



বিদ্যাসাগর বিশ্ববিদ্যালয়
VIDYASAGAR UNIVERSITY

Question Paper

B.Sc. General Examinations 2021

(Under CBCS Pattern)

Semester - VI

Subject: CHEMISTRY

Paper: DSE 1B/2B/3B-T & P

Full Marks : 60

Time : 3 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 COMPUTER IN CHEMISTRY

(THEORY - 40)

Group - A

Answer any *one* of the following :

2 × 15 = 30

1. What do you mean by the term “LOGICAL OPERATOR”. Discuss with appropriate example. (15)
2. (a) What is PROGRAMMING LANGUAGE ?
(b) What are the differences between Compiled and Interpreted language ?

(c) Is "PYTHON" an Interpreted language? Why?

(d) What is 'ORDER OF MATRIX'? Give example.

(e) Write down the five BASIC PROGRAMMING ELEMENTS. 5×3=15

3. What types of Numerical Methods are used to find out the Roots of an equation? Give a brief discussion on it. (15)

Group - B

Answer any *one* of the following : 1 × 10 = 10

4. (a) Why quadratic equations have two solutions?

(b) What do you understand by the term Molecular Modeling?

(c) What are the importance of Molecular Modeling in chemistry teaching? (2+4+4)

5. (a) Which parameters of a molecular system can be known from 'Potential Energy Surface'?

(b) Write down the applications of PES.

(c) What is 'Saddle Point'? (3+4+3)

বঙ্গানুবাদ

বিভাগ - ক

যে কোনো ২টি প্রশ্নের উত্তর লেখ : ২×১৫=৩০

১। LOGICAL OPERATOR বলতে কি বোঝ? সঠিক উদাহরণ সহ আলোচনা কর। ১৫

২। (ক) PROGRAMING LANGUAGE বলতে কি বোঝ?

(খ) Compiled এবং Interpreted Language এর মধ্যে পার্থক্য কি?

(গ) 'PYTHON' কি Interpreted language? কেন?

(ঘ) MATRIX এর ORDER বলতে কি বোঝ? উদাহরণসহ লেখ।

(ঙ) পাঁচটি BASIC PROGRAMMING ELEMENTS কি কি? ৫×৩=১৫

৩। Roots of the equation নির্ণয় করার জন্য মূলতঃ কয় প্রকার Numerical Methods ব্যবহার করা যেতে পারে? উদাহরণসহ সংক্ষিপ্ত ভাবে বোঝাও। (১৫)

বিভাগ - খ

যে কোনো একটি প্রশ্নের উত্তর দাও :

১×১০=১০

৪। (ক) Quadratic equation এর দুইটি solutions হয় কেন?

(খ) 'Molecular Modeling' বলতে কি বোঝ?

(গ) Chemistry Teaching এর ক্ষেত্রে Molecular Modeling এর গুরুত্ব (Importance) কি?

(২+৪+৪)

৫। (ক) Potential Energy Surface (PES) থেকে একটি Molecular System এর কি কি parameter জানতে পারি?

(খ) PES এর Applications গুলি লেখ।

(গ) Saddle point বলতে কি বোঝ?

(৩+৪+৩)

PRACTICAL (Marks : 20)

Answer any *one* of the following :

1 × 20 = 20

1. Discuss the Application of Gauss-Siedel Method in colourimetry.
2. Change in entropy for van der Waal's gas without phase changing is obtained from differentiating the van der Waal's EOS is :

$$\Delta S = \int_{v_1}^{v_2} \frac{R}{v-b} dv'$$

Write a 'C' programme to find the value of above integration by Simpsons 1/3rd rule when the gas is expanded from 0.03 m³/mol to 0.1 m³/mol.

3. Write a 'C' programme for Newton Raphson Method to find the volume of exactly one mol of oxygen gas at 10.00 atm pressure and at 300.0K temperature.

where a = 1.36 lit² atm/ mol²

b = 0.003183 lit² / mol

R = 0.0820578 lit² – atm / mol – K for oxygen.

