

BIKALI COLLEGE LIBRARY

Total number of printed pages-16

3 (Sem-5/CBCS) CHE RE 1/RE2/RE3

2021

(Held in 2022)

CHEMISTRY

(Regular Elective)

OPTION - A

Paper : CHE-RE-5016

(Applications of Computers in Chemistry)

Full Marks : 60

Time : Three hours

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

1. Answer **all** questions : 1×7=7
- (a) What are data processing operations ?
 - (b) What is interpolation method ?
 - (c) How many bits make a byte ?
 - (d) What is variable ?
 - (e) What is keyword ?
 - (f) What is a string constant ?
 - (g) What is iterative method ?

Contd.

BIKALI COLLEGE LIBRARY

2. Answer **all** questions : 2×4=8
- (a) What are library functions ? Give example.
 - (b) What is the use of REM statement in a BASIC program ?
 - (c) What are structured programming and debugging ?
 - (d) What is time-dependent differential equation ? Which one of the following includes a time-dependent differential equation ?
 - (i) Chemical reaction (evolution of concentrations with time)
 - (ii) Vibrational frequencies.
3. Answer **any three** of the following questions : 5×3=15
- (a) What do you mean by computer programming ? Write a BASIC program to print positive odd numbers less than 500.
 - (b) Describe the different types of operators with examples in BASIC language.
 - (c) Write a BASIC program to find the smallest of three input numbers.

BIKALI COLLEGE LIBRARY

- (d) Write a BASIC program to find average of n input numbers.
- (e) Write a BASIC program to find the numerical value of definite integral.

4. Answer **any three** of the following questions:
10×3=30

- (a) Explain Newton-Raphson method for finding roots of a real-valued function.
- (b) Write a BASIC program to compute the roots of a system of linear equations using Gauss-Seidel method.
- (c) The vapor pressure of liquid acetonitrile (CH_3CN) at three temperatures are :

	$T_i(^{\circ}K)$	$P_i(s)(mm\ Hg)$
1	268.15	20
2	289.05	60
3	300.15	100

Estimate the vapor pressure at 280.15K using (i) linear interpolation
(ii) quadratic interpolation.

- (d) Explain the functions of following BASIC statements with examples : (any two)
 - (i) DEF

BIKALI COLLEGE LIBRARY

(ii) CALL

(iii) SUB

(e) Write a BASIC program to fit a straight line for the following data relating the enthalpy of methane at 1 atm pressure with temperature :

Enthalpy (Btu/lb)	630	650	824	851	875	1050	1110	1200
Temperature (°F)	-200	-100	0	100	200	300	400	500

(f) What are interpolation and extrapolation ? Explain.

BIKALI COLLEGE LIBRARY

OPTION - B

CHE-RE-5026

(Analytical Method in Chemistry)

Full Marks : 60

Time : Three hours

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

Answer either in English or in Assamese.

1. Answer the following questions as directed :

1×7=7

নিৰ্দেশ অনুসৰি তলৰ প্ৰশ্নবোৰৰ উত্তৰ দিয়া :

(a) What is chiral shift reagent ?

কাইৰেল স্থানান্তৰ বিকাৰক কি?

(b) Why are quartz cuvettes used for UV-visible spectroscopy ?

UV-ভিজিবল্ স্পেক্ট্ৰ'স্কোপিত কিয় কোৱাৰ্ট্‌য কিউৱেট ব্যৱহাৰ কৰা হয়?

(c) What is the relationship between wavelength and wavenumber ?

তৰংগদৈৰ্ঘ্য আৰু তৰংগসংখ্যাৰ মাজত সম্পৰ্ক কি?

(d) What is the stationary phase in chromatography ?

ক্ৰমেট'গ্ৰাফীত ষ্টেচনাৰী ফেজ বুলিলে কি বুজা?

BIKALI COLLEGE LIBRARY

(e) Which instrument is used to convert sample in mist or aerosol ?

