

سری سوال: یک ۱

زمان آزمون (دقیقه): قسمتی: ۶۰ تشریعی: ۶۰

تعداد سوالات: قسمتی: ۲۵ تشریعی: ۵

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

وشته تحصیلی/ گد درس: شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی گوایش محض، شیمی (کاربردی) ۱۱۱۴۰۲۷

استفاده از ماشین حساب مهندسی مجاز است

۱- کدام گزینه نادرست است؟

۱. به هر کمیت فیزیکی می‌توان یک اپراتور خطی و هرمیتی نسبت داد.
۲. اپراتور می‌تواند حقیقی یا موهومی باشد.
- ۳.تابع حالت می‌تواند حقیقی یا موهومی باشد.
۴. دانسیته احتمال می‌تواند حقیقی یا موهومی باشد.

۲- کدامیک از گزینه‌های زیر ویژگی تابع حالت می‌باشد؟

۱. پیوسته بودن تابع و مشتق اول تابع
۲. معین بودن تابع در هر نقطه از فضا
۳. تک مقدار بودن
۴. تمام موارد

۳- کدامیک از توابع زیر ویژه تابع اپراتور \hat{D}_x^2 نمی‌باشد؟

$$\sin \alpha x \quad .\text{۱} \quad e^{x} \quad .\text{۲} \quad ye^x \quad .\text{۳} \quad x^4 \quad .\text{۴}$$

۴- کدام گزینه درست می‌باشد؟

۱. در حالت‌های ایستا چگالی احتمال مستقل از زمان می‌باشد.
۲. حالت‌های ایستا نتیجه مستقل از زمان بودن هامیلتونی سیستم می‌باشد.
۳. پتانسیل‌های کنسرواتیو نتیجه مستقل از زمان بودن تابع حالت می‌باشد.
۴. دریک حالت ایستا، تمام مشاهده پذیرهای سیستم این خاصیت را دارند که مقادیر خصوصیات قابل اندازه‌گیری آنها ثابت باقی می‌مانند.

۵- کدام گزینه نادرست است؟

۱. انرژی ذره آزاد پیوسته است.
۲. چگالی احتمال ذره آزاد (که در جهت X -حرکت می‌کند) مستقل از X می‌باشد.
۳. انرژی ذره آزاد نمی‌تواند شامل انرژی‌های منفی شود.
۴. تمام گزینه‌ها نادرست هستند.

۶- مقدار تابع پتانسیل سیستم ذره در جعبه یک بعدی وقتی $x < 0$ است، کدام است.

$$.\text{۱} \quad -\infty \quad .\text{۲} \quad 0 \quad .\text{۳} \quad ۰ \quad .\text{۴} \quad \text{هیچکدام}$$

سری سوال: ۱ بک

زمان آزمون (دقیقه): قستی: ۶۰ تشریحی: ۶۰

تعداد سوالات: قستی: ۲۵ تشریحی: ۵

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

روش تحقیلی / گد درس: شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی گرایش محض، شیمی (کاربردی) ۱۱۱۴۰۲۷

-۷ در سیستم ذره در جعبه یک بعدی اگر مبدا مختصات را وسط جعبه در نظر بگیریم کدام گزینه صحیح است.

۱. تابع حالت برای n های زوج $\varphi(x) = A \cos\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$ می باشد که یک تابع زوج است.

۲. تابع حالت برای n های فرد $\varphi(x) = A \cos\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$ می باشد که یک تابع زوج است.

۳. تابع حالت برای n های زوج $\varphi(x) = A \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$ می باشد که یک تابع زوج است.

۴. تابع حالت برای n های فرد $\varphi(x) = A \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$ می باشد که یک تابع زوج است.

-۸ $\varphi_n(x)$ حالت های ایستا ذره در جعبه یک بعدی می باشد که به هر یک انرژی E_n مربوط است، کدام گزینه نادرست می باشد؟

$$\hat{H}^2 \varphi_n(x) = E_n^2 \varphi_n(x) \quad .1$$

$$(\Delta E)_n = 0 \quad .2$$

۳. در هر بار اندازه گیری مقادیر مختلفی برای انرژی بدست می آید که میانگین آنها E_n است.

$$(\Delta E)_n = \sqrt{(\langle E_n^2 \rangle_n - \langle E_n \rangle_n^2)} \quad .4$$

-۹ برای تراز چهارم سیستم ذره در جعبه سه بعدی ($L_1 \neq L_2 \neq L_3$) تعداد حالت های هم تراز چیست؟

۴. ۴

۶. ۳

۳. ۲

۱. ۱

-۱۰ هنگامی که حجم سه بعدی ذره در جعبه بسیار بزرگ شود، انرژی آن می شود.

۴. صفر

۳. بی نهایت

۲. پیوسته

۱. کوانتیزه

۴. اورتوگونال

۳. نرمال شده و متعامد

۲. نرمال

۱. متعامد

-۱۲ کدام گزینه تابع لاگرانژی سیستم را نشان می دهد؟

$$L = \frac{P_x^2}{2m} + V(x) \quad .4$$

$$L = \frac{1}{2} m \ddot{x}^2 - V(x) \quad .3$$

$$L = \frac{1}{2} m \dot{x}^2 - V(x) \quad .2$$

$$L = T + V \quad .1$$

-۱۳ اگر انرژی تراز دوم چرخنده صلب در صفحه برابر \mathcal{E} باشد، انرژی تراز چهارم چقدر است.

۲. \mathcal{E}

۴. \mathcal{E}

۱۶. \mathcal{E}

۶. \mathcal{E}

سری سوال: ۱ بک

زمان آزمون (دقیقه): قسمتی: ۶۰ تشریحی: ۵۰

تعداد سوالات: قسمتی: ۲۵ تشریحی: ۵

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

روش تحقیلی/گد درس: شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی گرایش محض، شیمی (کاربردی) ۱۱۱۴۰۲۷

۱۴- کدام مولفه ها در اپراتور \hat{L}^2 چرخنده صلب در یک صفحه وجود دارد؟

۱. r, ϕ, θ .۴

۲. r, θ .۳

۳. ϕ, θ .۲

۴. r, ϕ .۱

۱۵- تعداد حالات همتراز برای تراز دوم چرخنده صلب در یک صفحه برابر با چند است؟

۱. ۳ .۴

۲. ۵ .۳

۳. ۲ .۲

۴. ۱ .۱

۱۶- کدام گزینه نادرست است؟

۱. اگر دو اپراتور جابجایی پذیر باشند، مجموعه کاملی از ویژه توابع مشترک دارند.

۲. اگر دو اپراتور جابجایی پذیر باشند، ویژه مقادیر آنها بطور همزمان شناخته می شوند.

۳. اگر دو اپراتور جابجایی پذیر باشند، آنگاه هر دو اپراتور هرمیتی می باشند.

۴. اگر دو اپراتور مجموعه کاملی از ویژه توابع مشترک داشته باشند جابجایی پذیرند.

۱۷- جمله $\hat{L}_x \hat{L}_y - \hat{L}_y \hat{L}_x$ با کدام گزینه برابر است.

۱. $-i\hbar \hat{L}_x$.۴

۲. $i\hbar \hat{L}_x$.۳

۳. $i\hbar \hat{L}_z$.۲

۴. $-i\hbar \hat{L}_z$.۱

۱۸- با توجه به اطلاعات زیر فرکانس اولین خط جذبی طیف چرخشی مولکول ^{100}C برابر با کدام مقدار است؟ $js = 6.62 \times 10^{-34}$

$$I = 14.5 \times 10^{-47} \text{ kg m}^2$$

۱. 263000 s^{-1} .۴

۲. 263 s^{-1} .۳

۳. $1.14 \times 10^{11} \text{ s}^{-1}$.۲

۴. $1.14 \times 10^{11} \text{ s}^{-1}$.۱

۱۹- در گونه های تک الکترونی در هر تراز با شماره n تعداد حالت های همتراز چند می باشد؟

۱. n^2 .۴

۲. $2n^2$.۳

۳. n .۲

۴. $2n$.۱

۲۰- کدام عبارت نشان دهندهتابع توزیع شعاعی است؟

۱. $4\pi r^2 R^2(r)$.۴

۲. $4\pi r^2 R^2(r)dr$.۳

۳. $4\pi r^2 R(r)$.۲

۴. $4\pi r^2$.۱

۲۱- طبق قضیه تغییر، هرگاه کوچکترین ویژه مقدار هامیلتونی یک سیستم E_0 و تابع ویژه مربوطه ϕ_0 باشد، با هر تابع ϕ

که شرایط مرزی سیستم در آن صدق کند خواهیم داشت:

۱. $\int \phi \hat{H} \phi d\tau \geq E_0$.۴

۲. $\int \phi_0 \hat{H} \phi d\tau \geq E_0$.۳

۳. $\int \phi_0 \hat{H} \phi_0 d\tau \geq E_0$.۲

۴. $\int \phi \hat{H} \phi_0 d\tau \geq E_0$.۱

زمان آزمون (دقیقه): قستی: ۶۰ تشریحی: ۵۰

تعداد سوالات: قستی: ۲۵ تشریحی: ۵

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

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

- ۲۲- کدام جمله در هامیلتونی اتم های چند الکترونی مانع حل آسان معادله شرودینگر می گردد؟

۴. هیچکدام

$$\sum_{ij} \frac{1}{r_{ij}} \cdot ۳$$

$$\sum_i \frac{z}{r_i} \cdot ۲$$

$$\frac{1}{2} \sum_i \nabla_i^2 \cdot ۱$$

- ۲۳- همه ذرات با اسپین صفر یا صحیح چه نوع تابع موجی دارند؟

۴. زوج

۳. فرد

۲. ضد متقارن

۱. متقارن

- ۲۴- در روش هوکل بررسی سیستم ها کدام عبارت نادرست است؟

۱. روش هوکل یک روش تقریبی نیمه تجربی است

۲. روش هوکل مشتق شده از نظریه MO-LCAO است

۳. روش هوکل برای تمام سیستم های شامل پیوند π کاربرد دارد

۴. در روش هوکل بررسی سیستم ها با استفاده از روش تغییر پارامترها صورت می گیرد

- ۲۵- انرژی حالت برانگیخته الکترون های C_2^- مولکول اتیلن برابر چند است؟

۴. $\alpha - 1.618\beta$

۳. $\alpha + 1.618\beta$

۲. $\alpha - \beta$

۱. $\alpha + \beta$

سوالات تشریحی

۱- نمره ۱۰۰

تاثیر مجموع دو اپراتور $(\hat{x} + \hat{D}_x)$ را بر روی تابع $e^{\alpha x}$ بدست آورید.

۲- نمره ۱۰۰

مقدار قابل انتظار p_x را برای سیستم ذره آزاد (وقتی در جهت مثبت x حرکت می کند) بدست آورید

$$\varphi(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx}$$

۳- نمره ۱۰۰

ضریب نرمالیزاسیون تابع موج چرخنده صلب در یک صفحه را بدست آورید.

۴- نمره ۱۰۰

برای تراز چهارم چرخنده صلب سه بعدی مقادیر E , L و مقادیر مولفه L_z را بدست آورید.

۵- نمره ۱۰۰

برای اتم هیدروژن فرکانس نور حاصل از انتقال الکترون از تراز سوم به تراز دوم را بدست آورید.

$$E_n = \frac{-21.7 \times 10^{-19} j}{n^2}$$

رقم السؤال	طريق صحيح	وضعية كلید
1	د	عادی
2	د	عادی
3	الف	عادی
4	ج	عادی
5	د	عادی
6	ب	عادی
7	ب	عادی
8	ج	عادی
9	الف	عادی
10	ب	عادی
11	ج	عادی
12	ب	عادی
13	الف	عادی
14	ج	عادی
15	ب	عادی
16	ج	عادی
17	ب	عادی
18	الف	عادی
19	د	عادی
20	د	عادی
21	د	عادی
22	ج	عادی
23	الف	عادی
24	ج	عادی
25	ب	عادی

سری سوال: یک ۱

زمان آزمون (دقیقه): قسمی: ۶۰ تشریحی: ۶۰

تعداد سوالات: نسخه: ۲۰ تشریحی: ۵

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

وشهه تحصيلي / کد درس: شيمي (شيمي فيزيك)، شيمي گرایش محض، شيمي (کاربردي) ۱۴۰۲۷

استفاده از ماشین حساب مهندسی مجاز است

۱- مقدار ویژه حاصل از اثر یک اپراتور بر رویتابع ویژه:

۱. همواره مشت است.
۲. همواره منفی است.

۱۳. همواره حقیقی است.
۱۴. حقیقی یا موهوم است.

- ۴- گدامیک از توابع زیر نمیتواند موهومی باشد؟

$$\varphi \varphi^* \rightarrow \varphi^* \rightarrow \varphi$$

کدامیک از گزینه های زیر نشان دهنده هرمیتیک بودن اپراتور \hat{H} در مدل ذره در جعبه است

$$\int (\hat{H}\psi_1)\psi_2^* dx = \int (\hat{H}\psi_2)\psi_1^* dx$$

۴- متغیرهای قابع لاگرانژ در مدل نوسانگر هارمونیک عبارتند از:

۱. مکان و سرعت ۲. سرعت و زمان ۳. مکان و اندازه حرکت ۴. اندازه حرکت و زمان

- انرژی در نوسانگر هارمونیک از دیدگاه کلاسیکی:

۱۰. تابعی بیوسته است چرا که مقدار آن به دامنه نوسان پستگی دارد.