বঙ্গানুবাদ

বিভাগ - ক

যে কোনো ১টি প্রশ্নের উত্তর লেখ :

১×২০=২০

- ১। কলোরমিতিতে গস্-সিড্‌ল পদ্ধতির ব্যবহার (Application) আলোচনা কর।
- ২। নিম্নলিখিত ভ্যান্ডারওয়াল (Vanderwaal's) অবস্থার সমীকরণের অবকলন করে ভ্যান্ডারওয়াল গ্যাসের এনট্রপির (Entropy) পরিবর্তন পাওয়া যায়, যেখানে দশা (Phase) অপরিবর্তিত থাকে :

$$\Delta S = \int_{v_1}^{v_2} \frac{R}{v-b} dv'$$

উক্ত সমীকরণে Simpson-এর 1/3rd rule প্রয়োগ করে r এর মান বের করার জন্য একটি 'C' programme লেখ। যখন গ্যাসটি 0.03 m³/mol থেকে 0.1 m³/mol আয়তনে সম্প্রসারিত হয়।

- ৩। 10 atm চাপ এবং 300.0K তাপমাত্রায় Newton Raphson পদ্ধতিতে 1 মোল প্রকৃত অক্সিজেন গ্যাসের আয়তন বের করার জন্য একটি 'C' Programme লেখ। দেওয়া আছে—

$$a = 1.36 \text{ lit}^2 \text{ atm/mol}^2$$

$$b = 0.003183 \text{ lit}^2 / \text{mol}$$

$$R = 0.0820578 \text{ lit}^2 - \text{atm} / \text{mol} - \text{K} \text{ অক্সিজেন গ্যাসের জন্য।}$$

Or
GREEN CHEMISTRY

(THEORY 40)

Group - A

Answer any *two* questions :

2 × 15 = 30

1. (a) Define atom economy.

(b) How can you improve the atom economy of a reaction ?

(c) Calculate the atom economy of the following reaction :

The fermentation of sugar to make ethanol



2. Write short notes on :

3 × 5

(a) Green energy and sustainability.

(b) Ionic liquids

(c) Carbon dioxide as cleaning agent.

3. (a) Give different techniques of minimizing hazardous wastes.

(b) Discuss the advantages of water over organic solvents. 10+5

4. Give one example each of the following cases, stating the green chemistry principle involved :

5 × 3

(a) Ultrasonic Reactions.

(b) Rightfit pigment.

(c) Microwave assisted reactions.

(d) Environmentally safe marine antifoulant.

(e) Aqueous phase reactions.

Group - B

Answer any *one* question :

1 × 10 = 10

5. Write twelve principles of Green chemistry.
6. What do you mean by “Cradle to Cradle Carpet”? How does it help to sustainability?

বঙ্গানুবাদ
বিভাগ - ক

যে কোনো ২টি প্রশ্নের উত্তর লেখ :

২×৫=১০

১। (ক) ‘অ্যাটম ইকনমি’-র সংজ্ঞা দাও।

(খ) ‘অ্যাটম ইকনমি’ কীভাবে বাড়ানো যাবে?

(গ) নিম্নলিখিত বিক্রিয়ার ‘অ্যাটম ইকনমি’ নির্ণয় কর :

সন্ধান প্রক্রিয়ার শর্করা থেকে ইথানল প্রস্তুতি



২। সংক্ষিপ্ত টীকা লেখ :

৩×৫

(ক) গ্রীন এনার্জি ও স্থায়িত্ব

(খ) আয়নীয় তরল

(গ) স্ফোঁতকারক হিসেবে CO₂ এর ব্যবহার

৩। (ক) ক্ষতিকারক বর্জ্যের পরিমাণ কমানোর বিভিন্ন উপায়গুলি লেখ।

১০

(খ) দ্রাবক হিসাবে জৈব দ্রাবকের থেকে জলের ব্যবহার বেশি সুবিধাজনক কেন?

