



বিদ্যাসাগর বিশ্ববিদ্যালয়  
**VIDYASAGAR UNIVERSITY**  
**Question Paper**

**B.Sc. General Examination 2022**

(Under CBCS Pattern)

**Semester - VI**

**Subject: CHEMISTRY**

**Paper : DSE - 1B / 2B / 3B - T**

**Full Marks : 40**

**Time : 2 Hours**

*Candidates are required to give their answer in their own words as far as practicable.*

*The figures in the margin indicate full marks.*

**(Application of Computers in Chemistry)**

**Group - A**

Answer any *four* from the following questions :

5×4=20

1. Explain the logical operators of basic programming. 5
2. Compare the compiled vs. interpreted languages. 5
3. What are strings ? Give example. 5
4. Describe the logic of matrix multiplication. 5
5. How many types of operators are there ? Explain with example. 5
6. Describe the relative operators of basic programming. 5

**Group - B**Answer any *two* from the following questions :

10×2=20

7. Describe Newton-Raphson Method that is used to find the roots of an equation. 10
8. Find a real root of the equation  $x^3 - x^2 - 2 = 0$  by Regula-Falsi method. 10
9. By Lagrange's interpolation formula, find the form of the function given by :

$x:$	0	1	2	3	4
$f(x):$	3	6	11	18	27

10

10. Calculate an approximate value of  $\int_0^{\pi/2} \sin x dx$  by Trapezoidal rule. 10

**বঙ্গানুবাদ****Group - A**

যে কোন চারটি প্রশ্নের উত্তর দাও :

৫×৪=২০

- ১। বেসিক প্রোগ্রামিং এর যৌক্তিক অপারেটরগুলি ব্যাখ্যা করো। ৫
- ২। কম্পাইলড বনাম ইন্টারপ্রেটেড ভাষার তুলনা করো। ৫
- ৩। স্ট্রিং কি? উদাহরণ দাও। ৫
- ৪। ম্যাট্রিক্স গুণ পদ্ধতি যুক্তিসহ বর্ণনা করো। ৫
- ৫। কত ধরনের অপারেটর আছে? উদাহরণসহ ব্যাখ্যা করো। ৫
- ৬। বেসিক প্রোগ্রামিং এর রিলেটিভ অপারেটরগুলির সম্পর্কে বর্ণনা করো। ৫

**Group - B**

যে কোন দুটি প্রশ্নের উত্তর দাও :

১০×২=২০

- ৭। Newton-Raphson পদ্ধতি বর্ণনা করো যা একটি সমীকরণের মূল খুঁজে বের করতে ব্যবহৃত হয়। ১০
- ৮। রেগুলার-ফালসি পদ্ধতিতে  $x^3 - x^2 - 2 = 0$  সমীকরণের একটি বাস্তব মূলগুলি খোঁজ। ১০
- ৯। Lagrange ইন্টারপোলেশন এর সূত্র দ্বারা, প্রদত্ত ফাংশনের ফর্মটি খোঁজ :

$x:$	0	1	2	3	4
$f(x):$	3	6	11	18	27

- ১০। Trapezoidal নিয়ম দ্বারা  $\int_0^{\pi/2} \sin x dx$  এর আনুমানিক মান গণনা করো। ১০

Or,

**(Green Chemistry)**

**Group - A**

A. Answer any **four** from the following questions : 5×4=20

1. What are the roles of 'Phase transfer catalyst' in Green Chemistry ?
2. Write the merits and demerits of Microwave assisted reactions.
3. Write the use of supercritical CO<sub>2</sub> as a green solvent.
4. (a) Define atom economy.  
(b) Write the four 'R' in Green Chemistry.  
(c) Write the best solvent in Green Chemistry. 2+2+1
5. (a) What are 'Ionic liquids' ?  
(b) How 'Carbaryl' is prepared after 'Bhopal Gas tragedy' ?  
(c) Why solvent free method is environmental friendly ? 2+2+1=5
6. What is Right-Fit pigment ? Why these are called environment friendly ?