- (i) Atomizer
- (ii) Hollow cathode lamps
- (iii) Nebulizer
- (iv) Detector

(Choose the correct answer)

নমুনা এটাক কুহেলিকা বা এৰ'চললৈ ৰূপান্তৰ কৰিবলৈ কোনটো যন্ত্ৰ ব্যৱহাৰ কৰা হয় ?

- (i) এট'মাইজাৰ
- (ii) হ'ল কেথড্ লেম্প
- (iii) নেবুলাইজাৰ
- (iv) সংস্ৰূচক

(শুদ্ধ উত্তৰটো বাছি উলিওৱা)

(f) What is the unit of specific conductance ?

নিৰ্দিষ্ট পৰিবাহিতাৰ একক কি ?

(g) What is the applicability of Q-test in data analysis ?

তথ্য বিশ্লেষণত Q-টেষ্টৰ প্ৰয়োজনীয়তা কি ?

2. Answer **any four** of the following questions :

2×4=8

তলৰ যিকোনো চাৰিটা প্ৰশ্নৰ উত্তৰ লিখা :

(a) If the diatomic molecule HCl , with 1H and ^{35}Cl were substituted with ^{37}Cl , what change occurs to the reduced mass ?

যদি দ্বিপাৰমাণৱিক অণু HCl ৰ 1H আৰু ^{35}Cl ক ^{37}Cl ৰে প্ৰতিস্থাপন কৰা হয়, তেন্তে ইয়াৰ ৰিডিউছড মাচৰ কি পৰিৱৰ্তন হ'ব?

- (b) What is meant by enantiomeric excess? Explain the term using a suitable example.

ইনানচিয়'মাৰিক এক্সেছ বুলিলে কি বুজা? উপযুক্ত উদাহৰণেৰে ব্যাখ্যা কৰা।

- (c) Twenty millilitres of an aqueous solution of $0.1M$ butyric acid is shaken with $10mL$ ether. After the layers are separated, it is determined by titration that $0.5mmol$ butyric acid remains in the aqueous layer. What is the distribution ratio and per cent extracted ?

0.1 ম'লাৰৰ $20mL$ বিউটাইৰিক এচিডৰ জলীয় দ্ৰৱ এটা $10mL$ ইথাৰৰ লগত মিহলি কৰা হয়। স্তৰবোৰ পৃথক হোৱাৰ পিছত টাইট্ৰেছনৰ সহায়ত দেখা গ'ল যে জলীয় দ্ৰৱত অৱশিষ্ট বিউটাইৰিক এচিডৰ পৰিমাণ $0.5mmol$ । বিতৰণ অনুপাত আৰু নিষ্কাশণ শতাংশ কিমান হ'ব?

- (d) What are the limitations of Beer-Lambert's law ?

বিয়ৰ-লেম্বাৰ্ট বিধিৰ সীমাবদ্ধতা কি কি?

(e) How is a double-beam UV-visible spectrophotometer different from a single-beam instrument ?

দ্বৈত আৰু একক বিম স্পেকট্ৰ'ফটোমিটাৰৰ মাজত পাৰ্থক্য কি?

3. Answer **any three** of the following questions :

5×3=15

তলৰ যিকোনো তিনিটা প্ৰশ্নৰ উত্তৰ লিখা :

(a) Write briefly about the classification of chromatographic techniques done based on the mechanism of separation.

পৃথকীকৰণ পদ্ধতিৰ ওপৰত নিৰ্ভৰ কৰি কেনেদৰে ক্ৰমেট'গ্ৰাফিক পদ্ধতিবোৰৰ শ্ৰেণীবিভাজন কৰা হয়?

(b) What is meant by resolution of racemic mixture ? Describe one method of resolution of racemic mixture.

ৰেচিমিক মিশ্ৰণৰ ৰিজ'লিউচন মানে কি বুজা? ৰেচিমিক মিশ্ৰণৰ ৰিজ'লিউচনৰ পদ্ধতি এটা বৰ্ণনা কৰা।

(c) Explain with an example, how Job's method of continuous variation can be used to determine the composition of a metal complex.