৫

৪। নিম্নলিখিতগুলির ক্ষেত্রে কীভাবে গ্রীন কেমিস্ট্রির নীতি প্রযোজ্য হয়েছে তা একটি করে উদাহরণ সহ লেখ :

(ক) আলট্রাসনিক বিক্রিয়া

(খ) রাইটফিট রঞ্জক

(গ) মাইক্রোওয়েভ-এর সাহায্যে বিক্রিয়া

(ঘ) পরিবেশগতভাবে নিরাপদ সামুদ্রিক অ্যান্টিফাউল্যান্ট

(ঙ) অ্যাকোয়াস ফেজ্জ বিক্রিয়া

বিভাগ - খ

যে কোনো ১টি প্রশ্নের উত্তর লেখ :

১×১০=১০

৫। গ্রীন কেমিস্ট্রির বারোটি নীতি লেখ।

৬। 'ত্র্যাডেল থেকে ত্র্যাডেল কাপেট' বলতে কী বোঝ? ইহা কীভাবে স্থায়িত্বকে সাহায্য করে?

PRACTICAL (Marks : 20)

Answer any *one* question :

1 × 20 = 20

1. Write the preparation procedure of gold nanoparticles using tea leaves extract.
2. Discuss principle and procedure of Benzoin condensation where thiamine hydrochloride acts as a catalyst instead of cyanide.
3. Write principle and procedure of photoreduction of benzophenone to benzopinacol in presence of sunlight.

বঙ্গানুবাদ

যে কোনো ১টি প্রশ্নের উত্তর লেখ :

১×২০=২০

- ১। চা-পাতার নির্যাস ব্যবহার করে গোল্ড ন্যানোপার্টিকল-এর প্রস্তুতি বর্ণনা কর।
 - ২। বেঞ্জয়িন কনডেনসেশন বিক্রিয়ার নীতি ও পদ্ধতি আলোচনা কর, যেখানে সাইসিন হাইড্রোক্লোরাইডকে সায়ানাইডের পরিবর্তে অনুঘটক হিসেবে ব্যবহার করা হয়।
 - ৩। সূর্যালোকের উপস্থিতিতে বেঞ্জোফেনোন থেকে বেঞ্জোপিনাকলের আলোক বিজারণ বিক্রিয়ার নীতি ও পদ্ধতি আলোচনা কর।
-

Or
INDUSTRIAL CHEMICALS AND ENVIRONMENT

(THEORY 40)

Group - A

Answer any *two* questions : 15×2=30

1. Briefly describe the manufacture, analysis, application and hazards in handling the nitric acid. [15]

2. (a) Define hydrometallurgy.
(b) 'Metal oxides are unstable at high temperature' — explain with Ellingham diagram.
(c) With the help of Ellingham diagram explain why carbon monoxide acts as a reducing agent in the production of cast iron from haematite. [5+5+5]

3. (a) Briefly explain the biogeochemical Carbon or Sulphur cycle with a neat, labelled diagram.
(b) Name the three major atmospheric pollutants. What are the sources of SO_x in the atmosphere? [8+7]

4. Write explanatory notes on the following :
(a) Greenhouse effect
(b) Nuclear pollution [7.5+7.5]

Group - B

Answer any *one* question : 10×1=10

5. Distinguish between the following :
(a) Nuclear fission and nuclear fusion
(b) Primary and secondary air pollutants [5+5]

6. (a) Discuss the catalytic role of NO and Cl in the stratospheric depletion of ozone layer.
(b) Give the classification of aquatic ecosystems. Discuss briefly the ecologically harmful effects of the presence of pesticides in a water body. [5+5]

বঙ্গানুবাদ

বিভাগ - ক

যে কোনো ২টি প্রশ্নের উত্তর লেখ :

২×১৫=৩০

১। নাইট্রিক অ্যাসিডের উৎপাদন পদ্ধতি, বিশ্লেষণ, প্রয়োগ এবং ব্যবহারের বিপত্তি সম্পর্কে সংক্ষেপে বর্ণনা কর। ১৫

২। (ক) হাইড্রোমেটালার্জির সংজ্ঞা দাও।

(খ) 'উচ্চ তাপমাত্রায় ধাতব অক্সাইডগুলি অস্থায়ী'—এলিংহাম ডায়াগ্রামের সাহায্যে ব্যাখ্যা কর।

(গ) হেমাটাইট থেকে কাস্ট আয়রন প্রস্তুতিতে কেন কার্বন মনোক্সাইড বিজারক দ্রব্য হিসাবে কাজ করে তা এলিংহাম ডায়াগ্রামের সাহায্যে ব্যাখ্যা কর। ৫+৫+৫