۲. تابعی گستته است چرا که مقدار آن به دامنه نوسان بستگی دارد.

۳. تابعی پیوسته است چرا که مقدار آن به فرکانس مشخصه سیستم بستگی دارد.

۴. تابعی گستته است چرا که مقدار آن به فرکانس مشخصه سیستم بستگی دارد.

۶- مقدار قابل انتظار اندازه حرکت $\langle v \rangle$ در مدل نوسانگر هارمونیک برابر است با:

$$\frac{\hbar}{2}, \quad \frac{i\hbar}{2}, \quad \frac{m\hbar\omega}{2}, \quad \text{ا. صفر}$$

- شرط $\psi(\phi) = \psi(\phi + 2\pi)$ نشان دهنده کدامیک از خصوصیات ψ است؟

۱. حقیقی بودن ψ ۲. معین بودن ψ ۳. پیوسته بودن ψ ۴. تک مقداری بودن ψ

-۸- تابع توزیع شعاعی به صورت کدام گزینه بیان می شود؟

$$4\pi(r+dr)^2R^2(r) \rightarrow 4\pi(r+dr)^2R^2dr \rightarrow 4\pi r^2R^2dr \rightarrow 4\pi r^2R^2(r) \rightarrow$$

سری سوال: ۱ بک

زمان آزمون (دقیقه): قسمتی: ۶۰ تشریحی: ۶۰

تعداد سوالات: قسمتی: ۲۰ تشریحی: ۵

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

روش تحقیلی/گد درس: شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی گوایش محض، شیمی (کاربردی) ۱۱۱۴۰۲۷

۹- سطوح تک دانسیته برای چه اوربیتال هایی به صورت کره هایی هم مرکز است؟

۱. اربیتال p

۲. اربیتال d

۳. اربیتال s

۱۰- چنانچه مولکول NO به عنوان یک چرخنده صلب در نظر گرفته شود، مقدار انرژی تراز دوم با فرض:

$I = 16.5 \times 10^{-47} \text{ kg m}^2$ و $m = 1.24 \times 10^{-26} \text{ kg}$

۱. $6.64 \times 10^{-46} \text{ J}$

۲. $13.28 \times 10^{-23} \text{ J}$

۳. $6.64 \times 10^{-23} \text{ J}$

۴. $3.32 \times 10^{-23} \text{ J}$

۱۱- مقدار L_y برابر با کدام گزینه است؟

۱. $zP_x - xP_z$

۲. $xP_z - yP_x$

۳. $zP_y - yP_z$

۴. $yP_z - zP_y$

۱۲- اپراتور \hat{L}^2 مستقل از کدامیک از گزینه های زیر است؟

۱. \hbar

۲. ϕ

۳. θ

۴. r

۱۳- مقدار E_{rot} در چرخنده صلب سه بعدی برابر با کدام گزینه است؟

۱. 0

۲. $m\hbar$

۳. $J(J+1)\frac{\hbar^2}{2I}$

۴. $\frac{L^2}{2\hbar}$

۱۴- تعداد حالت های مولفه L_z در تراز سوم انرژی چرخنده صلب سه بعدی چند است؟

۱. 7

۲. 5

۳. 3

۴. 1

۱۵- در اتم تک الکترونی در هر تراز انرژی به شماره n چه تعداد حالت همتراز پیش بینی می شود؟

۱. n^2

۲. $2n$

۳. n

۴. $\frac{n}{2}$

۱۶- کدام گزینه در مورد الکترون و فوتون صحیح است؟

۱. الکترون در دسته فرمیون و فوتون در دسته بوزون است.

۲. الکترون در دسته بوزون و فوتون در دسته فرمیون است.

۳. هر دو از ذرات بوزون هستند.

۴. هر دو از ذرات فرمیون هستند.

سری سوال: ۱ بک

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۶۰ تشریحی: ۶۰

تعداد سوالات: تستی: ۲۰ تشریحی: ۵

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

روش تحصیلی/گد درس: شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی گوایش محض، شیمی (کاربردی) ۱۱۱۴۰۲۷

۱۷- کدامیک از خصوصیات نظریه هوکل نمی باشد؟

۱. روش نیمه تجربی و تقریبی است.
۲. مشتق شده از نظریه MO-LCAO است.
۳. در مولکولهای مانند بنزن کاربرد دارد.
۴. برای توصیف وضعیت اوربیتالهای سیگما به کار می رود.

۱۸- در مدل ذره مستقل، از کدام جمله عبارت هامیلتون صرف نظر می شود؟

$$-\sum \frac{1}{r_{ij}} \quad .^4 \quad \sum \frac{1}{r_{ij}} \quad .^3 \quad \sum \frac{z}{r_i} \quad .^2 \quad -\sum \frac{z}{r_i} \quad .^1$$

۱۹- اصل موضوع دوم مکانیک کوانتومی چیست؟

۱. برای هر کمیت قابل اندازه گیری، اپراتور وابسته به آن وجود دارد.
۲. شناخت کامل از مکان و تکانه ذره را در هر لحظه در اختیار ما قرار می دهد.
۳. مقدار قابل انتظار هر مشاهده پذیر را مشخص می کند.
۴. احتمال حضور هر ذره را در کل فضا مشخص می کند.

۲۰- کدامیک از عبارات زیر در مورد اپراتور ها صحیح نمی باشد؟

۱. ضرب دو اپراتور، عمل تعویض پذیر نیست.
۲. جمع دو اپراتور، عمل تعویض پذیر است.
۳. جمع و تفاضل دو اپراتور، عمل تعویض پذیر نیست.
۴. حاصل ضرب دو اپراتور تاثیر متواالی آن دو عامل را با در نظر گرفتن ترتیب اثر اپراتور نشان می دهد.

سری سوال: ۱ بک

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۶۰ تشریحی: ۶۰

تعداد سوالات: تستی: ۲۰ تشریحی: ۵

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

روش تحقیلی/گد درس: شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی گوایش محض، شیمی (کاربردی) ۱۱۱۴۰۲۷

سوالات تشریحی

۱.۲۰ نمره

۱- اپراتور $\hat{x}D_x$ را برروی قابع $\sin ax^2$ تاثیر دهید و نتیجه را بنویسید.

۱.۲۰ نمره

۲- پدیده‌ی حالت‌های همتراز (یا چند حالتی شدن انرژی) را در مدل ذره چرخنده صلب سه بعدی توضیح دهید و روی شکل نشان دهید.

۱.۲۰ نمره

۳- در الگوی چرخنده صلب در صفحه، مولکول NO را که جذب سطح جامدی شده را در نظر می‌گیریم. جرم کاسته NO و معان اینرسی به ترتیب برابرند با $1.24 \times 10^{-26} kg$ و $16.5 \times 10^{-47} kgm^2$. اولین انرژی غیر صفر آن را بدست آورید.

۱.۲۰ نمره

۴- مقدار قابل انتظار فاصله الکترون از هسته را در حالت 1s حساب کنید

۱.۲۰ نمره

۵- اصل سوم مکانیک کوانتومی (در خصوص مقدار قابل انتظار هر مشاهده پذیر) را توضیح دهید.

رقم سؤال	ماسخ صحيح	وضعية كليد	عادي
1	د	—	عادي
2	ج	—	عادي
3	د	—	عادي
4	الف	—	عادي
5	الف	—	عادي
6	الف	—	عادي
7	د	—	عادي
8	الف	—	عادي
9	الف	—	عادي
10	ج	—	عادي
11	د	—	عادي
12	الف	—	عادي
13	ب	—	عادي
14	د	—	عادي
15	د	—	عادي
16	الف	—	عادي
17	د	—	عادي
18	ج	—	عادي
19	الف	—	عادي
20	ج	—	عادي

سری سوال: یک ۱

زمان آزمون (دقیقه): قسمتی: ۶۰ تشریحی: ۵۰

تعداد سوالات: قسمتی: ۲۰ تشریحی: ۵

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

وشیه تحقیلی/گد درس: شیمی گرایش محض، شیمی (کاربردی)، شیمی (شیمی فیزیک) ۱۱۱۴۰۲۷

استفاده از ماشین حساب مهندسی مجاز است

۱- کدامیک از توابع زیر، تابع ویژه اپراتور \hat{D}_x است؟

$$\sin ax e^{ax} \quad .4$$

$$e^{ax} + 1 \quad .3$$

$$\sin ax \quad .2$$

$$e^{ax} \quad .1$$

۲- کدام گزینه اپراتور هرمیتیک را نشان می دهد؟

$$\int \hat{A}^*(f^* \cdot g) dx = \int g (\hat{A}^* f) dx \quad .2$$

$$\int (\hat{A}^* f^*) \cdot g dx = \int f^* (\hat{A} g) dx \quad .1$$

$$\int \hat{A}^* (af) dx = \int a \hat{A}^* f dx \quad .4$$

$$\int \hat{A}^* (f^* + g) dx = \int (\hat{A}^* f + \hat{A}^* g) dx \quad .3$$

۳- معادله شرویدینگر مستقل از زمان کدام است؟

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi = E\psi \quad .2$$

$$\hat{H}\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad .1$$

۴. موارد ۲ و ۳

$$\hat{H}\psi = E\psi \quad .3$$

۴- کدام گزینه اصل عدم قطعیت هایزنبرگ را نشان نمی دهد؟

$$\Delta t \cdot \Delta E \geq \hbar \quad .2$$

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \hbar \quad .1$$

۴. هر سه مورد نشان دهنده اصل عدم قطعیت است.

$$\Delta m \cdot \Delta v \geq \hbar \quad .3$$

۵- در مدل ذره در جعبه یک بعدی، در نمودار تغییرات $\psi_{(x)}^2$ بر حسب x ، تعداد نقاط گره در حالت ۲ = n چند است؟

۳. ۴

۲. ۳

۱. ۲

۰. ۱

۶- تعداد حالت‌های همتراز (چندحالتی) در تراز سوم مدل ذره در جعبه سه بعدی مکعبی چند است؟

۳. ۴

۲. ۳

۱. ۲

۰. ۱

۷- در مدل نوسانگر هارمونیک، معادله لاغرانژ در کدام گزینه به درستی نوشته شده است؟

$$\frac{\partial L}{\partial x} = -k\ddot{x} \quad .4$$

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = m\ddot{x} \quad .3$$

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = m\dot{x} \quad .2$$

$$\frac{\partial L}{\partial x} = -k\dot{x} \quad .1$$

۸- انرژی نقطه صفر نوسانگر هارمونیک برابر است با:

۴. صفر

$$\frac{1}{2}h\nu_0 \quad .3$$

$$\frac{1}{2}h\nu \quad .2$$

$$\frac{1}{2}h\omega \quad .1$$

۹- توابع ویژه اپراتور \hat{H} در چرخنده صلب با کدام اپراتورها مشترک است؟

۴. موارد ۱ و ۲

$$\hat{L} \quad .3$$

$$\hat{L}_z \quad .2$$

$$\hat{L}^2 \quad .1$$

سری سوال: ۱ بک

زمان آزمون (دقیقه): قستی: ۶۰ تشریحی: ۶۰

تعداد سوالات: قستی: ۲۰ تشریحی: ۵

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

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

-۱۰- مقدار صحیح اپراتور \hat{L}_y کدام است؟

$$\hat{L}_y = \hat{x}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_x \quad .2$$

$$\hat{L}_y = \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z \quad .1$$

$$\hat{L}_y = i\hbar(\hat{x}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_x) \quad .4$$

$$\hat{L}_y = i\hbar(\hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z) \quad .3$$

-۱۱- اپراتور \hat{L}^2 در مختصات قطبی، مستقل از کدام کمیت است؟

$$\theta \quad .2$$

$$r \quad .1$$

.۴. تابع هر سه مورد است.

$$\phi \quad .3$$

-۱۲- مقدار انرژی چرخنده صلب سه بعدی در تراز چهارم انرژی برابر است با:

$$\frac{6\hbar^2}{2I} \quad .4$$

$$\frac{30\hbar^2}{2I} \quad .3$$

$$\frac{12\hbar^2}{2I} \quad .2$$

$$\frac{20\hbar^2}{2I} \quad .1$$

-۱۳- انرژی الکترونی اتم های تک الکترونی در رابطه E_n با چه کمیاتی متناسب است؟

$$E_n \propto -\frac{z^2}{\hbar^2} \quad .4$$

$$E_n \propto -\frac{\mu}{n^2} \quad .3$$

$$E_n \propto -\frac{z^2}{n^2} \quad .2$$

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

-۱۴- مقادیر ویژه توان دوم تکانه زاویه ای در سیستم دو ذره ای اتم هیدروژن برابر با کدام است؟

$$\sqrt{j(j+1)}\hbar \quad .4$$

$$j(j+1)\hbar^2 \quad .3$$

$$\ell(\ell+1)\hbar^2 \quad .2$$

$$\sqrt{\ell(\ell+1)}\hbar \quad .1$$

-۱۵- در حل معادله لاگر؛ پارامتر β در اتم های تک الکترونی معرف کدام است؟

.۲. عدد کوانتومی اصلی

.۱. عدد کوانتومی زاویه ای

.۴. عدد کوانتومی اربیتالی

.۳. عدد کوانتومی اسپین

-۱۶- در مدل ذره مستقل، از کدام جمله عبارت هامیلتون صرف نظر می شود؟

$$-\sum \frac{1}{r_{ij}} \quad .4$$

$$\sum \frac{1}{r_{ij}} \quad .3$$

$$+\sum \frac{z}{r_i} \quad .2$$

$$-\sum \frac{z}{r_i} \quad .1$$

-۱۷- انرژی اتم هلیوم با استفاده از روش اختلال مطابق با کدام گزینه بدست می آید؟

$$-z^2 + \frac{5}{8}z \quad .4$$

$$z - \frac{5}{8}z \quad .3$$

$$-z + \frac{5}{8}z \quad .2$$

$$z^2 + \frac{5}{8}z \quad .1$$

سری سوال: ۱ بک

زمان آزمون (دقیقه): قستی: ۶۰ تشریحی: ۶۰

تعداد سوالات: قستی: ۲۰ تشریحی: ۵

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

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

۱۸- کدامیک از عبارات زیر در مورد بوزون ها صحیح نمی باشد؟

۱. اسپین آنها صفر و یا صحیح است.
۲. عدد جرمی آنها زوج است.
۳. تابع موج نسبت به جابجایی دو ذره متقارن است.
۴. فوتون ها و نوترون ها در دسته بوزون ها قرار دارند.

