

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۲۰ تشریحی: ۰

سری سوال: یک ۱

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/گد درس: شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی (کاربردی)، شیمی گرایش محض ۱۱۱۴۰۲۷

استفاده از ماشین حساب مهندسی مجاز است

۱- کدام یک از گزینه های زیر از شرایط لازم برای یک تابع حالت قابل قبول کوانتومی نیست؟

۱. یک تابع پیوسته باشد.  
۲. همواره محدود و معین باشد.  
۳. یک تابع تک مقداری باشد.  
۴. یک تابع زوج باشد.

۲- حاصل تأثیر اپراتورهای  $\hat{x} + \hat{D}_x$  بر روی تابع  $x^2 + 1$  کدام است؟

۱.  $2x$   
۲.  $x^3 + x$   
۳.  $x^3 + 3x$   
۴.  $x^3 - x$

۳- کدام اپراتور زیر غیرخطی است؟

۱.  $\sqrt{\quad}$   
۲.  $\hat{D}_x^2$   
۳.  $\hat{D}_x$   
۴.  $\hat{x}$

۴- اپراتور وابسته به هر کمیت فیزیکی مشاهده پذیر باید چه شرط یا شرایطی داشته باشد؟

۱. خطی بودن  
۲. هرمیتیک بودن  
۳. خطی و هرمیتیک بودن  
۴. خطی و جمع پذیر بودن

۵- کدام گزینه زیر اپراتور انرژی جنبشی یک منظومه تک ذره ای را نشان می دهد؟

۱.  $\frac{\hbar}{m^2} \nabla^2$   
۲.  $-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2$   
۳.  $\frac{1}{2} k\hat{x}^2$   
۴.  $-\frac{1}{2} k\hat{x}$

۶- مقدار ویژه اپراتور  $\hat{D}_x^2$  وقتی که بر تابع  $\sin ax$  اثر می کند، چقدر است؟

۱.  $-a^2$   
۲.  $-a^2 \sin ax$   
۳.  $\sin ax$   
۴.  $a^2 \sin ax$

۷- برای حرکت ذره در جعبه یک بعدی به طول  $L$ ، مقدار قابل انتظار اندازه حرکت در راستای  $x$  ( $P_x$ ) چقدر است؟

۱.  $\sin^2\left(\frac{\pi x}{L}\right)$   
۲.  $\sqrt{2mE}$   
۳.  $0$   
۴.  $\frac{1}{2} \sin^2\left(\frac{\pi x}{L}\right)$

۸- کدام عبارت زیر می تواند بیانگر قسمت زمانی تابع موج باشد؟

۱.  $\phi(t) = \cos\left(\frac{iEt}{\hbar}\right)$   
۲.  $\phi(t) = \sin\left(\frac{iEt}{\hbar}\right)$   
۳.  $\phi(t) = e^{iEt/\hbar}$   
۴.  $\phi(t) = e^{-iEt/\hbar}$

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۲۰ تشریحی: ۰

سری سوال: ۱ یک

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/گد درس: شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی (کاربردی)، شیمی گرایش محض ۱۱۴۰۲۷

۹- میانگین  $x^2$  ها از چه رابطه ای به دست می آید؟

$$\langle x^2 \rangle = \int_0^{+\infty} \Psi^*(x,t)x^2\Psi(x,t)dx \quad .2 \qquad \langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x,t)x^2\Psi(x,t)dx \quad .1$$

$$\langle x^2 \rangle = \left( \int_0^{+\infty} \Psi^*(x,t)x\Psi(x,t)dx \right)^2 \quad .4 \qquad \langle x^2 \rangle = \left( \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x,t)x\Psi(x,t)dx \right)^2 \quad .3$$

۱۰- انرژی مربوط به اولین تراز انرژی در مثال ذره ای به جرم  $m$  در جعبه یک بعدی به طول  $L$  چقدر است؟

$$0 \quad .1 \qquad 1 \quad .2 \qquad \frac{h^2}{8mL^2} \quad .3 \qquad \frac{\pi^2 h^2}{8mL^2} \quad .4$$

