোলকৰ শক্তি স্তৰবোৰ সমান ব্যৱধানত থাকে আনকি সৰ্বনিম্ন কম্পনীয় অৱস্থাতো।

- (d) Write the Schrödinger equation for the particle inside and outside a one dimensional box. Calculate the wave function and translational kinetic energy for the particle inside the box. Explain why zero point energy for a particle inside the box is other than zero. 4+1=5

এটা একমাত্ৰিক বাকচৰ ভিতৰত আৰু বাহিৰত থকা এটা কণিকাৰ বাবে স্ক্ৰডিঞ্জাৰ সমীকৰণটো লিখা। কণিকাটোৰ বাকচৰ ভিতৰত থকা অৱস্থাৰ তৰংগফলন আৰু স্থানান্তৰ গতিশক্তি গণনা কৰা। ব্যাখ্যা কৰা কিয় বাকচৰ ভিতৰত কণিকাটোৰ শূন্যবিন্দু শক্তিৰ মান শূন্যতকৈ বেলেগ।

- (e) Starting from Schrödinger equation for the hydrogen atom, write down the Radial Equation of it. Show that the hydrogenic wave functions are n^2 -fold degenerate. Explain what do you mean by atomic orbital. Why ψ_{1s} wave function is spherically symmetric? 2+1+1=5

হাইড্রজেন পৰমাণুৰ স্ক্ৰডিঙাৰ সমীকৰণৰ পৰা আৰম্ভ কৰি ইয়াৰ ব্যাসাৱৰ্তী সমীকৰণটো লিখা। দেখুৱা যে হাইড্ৰ'জেনীয় তৰংগ ফলনসমূহ n^2 গুণ ডিজেণেৰেট পাৰমাণৱিক অৰবিটেল বুলিলে কি বুজা? ψ_{1s} তৰংগ ফলনটো গোলকীয়ভাবে কিয় সমমিত হয়?

- (f) Derive Clausius-Mosetti equation to show the relation between Dielectric constant and molecular polarizability.

ডাইইলেক্ট্ৰিক ধ্ৰুবক আৰু আণৱিক ধ্ৰুবক-ক্ষমতাৰ মাজত সম্পৰ্ক দেখুৱা ক্লছিয়াচ-মচটি সমীকৰণটো উপপাদন কৰা।

- (g) What do you mean by term symbol? How a term symbol is represented? If the electronic configuration of an atom gives rise to more than one term symbols, how the lowest energy state is determined? $1+1+3=5$

টাৰ্ম চিহ্ন বুলিলে কি বুজা? ইয়াক কেনেদৰে প্ৰকাশ কৰা হয়? যদি এটা পৰমাণুৰ ইলেক্ট্ৰনীয় বিন্যাসৰ বাবে একাধিক টাৰ্ম চিহ্ন থাকে তেন্তে নিম্নতম শক্তিস্তৰ কেনেকৈ নিৰ্ণয় কৰিবা?

4. Answer the following questions : (any one)
10×1=10

তলত দিয়া প্ৰশ্নবোৰৰ উত্তৰ দিয়া : (যিকোনো এটা)

- (a) (i) Discuss the main postulates of quantum mechanics. 4

কোৱাণ্টাম মেকানিক্সৰ মুখ্য স্বীকাৰ্য কেইটা আলোচনা কৰা।

- (ii) A particle of mass m is confined in a one dimensional box of length $2a$. If the origin of the coordinate system is located at the centre of the box so that the particle lies between $+a$ and $-a$, the potential energy $V(x)$ of the particle under such conditions becomes

$$V(x) = \begin{cases} 0; & -a \leq x \leq +a \\ \infty; & |x| > a \end{cases}$$

Solve the Schrödinger equation for the particle inside the box.