৩। (ক) একটি পরিষ্কার লেবেলযুক্ত চিত্রের সাহায্যে সংক্ষেপে জৈব রাসায়নিক কার্বন এবং সালফার চক্র ব্যাখ্যা কর।

(খ) তিনটি প্রধান পরিবেশ দূষকের নাম লেখো। পরিবেশে SO_x -এর উৎসগুলি কি কি? ৮+৭

৪। ব্যাখ্যামূলক টীকা লেখো :

৭.৫+৭.৫

(ক) গ্রীনহাউস এফেক্ট

(খ) পারমাণবিক দূষণ

বিভাগ - খ

যে কোনো ১টি প্রশ্নের উত্তর লেখ :

১×১০=১০

৫। পার্থক্য লেখ :

৫+৫

(ক) কেন্দ্রীয় বিদারণ (নিউক্লিয়ার ফিসন) এবং কেন্দ্রীয় সংযোজন (নিউক্লিয়ার ফিউসন)।

(খ) মুখ্য এবং গৌণ পরিবেশ দূষক।

৬। (ক) স্ট্র্যাটোস্ফিয়ার ডিপ্লিশন ওজোন স্তরে NO ও Cl-এর অনুঘটক ভূমিকা আলোচনা কর।

(খ) অ্যাকোয়াটিক বাস্তুতন্ত্রের শ্রেণিবিন্যাস লেখো। জলে কীটনাশকের পরিবেশগতভাবে ক্ষতিকারক প্রভাব সংক্ষেপে আলোচনা কর। ৫+৫

PRACTICAL (Marks : 20)

Answer any *one* question :

20×1=20

1. Define BOD and COD of water sample. Describe the method of determination of COD and BOD of a sample.
2. Write down the methods of estimation of total alkalinity of water samples using double titration method.
3. Write down the principle, details procedure and working formula for the measurement of available chlorine in bleaching powder.

বঙ্গানুবাদ

যে কোনো ১টি প্রশ্নের উত্তর লেখ :

১×২০=২০

- ১। জলের নমুনার BOD এবং COD-এর সংজ্ঞা দাও। একটি নমুনার COD এবং BOD নির্ধারণ করার পদ্ধতি বর্ণনা কর।
 - ২। ডবল টাইট্রেশন পদ্ধতি ব্যবহার করে জলের নমুনার সম্পূর্ণ ক্ষারত্ব নির্ধারণ করার পদ্ধতিগুলি লেখ।
 - ৩। ব্লিচিং পাউডারে প্রাপ্য ক্লোরিনের পরিমাণ নির্ধারণ করার নীতি, বিস্তারিত পদ্ধতি এবং কার্যকরী সূত্রটি লেখ।
-

Or
**QUANTUM CHEMISTRY, SPECTROSCOPY
AND PHOTOCHEMISTRY**

(THEORY 40)

Group - A

Answer any *two* questions :

15×2=30

1. (a) Derive the expression of energy for a quantum particle in a one dimensional box. 5
- (b) What is wave function ? 2
- (c) A cubic box of edge-length 1.2 nm contains 10 electrons. Applying the simple particle in a box theory calculate the value of energy. 4
- (d) Write the Schrodinger equation for simple Harmonic oscillator and explain its terms. 2
- (e) Explain 'quantization of energy' with respect to Hydrogen atom. 2
2. (a) Write the differences among IR, ultraviolet and microwave rays. 4
- (b) Which of following molecules are Rotational, IR and Raman active ?
HCl, H₂O, CO₂ and H₂ 4
- (c) What will be the differences in the Rotational spectra between ¹²CO and ¹³CO ? 3
- (d) What are the P, Q, R branches in IR Spectroscopy. 4
3. (a) Write down the limitations of Lambert-Beer's Law. 2
- (b) What is quantum yield ? How can it be increased for an excited molecule ? 2+1
- (c) Give an example of photo sensitized reaction. 2
- (d) State the principle of ESR spectroscopy. 4
- (e) Write a role of photochemical reaction in biochemical process. 2
- (f) What is chemiluminescence ? 2