۱۱- تابعی از  $x$  که علامت آن با تغییر  $x$  به  $-x$  عوض نمی شود، از چه نوعی است؟

زوج .۱      فرد .۲      متقارن .۳      هرمیتیک .۴

۱۲- در مثال ذره در جعبه سه بعدی دومین تراز انرژی چندحالتی است؟ (از چند حالت همتراز تشکیل شده است؟)

۱ .۱      ۲ .۲      ۳ .۳      ۴ .۴

۱۳- نتایج ویژه قابل قبول اپراتور هامیلتونی بایستی متعلق به چه نوع مجموعه ای باشند؟

 ۱. مجموعه ای نرمال شده      ۲. مجموعه ای متعامد  
۳. مجموعه ای ارتونرمال      ۴. مجموعه ای ارتوگونال
۱۴- فرکانس مشخصه یک نوسانگر به جرم  $m$  و ثابت فنر  $k$  کدام است؟

$$\frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{m}} \quad .1 \qquad \sqrt{\frac{k}{2\pi m}} \quad .2 \qquad \sqrt{\frac{2\pi m}{k}} \quad .3 \qquad \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{m}{k}} \quad .4$$

۱۵- فاصله بین ترازهای انرژی در چه نوع سیستمهایی برابر است؟

 ۱. نوسانگر هارمونیک      ۲. نوسانگر غیرهارمونیک  
۳. ذره در جعبه یک بعدی      ۴. ذره در جعبه سه بعدی

۱۶- سومین تراز انرژی در مدل نوسانگر هارمونیک چندحالتی است؟

۱. یک حالتی      ۲. سه حالتی      ۳. شش حالتی      ۴. هفت حالتی

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۲۰ تشریحی: ۰

سری سوال: ۱ یک

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/گد درس: شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی (کاربردی)، شیمی گرایش محض ۱۱۴۰۲۷

۱۷- انرژی تراز  $m$ ام یک چرخنده صلب با ممان اینرسی  $I$  در فضای سه بعدی از کدام رابطه زیر به دست می آید؟

$$E_m = \frac{\hbar^2}{2I} m(m+1) \quad .4 \quad E_m = \frac{m^2 \hbar^2}{2I} \quad .3 \quad E_m = \frac{m(m+1)}{2I} \quad .2 \quad E_m = \frac{m^2(m+1)}{2I} \quad .1$$

۱۸- دو اپراتور بایستی چه خاصیتی داشته باشند تا دارای دنباله مشترکی از توابع ویژه باشند؟

۱. باید هرمیتی باشند  
۲. باید با یکدیگر جابجاپذیر باشند  
۳. باید اورتونرمال باشند  
۴. باید ارتوگونال باشند

۱۹- کدام دو اپراتور زیر با یکدیگر جابجاپذیرند؟

$$\hat{p}_x, \hat{x}^2 \quad .1 \quad \hat{L}^2, \hat{L}_y \quad .3 \quad \hat{L}_x, \hat{L}_y \quad .4 \quad \hat{p}_x, \hat{x} \quad .2$$

۲۰- در مختصات قطبی، مختصه  $z$  اپراتور تکانه زاویه ای، تابع چه متغیر یا متغیرهایی است؟

$$r \quad .1 \quad r, \theta \quad .2 \quad \phi \quad .3 \quad r, \theta, \phi \quad .4$$

۲۱- به هر تراز انرژی با شماره  $m$ ، تعداد ..... حالت وابسته است.

$$2m^2 + 1 \quad .1 \quad 2(m+1) \quad .2 \quad 2m \quad .3 \quad 2m+1 \quad .4$$

