

B.Sc./6th Sem (G)/CEM/25(CBCS)

2025

6th Semester Examination

CHEMISTRY (General)

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

[CBCS]

Full Marks : 40

Time : Two Hours

*The figures in the margin indicate full marks.
Candidates are required to give their answers
in their own words as far as practicable.*

(Applications of Computers in Chemistry)

Group - A

Answer any *five* questions : $2 \times 5 = 10$

1. How 'constant' is different from 'variables' in a programme?
2. Write any two elements of the 'Basic Language'.
3. What is the function of a 'compiler'?
4. What is 'software'?
5. Write disadvantages of 'Bisection method'.
6. Why debugging is important for a software.
7. Why iterative methods are essential for few Chemistry problems?
8. What are the advantages of numerical integration?

P.T.O.

(2)

Group - B

Answer any **four** questions.

5×4=20

9. (a) Convert binary digit '10010' to decimal digit.

(b) 'Sqrt () - an inbuilt function in C++' — What is it means? 3+2

10. (a) What is 'hierarchy of operations'?

(b) What is the ASCII format? What are the forms of ASCII? 2+3

11. (a) Write a program of matrix multiplication between two matrices :

$$\begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 3 & 5 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 4 & 6 \\ 1 & -3 \end{bmatrix}$$

(b) What is a graphics? 3+2

12. (a) Write the differences between compiled and interpreted language.

(b) Where Gauss-Siedal method is used? 3+2

13. (a) For the initial value $x_0 = 3$, approximate the root of $f(x) = x^3 + 3x + 1$.

(b) Write three applications of Newton-Raphson method. 3+2

14. (a) Write the purpose of curve fitting in experimental data.

(b) What is potential energy surfaces? 3+2

(3)

Group - C

Answer any **one** question.

10×1=10

15. (a) What are inbuilt functions?
(b) How does an inbuilt function work?
(c) Differentiate between logical and relative operators.
(d) How 'string' is different from 'graphics'?
2+2+4+2
16. (a) What is the opposite method of extrapolation?
How interpolation method works.
(b) Write the principles and applications of 'molecular modelling'.
(c) Where the 'molecular mechanics' is used in chemistry?
(1+3)+(2+2)+2

বঙ্গানুবাদ

বিভাগ - ক

যে-কোনো পাঁচটি প্রশ্নের উত্তর দাও :

2×5=10

1. একটি প্রোগ্রামের ক্ষেত্রে 'ভেরিয়েবল' কীভাবে 'কনস্টেন্ট'-এর থেকে আলাদা?
2. 'বেসিক লেঙ্গুয়েজ'-এর দু'টি উপাদানের নাম লেখো।
3. 'কম্পাইলার'-এর কাজ কী?
4. 'সফটওয়্যার' কী?

P.T.O.

5. 'বাইসেক্সন মেথড'-এর অসুবিধাগুলি কী?
6. একটা সফ্টওয়্যারের ডিবাগিং কেন গুরুত্বপূর্ণ?
7. রসায়নের সমস্যাগুলির ক্ষেত্রে ইটারেটিভ প্রক্রিয়া কেন গুরুত্বপূর্ণ?
8. নিউমেরিকল ইনটিগ্রেশনের সুবিধাগুলি কী কী?

বিভাগ - খ

যে-কোনো চারটি প্রশ্নের উত্তর দাও : $5 \times 4 = 20$

9. (a) বাইনারি ডিজিট '10010' কে ডেসিমালে রূপান্তরিত করো।
(b) 'Sqrt ()' একটি ইনবিল্ট ফাংশন C++ এ' — ইহা কী বোঝাচ্ছে? 3+2
10. (a) 'হায়ারেসি অফ অপারেশন' বলতে কী বোঝো?
(b) ASCII format কী? ASCII-এর ফর্মগুলি কী কী? 2+3
11. (a) মেট্রিক্স গুণফলের একটি প্রোগ্রাম লেখো এই দুই মেট্রিক্স দুটির ক্ষেত্রে $\begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 3 & 5 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 4 & 6 \\ 1 & -3 \end{bmatrix}$
(b) গ্রাফিক্স কী? 3+2
12. (a) কম্পাইল্ড ও ইন্টারপ্রেটেড লেঙ্গুয়েজ-এর মধ্যে পার্থক্য কী?
(b) গস-সিল্ড মেথড কোথায় ব্যবহৃত হয়? 3+2