4. (a) What is 'zero point energy' of SHO ? Justify it with respect to Heisenberg's uncertainty principle. 3+2
- (b) What is Spherical Harmonics ? 3
- (c) Explain the dissociation of a molecule with the help of Morse potential diagram. 4
- (d) What do you mean by 'chemical shift' in NMR spectra ? 3

Group - B

Answer any *one* question : 1×10=10

5. (a) Prove $[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar$, where \hat{x} and \hat{p}_x are position and momentum operators along x direction, respectively. 4
- (b) What is Raman effect ? 2
- (c) What is the Physical significance of absorption coefficient ? 2
- (d) Write the Stark and Einstein's Law of Photochemistry. 2
6. (a) Write down the Franck-Condon principle for electronic transitions. 3
- (b) What are the differences between fluorescence and phosphorescence. 4
- (c) What are the Stokes line in Raman spectroscopy ? 3

বঙ্গানুবাদ

বিভাগ - ক

যে কোনো দুটি প্রশ্নের উত্তর লেখ : 2×15=30

1. (a) একটি এক মাত্রিক বাক্সে একটি কোয়ান্টাম বস্তু থাকলে, তার শক্তির মাত্রা নির্ণয় কর। 5
- (b) 'তরঙ্গ ফাংশন' বলতে কি বোঝ? 2
- (c) একটি 1.2 mm বর্গাকার বাক্সে 10টি ইলেকট্রন আছে। একমাত্রিক বাক্সে বস্তুর শক্তির মাত্রার সূত্র ব্যবহার করে উহার শক্তির মাত্রা নির্ণয় কর। 4
- (d) সরল দোলগতি সম্পর্কিত শোরেনজারের equation লিখ ও ব্যাখ্যা কর। 2
- (e) হাইড্রোজেন পরমাণুর ক্ষেত্রে 'শক্তির কোয়ানটাইজেশন' ব্যাখ্যা কর। 2

2. (a) অবলোহিত, অতি বেগুণী, মাইক্রোওয়েভ রশ্মিগুলির মধ্যে পার্থক্য লিখ। 4
- (b) নিম্নলিখিত অনুগুলির মধ্যে কোনগুলি মাইক্রোওয়েভ, অবলোহিত ও রমন বর্ণালী দেখাবে?
HCl, H₂O, CO₂, H₂ 4
- (c) ¹²CO এবং ¹³CO এর রোটেশনাল (মাইক্রোওয়েভ) বর্ণালীর মধ্যে কি কি পার্থক্য আছে? 3
- (d) অবলোহিত বর্ণালীর P, Q, R লাইনগুচ্ছ বলতে কি বোঝ? 4
3. (a) ল্যামবার্ট বেয়ারের সূত্রের সীমাবদ্ধতা গুলি লিখ। 2
- (b) কোয়ান্টাম ইন্ড কি? একটি উত্তেজিত অণুর ক্ষেত্রে কিভাবে ইহার মান বাড়ানো যায়? 2+1
- (c) একটি ফটো সেনসিটাইজ বিক্রিয়ার উদাহরণ দাও। 2
- (d) ESR বর্ণালীর মূলনীতি লেখ। 4
- (e) বায়োকেমিকাল প্রক্রিয়ায় আলোক রাসায়নিক বিক্রিয়ার ভূমিকা লেখ। 2
- (f) 'কেমিলুমিনেসেন্স' কি? 2
4. (a) 'জিরো পয়েন্ট শক্তি' (of SHO) কি? হাইসেনবার্গের অনিশ্চয়তা নীতির দ্বারা ইহাকে যাচাই কর। 3+2
- (b) 'স্ফেরিকাল হারমোনিক্স' কাকে বলে? 3
- (c) মোরস শক্তি মাত্রার চিত্রের সাহায্যে অণুর ভাঙন ব্যাখ্যা কর। 4
- (d) NMR বর্ণালীর 'কেমিকাল সিস্ট' বলতে কি বোঝ? 3

বিভাগ - খ

যে কোনো একটি প্রশ্নের উত্তর দাও :