۱۹- ضریب نرمالیزاسیون در دترمینان اسلیتر برای اتم برلیم برابر با کدام گزینه است؟ عدد اتمی برلیم ۴ است.

$$\frac{1}{4!} \cdot 4$$

$$\frac{1}{\sqrt{4}} \cdot 3$$

$$\sqrt{4!} \cdot 2$$

$$(4!)^{\frac{1}{2}} \cdot 1$$

۲۰- بر اساس مدل هوکل حاصل کدامیک از انتگرالهای زیر صفر است؟

$$S_{11} \cdot 2$$

$$S_{12} \cdot 1$$

$$(برای دو اتم همسایه)$$

$$H_{12} \cdot 4$$

$$H_{11} \cdot 3$$

سوالات تشریحی

۱.۲۰ نمره

- اپراتور $\hat{x} + \hat{P}_x^2 - e^{-ax^2}$ را بر روی تابع تاثیر بدهید و نتیجه را بنویسید.

۱.۲۰ نمره

- اختلاف انرژی بین دو تراز متوالی (ΔE) برای مولکول H_2 اگر در لوله مویینه به درازای ۵ سانتی متر قرار گرفته باشد (مدل ذره در جعبه) را محاسبه کنید.

$$h = 6.625 \times 10^{-34} \text{ J.s}$$

$$m = 3.6 \times 10^{-27} \text{ kg/mol}$$

۱.۲۰ نمره

- اولین انرژی غیر صفر در مولکول NO (چرخنده صلب) را حساب کنید. ممان اینرسی و جرم کاسته به ترتیب برابر با $1.24 \times 10^{-26} \text{ kg/m}$ و $16.5 \times 10^{-47} \text{ kg/m}^2$ است.

۱.۲۰ نمره

- عبارت هامیلتونی را برای یک اتم چند الکترونی بنویسید.

۱.۲۰ نمره

- قضیه کوپمان را به اختصار شرح دهید.

نمره سوار	واسخ صحيح	وصعب الكلب	
1	الف	عادي	
2	الف	عادي	
3	د	عادي	
4	ح	عادي	
5	د	عادي	
6	د	عادي	
7	ب	عادي	
8	ح	عادي	
9	د	عادي	
10	الف	عادي	
11	الف	عادي	
12	ب	عادي	
13	ب	عادي	
14	ب	عادي	
15	ب	عادي	
16	ح	عادي	
17	د	عادي	
18	د	عادي	
19	الف	عادي	
20	الف	عادي	

سری سوال: یک ۱

زمان آزمون (دقیقه): قسمتی: ۶۰ تشریحی: ۶۰

تعداد سوالات: قسمتی: ۲۰ تشریحی: ۵

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

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

استفاده از ماشین حساب مهندسی مجاز است

۱- برای ذره آزاد یک بعدی ثابت نرمال سازی تابع موج کدام است؟

$$\sqrt{\frac{2}{L}} \cdot ۴$$

$$\sqrt{\frac{1}{L}} \cdot ۳$$

$$\frac{2}{L} \cdot ۲$$

$$\sqrt{\frac{L}{2}} \cdot ۱$$

۲- منظور از چرخنده صلب چیست؟

۱. چرخنده‌ای که در اثر چرخش، عمل نوسان را نیز انجام دهد.

۲. چرخنده‌ای که در اثر چرخش، فاصله بین دو اتم (طول پیوند) تغییر کند.

۳. چرخنده‌ای که حرکت آن منحصر به جاگایی در فضا باشد.

۴. چرخنده‌ای که حول مرکز جرم خود دارای دوران آزاد باشد.

۳- کدام مورد زیر متعامد بودن توابع موج وابسته به کمیتهای فیزیکی را نشان می‌دهد؟

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_i^* \psi_j d\tau = 0 \quad (i \neq j) \cdot ۲$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_i^* \psi_j d\tau = 1 \quad (i = j) \cdot ۱$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_i^* \psi_j d\tau = 0 \quad (i = j) \cdot ۴$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_i^* \psi_j d\tau = 1 \quad (i \neq j) \cdot ۳$$

۴- تراز ۵ چرخنده صلب سه بعدی چند حالتی است؟

۱۴. ۴

۱۱. ۳

۹. ۲

۵. ۱

۵- کدام مورد زیر از خصوصیات تابع حالت Ψ نمی‌باشد؟

۱. تابعی از مختصات مکانی و زمانی

۲. توان دوم آن در هر لحظه معین احتمال وجود ذره را نشان می‌دهد.

۳. تابع حالت همواره حقیقی است.

۴. چگالی احتمال سیستم در هر نقطه از فضا مقدار معینی است.

۶- در نظریه اوربیتال مولکولی هوکل کدام فرض زیر وجود ندارد؟ ($i \neq j$)

$$H_{ii} = \alpha \cdot ۴$$

$$H_{ij} = \beta \cdot ۳$$

$$S_{ij} = 0 \cdot ۲$$

$$S_{ij} = 1 \cdot ۱$$

۷- اگر $\psi_{ij} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \alpha^{\frac{3}{2}} e^{-\alpha r}$ تابع موج اتم هیدروژن باشد، مقدار انتظار قابل انتظار فاصله الکترون از هسته در حالت ۱s برابر است با:

$$r = 0 \cdot ۴$$

$$r = \alpha \cdot ۳$$

$$r = \frac{1}{2\alpha} \cdot ۲$$

$$r = \frac{3}{2\alpha} \cdot ۱$$

سری سوال: ۱ بک

زمان آزمون (دقیقه): قسمتی: ۶۰ تشریحی: ۵۰

تعداد سوالات: قسمتی: ۲۰ تشریحی: ۵

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

روش تحقیلی/گد درس: شیمی گرایش محض، شیمی (کاربردی)، شیمی (شیمی فیزیک) (۱۱۱۴۰۲۷)

۸- در مثال ذره در جعبه مکعبی پنجمین تراز انرژی چند حالتی است؟

۱. ۴

۳. ۳

۲. ۲

۶. ۱

۹- در سیستم چرخنده صلب در صفحه دو بعدی کدام رابطه انرژی مجاز را نشان می دهد؟

$$\frac{m^2\hbar^2}{2I\omega} . ۴$$

$$\frac{\hbar^2}{2m^2I} . ۳$$

$$\frac{m^2\hbar^2}{2I} . ۲$$

$$\frac{m^2\hbar^2}{2I} . ۱$$

۱۰- فرکانس مشخصه سیستم در مدل نوسانگر هارمونیک برابر است با:

$$\frac{\hbar}{2\pi}\sqrt{\frac{k}{m}} . ۴$$

$$\frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{k}{m}} . ۳$$

$$\frac{1}{2\pi\hbar}\sqrt{\frac{k}{m}} . ۲$$

$$\frac{1}{2\pi h}\sqrt{\frac{k}{m}} . ۱$$

۱۱- به منظور بررسی حرکت ارتعاشی اتم ها در مولکول نسبت به یکدیگر از چه مدلی استفاده می شود؟

۱. مدل ذره در جعبه

۲. مدل نوسانگر هارمونیک

۳. مدل چرخنده صلب

۴. بستگی به نوع حرکت ارتعاشی دارد.

۱۲- معادل ماتریسیتابع اسپینی β کدام است؟

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} . ۴$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} . ۳$$

$$\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} . ۲$$

$$\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} . ۱$$

۱۳- مبنای اصل فرانک-کوندون کدام مورد زیر است؟

۱. تفاوت طول پیوند بین مولکول و یون-مولکول در طی جهش الکترونی

۲. عدم تغییر طول پیوند بین مولکول و یون-مولکول در طی جهش الکترونی

۳. ممان دوقطبی الکتریکی مولکول شامل ممانهای الکترونی و هسته ای است.

۴. شدت جهش ها متناسب با توان دوم ممان مغناطیسی جهش الکترونی است.

۱۴- کدام مورد زیر رابطه بین ممان مغناطیسی و تکانه زاویه ای اسپینی الکترون را نشان می دهد؟

$$\hat{\mu}_z = -\frac{e\hbar}{2m_e} m_l . ۴$$

$$\hat{\mu}_z = \pm \frac{e\hbar}{2m_e} . ۳$$

$$\hat{\mu}_z = -\frac{e}{2m_e} L_z . ۲$$

$$\hat{\mu} = -\frac{e}{2m_e} L . ۱$$

۱۵- کدام گزینه تابع توزیع شعاعی را نشان می دهد؟

$$4\pi r^2 R^2(r) . ۴$$

$$4\pi r^2 R(r) . ۳$$

$$R^2(r) . ۲$$

$$R(r) . ۱$$

۱۶- در یک سیستم سه بعدی بطور کلی مولفه X تکانه زاویه ای کدام مورد است؟

$$zp_y - yp_z . ۴$$

$$xp_y - yp_x . ۳$$

$$zp_x - xp_z . ۲$$

$$yp_z - zp_y . ۱$$

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۶۰ تشریحی: ۶۰

تعداد سوالات: تستی: ۲۰ تشریحی: ۵

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

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

۱۷- اصل موضوع سوم مکانیک کوانتوم درباره کدام مورد زیر است؟

۱. عملگر هرمیتی ۲. تعریف تابع موج ۳. عملگرها ۴. مقدار قابل انتظار

۱۸- کدام مورد زیر از خصوصیات معادله مستقل از زمان شروdingر نمی باشد؟

۱. جوابهای آن ردیفی از توابع (x) ارتونرمال را می دهد.

۲. مقادیر ویژه معادله مستقل از زمان شروdingر مقادیر انرژی، E می باشد.

۳. جوابهای آن بطور کلی نامتناهی است و ردیف ناپیوسته‌ای را تشکیل می دهند.

۴. توابع حالت حاصل می توانند با زمان تغییر کنند.

۱۹- اصل موضوعه اول مکانیک کوانتوم عبارت است از:

۱. به هر حالت فیزیکی قابل حصول سیستم تابعی به نام تابع حالت وابسته است که شامل همه اطلاعات فیزیکی قابل دسترس در آن حالت است.

۲. به هر خاصیت فیزیکی یک عملگر وابسته است که با اثر روی تابع موج مقادیر ویژه آن کمیت را می دهد.

۳. حاصل ضرب مزدوج مختلط تابع حالت در خود تابع حالت چگالی احتمال را در هر لحظه t در محدوده مکانی معین نشان می دهد.

۴. تابع موج بایستی در تمام فضا نرمال باشد.

۲۰- کدام مورد از خواص عملگرهای مکانیک کوانتوم نمی باشد؟

۱. جمع پذیربودن ۲. خطی بودن ۳. هرمیتیک بودن ۴. موهمی بودن

سوالات تشریحی

۱- اولین و دومین تراز از ۴ تراز انرژی برای الکترونهای π مولکول O_3 - بوتا دی ان $\alpha + 0.618\beta, \alpha + 1.618\beta$ می باشد. انرژی کل الکترونهای π مولکول چقدر است؟

۲- مقدار قابل انتظار $\langle x \rangle$ برای سیستم نوسانگر هماهنگ را حساب کنید.

۳- نتیجه‌ی اعمال اپراتور $[\hat{D}_x^2, \hat{x}]$ بر روی تابع $f(x)$ چه می باشد؟

۴- برای مولکول CO فاصله هسته دو اتم و جرم کاسته به ترتیب برابر با $m = 0.113 \times 10^{-26}$ و $g = 1.14 \times 10^{-26}$ می باشد، انرژی اولین تراز چند زول است؟

۵- حالت‌های همتراز (چند حالتی شدن ترازهای انرژی) را در مدل ذره در جعبه سه بعدی توضیح دهید.

1114027 - 98-99-3

رقم	العنوان	تصنيف	نوع
1		+	ج - د
2		+	ج - د
3		-	ج - د
4		?	ج - د
5		?	ج - د
6		-	ج - د
7		-	ج - د
8		+	ج - د
9		-	ج - د
10		?	ج - د
11		-	ج - د
12		-	ج - د
13		-	ج - د
14		?	ج - د
15		+	ج - د
16		-	ج - د
17		+	ج - د
18		+	ج - د
19		-	ج - د
20		+	ج - د

سری سوال: یک ۱

زمان آزمون (دقیقه): قسمتی: ۶۰ تشریحی: ۵۰

تعداد سوالات: قسمتی: ۲۰ تشریحی: ۵

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

روش تعلیمی/گد درس: شیمی گرایش محض، شیمی (کاربردی)، شیمی (شیمی فیزیک) ۱۱۱۴۰۲۷

استفاده از ماشین حساب مهندسی مجاز است

۱- مقدار قابل انتظار تکانه در مورد ذره در جعبه هنگامی که میانه مختصات بگیریم، برابر با کدام گزینه است؟

$$\int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \varphi^* \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \varphi dx \quad .4$$

$$\int_0^L \varphi^* \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \varphi dx \quad .3$$

$$\int_0^L \varphi^* \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right) \varphi dx \quad .2$$

$$\int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \varphi^* \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right) \varphi dx \quad .1$$

۲- کدامیک از شرایط زیر برای تابع موجی Ψ صحیح نیست؟

۱. Ψ بایستی محدود باشد.
۲. Ψ می بایست در هر نقطه معین، تک مقدار باشد.
۳. Ψ باید مثبت باشد.
۴. Ψ می بایست یک تابع پیوسته از مختصاتش باشد.