13. (a) প্রাথমিক মান $x_0 = 3$, জন্য $f(x) = x^3 + 3x + 1$ সমীকরণটির আনুমানিক মূল্য নির্ণয় করো।

(b) নিউটন-রাপসন মেথড কোথায় ব্যবহৃত হয়? 3+2

14. (a) পরীক্ষালব্ধ মানের ক্ষেত্রে কার্ভ ফিটিং করার উদ্দেশ্য কী?

(b) পোটেনশিয়াল এনার্জি সারফেসের উদ্দেশ্য কী? 3+2

বিভাগ - গ

যে-কোনো একটি প্রশ্নের উত্তর দাও : $10 \times 1 = 10$

15. (a) ইনবিল্ট ফাংশন কোন্গুলি?

(b) ইনবিল্ট ফাংশন কীভাবে কাজ করে?

(c) লজিকাল ও রিলেটিভ অপারেটরের মধ্যে পার্থক্যগুলি কী কী?

(d) 'স্ট্রিং' কীভাবে 'গ্রাফিক্স'-এর থেকে আলাদা? 2+2+4+2

16. (a) এক্স পোলেশনের বিপরীত প্রক্রিয়া কী? কীভাবে ইন্টারপোলেশন কাজ করে?

(b) 'মলিকিউলার মডেলিং'-এ নীতি ও প্রয়োগ সম্পর্কে আলোচনা করো।

(c) রসায়নে কীভাবে 'মলিকিউলার মেকানিক্স' কাজ করে?

(1+3)+(2+2)+2

P.T.O.

(6)

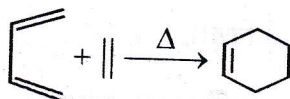
OR

(Green Chemistry)

Group - A

Answer any *five* questions : $2 \times 5 = 10$

1. Calculate atom economy of the reaction —



2. Give two examples of green solvent.
3. Write a reaction using alternative source of energy.
4. What are ionic liquids? Give examples.
5. Mention two important chemical accidents which demand the need for green chemistry?
6. What is the main ingredient of SEA-NINE?
7. What is Right-Fit pigment?
8. What are biodegradable polymers? Give one example.

Group - B

Answer any *four* questions. $5 \times 4 = 20$

9. Write down the name and structure of two most commonly used antifoulants? What is the use of PERC?
10. What do you mean by 'Cradle to Cradle Carpeting'?

11. Why green chemistry prefers the use of catalyst instead of reagents? How CO_2 can be used for precision cleaning?
12. What are the advantages of solvent free reaction? Give an example of solvent free reaction?
13. Write the differences between microwave heating and conventional heating.
14. Give one example each for the green method of oxidation and reduction reaction.

Group - C

Answer any **one** question.

10×1=10

15. Give a detailed outline for synthesis of polylactic acid from corn?
16. Discuss first five principles of Green Chemistry.

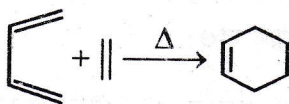
বঙ্গানুবাদ

বিভাগ - ক

যে-কোনো পাঁচটি প্রশ্নের উত্তর দাও :

2×5=10

1. নীচের বিক্রিয়ার অ্যাটম ইকোনমি বের করো :



P.T.O.

2. দু'টি 'গ্রীন ড্রাবকের' উদাহরণ দাও।
3. বিকল্প শক্তির উৎস দিয়ে একটি বিক্রিয়া লেখো।
4. আয়নিক তরল কী? উদাহরণ দাও।
5. দু'টি রাসায়নিক দুর্ঘটনার উল্লেখ করো যা গ্রীন কেমিস্ট্রির প্রয়োজন বোঝায়?
6. SEA-NINE-এর প্রধান উপাদান কী?
7. Right-Fit রঞ্জক কী?
8. বায়োডিগ্রেডবল পলিমার কী? একটি উদাহরণ দাও।