উদাহৰণসহ ব্যাখ্যা কৰা যে, অবিৰত প্ৰকৰণৰ জ'বৰ পদ্ধতি ব্যৱহাৰ কৰি জটিল ধাতু এটাৰ সংযুতি কেনেদৰে নিৰ্ণয় কৰা হয়।

(d) Discuss the methods for the preparation of solid sample in IR spectroscopy.

কঠিন পদাৰ্থ এটাৰ স্পেকট্ৰ'স্কোপী ল'বলৈ কেনেদৰে নমুনা প্ৰস্তুত কৰা হয় আলোচনা কৰা।

(e) What are common sources of errors in thermogravimetric analysis ?

থাৰ্ম'গ্ৰেভিমেট্ৰিক বিশ্লেষণৰ ত্ৰুটিবোৰৰ সাধাৰণ উৎসবোৰ কি কি?

4. Answer **any three** of the following questions :

10×3=30

তলৰ যিকোনো তিনিটা প্ৰশ্নৰ উত্তৰ লিখা :

(a) (i) Write about the different methods of extraction used in the solvent extraction process. 6

দ্রাবক সংশ্লেষণ প্ৰক্ৰিয়াত ব্যৱহাৰ হোৱা বিভিন্ন পদ্ধতিবোৰৰ বিষয়ে লিখা।

(ii) Mention *two* advantages and *two* disadvantages of solvent extraction. 4

দ্রাবক সংশ্লেষণৰ দুটাকৈ উপকাৰিতা আৰু অপকাৰিতা উল্লেখ কৰা।

BIKALI COLLEGE LIBRARY

- (b) (i) Discuss with an example how equivalence point of an acid-base titration can be determined by conductometric titration method. 5

উদাহৰণসহ ব্যাখ্যা কৰা, অম্ল-ক্ষাৰ টাইট্ৰেছনৰ ইকুইভেলেন্স পইন্ট কন্ডাক্টিমেট্ৰিক পদ্ধতিৰে কেনেদৰে নিৰ্ধাৰণ কৰা হয়।

- (ii) Discuss the basic principle of Atomic Emission Spectrometry. 5

এট'মিক এমিছন স্পেক্টিমেট্ৰিৰ মৌলিক কাৰ্যনীতি আলোচনা কৰা।

- (c) (i) What is the difference between accuracy and precision? Discuss the ways of absolute method and comparative method for determining the accuracy.

1+4=5

সঠিকতা আৰু পৰিশুদ্ধতাৰ মাজত পাৰ্থক্য কি? সঠিকতা নিৰ্ণয় কৰিবলৈ এবচ'লিউত আৰু কম্পেৰেটিভ পদ্ধতিৰ প্ৰকাৰবোৰ আলোচনা কৰা।

- (ii) Discuss the principle of colorimetric estimation of metal ions from aqueous solution. 5

ক'ল'ৰিমেট্ৰিক প্ৰাককলনৰ মূলনীতি বৰ্ণনা কৰা।

- (d) (i) Define confidence interval. The mean of four determinations of the copper content of a sample of an alloy was 8.27% with a standard deviation 0.17%. Calculate the 95% confidence limit for the true value. The value of t for the 95% confidence level with three degrees of freedom is 3.18. 2+3=5

কনফিডেন্স ইন্টাৰভেলৰ সংজ্ঞা দিয়া। এটা সংকৰ ধাতুৰ নমুনাত থকা কপাৰৰ পৰিমাণৰ চাৰিটা নিৰ্ণয়ৰ মধ্যমা হ'ল 8.27% আৰু প্ৰামাণিক বিচ্যুতি হ'ল 0.17%। শুদ্ধ উত্তৰৰ 95% কনফিডেন্স লিমিত নিৰ্ণয় কৰা। তিনিটা ডিগ্রী অফ ফ্ৰিডমৰ সৈতে 95% কনফিডেন্স লেভেলৰ বাবে t ৰ মান হ'ল 3.18।

- (ii) What is the basic principle of atomic absorption spectroscopy? What are the different atomization processes commonly employed in the atomic absorption spectroscopy (AAS)?