۳- در مکانیک کوانتومی منظور از نوسانگر هارمونیک چیست؟

۱. نوسانگری که معادله شرودینگر برای آن حل شده باشد.
۲. دارای الگوی یک بعدی است.
۳. الف و ب
۴. نوسانگری که فاقد انرژی پتانسیل است.

۴- حاصل عبارت $\frac{\partial L}{\partial x}$ برابر با کدام گزینه است؟

$$kx \quad .4 \quad -kx \quad .3 \quad mx \dot{x} \quad .2 \quad m\ddot{x} \quad .1$$

۵- انرژی در نوسانگر هارمونیک از دیدگاه کوانتومی (ذره ای) :

۱. تابعی پیوسته و مقدار آن به دامنه نوسان بستگی دارد.
۲. تابعی گسسته و اختلاف بین انرژی ترازها مقداری ثابت است.
۳. تابعی پیوسته و وابسته به دما است.
۴. تابعی گسسته با فواصل $\hbar\nu_0$ است.

۶- مقدار قابل انتظار اندازه حرکت p_x در مدل نوسانگر هارمونیک برابر است با :

$$\frac{\hbar}{2} \quad .4 \quad \frac{i\hbar}{2} \quad .3 \quad \frac{mh\omega}{2} \quad .2 \quad ۰. صفر$$

۷- تابع لاغرانژی در یک سیستم نوسانگر هارمونیک مطابق با کدام گزینه است؟

$$\frac{1}{2}m'q^2 - \frac{1}{2}kq^2 \quad .4 \quad \frac{1}{2}m'q^2 - \frac{1}{2}k\dot{q}^2 \quad .3 \quad \frac{1}{2}\dot{m}q^2 - \frac{1}{2}k\dot{q}^2 \quad .2 \quad \frac{1}{2}m'q^2 - \frac{1}{2}kq^2 \quad .1$$

سری سوال: ۱ بک

زمان آزمون (دقیقه): قسمتی: ۶۰ تشریحی: ۶۰

تعداد سوالات: قسمتی: ۲۰ تشریحی: ۵

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

روش تحقیلی/گد درس: شیمی گرایش محض، شیمی (کاربردی)، شیمی (شیمی فیزیک) ۱۱۱۴۰۲۷

-۸- منظور از چرخنده صلب چیست؟

۱. چرخنده‌ای که در یک صفحه حرکت دورانی داشته باشد.

۲. چرخنده‌ای که در اثر چرخش، فاصله بین دو اتم (طول پیوند) تغییر کند.

۳. چرخنده‌ای که حرکت آن منحصر به جابجایی در فضا باشد.

۴. چرخنده‌ای که حول مرکز جرم خود دارای دوران آزاد باشد.

-۹- شرط $(\phi + 2\pi)\psi = \psi$ نشان دهنده کدامیک از خصوصیات ψ است؟

۴. تک مقداری بودن ψ

۳. پیوسته بودن ψ

۲. معین بودن ψ

۱. حقیقی بودن ψ

-۱۰- کدامیک از توابع زیر متعامدند؟

۴. ψ_{1s} و ψ_{2s}

۳. ψ_{1s} و ψ_{2py}

۲. ψ_{1s} و ψ_{2px}

۱. ψ_{1s} و ψ_{2pz}

-۱۱- سطوح تک دانسیته برای چه اوربیتال‌هایی به صورت کره‌هایی هم مرکز است؟

۲. اربیتال p

۱. اربیتال s

۴. بستگی به نوع ابر الکترونی دارد.

۳. اربیتال d

-۱۲- چنانچه مولکول NO به عنوان یک چرخنده صلب در نظر گرفته شود، مقدار انرژی تراز دوم با فرض:

$$h=6.625\times 10^{-34} J_s \quad I=16.5\times 10^{-47} kgm^2 \quad m=1.24\times 10^{-26} kg$$

۴. $6.64\times 10^{-46} J$

۳. $13.28\times 10^{-23} J$

۲. $6.64\times 10^{-23} J$

۱. $3.32\times 10^{-23} J$

-۱۳- کدام دو اپراتور زیر با یکدیگر جابجاپذیر هستند؟

۴. \hat{P}_x, \hat{L}_z

۳. \hat{H}, \hat{V}

۲. \hat{V}, \hat{L}_z

۱. \hat{H}, \hat{L}_z

-۱۴- مقدار L_y برابر با کدام گزینه است؟

۴. $zP_x - xP_z$

۳. $xP_z - zP_x$

۲. $zP_y - yP_z$

۱. $yP_z - zP_y$

-۱۵- حاصل $\hat{p}_x \hat{x} - \hat{x} \hat{p}_x$ برابر است:

۴. صفر

۳. $2ix\hbar$

۲. $-i\hbar$

۱. $2i\hbar$

-۱۶- اپراتور \hat{L}^2 مستقل از کدامیک از کمیات زیر است؟

۴. θ, r و ϕ

۳. ϕ

۲. θ

۱. r

سری سوال: ۱ بک

زمان آزمون (دقیقه): قسمتی: ۶۰ تشریعی: ۶۰

تعداد سوالات: قسمتی: ۲۰ تشریعی: ۵

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

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

۱۷- کدامیک از جملات زیر صحیح نیست؟

۱. ترازهای انرژی در یک چرخنده صلب همگی دوتایی هستند.

۲. انرژی محاسبه شده به روش تغییر پارامترها همواره بزرگتر از انرژی واقعی سیستم است.

۳. علامت تابع موج سیستم چند الکترونی با تعویض دو الکترون تغییر نمی کند.

۴. با افزایش عدد کوانتومی در سیستم ذره در جعبه یک بعدی فاصله ترازهای انرژی ثابت است.

۱۸- کدام عبارت زیر مربوط به اصل فرانک- کوندون می باشد؟

۱) با توجه به جرم زیاد هسته ها در برانگیختگی الکترونی فاصله دو هسته تغییر نمی کند.

۲) در مورد یون- مولکول هیدروژن حرکت هسته ها را از حرکت الکترون متمایز می کنیم

۳) هنگام برانگیختگی الکترونی جهش هایی که از پایین به بالا به طور قائم روی می دهد متحمل ترین جهش هاست.

۱. ۱ و ۲ و ۳
۲. ۱ و ۲
۳. ۱ و ۲
۴. ۱ و ۲ و ۳

۱۹- اپراتورهای مربوط به دو کمیت وابسته که به طور همزمان قابل شناخت هستند، نسبت به هم.....

۱. جابجاپذیرند.
۲. جابجاناپذیرند.
۳. متعامدند.
۴. قرینه هستند.

۲۰- کدامیک از عبارات زیر در مورد بوزون ها صحیح نمی باشد؟

۱. اسپین آنها صفر و یا صحیح است.
۲. عدد جرمی آنها زوج است.

۳. تابع موج نسبت به جابجایی دو ذره متقابران است.
۴. فوتون ها و نوترون ها در دسته بوزون ها قرار دارند.

سری سوال: ۱ بک

زمان آزمون (دقیقه): قستی: ۶۰ تشریحی: ۶۰

تعداد سوالات: قستی: ۲۰ تشریحی: ۵

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

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

سوالات تشریحی

۱- مدل ذره مستقل را توضیح داده و سپس اپراتور هامیلتونی اتم هلیوم را مطابق این مدل (در واحد اتمی) بنویسید.

۲- دترمینان اسلیتر را برای مولکول بنزن نوشته و از آنجا سهم الکترونهای π را بدست آورید (مطابق روش هوکل)

۳- مقدار قابل انتظار p_x را برای ذره در جعبه یک بعدی بدست آورید.

۴- حالت‌های همتراز یعنی چه؟ در مدل ذره در جعبه یک بعدی توضیح دهید.

۵- طول موج مربوط به اولین خط جذبی را در مولکول چرخنده صلب CO بدست آورید. فاصله دو اتم در حالت پایه برابر با $0.113 \times 10^{-9} m$ و جرم کاسته برابر با $1.14 \times 10^{-26} kg$ است.

$$c = 3 \times 10^8 m/s$$

$$\hbar = 6.625 \times 10^{-34} J.s \quad \hbar = 6625 \times 10^{-34}$$

نمبر	سوان	ياسخ صحبح	وضعیت کلب	عادي
1		الف		عادي
2		ح		عادي
3		ح		عادي
4		ب		عادي
5		ب		عادي
6		الف		عادي
7		د		عادي
8		د		عادي
9		د		عادي
10		الف		عادي
11		الف		عادي
12		ح		عادي
13		الف		عادي
14		د		عادي
15		ب		عادي
16		الف		عادي
17		ح		عادي
18		ب		عادي
19		الف		عادي
20		د		عادي



سری سوال: یک ۱

زمان آزمون (دقیقه): قسمتی: ۶۰ تشریحی: ۶۰

تعداد سوالات: قسمتی: ۲۰ تشریحی: ۵

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

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

استفاده از ماشین حساب ساده، ماشین حساب مهندسی مجاز است

۱- اپراتور انرژی جنبشی دارای کدام خاصیت زیر است؟

۱. یک اپراتور هرمیتی است.
 ۲. یک اپراتور حقیقی است.
 ۳. مقدار ویژه آن انرژی کل سیستم است.
 ۴. موارد الف و ب درست است.

۲- قسمت وابسته به زمان تابع موج کدام است؟

$e^{-Et/\hbar}$

$e^{-iEt/\hbar}$

$e^{-iEt/\hbar}$

e^{-iEt}

۱. ۴

-2x

2x-1

2. ۱

۳- جایه جاگر اپراتورهای $[x^2, D_x]$ کدام است؟

۱. ۲

-2x

2x-1

2. ۱

۱. ۴

-2x

2x-1

2. ۱

۴- انرژی ذره در جعبه یک بعدی به طول ۱ دارای کدام خاصیت است؟

۱. مقادیری مثبت است که با افزایش عدد کوانتومی سیستم مقدار آن کاهش می یابد.
 ۲. فواصل ترازهای انرژی همواره ثابت است.
 ۳. دارای تبھگنی ۱ است.
 ۴. تمام موارد درست است.

۵- شرایط مرزی ذره در جعبه ای به طول ۱ کدام است؟

$x=-1/2, \psi(x)=0$

$x=1/2, \psi(x)=0$

۴. موارد الف و ب درست است.

$x=\pm 1/2, \psi(x)=1$

۶- چرا وجود الکترون در هسته مردود است؟

۱. سرعت آن بیشتر از سرعت نور میشود.
 ۲. انرژی آن از بیشتر از انرژی معادل جرم آن میشود.
 ۳. با پروتون واکنش میدهد.
 ۴. موارد الف و ب درست است.

۷- از کدام تکنیک برای حل معادله ذره در جعبه سه بعدی استفاده میشود؟

۱. تغییر متغیر
 ۲. تفکیک متغیر
 ۳. تغییر پارامتر
 ۴. اختلال

سری سوال: ۱ بک

زمان آزمون (دقیقه): قسمتی: ۶۰ تشریحی: ۶۰

تعداد سوالات: قسمتی: ۲۰ تشریحی: ۵

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

روش تحقیلی/گد درس: شیمی گرایش محض، شیمی (کاربردی)، شیمی (شیمی فیزیک) ۱۱۱۴۰۲۷

۸- کدام عبارت در مورد توابع ویژه اپراتور هامیلتونی درست است؟

۱. مجموعه ای نرمال هستند.

۲. مجموعه ای ارتونرمال هستند.

۳. مجموعه ای حقیقی میباشدند.

۴. تنها برای سیستم هایی که حل دقیقی دارند مجموعه ای حقیقی میباشدند.

۹- متوسط مکانی ذره نوسانگ هماهنگ کدام است؟

 $(1/2\alpha)^{1/2}$ $-h/2\pi$

۰

 $h/2\pi$

۱

۲

۳

۴

۱۰- تقریب هارمونیک دارای چه ویژگی میباشد؟

۱. نیروی وارد بر ذره از قانون ماکسول تبعیت میکند

۲. انرژی پتانسیل ذره از رابطه $1/2kq^2$ بدست می اید.

۳. انرژی پتانسیل منطبق بر یک سهمی است.