বিভাগ - খ

যে-কোনো চারটি প্রশ্নের উত্তর দাও : $5 \times 4 = 20$

9. সাধারণত ব্যবহার করা হয় এমন দু'টি antifoulants-এর নাম ও গঠন লেখো। PERC-এর ব্যবহার কী?
10. 'Cradle to Cradle Carpeting' বলতে কী বোঝো?
11. বিকারকের পরিবর্তে অনুঘটকের ব্যবহার কেন গ্রীন কেমিস্ট্রি পছন্দ করে? কীভাবে CO_2 কে প্রিসিসান ক্লিনিং-এ ব্যবহার করা হয়?
12. দ্রাবকহীন বিক্রিয়ার সুবিধাগুলি কী কী? একটি দ্রাবকহীন বিক্রিয়ার উদাহরণ দাও।
13. সাধারণ তাপন পদ্ধতি ও মাইক্রোওয়েভ তাপন পদ্ধতির পার্থক্যগুলি লেখো।

14. গ্রীন পদ্ধতিতে একটি করে জারণ পদ্ধতি ও বিজারণ পদ্ধতির উদাহরণ দাও।

বিভাগ - গ

যে-কোনো একটি প্রশ্নের উত্তর দাও : $10 \times 1 = 10$

15. ভূট্টা থেকে পলিল্যাকটিক অ্যাসিড তৈরির পদ্ধতির পুঙ্খানুপুঙ্খ রূপরেখা লেখো।
16. গ্রীন কেমিস্ট্রির প্রথম পাঁচটি নীতির ব্যাখ্যা করো।

P.T.O.

(10)

OR

(Industrial Chemicals and Environment)

Group - A

Answer any *five* questions : $2 \times 5 = 10$

1. Differentiate between coagulation and flocculation.
2. Mention the processes that take place in the production of iron from iron ore in the blast furnace.
3. What is ecosystem?
4. Write sources of air pollutants?
5. Write the list of water quality parameters.
6. What is the beneficial aspects of nuclear fission?
7. What is chrome alum? Write its application.
8. What is photochemical smog?

Group - B

Answer any *four* questions. $5 \times 4 = 20$

9. (a) How is caustic soda manufactured?
(b) Give important applications of argon. $3+2$
10. (a) Explain the Van Arkel method to obtain ultrapure titanium metal.
(b) Mention the hazards involved in storage of fluorine. $3+2$

11. (a) Write the industrial effluents and their treatment from dairy industry.
(b) What is electrodialysis method of water purification? 3+2
12. (a) Mention the sources of particulate matter that pollute air.
(b) Explain the method for removal of particulate by Cottrell electrostatic precipitator. 2+3
13. (a) Is B.O.D. the key test for determining the pollution load in water samples? Justify your answer.
(b) What is greenhouse effect? What are adverse effect of greenhouse effect? 2+(1+2)
14. (a) Explain two industrial applications of the biocatalysts.
(b) What is ozone layer depletion? Explain what happens in the spring season in the stratosphere over Antarctica? 2+(1+2)

Group - C

Answer any *one* question. 10×1=10

15. (a) Describe briefly the manufacture of sulfuric acid by contact process.
(b) What is renewable energy? How can renewable energy benefit the environment?

P.T.O.

- (c) What is electrolytic refining of metals? Mention the anode, cathode and electrolyte used in the purification of silver in this method.

4+(1+2)+(1+2)

16. (a) Describe the water pollution caused by detergents and pesticides.
- (b) Draw and explain biogeochemical cycle of nitrogen.
- (c) What is meant by coal conversion? Discuss the various methods of coal conversion. 2+3+(2+3)

বঙ্গানুবাদ

বিভাগ - ক

যে-কোনো পাঁচটি প্রশ্নের উত্তর দাও : 2×5=10

1. Coagulation এবং Flocculation-এর পার্থক্য লেখো।
2. মারাত্মক চুল্লিতে লোহার আকরিক থেকে লোহা নিষ্কাশনের প্রক্রিয়াগুলি উল্লেখ করো।
3. বাস্তুতন্ত্র কাকে বলে?
4. বায়ু দূষণকারী পদার্থগুলির উৎস সম্বন্ধে লেখো।
5. জলের গুণমানের স্থিতিমাপগুলির তালিকা দাও।
6. নিউক্লিয়ার ফিশন বিক্রিয়ার উপকারী দিকগুলি কী কী?
7. 'Chrome alum' কী? এর ব্যবহার লেখো।
8. আলোক রাসায়নিক ধোঁয়াশা কাকে বলে?