۲۲- جرم کاسنه مولکول CO،  $1.1 \times 10^{-26}$  کیلوگرم و فاصله دو اتم در حالت پایه  $1.1 \times 10^{-10}$  متر است. ممان اینرسی این مولکول چقدر است؟

$$1.4 \times 10^{-47} \quad .1 \quad 1.3 \times 10^{-46} \quad .2 \quad 7.55 \times 10^{-23} \quad .3 \quad 2.63 \times 10^{-1} \quad .4$$

۲۳- انرژی الکترونی تراز  $n$ ام اتم هیدروژن چه نسبتی با شماره آن تراز دارد؟

$$E_n \propto n \quad .1 \quad E_n \propto n^2 \quad .2 \quad E_n \propto \frac{1}{n} \quad .3 \quad E_n \propto \frac{1}{n^2} \quad .4$$

۲۴- در اتم تک الکترونی در هر تراز انرژی به شماره  $n$  چند حالت همتراز پیش بینی شود؟

$$n \quad .1 \quad n^2 \quad .2 \quad 2n+1 \quad .3 \quad n^2+1 \quad .4$$

۲۵- کدام عبارت زیر نشان دهنده تابع توزیع شعاعی است؟

$$4\pi r^2 R(r) \quad .1 \quad 4\pi r^2 R^2(r) \quad .2 \quad 4\pi r^2 R^2(r) \quad .3 \quad R^2(r) \quad .4$$

۲۶- اولین خط طیفی سری بالمر از چه جهش الکترونی حاصل می شود؟

۱. از حالت  $n=3$  به تراز  $n=2$   
۲. از حالت  $n=4$  به تراز  $n=2$   
۳. از حالت  $n=3$  به تراز  $n=4$   
۴. از حالت  $n=2$  به تراز  $n=4$

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۲۰ تشریحی: ۰

سری سوال: ۱ یک

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/گد درس: شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی (کاربردی)، شیمی گرایش محض ۱۱۴۰۲۷

۲۷- رابطه عمومی بین تکانه زاویه ای و ممان مغناطیسی به چه شکل است؟

$$\bar{\mu} = \frac{1}{2m_e} \bar{L} \quad .۴$$

$$\bar{\mu} = -\frac{1}{2} \bar{L} \quad .۳$$

$$\bar{\mu} = -\frac{e}{2m_e} \bar{L} \quad .۲$$

$$\bar{\mu} = -\frac{2}{m_e} \bar{L} \quad .۱$$

۲۸- مقادیر ویژه اپراتور اسپین  $\hat{S}_z$  کدامند؟

$$\alpha, \beta \quad .۴$$

$$\pm \frac{1}{2} \quad .۳$$

$$\pm \frac{\hbar}{2} \quad .۲$$

$$-\frac{1}{2}\alpha, \frac{1}{2}\beta \quad .۱$$

۲۹- بر اساس قضیه تغییر پارامترها هرگاه کوچکترین مقدار ویژه هامیلتونی یک منظومه  $E_0$  و تابع ویژه مربوط  $\Psi_0$  باشد، با هرتابع  $\Phi$  غیر از  $\Psi_0$ ، خواهیم داشت:

$$\int \Phi^* \hat{H} \Psi_0 \Phi d\tau \geq E_0 \quad .۴$$

$$\int \Phi^* \hat{H} \Psi_0 d\tau \geq E_0 \quad .۳$$

$$\int \Psi_0^* \hat{H} \Phi d\tau \geq E_0 \quad .۲$$

$$\int \Phi^* \hat{H} \Phi d\tau \geq E_0 \quad .۱$$

۳۰- در هامیلتونی اتم هلیوم جمله اختلال آور کدام است؟

۰۱. انرژی جنبشی هسته

۰۲. انرژی جنبشی الکترونها

۰۳. جاذبه بین الکترونها و هسته

۰۴. دافعه بین دو الکترون

۳۱- تابع موج مربوط به فوتون و هسته هلیوم به ترتیب از چه گروه تقارنی هستند؟

۰۱. ضد متقارن- متقارن

۰۲. متقارن- ضد متقارن

۰۳. متقارن- متقارن

۰۴. ضد متقارن- ضد متقارن

۳۲- ترکیب اسپین- اوربیتالها که درمینان اسلیتر نمایشگر آن است، ..... است.