B. Answer any **two** : 10×2=20

1. (a) Write the significance of 'Catalyst' in green chemistry.  
(b) Write an example of bio-catalyst.  
(c) Write the use of ultrasound in Green Chemistry.  
(d) Write the reagent used in methylation of active methylene group in Green Chemistry.  
Give an example. 3+1+3+3=10
2. Discuss any four principles of Green Chemistry. 10
3. (a) What do you mean by Cradle to Cradle Carpeting ?  
(b) Write the significance of inter esterification reaction for enhancement of quality of fat or oil.  
(c) Give an example of green method of oxidation of alcohol.  
(d) Write the name and symbol of two heavy and toxic metals. 3+3+2+2=10

4. What is the Conventional method for adipic acid preparation ? Why this method is not environment friendly ? Write an alternative green method of this. 4+2+4=10

বঙ্গানুবাদ

- A. Answer any *four* : 5×4=20

- ১। গ্রীন পদ্ধতিতে দশা স্থানান্তকারী অনুঘটক (Phase transfer catalyst) এর কাজ কী?
- ২। মাইক্রোওয়েভ অ্যাসিসটেড (Microwave - Assisted) বিক্রিয়ার সুবিধা ও অসুবিধাগুলি কি কি?
- ৩। গ্রীন দ্রাবক হিসাবে সুপার ক্রিটিক্যাল CO<sub>2</sub> এর ব্যবহার উল্লেখ কর।
- ৪। (a) অ্যাটম ইকোনমি (Atom economy) এর সংজ্ঞা দাও।  
(b) গ্রীন কেমিস্ট্রির চারটি 'R' কি কি?  
(c) গ্রীন পদ্ধতিতে ব্যবহৃত সর্বশ্রেষ্ঠ দ্রাবক কি? 2+2+1
- ৫। (a) আয়নীয় তরল কাকে বলে?  
(b) ভোপাল গ্যাস দুর্ঘটনার পর 'Carbaryl' কিভাবে তৈরি করা হয়?  
(c) দ্রাবকহীন পদ্ধতি কেন পরিবেশ বান্ধব?
- ৬। রাইটফিট পিগমেন্ট কাকে বলে? কেন এদেরকে পরিবেশ বান্ধব বলা হয়?

- B. Answer any *two* : 10×2=20

- ১। (a) গ্রীন কেমিস্ট্রিতে অনুঘটক কিভাবে গুরুত্বপূর্ণ?  
(b) একটি জৈব অনুঘটকের উদাহরণ দাও।  
(c) গ্রীন কেমিস্ট্রিতে আলট্রা-সাইণ্ডের ব্যবহার লেখ।  
(d) সক্রিয় মিথিলিন যৌগের মিথাইলেশন এ কোন গ্রীন বিকারক ব্যবহার করা হয়। উদাহরণসহ লেখ। 3+1+3+3=10
- ২। গ্রীন কেমিস্ট্রির যেকোনো চারটি নীতি ব্যাখ্যা কর। 10
- ৩। (a) Cradle to Cradle নকশা কাকে বলে?  
(b) ফ্যাট বা তেলের গুণগত মান বৃদ্ধিতে ইন্টার এসটারিফিকেশন এর ভূমিকা কি?  
(c) গ্রীন পদ্ধতিতে অ্যালকোহলের জারণের একটি উদাহরণ দাও।  
(d) যেকোনো দুটি বিষাক্ত ভারী ধাতুর নাম ও সংকেত লেখ। 3+3+2+2=10
- ৪। অ্যাডিপিক অ্যাসিড তৈরির প্রচলিত পদ্ধতি কি? এই পদ্ধতি পরিবেশ বান্ধব না কেন? এর পরিবর্তে একটি পরিবেশ বান্ধব পদ্ধতি লেখ। 4+2+4=10