বিভাগ - খ

যে-কোনো চারটি প্রশ্নের উত্তর দাও : $5 \times 4 = 20$

9. (a) কস্টিক সোডা কীভাবে প্রস্তুত করা হয় বর্ণনা করো।
(b) আর্গনের গুরুত্বপূর্ণ ব্যবহারগুলি লেখো। $3+2$
10. (a) অতি বিশুদ্ধ Titanium ধাতু প্রস্তুতি করার Van Arkel পদ্ধতিটি বর্ণনা করো।
(b) ফ্লোরিন সংরক্ষণের ঝুঁকিগুলি উল্লেখ করো। $3+2$
11. (a) দুগ্ধ শিল্প থেকে নির্গত বর্জ্য পদার্থ সম্পর্কে লেখো এবং তাদের পরিশোধনের পদ্ধতি আলোচনা করো।
(b) জল পরিশোধনের তড়িৎ বিশ্লেষণ পদ্ধতি বলতে কী বোঝো? $3+2$
12. (a) বায়ু দূষণকারী কণা পদার্থ (Particulate matter) সমূহের উৎসগুলি উল্লেখ করো।
(b) Cottrell electrostatic precipitator দ্বারা কণা অপসারণের পদ্ধতি ব্যাখ্যা করো। $2+3$
13. (a) জলের নমুনায় দূষণের পরিমাণ নির্ধারণের জন্য B.O.D. কী মূল পরীক্ষা? ব্যাখ্যা দাও।
(b) 'গ্রীনহাউস এফেক্ট' কাকে বলে? গ্রীনহাউস এফেক্টের বিরূপ প্রভাব কী কী? $2+(1+2)$
14. (a) জৈব অনুঘটকের দু'টি শিল্প প্রয়োগ ব্যাখ্যা করো।

P.T.O.

- (b) ওজন স্তরের ক্ষয় কাকে বলে? অ্যান্টার্কটিকার উপর স্ট্রাটোস্ফিয়ারে বসন্ত ঋতুতে কী ঘটে তা ব্যাখ্যা করো।

$$2+(1+2)$$

বিভাগ - গ

যে-কোনো একটি প্রশ্নের উত্তর দাও : $10 \times 1 = 10$

15. (a) স্পর্শ পদ্ধতিতে সালফিউরিক অ্যাসিড কীভাবে প্রস্তুত করবে সংক্ষেপে বর্ণনা করো।

- (b) পুনর্নবীকরণযোগ্য শক্তি কাকে বলে? পুনর্নবীকরণযোগ্য শক্তি কীভাবে পরিবেশের উপকার করে লেখো।

- (c) ধাতুর তড়িৎ বিশোধন কাকে বলে? এই পদ্ধতিতে সিলভার বিশুদ্ধকরণের সময় ক্যাথোড, অ্যানোড এবং তড়িৎ বিশ্লেষ্য হিসেবে কী কী ব্যবহৃত হয় লেখো।

$$4+(1+2)+(1+2)$$

16. (a) ডিটারজেন্ট এবং কীটনাশক দ্বারা সৃষ্ট জল দূষণ বর্ণনা করো।

- (b) নাইট্রোজেনের জৈব রাসায়নিক চক্রটি লেখো এবং ব্যাখ্যা করো।

- (c) কয়লা রূপান্তর বলতে কী বোঝায়? কয়লা রূপান্তরের বিভিন্ন পদ্ধতিগুলি বর্ণনা করো।

$$2+3+(2+3)$$

OR

**(Quantum Chemistry, Spectroscopy
and Photochemistry)**

Group - A

Answer any *five* questions : $2 \times 5 = 10$

1. Write the Schrödinger equation. Explain.
2. Using the quantum particle in a box model describe how the possible energies of the particle are related to the size of the box.
3. Write the quantum numbers (n, l, m_l) of $3d$ orbital.
4. What is the most probable distance of an electron from nucleus in the $1s$ orbital of a hydrogen atom?
5. Identify the infrared active molecules from the following : N_2 , NO , CO , CO_2 .
6. In the rotational Raman spectra of a diatomic molecule, find the energy gap between the first Stokes and first Anti-Stokes lines.
7. What is chemical shift in NMR spectra?
8. "Quantum yield of a photochemical reaction is 0.40" — Explain the statement.