۱۱- ثابت نرمال شدگی برای توابع موج یک چرخنده صلب در صفحه کدام است؟

 $(2\pi)^{1/2}$ $1/(2\pi)$ $(2\pi)^{-1/2}$ $1/(\pi)^{1/2}$

۱

۲

۳

۴

۱۲- چرخنده صلب در صفحه به ازای هر یک از مقادیر کوانتومی انرژی چند حالت همتراز دارد؟

 $2m+1$

۱

۲

 m^2

۳

۴

۵

۱۳- کدام مؤلفه تکانه زاویه ای با اپراتور مجدور تکانه زاویه ای، \hat{L}^2 ، جابجاپذیر است؟

۴. هر سه مورد

 \hat{L}_z \hat{L}_y \hat{L}_x

۱

۲

۳

۴

۵

۱۴- ماکزیمم تابع توزیع شعاعی اتم هیدروژن در حالت $1s$ کدام است؟ $a_0/3$ $a_0/2$

۲

 a_0

۱

۲

۳

۴

۵

۱۵- جهش الکترون از تراز سوم به تراز دوم باعث ایجاد کدام خط در سری طیفی بالمر اتم هیدروژن می شود؟

۴. اول

۳. دوم

۲. سوم

۱. چهارم

۱

۲

۳

۴

۵

۱۶- زاویه بین مؤلفه S_z و خود S کدام است؟ $\text{Arcos}(-1/3)$ $\text{Arcos}(\pm(1/3)^{1/2})$ $\text{Arcos}(\pm 1/3)$ $\text{Arcos}(1/3)$

۱

۲

۳

۴

۵

سری سوال: ۱ بک

زمان آزمون (دقیقه): قسمتی: ۶۰ تشریحی: ۶۰

تعداد سوالات: قسمتی: ۲۰ تشریحی: ۵

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

روش تحقیلی/گد درس: شیمی گرایش محض، شیمی (کاربردی)، شیمی (شیمی فیزیک) ۱۱۱۴۰۲۷

۱۷- هامیلتونی غیر نسبیتی اتم N الکترونی دارای کدام جملات است؟

- ۱. دافعه هسته ای
- ۲. پتانسیل برهم کنش الکترون- هسته
- ۳. انرژی جنبشی هسته ها
- ۴. تمام موارد درست است.

۱۸- بر اساس مدل ذره مستقل کدام عبارت درست است؟

- ۱. از جملات دافعه الکترونی صرفنظر میشود.
- ۲. تابع موج کل مجموع توابع موج تک تک ذرات است.
- ۳. هامیتونی کل حاصلضرب هامیلتونی های تک تک ذرات است.
- ۴. انرژی کل بصورت حاصلضرب انرژی تک تک ذرات است.

۱۹- بر اساس مدل ذره مستقل برای اتم هلیوم انرژی این اتم چند هارتی است؟

- 10 . ۴
- 2.9 . ۳
- 4 . ۲
- 8 . ۱

۲۰- عبارت "هیچ دو الکترونی چهار عدد کوانتومی یکسان ندارند" بیانگر کدام اصل است؟

- ۱. هوند
- ۲. پائولی
- ۳. هایزنبرگ
- ۴. اسلیتر

سوالات تشریحی

۱. تقریب های منظور شده در تئوری اربیتال مولکولی هوکل را بنویسید؟

۲. بر اساس تئوری اربیتال مولکولی هوکل برای سیستم مزدوج بوتادین دترمینان ضرایب را بنویسید.

۳. متوسط r یعنی $\langle r \rangle$ برای اتم هیدروژن در حالت $1s$ را بیابید.

$$\psi_{1s} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} a^{3/2} e^{-ar}$$

$$\int_0^{\infty} x^n e^{-bx} dx = \frac{n!}{b^{n+1}}$$

۴. نمودار ترازی انرژی چرخنده صلب سه بعدی را با ذکر مقدار انرژی و چندگانگی چهار تراز اول رسم کنید؟

۵. با استفاده از داده های زیر برای مولکول HCl انرژی نقطه صفر این مولکول را بدست آورید.

$$c = 3 \times 10^{10} \text{ cm/s}, h = 6.63 \times 10^{-34} \text{ J.s}$$

$$v_0 = 2988 \text{ cm}^{-1}, k = 516 \text{ N/m}$$

نمر سوار	باسخ صحبح	وضعیت کلبد	
1	د	عادی	
2	ج	عادی	
3	ج	عادی	
4	ج	عادی	
5	د	عادی	
6	د	عادی	
7	ب	عادی	
8	ب	عادی	
9	ب	عادی	
10	د	عادی	
11	ب	عادی	
12	ب	عادی	
13	د	عادی	
14	الف	عادی	
15	د	عادی	
16	ج	عادی	
17	ب	عادی	
18	الف	عادی	
19	ب	عادی	
20	ب	عادی	

سری سوال: یک ۱

زمان آزمون (دقیقه): قسمتی: ۶۰ تشریحی: ۵۰

تعداد سوالات: قسمتی: ۲۰ تشریحی: ۵

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

وشیه تحصیلی/گد درس: شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی گوایش محض، شیمی (کاربردی) ۱۱۱۴۰۲۷

استفاده از ماشین حساب ساده مجاز است

۱- کدام گزینه در مورد تابع موج (Ψ) یک سیستم صحیح نیست؟

۱. همواره مقداری حقیقی دارد.
۲. Ψ دامنه احتمال است.
۳. Ψ شامل همه معلوماتی است که در یک حالت فیزیکی خاص می‌توان در مورد سیستم کسب کرد.
۴. Ψ تابعی از مختصات مکانی و زمان است.

۲- کدام گزینه زیر همواره مقداری حقیقی دارد؟

۱. اپراتورهای مکانیک کوانتومی
۲. کمیتهای فیزیکی
۳. تابع موج
۴. کمیتهای فیزیکی و تابع موج

۳- به هر کمیت فیزیکی مشاهده پذیر یک اپراتور وابسته است.

۱. خطی
۲. حقیقی
۳. خطی و هرمیتیک
۴. موهومی

-۴- تابع ویژه اپراتور \hat{D}_x با مقدار ویژه است.

$$e^{ax} \quad ax \quad a^2 \quad a$$

-۵- از رابطه زیر به دست می‌آید.

$$\int \Psi^*(\vec{r}, t) \cdot x \cdot \Psi(\vec{r}, t) dv$$

۱. میانگین Xها
۲. دانسیته احتمال
۳. تکانه خطی
۴. انحراف استاندارد X

-۶- برای یک ذره آزاد به جرم m، میانگین مؤلفه X تکانه خطی $\langle P_x \rangle$ به ازای هر مقدار از انرژی ذره (E) برابر است با

$$\frac{m}{E} \quad \frac{E}{m} \quad \sqrt{2mE} \quad 0$$

-۷- عدم قطعیت در اندازه گیری همزمان مکان و اندازه حرکت ذره چقدر است؟

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq 10^{-x} \quad \Delta x \cdot \Delta p_x \geq \hbar \quad \Delta x \cdot \Delta p_x \geq 0 \quad \Delta x \cdot \Delta p_x \geq 10^x$$

سری سوال: ۱ بک

زمان آزمون (دقیقه): قستی: ۶۰ تشریعی: ۶۰

تعداد سوالات: قستی: ۲۰ تشریعی: ۵

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

روش تحقیلی/گد درس: شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی گرایش محض، شیمی (کاربردی) ۱۱۱۴۰۲۷

۸- با توجه به رابطه زیر، دوتابع ψ_i و ψ_j هستند.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_i^* \cdot \psi_j dv = 0$$

۴. حقیقی

۳. ارتونرمال

۲. متعامد

۱. نرمال شده

۹- از اپراتورهای وابسته به تکانه زاویه ای کدام یک با یکدیگر جابجاپذیرند؟

\hat{L}^2 و \hat{L}_z

\hat{L}_z و \hat{L}_y

\hat{L}_z و \hat{L}_x

\hat{L}_y و \hat{L}_x

۱۰- جابجاپذیر بودن اپراتورها گویای این واقعیت است که

۱. کمیتهای وابسته به آنها بطور همزمان قابل شناختند.

۴. توابع موج وابسته به اپراتورها ارتوگنال هستند.

۲. توابع موج وابسته به آنها موهمی هستند.

۳. توابع موج وابسته به اپراتورها نرمال هستند.

۱۱- چند حالت همتراز به تراز انرژی Λ م یک چرخنده صلب سه بعدی وابسته است؟

$2J+1$

$J+1$

$2J$

J

۱۲- هر یک از جوابهای معادله شرودینگر اتم را که با دادن مقادیر معین به سه عدد n ، m و l مشخص می شود یک ... می نامند.

۴. پروتون

۳. اربیتال اتمی

۲. تراز انرژی

۱. الکترون

۱۳- در یک اتم تک الکترونی در هر تراز انرژی به شماره n ، تعداد حالت همتراز پیش بینی می شود.

$2n^2$

$2n$

n^2

n

۱۴- توابع یک اتم تک الکترونی مجموعه ای را تشکیل می دهند.

۴. نرمال

۳. ارتوگنال

۲. زوج

۱. حقیقی

۱۵- حل دقیق معادله شرودینگر برای کدام اتم زیر امکانپذیر است؟

۴. هیدروژن

۳. هلیم

۲. لیتیم

۱. بریلیم

سری سوال: ۱ بک

زمان آزمون (دقیقه): قستی: ۶۰ تشریعی: ۶۰

تعداد سوالات: قستی: ۲۰ تشریعی: ۵

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

روش تحقیلی/گد درس: شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی گوایش محض، شیمی (کاربردی) ۱۱۱۴۰۲۷

۱۶- جمله اختلال آور در هامیلتونی اتم هلیم مربوط به کدام گزینه زیر است؟

۲. دافعه بین دو الکترون

۱. جاذبه بین الکترونها و هسته

۴. انرژی جنبشی الکترونها

۳. انرژی جنبشی هسته

۱۷- قابع موجی یک منظومه چند الکترونی نسبت به جابجایی هر دو الکترون از الکترونها است.

۴. قرینه

۳. نامتقارن

۲. ضدمتقارن

۱. متقارن

۱۸- کدام گزینه زیر در مورد تقریب هوکل صحیح نیست؟

۱. این روش برای سیستمهای مزدوج به کار می رود.

۲. این روش یک روش نیمه تجربی است.

۳. این روش برگرفته از نظریه MO-LCAO است.

۴. در این روش توابع پایه مربوط به سیستم P از اوربیتالهای S ساخته می شوند.

۱۹- در روش هوکل انتگرالهای تبادلی برای اتمهای غیر همسایه چند در نظر گرفته می شود؟

a. ۴

b. ۳

۰. ۲

۱. ۱

۲۰- اوربیتالهای مولکولی تک الکترونی مناسب در تقریب هوکل، با روش تعیین می شوند.

۴. آزمون و خطا

۳. تجربی

۲. تغییر پارامترها

۱. اختلال

سری سوال: ۱ بک

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۶۰ تشریحی: ۶۰

تعداد سوالات: تستی: ۲۰ تشریحی: ۵

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

روش تحقیلی/گد درس: شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی گوایش محض، شیمی (کاربردی) ۱۱۱۴۰۲۷

سوالات تشریحی

۱.۲۰ نمره

۱- مجموع دو اپراتور \hat{x} و \hat{D}_x (یعنی $\hat{x} + \hat{D}_x$) را بر روی تابع $1 + x^2$ اثر دهید. ($\hat{D}_x = \frac{\partial}{\partial x}$)

۱.۲۰ نمره

۲- انرژی سه تراز اول (۱، ۲ و ۳) و چندحالتی مربوط به هر تراز را برای ذره ای به جرم m در جعبه ای مکعبی با ابعاد a مشخص کنید.

۱.۲۰ نمره

۳- جرم کاسته و معان اینرسی مولکول NO به ترتیب $1.65 \times 10^{-26} kg$ و $1.24 \times 10^{-26} kg.m^2$ است. بر اساس الگوی چرخنده صلب، اولین انرژی غیرصفر آن ($J=1$) را به دست آورید.

$$h = 6.6 \times 10^{-34} J.s$$

۱.۲۰ نمره

۴- فرکانس جهش الکترون در اتم هیدروژن از حالت $n=3$ به تراز $n=2$ را به دست آورید. انرژی حالت اصلی (پایه) اتم هیدروژن $J = 21.7 \times 10^{-19}$ است.

$$h = 6.6 \times 10^{-34} J.s$$

۱.۲۰ نمره

۵- دترمینان اسلیتر را برای یک منظومه دو الکترونی بنویسید.

نمره سؤال	ماسخ صحيح	وضعیت کلید	
1	الف	حادی	
2	ب	حادی	
3	ج	حادی	
4	الف	حادی	
5	الف	حادی	
6	ب	حادی	
7	ج	حادی	
8	ب	حادی	
9	د	حادی	
10	الف	حادی	
11	د	حادی	
12	ج	حادی	
13	ب	حادی	
14	ج	حادی	
15	د	حادی	
16	ب	حادی	
17	ب	حادی	
18	د	حادی	
19	ب	حادی	
20	ب	حادی	

سری سوال: یک ۱

زمان آزمون (دقیقه): قسمتی: ۶۰ تشریحی: ۶۰

تعداد سوالات: قسمتی: ۲۰ تشریحی: ۵

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

روش تحقیلی/گد درس: شیمی گرایش محض، شیمی (کاربردی)، شیمی (شیمی فیزیک) ۱۱۱۴۰۲۷

استفاده از ماشین حساب ساده مجاز است

۱- دانسیته احتمال معادل کدام تابع زیر است؟

$$r^2 |\psi|^2 . ۴$$

$$r |\psi|^2 . ۳$$

$$\psi^2 . ۲$$

$$|\psi|^2 . ۱$$

۲- به هر کمیت فیزیکی مشاهده پذیر یک اپراتور وابسته است.