Or,

**(Industrial Chemicals and Environment)**

**Group - A**

- A. Answer any **four** from the following questions : 5×4=20
1. Describe Kroll process for the extraction of titanium metal. 5
  2. (a) What is biochemical oxygen demand ?  
(b) How fertilizers pollute the water sources ? 2+3=5
  3. (a) What is ecosystem ? Write the name of four greenhouse gases.  
(b) What are the differences between ferrous and non-ferrous metals ? (1+2)+2=5
  4. (a) What is the average composition of air ?  
(b) What kind of plant safety should be maintained for the production of Industrial gases ? 3+2=5
  5. Discuss Merck's method for the production of hydrogen peroxide. 5
  6. What are the hazards in handling of the following industrial chemicals :  
(a) Hydrogen chloride  
(b) Caustic soda (2.5×2)=5

**Group - B**

- B. Answer any **two** questions : 10×2=20
7. (a) What are the uses of the following industrial gases :  
(i) Nitrogen, (ii) Argon, (iii) Hydrogen  
(b) What are the advantages and disadvantages of biocatalysts ? (2×3)+4=10
  8. (a) What is ozone layer depletion ? Write the effects of ozone layer depletion.  
(b) Which metal is purified by Mond's process and how ? (3+2)+(1+4)=10
  9. (a) Briefly discuss the manufacturing process of acetylene gas.  
(b) How oxides of nitrogen act as air pollutants ? 7+3=10

10. Write short notes on (any two) :

5×2=10

- (a) Bleaching powder
- (b) Photochemical smog
- (c) Carbon Cycle

বঙ্গানুবাদ

বিভাগ - ক

যে কোন চারটি প্রশ্নের উত্তর লেখো :

৫×৪=২০

- ১। টাইটেনিয়াম ধাতু নিষ্কাশনের 'Kroll' পদ্ধতিটি বর্ণনা করো। ৫
- ২। (ক) বায়োকেমিক্যাল অক্সিজেন চাহিদা বলতে কি বোঝ?
- (খ) সার কিভাবে জলের উৎসগুলিকে দূষিত করে? ২+৩=৫
- ৩। (ক) বাস্তুতন্ত্র বলতে কি বোঝ? চারটি গ্রীন হাউস গ্যাসের নাম লেখো।
- (খ) লৌহঘটিত এবং অলৌহঘটিত ধাতুর মধ্যে পার্থক্য লেখো। (১+২)+২=৫
- ৪। (ক) বায়ুর গড় উপাদান লেখো।
- (খ) শিল্প গ্যাস প্রস্তুতির জন্য কারখানাতে কি ধরনের সাবধানতা অবলম্বন করা প্রয়োজন — লেখো ৩+২=৫
- ৫। হাইড্রোজেন পারক্সাইড প্রস্তুতির 'Merck's' পদ্ধতিটি বর্ণনা করো। ৫
- ৬। নিম্নলিখিত শিল্প রাসায়নিকগুলির ব্যবহারের সময় কি ধরনের বিপদ হতে পারে লেখো :
  - (ক) হাইড্রোজেন ক্লোরাইড
  - (খ) কস্টিক সোডা ২.৫×২=৫

বিভাগ - খ

যে কোন দুটি প্রশ্নের উত্তর লেখো :

১০×২=২০

- ৭। (ক) নিম্নলিখিত শিল্প গ্যাসগুলির ব্যবহার লেখো :  
নাইট্রোজেন, আর্গন, হাইড্রোজেন
- (খ) জৈব অনুঘটকের সুবিধা এবং অসুবিধাগুলি কি কি? (২×৩)+৪=১০
- ৮। (ক) ওজোন স্তরের হ্রাস বলতে কি বোঝ? ওজোন স্তর হ্রাসের প্রভাব কি?