P.T.O.

Group - BAnswer any *four* questions.

5×4=20

9. (a) Find the uncertainty in the position of an electron ($m = 9.1 \times 10^{-28}$ gm) and uncertainty in velocity is 2×10^{-3} cm/sec.
- (b) Can the magnitude of $\psi^*(x,t)\psi(x,t)$ be a negative number? Explain. 3+2
10. (a) Show that $\psi(x,t) = Ae^{i(kx-\omega t)}$ is a valid solution of Schrödinger's time dependent equation.
- (b) Find out the energy levels of a 2D particle in a box with $\psi(1,2)$ and $\psi(2,1)$. Comment on the results. 3+2
11. (a) The atomic masses of $^1\text{H} = 1.673 \times 10^{-27}$ kg and $^{35}\text{Cl} = 58.06 \times 10^{-21}$ kg. Find out the reduced mass of HCl.
- (b) 'Triplet carbenes are paramagnetic' — Explain with structure of carbene. 3+2
12. (a) Which of the following molecules will not absorb in the microwave region, but will absorb in the IR region :
 N_2 , C_2H_2 , HCl , H_2O . Give reasons.
- (b) Write the reason of intensity difference between Stokes and Anti-Stokes lines. 3+2

13. (a) Write and explain Franck-Condon principle.
(b) Discuss in detail the principles of NMR spectroscopy. 2+3
14. (a) State and explain Einstein law of photochemistry.
(b) Why we need approximate method to solve multielectron system? 3+2

Group - C

Answer any *one* question. 10×1=10

15. (a) Draw probability distribution function for 4p orbital. How is it related to 3p orbital?
(b) Write the difference between fluorescence and phosphorescence.
(c) What do you mean by hot bands?
(d) What do you mean by eigen value. 3+3+2+2
16. (a) A substance absorbs 2×10^6 quanta of radiation/sec and 0.002 moles of it reacts in 20 minutes. Calculate quantum yield of this reaction ($N = 6.023 \times 10^{23}$).
(b) What is photosensitized reaction? Give example. How quenching is involved to it.
(c) How photostationary state is related to photochemical equilibrium. 3+(3+2)+2

P.T.O.

বঙ্গানুবাদ

বিভাগ - ক

যে-কোনো পাঁচটি প্রশ্নের উত্তর দাও : $2 \times 5 = 10$

1. শ্রোডিঙ্গার-এর সমীকরণটি লেখো ও ব্যাখ্যা করো।
2. 'বাক্সের মধ্য একটি বস্তু' মডেল ধরে নিয়ে, তার শক্তি মাত্রাগুলি বাক্সের আয়তনের উপর কীভাবে নির্ভর করে ব্যাখ্যা দাও।
3. $3d$ কক্ষকের কোয়ান্টাম সংখ্যাগুলি (n, l, m_l) লেখো।
4. হাইড্রোজেন পরমাণুতে একটি ইলেকট্রন যা $1s$ কক্ষকে আছে। তার নিউক্লিয়াস থেকে সম্ভাব্য দূরত্ব নির্ণয় করো।
5. নিম্নোক্ত অণুগুলির মধ্যে কোন্গুলি IR বর্ণালী দেখাবে?
 N_2, NO, CO, CO_2
6. একটি দ্বিপরমাণুক অণুর ঘূর্ণায়মান রমন বর্ণালীর প্রথম স্টোক্স এবং প্রথম অ্যান্টি-স্টোক্স লাইনগুলির মধ্যে দূরত্ব নির্ণয় করো।
7. NMR বর্ণালীর 'কেমিক্যাল শিফট' কী?
8. 'একটি আলোক রাসায়নিক বিক্রিয়ার কোয়ান্টাম ইল্ড 0.4 ' বস্তুব্যাটির ব্যাখ্যা করো।