۴. خطی

۳. خطی و هرمیتیک

۲. حقیقی

۱. خطی و حقیقی

۳- مقدار ویژه اپراتور \widehat{D}_x وقتی بر تابع $e^{\alpha x}$ اثر می کند، کدام است؟

$$-\alpha^2 . ۴$$

$$-\alpha x . ۳$$

$$\alpha x . ۲$$

$$\alpha . ۱$$

۴- قسمت زمانی تابع حالت یک ذره با انرژی E در حرکت پس از کدام گزینه زیر می تواند باشد؟

$$e^{-iEt/\hbar} . ۴$$

$$e^{iEt/\hbar} . ۳$$

$$-i/(Et\hbar) . ۲$$

$$i/(Et\hbar) . ۱$$

۵- مقدار میانگین مؤلفه x اندازه حرکت، p_x ، به ازای انرژی E برای ذره ای به جرم m کدام است؟

$$-\sqrt{2m/E} . ۴$$

$$-\sqrt{2mE} . ۳$$

$$0 . ۲$$

$$\sqrt{2mE} . ۱$$

۶- اگر با تبدیل x به $-x$ علامت تابع عوض نشود، آن تابع است.

۴. ارتوگنال

۳. نرمال

۲. زوج

۱. فرد

۷- حالت کوانتومی هم انرژی به دومین تراز انرژی ذره در جعبه سه بعدی مکعبی مربوط می شود.

۴. چهار

۳. سه

۲. دو

۱. یک

۸- رابطه زیر چه خاصیتی از تابع ψ را نشان می دهد؟

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_i \psi_i^* dv = 1$$

۴. ارتونرمال بودن

۳. نرمال بودن

۲. متعامد بودن

۱. ارتوگنال بودن

۹- اگر p بردار تکانه خطی و r بردار موضعی ذره باشد، حاصلضرب بیانگر کدام خاصیت است؟

۴. تکانه زاویه ای

۳. هامیلتونی

۲. جابجاپذیری

۱. ممان مغناطیسی

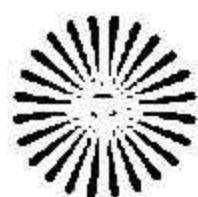
۱۰- کدام دو اپراتور زیر با یکدیگر جابجاپذیرند؟

$$\hat{L}_x, \hat{L}_y . ۴$$

$$\hat{L}_x, \hat{L}_z . ۳$$

$$\hat{L}_z, \hat{L}_y . ۲$$

$$\hat{L}^2, \hat{L}_z . ۱$$



سری سوال: ۱ بک

زمان آزمون (دقیقه): قسمتی: ۶۰ تشریحی: ۶۰

تعداد سوالات: قسمتی: ۲۰ تشریحی: ۵

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

روش تحقیلی/گد درس: شیمی گرایش محض، شیمی (کاربردی)، شیمی (شیمی فیزیک) ۱۱۱۴۰۲۷

۱۱- چه رابطه‌ای بین انرژیهای مجاز اتم هیدروژن، E_n ، وجود دارد؟ E_n انرژی حالت اصلی اتم هیدروژن است.

$$E_n = \frac{E_H}{2n^2} \quad .4$$

$$E_n = \frac{E_H}{2n} \quad .3$$

$$E_n = \frac{E_H}{n^2} \quad .2$$

$$E_n = \frac{E_H}{n} \quad .1$$

۱۲- بر اساس مدل چرخنده صلب سه بعدی، به هر یک از ترازهای انرژی چرخشی با شماره J ، تعداد حالت وابسته است.

$$(2J+1) \quad .4$$

$$J(J+1) \quad .3$$

$$J(2J+1) \quad .2$$

$$2J \quad .1$$

۱۳- در اتم تک الکترونی در هر تراز انرژی به شماره n چه تعداد حالت همتراز پیش بینی می‌شود؟

$$n \quad .4$$

$$2n \quad .3$$

$$n^2 \quad .2$$

$$2n^2 \quad .1$$

۱۴- کدام گزینه زیر تابع توزیع شعاعی را به درستی نشان می‌دهد؟

$$P(r) = R^2(r) \quad .4$$

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

$$P(r) = \frac{1}{4\pi r^2} R^2(r) \quad .2$$

$$P(r) = \frac{1}{4\pi r^2} R(r) \quad .1$$

۱۵- در انتقالات الکترونی در ترازهای انرژی اتم هیدروژن اولین خط سری بالمر مربوط به کدام جهش الکترونی است؟

۱. جهش الکترون از حالت $n=4$ به تراز $n=2$

۲. جهش الکترون از حالت $n=4$ به تراز $n=2$

۳. جهش الکترون از حالت $n=1$ به تراز $n=2$

۴. جهش الکترون از حالت $n=3$ به تراز $n=2$

۱۶- بر اساس قضیه تغییر پارامترها هر گاه کوچکترین مقدار ویژه هامیلتونی یک منظومه E_0 و تابع ویژه مربوط ψ_0 باشد، با هر تابع ψ غیر از ψ_0 خواهیم داشت:

$$\int \phi^* H \phi d\tau = 0 \quad .4$$

$$\int \phi^* H \phi d\tau \geq E_0 \quad .3$$

$$\int \phi^* H \phi d\tau \leq E_0 \quad .2$$

$$\int \phi^* H \phi d\tau \geq \frac{\hbar}{2} \quad .1$$

۱۷- تابع موجی ذره‌ای با اسپین نیمه صحیح است.

۱. ضدمتقارن

۲. فرد

۳. نامتقارن

۴. متقارن

۱۸- نظریه هوکل برای توصیف سیستمهای به کار می‌رود.

۱. آلیفاتیک

۲. حلقوی

۳. دارای الکترونهای p

۴. تک الکترونی

۱۹- در روش هوکل مقدار انتگرالهای تبادلی، H_{ij} ، مربوط به دو اتم غیرهمسايه چند در نظر گرفته می‌شود؟

$$0 \quad .4$$

$$1 \quad .3$$

$$2 \quad .2$$

$$-1 \quad .1$$

سری سوال: ۱ بک

زمان آزمون (دقیقه): قسمتی: ۶۰ تشریحی: ۶۰

تعداد سوالات: قسمتی: ۲۰ تشریحی: ۵

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

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

۲۰- اوربیتالهای مولکولی تک الکترونی مناسب در روش هوکل به چگونه تعیین می شوند؟

۱. بر اساس اوربیتالهای اتم هیدروژن

۲. به طور تجربی

۳. به روش تغییر پارامترها

سوالات تشریحی

۱. نمره ۱۲۰

۱- تأثیر اپراتور \hat{D}_x^2 بر تابع $f(x)$ را بنویسید. \hat{D}_x معادل $\frac{d}{dx}$ است.

$$f(x) = a \sin x$$

۲. نمره ۱۲۰

۲- سه تراز اول انرژی مجاز یک چرخنده صلب دو بعدی با ممان اینرسی I را بنویسید.

۳. نمره ۱۲۰

۳- طول پیوند یک مولکول دواتمی 0.113×10^{-9} متر و جرم کاسته آن 1.14×10^{-26} کیلوگرم است. انرژی اولین و دومین تراز چرخشی آن (با تقریب چرخنده صلب) چقدر است؟ $\hbar = 6625 \times 10^{-34} Js^{-1}$

۴. نمره ۱۲۰

۴- هامیلتونی اتم هلیوم را بنویسید و در مورد جملات آن توضیح دهید.

۵. نمره ۱۲۰

۵- انرژی الکترونیهای π مولکولهای اتیلن و بنزن به ترتیب برابر $8\beta, 2\beta$ است. انرژی رزونانس مولکول بنزن را به دست آورید.

شماره سوان	ياسخ صحبيج	وصعبت كلبد	عادي
١	الف		عادي
٢	ج		عادي
٣	الف		عادي
٤	د		عادي
٥	الف		عادي
٦	بـ		عادي
٧	ج		عادي
٨	ج		عادي
٩	د		عادي
١٠	الف		عادي
١١	بـ		عادي
١٢	د		عادي
١٣	بـ		عادي
١٤	ج		عادي
١٥	ج		عادي
١٦	ج		عادي
١٧	الف		عادي
١٨	ج		عادي
١٩	د		عادي
٢٠	ج		عادي

سری سوال: یک ۱

زمان آزمون (دقیقه): قسمتی: ۶۰ تشریحی: ۵۰

تعداد سوالات: قسمتی: ۲۰ تشریحی: ۵

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

روش تحقیلی/گد درس: شیمی گرایش محض، شیمی (کاربردی)، شیمی (شیمی فیزیک) ۱۱۱۴۰۲۷

استفاده از ماشین حساب مهندسی مجاز است

۱- اصل موضوع سوم مکانیک کوانتوم در کدام گزینه بیان شده است؟

$$H\psi(x,t) = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad .4$$

$$\langle a \rangle = \frac{\int \psi^* \hat{A} \psi dv}{\int \psi^* \psi dv} \quad .3$$

$$dp = |\psi|^2 dv \quad .2$$

$$\hat{H}\psi = E\psi \quad .1$$

۲- کدام گزینه صحیح نیست؟

۱. چندین حالت کوانتومی هم انرژی در یک سیستم، حالت‌های همتراز نام دارند.

۲. به هر کمیت فیزیکی مشاهده پذیر یک اپراتور خطی و هرمیتیک وابسته است.

۳. مجموع مشتقهای جزئی مرتبه دوم موقعیت را لاپلاسی می‌گویند.

۴. همواره ضرب دو اپراتور \hat{A} و \hat{B} جایه جایی پذیر هستند.

۳- کدام عبارت صحیح است؟

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_z] = 0 \quad .4$$

$$[\hat{L}_y, \hat{L}_z] = 0 \quad .3$$

$$[\hat{L}^2, \hat{H}] \neq 0 \quad .2$$

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_z] = 0 \quad .1$$

۴- حاصل اپراتور \hat{L}_z بر روی تابع $\psi_m^l(\varphi)$ کدام عبارت است؟

$$l\psi_m^l(\varphi) \quad .4$$

$$l\hbar\psi_m^l(\varphi) \quad .3$$

$$\hbar\psi_m^l(\varphi) \quad .2$$

$$m\hbar\psi_m^l(\varphi) \quad .1$$

۵- اپراتور \hat{L}_z در مختصات قطبی،

۱. فقط وابسته به φ است.

۲. به r و θ و φ وابسته است.

۳. فقط وابسته به θ است.

۴. فقط وابسته به r است.

۶- تعداد حالت‌های همتراز در چرخنده صلب سه بعدی برابر است با:

$$n^2 \quad .4$$

$$j(j+1) \quad .3$$

$$2j+1 \quad .2$$

$$2j \quad .1$$

۷- در اتم‌های تک الکترونی، انرژی از رابطه به دست می‌آید.

$$E_n = -\frac{13.6}{n^2} eV \quad .4$$

$$E_n = -\frac{2\pi^2 \mu e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 n^2 h^2} \quad .3$$

$$E_n = -\frac{2\pi^2 \mu Z^2 e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 n^2 h^2} \quad .2$$

$$E_n = +\frac{2\pi^2 \mu Z^2 e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 n^2 h^2} \quad .1$$

۸- در اتم‌های تک الکترونی، در هر تراز انرژی به شماره n ، تعداد حالت همتراز وجود دارد.

$$2l+1 \quad .4$$

$$n^2 \quad .3$$

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

$$2n+1 \quad .1$$

۹- کدام عبارت صحیح است؟

$$\hat{S}_z \beta(\sigma) = -\frac{1}{2} \hbar \beta(\sigma) \quad .4$$

$$\hat{S}_z \alpha(\sigma) = +\hbar \alpha(\sigma) \quad .3$$

$$\hat{S}_z \beta(\sigma) = +\frac{1}{2} \hbar \beta(\sigma) \quad .2$$

$$\hat{S}_z \alpha(\sigma) = -\frac{1}{2} \hbar \alpha(\sigma) \quad .1$$

سری سوال: ۱ بک

زمان آزمون (دقیقه): قسمتی: ۶۰ تشریحی: ۶۰

تعداد سوالات: قسمتی: ۲۰ تشریحی: ۵

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

روش تحقیلی/گد درس: شیمی گرایش محض، شیمی (کاربردی)، شیمی (شیمی فیزیک) ۱۱۱۴۰۲۷

۱۰- در کدام عبارت تقریب اسلیتر بیان شده است؟

۴. هیچکدام

$$Z^+ = \frac{Ze^2}{r} \cdot ۳$$

$$Z^+ = \frac{Ze}{r} \cdot ۲$$

$$Z^+ = Z - b \cdot ۱$$

۱۱- کدام اپراتور عمل تعویض مختصات ذره i و j را درتابع موج بر عهده دارد؟

۴. اندازه حرکت زاویه ای

۳. پرموتاسیون

۲. پاریته

۱. هامیلتونین

۱۲- کدام عبارت صحیح است؟

۲. الکترون فرمیون است و نوترون بوزون است.

۱. الکترون فرمیون است و پروتون و نوترون بوزون هستند.

۴. فوتون، بوزون است و پروتون فرمیون است

۳. هسته هلیم و پروتون فرمیون هستند.

۱۳- تابع موجی یک منظومه چند الکترونی نسبت به جایه جایی هر دو الکترون از الکترونها ضد متقارن است. این حکم بیان اصل است.

۴. هوند

۳. فرانک کاندون

۲. پاولی

۱. کوپمان

۱۴- کدام عبارت در مورد نظریه هوکل صحیح نیست؟

۱. نظریه هوکل روش تقریبی نیمه تجربی مشتق از نظریه MO-LCAO است.