1×10=10

5. (a) প্রমাণ কর $[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar$ যেখানে \hat{x} এবং \hat{p}_x হল যথাক্রমে অবস্থান ও ভরবেগ অপারেটর। 4
- (b) 'রমন প্রভাব' কি? 2
- (c) শোষণ গুণাঙ্কের ভৌত রাসায়নিক গুরুত্ব সম্পর্কে লেখ। 2
- (d) আলোক রসায়নে 'স্টার্ক ও আইনস্টাইনের সূত্র'টি লিখ। 2

6. (a) ইলেকট্রনিক স্থানান্তরের ক্ষেত্রে ফ্রেক-কন্ডনের সূত্রটি লিখ। 3
- (b) 'ফ্লুরোসেন্স' ও 'ফসফোরোসেন্স' এর মধ্যে পার্থক্য লিখ। 4
- (c) রমন বর্ণালীতে স্টোক্স লাইনগুলি কি? 3

PRACTICAL (Marks : 20)

Discuss any **one** of the following experiments with respect to working principle (Diagram if necessary) and procedure : 20×1=20

1. (a) pH dependence UV-vis spectrum (200-500 nm) study of $K_2Cr_2O_7$.
- (b) Study of the 200-500 nm absorbance spectra of $KMnO_4$ and $K_2Cr_2O_7$ (in 0.1 M H_2SO_4) and determination of the λ_{max} values of each. Calculate the energies of the two transitions in different units ($J \text{ molecule}^{-1}$, $kJ \text{ mol}^{-1}$, cm^{-1} , ev)
2. (a) Verification (colorimetrically) of Lambert-Beers Law and determine the concentration of $KMnO_4$ in a solution of unknown concentration.
- (b) Determine the concentration of $KMnO_4$ and $K_2Cr_2O_7$ in a mixture by colorimetric method.
3. (a) Using colorimeter determine the amount of iron present in a sample using 1, 10 phenanthroline.
- (b) Study the kinetics of interaction of crystal violet with sodium hydroxide by colorimetric method.

বঙ্গানুবাদ

কার্যনীতি ও পরীক্ষা পদ্ধতির ওপর ভিত্তি করে নিম্নলিখিত যে কোনো **১টি** পরীক্ষা আলোচনা কর :
১×২০=২০

- ১। (ক) $K_2Cr_2O_7$ এর pH নির্ভর UV-vis বর্ণালী (200-500 nm) আলোচনা কর।
- (খ) $KMnO_4$ এবং $K_2Cr_2O_7$ (0.1 M H_2SO_4)-এর 200-500 nm শোষণ বর্ণালী দ্রবণে আলোচনা এবং প্রতি ক্ষেত্রে λ_{max} এর মান নির্ণয়।
- ২। (ক) কলোরিমিতির সাহায্যে Lambert Beer's সূত্রটি কীভাবে যাচাই এবং এ থেকে অজানা মাত্রার $KMnO_4$ দ্রবণের গাঢ়ত্ব নির্ণয়।

(খ) কলোরিমিতি পদ্ধতিতে KMnO_4 ও $\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7$ মিশ্রিত দ্রবণে তাদের গাঢ়ত্ব নির্ণয়।

৩। (ক) কলোরিমিটারের সাহায্যে 1, 10-ফিনানথোলিন ব্যবহার করে একটি নমুনাতে উপস্থিত লোহার পরিমাণ নির্ণয়।

(খ) কলোরিমিতি পদ্ধতিতে সোডিয়াম হাইড্রক্সাইডের সঙ্গে ক্রিস্টাল ভায়োলেটের মিথস্ক্রিয়া গতিবিদ্যা।

Vidyasagar University

Or

MOLECULAR MODELING AND DRUG DESIGN

(THEORY - 40)