(খ) কোন্ ধাতুকে শোধন করা হয় Mond's পদ্ধতিতে এবং কিভাবে?  $(৩+২)+(১+৪)=১০$

৯। (ক) অ্যাসিটিলিন গ্যাসের উৎপাদন পদ্ধতি বর্ণনা করো।

(খ) নাইট্রোজেনের অক্সাইডগুলি কিভাবে বায়ুদূষণকারী গ্যাস হিসাবে কাজ করে লেখো।

$৭+৩=১০$

১০। সংক্ষিপ্ত বিবরণ লেখো (যেকোনো দুটি) :

$৫ \times ২ = ১০$

(ক) ব্লিচিং পাউডার

(খ) আলোক রাসায়নিক ধোঁয়াশা

(গ) কার্বন চক্র

Vidyasagar University

Or,

**(Quantum Chemistry, Spectroscopy & Photo Chemistry)****Group - A**Answer any *four* questions :

5×4=20

1. (a) Are the operators  $\frac{d^2}{dx^2}$  and  $\sqrt{\phantom{x}}$  linear ? 3
- (b) Write down the wave function of second quantum state for a quantum particle enclosed in a one dimensional box  $0 < x < a$ . 2
2. (a) Explain with reason why  $e^{-x}(0, x)$  is acceptable but  $e^{-x}(-\infty, +\infty)$  is not acceptable wave function. 3
- (b) Explain degeneracy in energy level for two dimensional particle in a box. 2
3. (a) A quantum Harmonic Oscillator has mass  $3 \times 10^{-27}$  gm. If its mass becomes double will it execute Simple Harmonic motion? How will its frequency be changed ? 3
- (b) What is the ground state energy of rigid diatomic rotor ? Explain the terms. 2
4. (a) Why is methanol a good solvent for UV spectroscopy but not for IR spectroscopy ? 2
- (b) Describe the effect of nuclear spin in Raman effect. 3
5. (a) Between  $CO$  and  $H_2$  which diatomic molecule is Raman active and why ?  $2\frac{1}{2}$
- (b) Diatomic molecules such as  $CO$ ,  $HF$  will show rotational spectrum whereas  $N_2$ ,  $O_2$  do not, why ?  $2\frac{1}{2}$
6. (a) What are the limitations of Lambert-Beer's Law ? 3
- (b) The quantum yield of a reaction may be 100. — Justify or criticise. 2

**Group - B**Answer any *two* questions :

10×2=20

7. (a) A particle of mass  $2.0 \times 10^{-26}$  g is in a one-dimensional box of length 4.00 nm. Find the frequency and wave length of the photon emitted when this particle goes from the  $n = 3$  to the  $n = 2$  level. 3
- (b) Zero point energy (ZPE) of a linear harmonic oscillator does not violate the Heisenberg Uncertainty principle — Explain. 3
- (c) What do you mean by most probable distances of electron from nucleus ? 2



- (d) Draw the radial distribution function of 3d orbital. 2
8. (a) Prove that position and momentum operators do not commute. 3
- (b) Why can the Schrodinger equation not be solved exactly for atoms in which more than one electron is present ? What is the possible way out from this problem ? 3
- (c) Explain pictorially bonding and antibonding orbitals of  $H_2^+$ . 2+2
9. (a) Explain dissociation and pre dissociation level of diatom with the help of Jablonski diagram. 3
- (b) Outline the effect of isotopic substitution on the rotational spectra of molecules. 2
- (c) How will you show using Infra red spectrum of O-Hydroxy benzaldehyde, the presence of intramolecular hydrogen bonding in the molecule ? 3
- (d) Why water is not used as a solvent in IR spectroscopy ? 2
10. (a) What is basic difference between NMR and ESR spectroscopy ?  $2\frac{1}{2}$
- (b) At 462 nm a blue filter transmits 71% of the light and a yellow filter transmits 40.9% of the light. What is the transmittance at the same wave length of two filters in combination ?  $2\frac{1}{2}$
- (c) Explain with example photosensitised reaction.  $2\frac{1}{2}$
- (d) Illustrate photostationary states in dimerisation of anthracene.  $2\frac{1}{2}$