6

m ভৰবিশিষ্ট এটা কণিকাক দৈৰ্ঘ্য $2a$ থকা এক
মাত্ৰিক বাকচৰ ভিতৰত আৱদ্ধ কৰি ৰখা হৈছে।
যদি স্থানাংক পদ্ধতিৰ উৎসটো বাকচটোৰ মাজত
স্থাপন কৰা হয় তেন্তে কণিকাটো $+a$ আৰু
 $-a$ ৰ মাজত অৱস্থিত থাকে। এই পৰিস্থিতিত
কণিকাটোৰ স্থিতি শক্তি $V(x)$ হ'ব

$$V(x) = \begin{cases} 0; & -a \leq x \leq +a \\ \alpha; & |x| > a \end{cases}$$

বাকচৰ ভিতৰত থকা কণিকাটোৰ বাবে স্ফুৰ্ণভাৱৰ
সমীকৰণটো সমাধান কৰা।

- (b) (i) Explain what do you mean by
Russell-Saunders Coupling
Scheme. Derive Russell-Saunders
Term Symbol for the configuration
 $2p$ and $3p$ of electrons. $3+4=7$

ৰাচেল-ছান্দৰ যুগ্মন বুলিলে কি বুজা বুজাই লিখা।
ইলেক্ট্ৰনৰ $2p$ আৰু $3p$ বিন্যাসৰ বাবে ৰাচেল-
ছান্দৰ পদ চিহ্ন উপপাদন কৰা।

- (ii) Examine whether the following
functions are acceptable or not :

3

$$xe^{-ax} \text{ for } x \geq 0$$

$$\text{And } \cos x + \sin x \text{ for } 0 \leq x \leq \pi/2$$

তলত দিয়া ফলনবোৰ গ্ৰহণযোগ্য হয়নে নহয়
পৰীক্ষা কৰা :

$$xe^{-ax}; x \geq 0 \text{ৰ বাবে}$$

$$\text{আৰু } \cos x + \sin x; 0 \leq x \leq \pi/2 \text{ৰ বাবে}$$

- (c) (i) Define radial distribution function.
Deduce an expression for the
radial distribution function for
non-s state. $1+3=4$

ব্যাসাঙ্গীয় বিতৰণ ফলনৰ সংজ্ঞা দিয়া। অনা-s
অৱস্থাৰ বাবে ব্যাসাঙ্গীয় বিতৰণ ফলনৰ এটা প্ৰকাশ
ৰাশি উপপাদন কৰা।

- (ii) Explain what do you mean by
space quantisation. 3

স্পেচ কোৱাণ্টাইজেচন বুলিলে কি বুজা বুজাই
লিখা।

- (iii) Calculate the average value of potential energy for the electron of H -atom in the $1s$ -state. 3

হাইড্র'জেন পৰমাণুৰ $1s$ অৱস্থাত থকা ইলেক্ট্ৰনৰ বাবে স্থিতি শক্তিৰ গড় মান গণনা কৰা।

- (d) (i) How can you apply dipole moment of a molecule to calculate the percentage of ionic character of the molecule and to predict the shapes of the molecules? 6

দ্বিমৰু ভ্ৰামকক এটা অণুৰ শতকৰা হিচাপত আয়নীয় ধৰ্ম আৰু অণুৰ আকৃতি নিৰ্ণয় কৰিবলৈ কিদৰে প্ৰয়োগ কৰিবা?

- (ii) The dipole moment of $NH_3(g)$ is $1.46D$ and the bond angle HNH is 108° . Calculate the bond moment of the $N-H$ bond. 2

$NH_3(g)$ ৰ দ্বিমৰু ভ্ৰামকৰ মান $1.46D$ আৰু HNH বাকনি কোণৰ মান 108° । $N-H$ বান্ধনিৰ বান্ধনি ভ্ৰামকৰ মান গণনা কৰা।

- (iii) How do you explain that the dipole moment of ethylchloride is considerably larger than that of chlorobenzene? 2

কেনেকৈ ব্যাখ্যা কৰিবা যে ইথাইল ক্লৰাইডৰ দ্বিমৰু ভ্ৰামকৰ মান ক্লৰ'বেনজিনৰ মানতকৈ যথেষ্ট বেছি হয়।