۲. نظریه هوکل برای توصیف وضع الکترونها ψ در ملکولهای یک در میان ساده و دوگانه اند کاربرد دارد.

۳. انتگرالهای $\int \psi_i \psi_j d\tau$ انتگرالهای کولونی نام دارند.

۴. انتگرالهای $\int \hat{H} \psi_i \psi_j d\tau$ انتگرالهای تبادلی نام دارند.

۱۵- در نظریه اربیتالهای مولکولی هوکل برای بنزن، سهم الکترونها π در انرژی پیوند برابر است با:

۴. 8α

۳. 6α

۲. 6β

۱. 8β

۱۶- مطابق اصل فرانک کوندون محتملترین جهشها آنهایی است که:

۲. انرژی جنبشی ملکول افزایش یابد.

۱. فاصله بین هسته ها افزایش یابد.

۴. فاصله بین هسته ها تغییری نکند.

۳. انرژی پتانسیل ملکول کاهش یابد.

۱۷- تکانه زاویه ای ذره ای با اندازه حرکت خطی \dot{r} و بردار موقعیت \vec{r} برابر است با:

$$\dot{L} = \frac{\dot{p}}{r} \cdot ۴$$

$$\dot{L} = \frac{2\dot{r}}{\dot{p}} \cdot ۳$$

$$\dot{L} = \dot{r} \times \dot{p} \cdot ۲$$

$$\dot{L} = \dot{r} \cdot \dot{p} \cdot ۱$$

سری سوال: ۱ بک

زمان آزمون (دقیقه): قسمتی: ۶۰ تشریحی: ۶۰

تعداد سوالات: قسمتی: ۲۰ تشریحی: ۵

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

روش تحقیلی/گد درس: شیمی گرایش محض، شیمی (کاربردی)، شیمی (شیمی فیزیک) ۱۱۱۴۰۲۷

۱۸- در مدل ذره در جعبه مکعبی دو مین تراز انرژی، چند حالت همتراز دارد؟

۱. ۴

۳. ۳

۲. ۲

۶. ۱

۱۹- کدام گزینه دانسیته احتمال را نشان می دهد؟

۳. ۹۱. ۴

$|\psi|^2$

ψ^2

$\psi\psi$

۲۰- تک حالته بودن ترازهای انرژی از ویژگیهای کدام سیستم است؟

۱. ذره در جعبه مکعبی

۲. چرخنده صلب

۳. چرخنده صلب سه بعدی

۴. نوسانگر هارمونیک

سوالات تشریحی

۱. نمره ۱۰۰

۱- آیا اپراتورهای \hat{D}_x و \hat{x} جایه جا شدنی هستند؟ تابع فرضی $f(x) = a \sin \alpha x$ را در نظر بگیرید.

۲. نمره ۱۰۰

۲- توابع موج نرمال ذره در جعبه یک بعدی عبارتند از:
 $\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin \frac{n\pi x}{l}$
 ثابت کنید $\psi_1(x)$ و $\psi_2(x)$ متعامدند.

۳. نمره ۱۰۰

۳- تابع موج سطح دوم نوسانگر هارمونیک عبارتست از:

$$\psi_2 = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \sqrt{\frac{1}{8}} (4\alpha x^2 - 2) e^{-\frac{\alpha x^2}{2}}$$

الف) انرژی سطح دوم نوسانگر هارمونیک را محاسبه کنید.

ب) مقدار قابل انتظار تکانه برای این سطح را محاسبه کنید.

ج) مقدار قابل انتظار مکان را برای این سطح محاسبه کنید.

۴. نمره ۱۰۰

۴- فرکانس اولین خط سری بالمردر سری های طیفی اتم هیدروژن را محاسبه کنید. انرژیهای تراز دوم و سوم به

$$h = 6.6 \times 10^{-34} J.s$$

ترتیب برابرند با $1/51$ و $3/39$ الکترون ولت.

۵. نمره ۱۰۰

۵- دترمینان اسلیتر برای اتم N الکترونی را بنویسید.

نمبر سوان	واسخ صحبي	وضعیت كلبد	عادي
1	ج		عادي
2	د		عادي
3	الف		عادي
4	الف		عادي
5	ب		عادي
6	ب		عادي
7	ب		عادي
8	ج		عادي
9	د		عادي
10	الف		عادي
11	ج		عادي
12	د		عادي
13	ب		عادي
14	ج		عادي
15	الف		عادي
16	د		عادي
17	ب		عادي
18	ج		عادي
19	د		عادي
20	د		عادي

سری سوال: یک ۱

زمان آزمون (دقیقه): قسمتی: ۶۰ تشریحی: ۵۰

تعداد سوالات: قسمتی: ۲۰ تشریحی: ۵

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

روش تحقیلی/گد درس: شیمی گرایش محض ، شیمی (کاربردی) ، شیمی (شیمی فیزیک) ۱۱۱۴۰۲۷

استفاده از ماشین حساب مهندسی مجاز است

-۱ - کدام گزینه زیر نمی تواند شامل بخش موهومن باشد؟

۱. تابع موج سیستم

۲. دامنه احتمال

۳. اپراتور مکانیک کوانتومی

-۲ - حاصل تأثیر اپراتور $\hat{x}\hat{D}_x$ بر تابع x^2 کدام است؟

$2x^4$

$2x^2$

$3x^2$

$3x^3$

-۳ - کدام اپراتور زیر خطی نیست؟

\hat{x}^4

\hat{D}_x^3

\hat{D}_x^2

$\sqrt{\cdot}$

-۴ - کدام گزینه زیر معادله شرودینگر تابع زمان است؟

$\hat{H}\Psi(t) = i\hbar \frac{\partial\Psi}{\partial t}$

$\hat{H}\Psi(x,t) = i\hbar \frac{\partial\Psi}{\partial x}$

$\hat{H}\Psi(t) = i\hbar \frac{\partial\Psi}{\partial x}$

$\hat{H}\Psi(x,t) = i\hbar \frac{\partial\Psi}{\partial t}$

-۵ - به ازای هر مقدار از انرژی (E) ذره ای به جرم m مقدار میانگین اندازه حرکت در راستای x (P_x) چقدر است؟

$\sqrt{2E/m}$

$\sqrt{2m/E}$

۰

$\sqrt{2mE}$

-۶ - اولین حالت کوانتومی در مثال ذره در جعبه یک بعدی مربوط به کدام گزینه زیر است؟

$n = \frac{3}{2}$

$n = \frac{1}{2}$

$n = 1$

$n = 0$

-۷ - در مثال ذره در جعبه یک بعدی نمودار تغییرات $\Psi^2(x)$ بر حسب x در حالت n = 2 چند گره دارد؟

۳

۲

۱

۰

سری سوال: ۱ بک

زمان آزمون (دقیقه): قستی: ۶۰ تشریحی: ۶۰

تعداد سوالات: قستی: ۲۰ تشریحی: ۵

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

روش تحقیلی/گد درس: شیمی گرایش محض ، شیمی (کاربردی) ، شیمی (شیمی فیزیک) ۱۱۱۴۰۲۷

-۸- توابع ویژه قابل قبول اپراتور هامیلتونی مجموعه ای را تشکیل می دهند.

۴. پیوسته

۳. نرمال

۲. متعامد

۱. نرمال شده و متعامد

-۹- از ضرب بردار تکانه خطی (\vec{P}) در بردار موضعی ذره (\vec{r}) حاصل می شود.

۴. اپراتور انرژی پتانسیل

۳. اپراتور انرژی جنبشی

۲. هامیلتونی

۱. بردار تکانه زاویه ای

-۱۰- تعیین همزمان مقادیر انرژی و امکانپذیر است.

۲. مؤلفه X تکانه زاویه ای

۱. تکانه زاویه ای

۴. هیچکدام

۳. مؤلفه y تکانه زاویه ای

-۱۱- یک مولکول دو اتمی را در نظر بگیرید. اگر فاصله بین دو اتم $0.113 \times 10^{-9} m$ و جرم کاسته آنها

$1.14 \times 10^{-26} kg$ باشد، ممکن اینترسی این مولکول چقدر است؟

$7.55 \times 10^{-23} kgm^2$

$12.8 \times 10^{-35} kgm^2$

$26.3 \times 10^{-47} kgm^2$

$14.5 \times 10^{-47} kgm^2$

-۱۲- اتم هیدروژن مرکب از هسته ای به جرم m_1 و با بار الکتریکی Ze و الکترونی به جرم m_2 و بار الکتریکی e است، که در فاصله r از هم قرار دارند. کدام گزینه زیر نیروی جاذبه الکتروستاتیکی در اتم هیدروژن را نشان می دهد؟

$$V(r) = -K \frac{Ze^2}{m_1 m_2 r^2} \quad .2$$

$$V(r) = -K \frac{Zm_1 m_2}{re^2} \quad .1$$

$$V(r) = -K \frac{Ze^2}{r^2 e^2} \quad .4$$

$$V(r) = -K \frac{Ze^2}{r} \quad .3$$

-۱۳- در اتم تک الکترونی در هر تراز انرژی به شماره تراز n ، چه تعداد حالت همتراز پیش بینی می شود؟

n^2

$2n$

n^2

2^n

سری سوال: ۱ بک

زمان آزمون (دقیقه): قستی: ۶۰ تشریعی: ۶۰

تعداد سوالات: قستی: ۲۰ تشریعی: ۵

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

روش تحقیلی/گد درس: شیمی گرایش محض ، شیمی (کاربردی) ، شیمی (شیمی فیزیک) ۱۱۱۴۰۲۷

۱۴- کدام نوع اوربیتال عدد کوانتومی سمعتی (۱) برابر ۱ دارد؟

f . ۴

d . ۳

p . ۲

s . ۱

۱۵- بر اساس کدام اصل زیر، هیچ دو الکترون از الکترون‌های اتم نمی‌توان یافت که در یک مجموعه از مقادیر چهار عدد

m_s ، m_l ، l ، n کوانتومی مشترک باشند.

۴. اصل پاولی

۳. اصل هوند

۲. اصل آفبا

۱. اصل زیمان

۱۶- تابع موجی یک منظومه چند الکترونی نسبت به جابجایی هر دو الکترون از الکترونها است.

۴. جابجاپذیر

۳. نامتقارن

۲. ضدمتقارن

۱. متقارن

۱۷- جمله اختلال آور در هامیلتونی اتم هلیم کدام است؟

$$H = -\frac{1}{2}(\nabla_1^2 + \nabla_2^2) - \frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \frac{1}{r_{1,2}}$$

$$-\frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2}$$

$$-\frac{1}{2}(\nabla_1^2 + \nabla_2^2)$$

$$\frac{1}{r_{1,2}}$$

$$-\frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \frac{1}{r_{1,2}}$$

۱۸- کدام گزینه زیر در مورد نظریه هوکل صحیح نیست؟

۱. نظریه هوکل یک روش تقریبی است.

۲. نظریه هوکل یک روش نظری است.

۳. نظریه هوکل از نظریه MO-LCAO مشتق شده است.

۴. نظریه هوکل برای توصیف وضعیت الکترون‌های π به کار می‌رود.

۱۹- اوربیتال‌های مولکولی تک الکترونی مناسب، در روش هوکل، با چه روشی تعیین می‌شوند؟

۴. محاسبه دقیق

۳. تکرار

۲. تغییر پارامترها

۱. اختلال

سری سوال: ۱ بک

زمان آزمون (دقیقه): قسمتی: ۶۰ تشریحی: ۶۰

تعداد سوالات: قسمتی: ۲۰ تشریحی: ۵

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

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

-۲۰

در روش هوکل مقدار انتگرال های همپوشانی S_{ij} چقدر است؟

۰ . ۱ . ۲ . ۳ . ۴ .

۰ . ۱ . ۲ .

۰ . ۱ .

سوالات تشریحی

۱۰۰ نمره

($\hat{D}_x = \frac{\partial}{\partial x}$) مقدار ویژه اپراتور \hat{D}_x^2 را وقتی که بر تابع $\sin ax$ اثر می کند، به دست آورید.

۱۰۰ نمره

-۲- انرژی و درجه همترازی ترازهای اول تا چهارم در مثال ذرہ در جعبه مکعبی را معین کنید.

۱۰۰ نمره

-۳- برای یک چرخنده صلب سه بعدی با ممان اینرسی I، کمیتهای زیر را در تراز $J=1$ به دست آورید.

الف) انرژی چرخشی

ب) تکانه زاویه ای

ج) مؤلفه Z تکانه زاویه ای

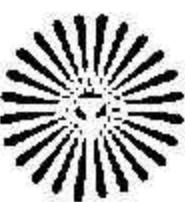
۱۰۰ نمره

-۴- دترمینان اسلیتر را برای اتم دو الکترونی هلیم مشخص کنید. (اسپین الکترون را نیز در توابع موج به حساب بیاورید).

۱۰۰ نمره

-۵- انرژی الکترونهای مولکول اتیلن و بنزن به ترتیب 8β و 2β است. انرژی عدم استقرار را در مولکول بنزن به دست آورید.