বঙ্গানুবাদ

বিভাগ - ক

যে কোন চারটি প্রশ্নের উত্তর লেখো :

$৫ \times ৪ = ২০$

- ১। (ক)  $\frac{d^2}{dx^2}$  এবং  $\sqrt{\quad}$  অপারেটরগুলি কি রৈখিক? 3
- (খ) একটি কোয়ান্টাম বস্তু যে একমাত্রিক বাক্সে ( $0 < x < a$ ) আবদ্ধ, তার দ্বিতীয় কোয়ান্টাম স্তরের ওয়েভ ফাংশন লিখ। 2
- ২। (ক) কারণ দেখাও  $e^{-x}(0, x)$  গ্রহণযোগ্য ওয়েভ ফাংশন, কিন্তু  $e^{-x}(-\infty, +\infty)$  গ্রহণযোগ্য নয়। 3
- (খ) দ্বিমাত্রিক 'পার্টিকেল ইন এ বক্স' এর ক্ষেত্রে শক্তির 'ডিজেনারেসি' বলতে কি বোঝ? 2

- ৩। (ক) একটি সরল দোলগতি সম্পন্ন কোয়ান্টাম বস্তুর ভর  $3 \times 10^{-27}$  gm যদি উহার ভর দ্বিগুণ করা হয়, তবে উহার কম্পাঙ্কের কি পরিবর্তন হবে? 3
- (খ) দ্বিপারমাণুক রিজিড রোটরের সর্বনিম্ন শক্তি মাত্রা কি? 2
- ৪। (ক) মিথানেল UV বর্ণালীর জন্য খুব ভালো দ্রাবক, কিন্তু IR বর্ণালীর জন্য নয় - কেন? 2
- (খ) 'রমন প্রভাবে' নিউক্লিয় ঘূর্ণনের প্রভাব কি? ব্যাখ্যা কর। 3
- ৫। (ক) CO এবং  $H_2$  র মধ্যে কোন অণুটি রমন প্রভাব দেখাবে এবং কেন?  $2\frac{1}{2}$
- (খ) দ্বিপারমাণুক অণুগুলির মধ্যে CO, HF ঘূর্ণন বর্ণালী দেখায়, কিন্তু  $N_2$ ,  $O_2$  দেখায় না - কেন?  $2\frac{1}{2}$
- ৬। (ক) লেমবার্ট-বেয়ার সূত্রের সীমাবদ্ধতাগুলি কি কি? 3
- (খ) একটি বিক্রিয়ার 'কোয়ান্টাম ইন্ড' 100 হতে পারে - স্বপক্ষে অথবা বিপক্ষে যুক্তি দাও। 2

## বিভাগ - খ

যে কোন দুটি প্রশ্নের উত্তর লেখো :