۰۱. متقارن یا نامتقارن

۰۲. متقارن یا ضد متقارن

۰۳. الزاماً متقارن

۰۴. الزاماً ضد متقارن

۳۳- در نظریه اوربیتال مولکولی هوکل، اوربیتالهای مولکولی تک الکترونی با استفاده از کدام روش زیر حاصل می شوند؟

۰۱. حل دقیق معادله شرودینگر

۰۲. اختلال

۰۳. تغییر پارامترها

۰۴. اختلال و تغییر پارامترها

۳۴- کدام گزینه زیر در مورد انتگرالهای تبادلی،  $H_{ij}$ ، در روش هوکل صحیح است؟

۰۱. مقدار آنها جز برای دو اتم همسایه صفر است.

۰۲. برابر با انتگرالهای کولونی است.

۰۳. برابر با انتگرالهای همپوشانی است.

۰۴. برابر با انتگرالهای نرمال شدگی است.

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۲۰ تشریحی: ۰

سری سوال: ۱ یک

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/گد درس: شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی (کاربردی)، شیمی گرایش محض ۱۱۴۰۲۷

۳۵- انرژی الکترونیهای  $\pi$  در مولکول بنزن  $8\beta$ ، و انرژی الکترونیهای  $\pi$  مولکول اتیلن  $2\beta$  است. انرژی عدم استقرار مولکول بنزن چقدر است؟

۱.  $10\beta$       ۲.  $6\beta$       ۳.  $2\beta$       ۴.  $4\beta$

۳۶- اگر  $\Psi_i$  تابع موجی حالت آغازی،  $\Psi_j$  تابع موجی حالت پایانی و  $\hat{R}$  اپراتور ممان دوقطبی باشد، ممان الکتريکی جهش در جهشهای الکترونی از چه رابطه ای محاسبه می شود؟

۱.  $\int \Psi_j^* \hat{R} \Psi_i d\tau$       ۲.  $\int \Psi_j^* \Psi_i d\tau$       ۳.  $\int \Psi_i^* \hat{R}^2 \Psi_j d\tau$       ۴.  $\frac{1}{4\pi} \int \Psi_j^* \hat{R}^2 \Psi_i d\tau$

۳۷- طبق قضیه کوپمان انرژیهای یونش قائم با ..... برابرند.

۱. انرژیهای اوربیتالی که به روش هارتری- فوک تعیین می شوند
۲. منفی انرژیهای اوربیتالی که به روش هارتری- فوک تعیین می شوند
۳. دو برابر انرژیهای اوربیتالی که به روش هارتری- فوک تعیین می شوند
۴. منفی دو برابر انرژیهای اوربیتالی که به روش هارتری- فوک تعیین می شوند

۳۸- کدام گزینه زیر در مورد طیف فوتوالکترونی مولکولی که در آن الکترون از یک اوربیتال درونی کنده شده باشد، صحیح نیست؟

۱. یون و مولکول هر دو در تراز ارتعاشی پایه هستند.
۲. منحنی انرژی پتانسیل یون نسبت به منحنی انرژی پتانسیل مولکول جابجایی عرضی زیادی ندارد.
۳. پیک یونش یک پیک باریک است.
۴. نوار فوتوالکترونی مربوط به این انتقال دارای ساختار ارتعاشی است.

۳۹- کدام مولکول زیر با استفاده از روش اوربیتال مولکولی هوکل قابل بررسی نیست؟

۱. بنزن      ۲. سیکلوبوتان      ۳. بوتادی ان      ۴. نفتالن

۴۰- جابجا کردن دو سطر از دترمینان اسلیتر معادل است با .....

۱. انطباق دو الکترون
۲. تعویض مختصات دو الکترون
۳. حذف دو الکترون
۴. حذف همه الکترونها