5

এট'মিক এবযৰ্বছন স্পেক্ট্ৰ'স্কোপীৰ মৌলিক কাৰ্যনীতি কি? এট'মিক এবযৰ্বছন স্পেক্ট্ৰ'স্কোপীত সাধাৰণতে কি কি এট'মাইজেছন প্ৰক্ৰিয়া ব্যৱহাৰ কৰা হয়?

- (e) (i) . Discuss the factors on which conductance of a solution depends. 5

এটা দ্রৱৰ পৰিবাহীতা নিৰ্ভৰ কৰা কাৰকবোৰ আলোচনা কৰা।

- (ii) Discuss the principle used in HPLC. 5

HPLC ত ব্যৱহাৰ হোৱা কাৰ্যনীতি আলোচনা কৰা।

- (f) (i) Discuss with an example how the strength of an acid can be determined by pH metric titration against a standard base. 5

প্ৰামাণিক ক্ষাৰক এটা ব্যৱহাৰ কৰি pH মেট্ৰিক টাইট্ৰেছন পদ্ধতিৰে অম্ল এটা গাঢ়তা কেনেদৰে নিৰূপণ কৰা হয়? আলোচনা কৰা।

- (ii) Discuss the application of ion exchange chromatography with an example. 5

উদাহৰণসহ আয়ন বিনিময় ক্ৰমেট'গ্ৰাফীৰ প্ৰয়োগ আলোচনা কৰা।

OPTION - C

CHE-RE-5036

(Molecular Modelling and Drug Design)

Full Marks : 60

Time : Three hours

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

1. Answer the following questions : $1 \times 7 = 7$
- (a) What are different types of models used to describe a molecule ?
 - (b) What is a Z-matrix ?
 - (c) What do you mean by PES ?
 - (d) How is van der Waals surface constructed ?
 - (e) What are the conventional units of length and energy in molecular modelling ?
 - (f) How will you define a simple molecular mechanics force field ?
 - (g) Write the mathematical form of Morse potential.

BIKALI COLLEGE LIBRARY

2. Answer the following questions : $2 \times 4 = 8$
- (a) Describe briefly the Born-Oppenheimer approximation.
 - (b) What types of points on a PES are particularly relevant in understanding a chemical reaction ?
 - (c) What are 'hard' degrees of freedom ? Provide schematic illustration of the cross terms believed to be most important in force fields.
 - (d) What do you mean by *H*-bonding in molecular mechanics ?
3. Answer **any three** questions from the following : $5 \times 3 = 15$
- (a) Discuss briefly, different types of non-bonded interactions..
 - (b) What do you mean by computer hardware and software ? Describe briefly with examples.
 - (c) Discuss briefly the solvent dielectric models.
 - (d) What do you mean by dispersive interactions ? What are exchange forces ?
 $2\frac{1}{2} + 2\frac{1}{2} = 5$

BIKALI COLLEGE LIBRARY

(e) Discuss briefly the simple water models used for the simulation of liquid water.

4. Answer **any three** questions from the following : $10 \times 3 = 30$

(a) Give a typical expression for a molecular mechanics potential energy function of the type used for macromolecular simulations. Include intra- and intermolecular terms. Describe, what each energy term represents. Also state briefly the physical origin of each of the energy terms. 10

(b) Describe briefly the following methods for calculating molecular energies and geometries (outline their advantages and disadvantages) : $5 + 5 = 10$

(i) *ab initio* molecular orbital methods

(ii) Semiempirical molecular orbital methods.

(c) How are different thermodynamic properties calculated using a force field ? Discuss briefly force field parametrisation technique. $5 + 5 = 10$

(d) Discuss briefly the simplex method and the sequential univariate method used for energy minimisation.

5+5=10

(e) Discuss briefly the Monte Carlo method. State the differences between the MD and Monte Carlo method.

5+5=10

(f) Discuss briefly the different steps involved in running a computer simulation.

10