10×2=20

- ৭। (ক) একটি  $2.0 \times 10^{-26}$  g ওজনের বস্তু একটি 4.00 nm দৈর্ঘ্যের এক মাত্রিক বাক্সে আবদ্ধ আছে। এই বস্তুটি যখন  $n = 3$  থেকে  $n = 2$  স্তরে যাবে, তখন ঐ বস্তু থেকে কত কম্পাঙ্ক ও তরঙ্গ দৈর্ঘ্যের ফোটন নির্গত হবে? 3
- (খ) ব্যাখ্যা কর — 'জিরো পয়েন্ট শক্তি' হাইজেনবার্গের 'অনিশ্চয়তা নীতি' উল্লঙ্ঘন করে না। 3
- (গ) নিউক্লিয়াস থেকে ইলেকট্রনের খুব সম্ভবত দূরত্ব বলতে কি বোঝ? 2
- (ঘ) 3d কক্ষকের 'রেডিয়াল ডিসট্রিবিউশন ফাংশন' অঙ্কন কর। 2
- ৮। (ক) প্রমাণ কর — অবস্থান ও ভরবেগ অপারেটর কমিউট করে না। 3
- (খ) একের বেশী ইলেকট্রনযুক্ত পরমাণুতে কেন শ্রোডিঙ্গারের সমীকরণ সঠিকভাবে সমাধান করা যায় না? এই সমস্যা সমাধানের সম্ভাব্য পথ কি? 3
- (গ)  $H_2^+$  র ক্ষেত্রে বন্ডিং ও অ্যান্টি বন্ডিং কক্ষকগুলির ছবি দিয়ে ব্যাখ্যা কর। 2+2
- ৯। (ক) দ্বি পরমাণু অণুর ক্ষেত্রে বন্ধনী ভাঙ্গা ও ভাঙ্গার আগের অবস্থা জেবলক্সি চিত্রের সাহায্যে ব্যাখ্যা কর। 3
- (খ) ঘূর্ণন বর্ণালীর ক্ষেত্রে অণুর মধ্যে আইসোটোপ প্রতিস্থাপনের প্রভাব আলোচনা কর। 2
- (গ) অবলোহিত (IR) বর্ণালীর সাহায্যে তুমি কিভাবে দেখাবে যে অর্থোহাইড্রোক্সি বেঞ্জালডিহাইডের মধ্যে আন্তঃ আণবিক বন্ধনী বর্তমান? 3

- (ঘ) জল কেন অবলোহিত বর্ণালী নির্ণয় যন্ত্রে ব্যবহৃত হয় না? 2
- ১০। (ক) NMR এবং ESR বর্ণালীর মধ্যে মূল পার্থক্য কি? 2½
- (খ) 462 nm এর একটি নীল ফিল্টার 71% আলো বিকিরণ করে এবং একটি হলুদ ফিল্টার 40.9% আলো পাঠায়। দুটি ফিল্টারকে একসাথে জুড়ে দিলে একই তরঙ্গ দৈর্ঘ্যে কত আলো পাঠাবে? 2½
- (গ) উদাহরণসহ আলোক সংবেদনশীল বিক্রিয়া সম্পর্কে বল। 2½
- (ঘ) এনথাসিনের ডাইমারাইজেশন বিক্রিয়ার 'ফটো স্টেশনারি অবস্থা' বলতে কি বোঝ? 2½

Vidyasagar University

Or,

**(Molecular Modeling and Drug Design)**

**Group - A**

Answer any *four* questions :

5×4=20

1. Match the sequences

- |                         |                               |
|-------------------------|-------------------------------|
| (a) Z-matrix            | (i) Molecular representation  |
| (b) Global minimum      | (ii) Molecular surface        |
| (c) CPK                 | (iii) Amino acids             |
| (d) van der Waals radii | (iv) Internal coordinates     |
| (e) Protein             | (v) Computer software         |
| (f) MM2 program         | (vi) Potential energy surface |

2. Construct the Z-matrix for ethylene molecule. 5

3. (a) Name two secondary structural elements of protein.

(b) Why sequence alignment algorithm is used in molecular modeling?

(c) Cite an alternative of sequence alignment algorithm. 2+2+1

4. Briefly discuss DOCK program for drug designing. Mention its limitations. 5

5. (a) Depict TIP3P and TIP5P water models.

(b) What are the advantages of TIP5P model over TIP3P model? 3+2

6. (a) Find the distance ( $r_{\min}$ ) between two atoms at which Lennard-Jones potential is minimum.

(b) Express Lennard-Jones potential in term of this distance. 3+2

**Group - B**

Answer any *two* questions :

10×2=20

7. (a) What are the components of intramolecular interaction potential of a macromolecule ?

(b) How electrostatic interaction is accounted in molecular dynamics simulation ?

(c) Electrostatic interaction is long-ranged, whereas van der Waals interaction is short-ranged — Explain.