বিভাগ - খ

যে-কোনো চারটি প্রশ্নের উত্তর দাও : $5 \times 4 = 20$

9. (a) একটি ইলেকট্রনের (ভর : $9.1 \times 10^{-28} \text{ gm}$) অবস্থানগত অনিশ্চয়তা নির্ণয় করো যার গতির অনিশ্চয়তা হলো $2 \times 10^{-3} \text{ cm/sec}$ ।

- (b) $\psi^*(x,t)\psi(x,t)$ -এর মান কী ঋণাত্মক হতে পারে? ব্যাখ্যা করো। 3+2
10. (a) দেখাও যে $\psi(x,t) = Ae^{i(kx-\omega t)}$ হলো সময় নির্ভর শ্রোডিঙ্গার সমীকরণের একটি সমাধান।
 (b) একটি দ্বিমাত্রিক 'বস্তু একটি বাক্সে' মডেলের $\psi(1,2)$ এবং $\psi(2,1)$ -এর শক্তির মাত্রাগুলি কী কী? ব্যাখ্যা করো। 3+2
11. (a) পরমাণুর ভর $^1\text{H} = 1.673 \times 10^{-27} \text{ kg}$ এবং $^{35}\text{Cl} = 58.06 \times 10^{-21} \text{ kg}$ । HCl-এর 'রিডিউস মাস' নির্ণয় করো।
 (b) 'ট্রিপলেট কারবিন প্যারাম্যাগনেটিক' — কারবিনের গঠন দেখিয়ে ব্যাখ্যা করো। 3+2
12. (a) নিম্নোক্ত অণুগুলির মধ্য কোন্গুলি মাইক্রোওয়েভ বর্ণালী দেখায় না, কিন্তু IR বর্ণালী দেখায় : N_2 , C_2H_2 , HCl , H_2O । কারণ দেখাও।
 (b) রমন বর্ণালীতে স্টোকস ও অ্যান্টি-স্টোকস লাইনগুলির মধ্যে প্রাবল্যের পার্থক্য থাকে কেন? 3+2
13. (a) 'ফ্রাঙ্ক-কনডন সূত্র'র বর্ণনা দাও। ব্যাখ্যা করো।
 (b) NMR বর্ণালীর মূলনীতি ব্যাখ্যা করো। 2+3
14. (a) আলোক রাসায়নিক সংক্রান্ত আইনস্টাইনের সূত্রটি লেখো। ব্যাখ্যা করো।
 (b) একটি তন্ত্রে অনেকগুলি ইলেকট্রন থাকলে কেন আনুমানিক পদ্ধতিতে সমাধান করা হয়? 3+2

বিভাগ - গ

যে-কোনো একটি প্রশ্নের উত্তর দাও : $10 \times 1 = 10$

15. (a) $4p$ কক্ষকের 'প্রোবাবিলিটি ডিসট্রিবিউশন ফাংশন' অঙ্কন করো। এটি কীভাবে $3p$ কক্ষকের থেকে আলাদা।
- (b) ফ্লুরোসেন্স ও ফসফোরোসেন্সের মধ্যে পার্থক্য করো।
- (c) 'হট ব্যান্ডস' বলতে কী বোঝো?
- (d) আইগেন ভ্যালু বলতে কী বোঝো? $3+3+2+2$
16. (a) একটি বস্তু 2×10^6 কোয়ান্টা রশ্মি প্রতি সেকেন্ডে শোষিত হয় এবং ইহার 0.002 মোল প্রতি 20 মিনিটে বিক্রিয়া করে। এই বিক্রিয়ার কোয়ান্টাম ইন্ড বার করো ($N = 6.023 \times 10^{23}$)।
- (b) আলোক সংবেদনশীল বিক্রিয়া কী? উদাহরণ দাও। কোয়েঞ্চিং কীভাবে ইহার সহিত সম্পর্কযুক্ত?
- (c) ফটোস্টেশনারি দশা কীভাবে আলোক রাসায়নিক সমতার সহিত যুক্ত। $3+(3+2)+2$

OR

(Molecular Modelling and Drug Design)

Group - A

Answer any *five* questions : $2 \times 5 = 10$

1. Calculate total no. of bytes present in 10MB hard drive.
2. How many cubic bases are required to completely enclose one cubic box of identical size?
3. Does the number '100' imply same value in decimal and binary system?
4. What is potential energy surface?
5. Name one software each for structure visualization and structure optimization.
6. Draw H-bonding pattern in parallel β -sheet.
7. What is ensemble?
8. Is the MD simulation deterministic?