Group - A

Answer any *two* of the following questions : 2×15=30

1. What is molecular modeling ? Mention the methods by which geometry of a molecule can be described ? What is potential energy surface ? What happens if it is rotated in space? Mention the steps to construct a Z-matrix. What are the two commonly used molecular models ?
2+2+2+1+6+2
2. What do you mean by molecular graphics ? Compare it with physical models. What is energy minimization in molecular docking ? Why is energy minimization important ? What are the structure minimization and energy optimization ? What are the basic steps of molecular docking ?
2+2+2+2+4+3
3. Write short notes (any three) :
 - (a) Water model in computational chemistry.
 - (b) Force field.
 - (c) Molecular mechanics.
 - (d) Denovo drug design. 5+5+5
4. What is meant by molecular simulation ? How much time is required to simulate the dynamics of a molecule ? What is dynamic simulation model ? What is the purpose of molecular dynamics ? How does Metropolis algorithm work ? What is Random Walk Metropolis ? 2+2+2+3+4+2

Group - B

Answer any *one* of the following questions : 1×10=10

5. What is Monte Carlo simulation and how does it work ? Write some applications of Monte Carlo simulation. What are the disadvantages of Monte Carlo simulation ? 2+2+4+2
6. What is QSAR Modeling ? How QSAR can be used in drug designing ? What is the reason for selecting QSAR model ? Write an overview of the key features of the QSAR formalism.
2+2+2+4

বঙ্গানুবাদ

বিভাগ - ক

যে কোনো দুটি প্রশ্নের উত্তর লেখ :

2×15=30

1. Molecular Modeling কী ? অণুর জ্যামিতিক গঠন ব্যাখ্যা করার পদ্ধতিগুলি উল্লেখ কর। Potential Energy Surface কী? এটিকে space-এ আবর্তিত করলে কী ঘটবে? Z-Matrix গঠনের ধাপগুলি উল্লেখ করো। সাধারণভাবে ব্যবহৃত দুটি Molecular Model-এর উল্লেখ করো। 2+2+2+1+6+2
2. Molecular Graphics বলতে কী বোঝ? Physical Model এর সাথে ইহার তুলনা করো। Molecular Docking এ Energy Minimisation বলতে কী বোঝ? Energy Minimisation গুরুত্বপূর্ণ কেন? Structure Minimisation ও Optimized Energy বলতে কী বোঝ? Molecular Docking এর মৌলিক ধাপগুলি কী কী? 2+2+2+2+4+3
3. টীকা লেখ : (যে কোন তিনটি)
 - (a) Water model in computational chemistry.
 - (b) Force field.
 - (c) Molecular mechanics.
 - (d) Denovo drug design. 5+5+5
4. Molecular simulation বলতে কী বোঝ? Molecular Dynamics Simulation হতে কত সময় লাগে? Dynamic Simulation Model কী? Molecular Dynamics এর উদ্দেশ্য কী? Metropolis algorithm কীভাবে কাজ করে? Random Walk Metropolis কী? 2+2+2+3+4+2

বিভাগ - খ

যে কোনো একটি প্রশ্নের উত্তর লেখ :

1×10=10

5. Monte Carlo Simulation কী? ইহা কীভাবে কাজ করে? ইহার প্রয়োগগুলি উল্লেখ করো। Monte Carlo Simulation এর অসুবিধাগুলি কী কী? 2+2+4+2
6. QSAR Modeling কী? ড্রাগ ডিজাইনে ইহা কীভাবে ব্যবহৃত হয়? কী কারণে এই মডেল নির্বাচন করা হয়? QSAR Formalisation এর প্রধান বৈশিষ্ট্যগুলি উল্লেখ করো। 2+2+2+4

PRACTICAL (Marks : 20)

Elaborately discuss any **one** of the following topics :

20

1. Determination the enthalpy of isomerization of cis and trans - 2 - butene.
2. Comparison of the basicities of nitrogen atoms in ammonia and methylamine.
3. Comparison of the optimized bond angles of H₂O and H₂S.

বঙ্গানুবাদ

যে কোনো একটি প্রশ্নের উত্তর লেখ :

20

1. সিস্-২-বিউটিন এবং ট্রান্স ২-বিউটিনের enthalpy of isomerization নির্ণয় করো।
 2. অ্যামোনিয়া ও মিথাইল অ্যামিনে নাইট্রোজেন পরমাণুর ক্ষারকীয়তা তুলনা করো।
 3. H₂O ও H₂S এ অনুকূলিত বন্ধন কোণের তুলনা করো।
-