- (d) What is improper torsion angle ? 3+3+2+2
8. (a) What is saddle point in potential energy surface ?
- (b) Energy-minimized structure is not always the most stable structure — Explain.
- (c) Discuss conjugate-gradient energy minimization method. 2+3+5
9. Write a simple code for the Monte Carlo simulation of a system containing four Ar atoms. 10
10. (a) Write Newton's equation of motion for simple atomic system.
- (b) How the equation is solved by velocity Verlet algorithm ?
- (c) How the temperature is defined in molecular dynamic simulations ?
- (d) Give names of the methods used to maintain constant temperature and constant pressure in simulations. 2+4+2+2

বঙ্গানুবাদ

বিভাগ - ক

যে কোন চারটি প্রশ্নের উত্তর লেখো :

৫×৪=২০

১। ডানদিকের সঙ্গে বামদিক মেলাও।

- |                         |                               |
|-------------------------|-------------------------------|
| (a) Z-matrix            | (i) Molecular representation  |
| (b) Global minimum      | (ii) Molecular surface        |
| (c) CPK                 | (iii) Amino acids             |
| (d) van der Waals radii | (iv) Internal coordinates     |
| (e) Protein             | (v) Computer software         |
| (f) MM2 program         | (vi) Potential energy surface |

৫

২। ইথিলিন অণুর জন্য Z-matrix তৈরী কর।

৫

৩। (ক) প্রোটিনের দ্বিতীয় ক্রমের দুটি গঠনগত উপাদানের নাম লেখ।

(খ) Molecular modeling -এ sequence alignment কেন ব্যবহার করা হয়?

(গ) Sequence alignment এর একটি বিকল্প পদ্ধতি উল্লেখ কর।

২+২+১

- ৪। Dock program সম্পর্কে সংক্ষেপে লেখ। এর সীমাবদ্ধতা উল্লেখ কর। ৫
- ৫। (ক) জলের TIP3P ও TIP5P model এর চিত্র অঙ্কন কর।
- (খ) TIP3P এর তুলনায় TIP5P এর সুবিধা কী? ৩+২
- ৬। (ক) দুটি পরমাণুর মধ্যে যে দূরত্বের জন্য Lennard-Jones potential ন্যূনতম, সেই দূরত্ব নির্ণয় কর।
- (খ) সেই দূরত্বের সাহায্যে Lennard-Jones সমীকরণটি লেখ। ৩+২

### বিভাগ - খ

যে কোন দুটি প্রশ্নের উত্তর লেখো :

১০×২=২০

- ৭। (ক) বৃহদ-অণুর intramolecular interaction potential এর উপাদানগুলি লেখ।
- (খ) Molecular dynamics simulation এ কীভাবে electrostatic interaction প্রয়োগ করা হয়?
- (গ) van der Waals interaction হল স্বল্প-পরিসরের কিন্তু electrostatic interaction দীর্ঘ-পরিসরের – ব্যাখ্যা কর।
- (ঘ) Improper torsion কোন্ কি? ৩+৩+২+২
- ৮। (ক) Potential energy surface এ saddle point কী?
- (খ) Energy-minimized গঠন সর্বদা অধিক সুস্থিত গঠন নয় -- ব্যাখ্যা কর।
- (গ) Conjugate-gradient energy minimization method টি আলোচনা কর। ২+৩+৫
- ৯। চারটি argon পরমাণু আছে এমন একটি system এর জন্য Monte Carlo simulation এর কোড লেখ। ১০
- ১০। (ক) সরল পারমাণবিক system এর জন্য Newton এর গতিবিদ্যার সমীকরণ লেখ।
- (খ) এই সমীকরণটি velocity Verlet algorithm এর সাহায্যে কীভাবে সমাধান করা হয়?
- (গ) Molecular dynamic simulations এ উষ্ণতা কীভাবে সংজ্ঞায়িত করা হয়?
- (ঘ) স্থির উষ্ণতা ও চাপ বজায় রাখার জন্য simulations এ যে পদ্ধতিগুলি ব্যবহার করা হয় সেগুলির নাম লেখ। ২+৪+২+২