Group - B

Answer any *four* questions. $5 \times 4 = 20$

9. Draw pictures of a three-site water model and five-site water model. Mention each components of the structure.

3+2

P.T.O.

10. Write the expression for Lennard-Jones potential by mentioning all the terms present there. At which distance the potential has minimum? 2+3
11. How would you identify H-bonding in a MD trajectory.
12. Write short note on docking.
13. How a protein structure is predicted by sequence alignment?
14. Write a computer program for the calculation of bond angles from the coordinate of atoms.

Group - C

Answer any *one* question. 10×1=10

15. (a) Discuss the basic algorithm used to get the trajectory of each particle in MD simulation.
(b) How the surface tension of a small sized model system is eliminated in simulation? 6+4
16. (a) What do you mean by long range interaction?
(b) How the electrostatic interaction is accounted in simulation?
(c) What is continuum solvent model in simulation. Mention its advantage and disadvantage. 2+4+4

বঙ্গানুবাদ

বিভাগ - ক

যে-কোনো পাঁচটি প্রশ্নের উত্তর দাও : $2 \times 5 = 10$

1. একটি 10 MB hard drive-এ কত সংখ্যক byte উপস্থিত তা গণনা করো।
2. একটি ঘনককে সম্পূর্ণ পরিবৃত্ত করার জন্য সম আকৃতির কতগুলি ঘনকের প্রয়োজন?
3. Binary এবং decimal পদ্ধতিতে '100' সংখ্যাটি কী একই মান নির্দেশ করে?
4. Potential energy-তল বলতে কী বোঝো?
5. গঠন নিরীক্ষণ এবং গঠন নির্বাচন করার জন্য একটি করে software-এর নাম লেখো।
6. সমান্তরাল β -sheet গঠনে H-বন্ধনের চিত্র অঙ্কন করো।
7. Ensemble বলতে কী বোঝো?
8. MD simulation কী নির্ণীত ধর্মী?

বিভাগ - খ

যে-কোনো চারটি প্রশ্নের উত্তর দাও : $5 \times 4 = 20$

9. প্রতিটি উপাদান উল্লেখ করে একটি three-site এবং একটি five-site জলের মডেলের চিত্র অঙ্কন করো। $3+2$

P.T.O.

10. Lennard-Jones স্থিতিশক্তির সমীকরণটি লেখো। কোন্ অবস্থায় শক্তির মান সর্বনিম্ন হয়? 2+3
11. MD trajectory তে H-বন্ধন শনাক্ত করবে কীভাবে?
12. Docking সম্পর্কে টীকা লেখো।
13. Sequence alignment-এর সাহায্যে কীভাবে protein-এর গঠন অনুমান করা যায়?
14. পরমাণুগুলির স্থানাঙ্ক থেকে বন্ধন কোণ নির্ণয় করার জন্য একটি program লেখো।

বিভাগ - গ

যে-কোনো একটি প্রশ্নের উত্তর দাও : $10 \times 1 = 10$

15. (a) MD simulation-এ প্রতিটি কণার majority কীভাবে পাওয়া যায় সে সম্পর্কে একটি algorithm আলোচনা করো।
- (b) Simulation-এ একটি ক্ষুদ্র আকৃতি সম্পন্ন system -এর পৃষ্ঠ টান কীভাবে অপসারণ করা হয়? 6+4
16. (a) Long range মিথস্ক্রিয়া বলতে কী বোঝো?
- (b) simulation-এ স্থির তড়িৎ বল কীভাবে হিসেব করা হয়।
- (c) নিরবিচ্ছিন্ন-দ্রাবক মডেল বলতে কী বোঝো? এর সুবিধা ও অসুবিধাগুলি লেখো। 2+4+4