رقم سوار	واسطه صحيحة	وضعية الكلبة	عادي
1	د		عادي
2	ج		عادي
3	الف		عادي
4	ج		عادي
5	الف		عادي
6	ب		عادي
7	ب		عادي
8	الف		عادي
9	الف		عادي
10	الف		عادي
11	ج		عادي
12	ج		عادي
13	د		عادي
14	ب		عادي
15	د		عادي
16	ب		عادي
17	د		عادي
18	ب		عادي
19	ب		عادي
20	الف		عادي



سری سوال: یک ۱

زمان آزمون (دقیقه): قسمتی: ۶۰ تشریحی: ۶۰

تعداد سوالات: قسمتی: ۲۰ تشریحی: ۵

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

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

استفاده از ماشین حساب ساده، ماشین حساب مهندسی مجاز است

۱- برای سیستمی با تابع موج Ψ ، دانسیته احتمال کدام است؟

$$\sqrt{\Psi\Psi} \quad .4$$

$$\Psi\Psi \quad .3$$

$$\Psi^*\Psi^* \quad .2$$

$$\Psi\Psi^* \quad .1$$

۲- عبارت زیر کدام شرط تابع موج را نشان می‌دهد؟

$$\int_V \left| \vec{\Psi}(r, t) \right|^2 dV = 1$$

۴. نرمالیزه بودن

۳. ارتونرمال بودن

۲. ارتونرمال بودن

۱. حقیقی بودن

۳- دو شرط لازم برای اپراتور وابسته به هر کمیت فیزیکی مشاهده پذیر کدامند؟

۲. خطی و هرمیتیک بودن

۱. خطی و نرمال بودن

۴. خطی و ارتونرمال بودن

۳. نرمال و ارتونرمال بودن

۴- تابع $\sin ax$ تابع ویژه کدام اپراتور زیر نیست؟

$$\hat{x}^2 \quad .4$$

$$\hat{x} \quad .3$$

$$\hat{D}_x^2 \quad .2$$

$$\hat{D}_x \quad .1$$

۵- کدام گزینه زیر قسمت زمانی تابع موج است؟

$$\phi(t) = \frac{iEt}{\hbar} \quad .4$$

$$\phi(t) = e^{-iEt/\hbar} \quad .3$$

$$\phi(t) = e^{iEt/\hbar} \quad .2$$

$$\phi(t) = \frac{-iEt}{\hbar} \quad .1$$

۶- مقدار میانگین مؤلفه x تکانه خطی (E) چه رابطه‌ای با جرم (m) و انرژی (P_x) آن دارد؟

$$\langle p_x \rangle = 1 \quad .2$$

$$\langle p_x \rangle = \sqrt{\frac{1}{2}mE} \quad .1$$

$$\langle p_x \rangle = \sqrt{2mE} \quad .4$$

$$\langle p_x \rangle = 0 \quad .3$$

سری سوال: ۱ بک

زمان آزمون (دقیقه): قستی: ۶۰ تشریحی: ۶۰

تعداد سوالات: قستی: ۲۰ تشریحی: ۵

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

روش تحقیلی/گد درس: شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی (کاربردی)، شیمی گرایش محض ۱۱۱۴۰۲۷

-۷- کدام گزینه زیر عدم قطعیت زمان و انرژی را نشان می دهد؟

$$\frac{\Delta E}{\Delta t} = 0$$

$$\Delta t \cdot \Delta E \leq \hbar$$

$$\Delta t \cdot \Delta E \geq \hbar$$

$$\Delta t \cdot \Delta E = 0$$

-۸- در مدل ذره در جعبه مکعبی چند حالت همتراز به سومین تراز انرژی وابسته است؟

۱۲ .۴

۳ .۳

۶ .۲

۱ .۱

-۹- در مدل ذره در جعبه یک بعدی به طول L ، انرژی ذره ای به جرم m در تراز n از چه رابطه ای به دست می آید؟

$$E_n = \frac{n^2 \hbar^2}{2mL^2}$$

$$E_n = \frac{2mL^2}{\pi^2 n^2 \hbar^2}$$

$$E_n = \frac{2\pi L^2}{m^2 n^2 \hbar^2}$$

$$E_n = \frac{\pi^2 n^2 \hbar^2}{2mL^2}$$

-۱۰- تکانه زاویه ای ذره ای با تکانه خطی \vec{r} نسبت به مبدأ و بردار موضعی \vec{p} برابر است با:

$$\vec{L} = \frac{2\vec{p}}{\pi\vec{r}}$$

$$\vec{L} = \frac{\vec{p}}{\vec{r}}$$

$$\vec{L} = \frac{\vec{r}}{\vec{p}}$$

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$$

-۱۱- کدام دو اپراتور زیر با هم جابجاپذیر نیستند؟

$$\hat{L}_x, \hat{L}_y$$

$$\hat{L}^2, \hat{L}_z$$

$$\hat{H}, \hat{L}_z$$

$$\hat{H}, \hat{L}^2$$

-۱۲- ممان اینرسی مولکولی با طول پیوند $0.113 \times 10^{-9} m$ و جرم کاسته $1.14 \times 10^{-26} kg$ چقدر است؟

$$14.5 \times 10^{-47} kgm^2$$

$$0.129 \times 10^{-35} kgm$$

$$9.91 \times 10^{15} m/kg$$

$$1.02 \times 10^{-16} kg/m$$

-۱۳- در اتم تک الکترونی در هر تراز انرژی به شماره n ، تعداد حالت همتراز پیش بینی می شود.

$$n^2$$

$$2n^2$$

$$2n$$

$$\frac{n}{2}$$

سری سوال: ۱ بک

زمان آزمون (دقیقه): قستی: ۶۰ تشریحی: ۵۰

تعداد سوالات: قستی: ۲۰ تشریحی: ۵

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

روش تحقیلی/گد درس: شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی (کاربردی)، شیمی گرایش محض ۱۱۱۴۰۲۷

-۱۴ کدام عبارت زیر تابع توزیع شعاعی نامیده می شود؟ (بخش شعاعی تابع موج است.)

$$r^2 R^2(r) \quad .۴ \quad \frac{4}{3} \pi R^2(r) \quad .۳ \quad \frac{4}{3} \pi R^3(r) \quad .۲ \quad 4\pi r^2 R^2(r) \quad .۱$$

-۱۵ چه رابطه ای بین تکانه زاویه ای الکترون (\vec{L}) و ممان مغناطیسی حاصل از دوران آن ذره به دور هسته ($\vec{\mu}$) وجود دارد؟

$$\vec{\mu} = \frac{1}{2me} \vec{L} \quad .۴ \quad \vec{\mu} = -\frac{e}{2me} \vec{L} \quad .۳ \quad \vec{\mu} = -\frac{2m}{e} \vec{L} \quad .۲ \quad \vec{\mu} = -2me \vec{L} \quad .۱$$

-۱۶ میانگین انرژی پتانسیل اختلال در حالت ψ_i^0 ، در تقریب اول (انرژی اختلال مرتبه اول) از چه رابطه ای به دست می آید؟ (W هامیلتونی اختلال است).

$$E_i^{(1)} = \frac{W}{E_1 - E_2} \quad .۲ \quad E_i^{(1)} = \int_i \psi_i^{0*} \hat{W}^2 \psi_i^0 d\tau \quad .۱$$

$$E_i^{(1)} = \frac{W}{E_2 - E_1} \quad .۴ \quad E_i^{(1)} = \int_i \psi_i^{0*} \hat{W} \psi_i^0 d\tau \quad .۳$$

-۱۷ همه ذرات با اسپین صفر یا عدد صحیح تابع موجی دارند.

۱. متقارن یا نامتقارن ۲. نامتقارن ۳. ضد متقارن ۴. متقارن

-۱۸ هامیلتونی اختلال در مساله اتم هلیم کدام است؟ (۱ و ۲ شماره الکترونهای موجود در اتم هلیم است).

$$-\frac{1}{2} (\nabla_1^2 + \nabla_2^2) \quad .۲ \quad -\frac{1}{2} (\nabla_1^2 + \nabla_2^2) - \frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} \quad .۱$$

$$\frac{1}{r_{1,2}} \quad .۴ \quad -\frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} \quad .۳$$

-۱۹ نظریه هوکل برای توصیف الکترونهای کدام مولکول زیر کارایی ندارد؟

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

سری سوال: ۱ بک

زمان آزمون (دقیقه): قسمتی: ۶۰ تشریحی: ۵۰

تعداد سوالات: قسمتی: ۲۰ تشریحی: ۵

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

روش تحقیلی / کد درس: شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی (کاربردی)، شیمی گرایش محض ۱۱۱۴۰۲۷

- ۲۰ در روش هوکل انتگرالهای تبادلی H_{ij} برای دو اتم غیرهمسايه چند در نظر گرفته می شود؟
۱. ۲
۴. برابر با انتگرال کولونی
۰. ۱
۲. ۳

سوالات تشریحی

۱.۴۰

مجموع دو اپراتور $\hat{x} + \hat{D}_x$ را بر روی تابع e^{ax} اثر دهید. (\hat{x} عمل ضرب در متغیر x را نشان می دهد و \hat{D}_x معادل $\frac{\partial}{\partial x}$ است.)

۱.۴۰

-۲ مولکول NO را یک چرخنده صلب در نظر بگیرید که جرم کاسته و ممان اینرسی آن نسبت به مرکز جرم به ترتیب برابرند با $16.5 \times 10^{-47} \text{ kgm}^2$ و $1.24 \times 10^{-26} \text{ kg}$. اولین انرژی غیرصفرا آن یعنی تزار انرژی $m=1$ را محاسبه کنید.

$$h = 6.625 \times 10^{-34} \text{ Js}$$

۱.۴۰

-۳ برای یک چرخنده صلب سه بعدی که ممان اینرسی آن I است، انرژی و تعداد حالتها همتراز مربوط به پنج تراز اول انرژی را مشخص کنید.

۱.۴۰

-۴ فرکانس اولین خط سری بالمر (جهش الکترون از حالت $n=3$ به تراز $n=2$) را بدست آورید.

$$E_2 = 1.51 \text{ eV}$$

$$E_3 = 3.39 \text{ eV}$$

$$1 \text{ eV} = 1.6 \times 10^{-19} \text{ J}$$

$$h = 6.625 \times 10^{-34} \text{ Js}$$

۱.۴۰

-۵ دترمینان اسلیتر را برای اتم دو الکترونی هلیم بنویسید.

نمره سؤال	ماسخ صحيح	وضعیت کلبد	عادي
۱	الف		عادي
۲	د		عادي
۳	ب		عادي
۴	الف		عادي
۵	ح		عادي
۶	د		عادي
۷	ب		عادي
۸	ح		عادي
۹	ح		عادي
۱۰	الف		عادي
۱۱	د		عادي
۱۲	ب		عادي
۱۳	د		عادي
۱۴	الف		عادي
۱۵	ح		عادي
۱۶	ح		عادي
۱۷	د		عادي
۱۸	د		عادي
۱۹	ح		عادي
۲۰	الف		عادي

سری سوال: یک ۱

زمان آزمون (دقیقه): قستی: ۶۰ تشریحی: ۶۰

تعداد سوالات: قستی: ۲۰ تشریحی: ۵

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

روش تحقیلی/گد درس: شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی (کاربردی)، شیمی گرایش محض ۱۱۱۴۰۲۷

استفاده از ماشین حساب ساده مجاز است

۱- کدام گزینه زیر از شرایط لازم برای تابع موج قابل قبول برای سیستمهای کوانتومی نیست؟

۴. محدود بودن

۳. تک مقدار بودن

۲. پیوسته بودن

۱. نرمال بودن

۲- کدام اپراتور زیر خطی نیست؟

\hat{D}_x^2

\hat{D}_x

\hat{x}

$\sqrt{ }$

۳- به هر کمیت فیزیکی مشاهده پذیر یک اپراتور وابسته است.

۴. جابجاپذیر

۳. خطی و هرمیتیک

۲. هرمیتیک

۱. خطی

۴- مقدار ویژه‌ی تابع e^{ax} وقتی که اپراتور \hat{D}_x بر آن اثر می‌کند کدام است؟

e^x

e^a

x

a

۵- دانسیته احتمال در حالت‌های سیستم در هر نقطه از فضا مستقل از زمان است.

۴. منزوی

۳. موهومی

۲. ایستا

۱. حقیقی

۶- انرژی دومین تراز انرژی مربوط به ذره‌ای به جرم m در جعبه‌ای به طول L چقدر است؟

$\frac{4\pi^2\hbar^2}{mL^2}$

$\frac{2\pi^2\hbar^2}{mL^2}$

$\frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}$

$\frac{\pi^2\hbar^2}{mL^2}$

۷- کدام رابطه زیر عدم قطعیت در اندازه گیری زمان و انرژی را به درستی نشان می‌دهد؟

$\Delta t \Delta E \geq \hbar$

$\Delta t \Delta E \leq \hbar$

$\Delta t \Delta E \geq \frac{2}{\hbar}$

$\Delta t \Delta E \leq \frac{2}{\hbar}$

۸- چرخنده صلب در صفحه به ازای هر یک از مقادیر کوانتومی انرژی چند حالت همتراز دارد؟

۴. چهار

۳. سه

۲. دو

۱. یک

۹- اپراتور \hat{L}_x (تکانه زاویه‌ای در راستای x) با کدام اپراتور زیر جابجاپذیر است؟

\hat{D}_y

\hat{L}^2

\hat{L}_z

\hat{L}_y

۱۰- در مورد چرخنده صلب در فضای سه بعدی تراز انرژی J ام سیستم دارای درجه همترازی است.

$J+2$

$2(J+1)$

$2J+1$

$2J$

سری سوال: ۱ بک

زمان آزمون (دقیقه): قستی: ۶۰ تشریحی: ۶۰

تعداد سوالات: قستی: ۲۰ تشریحی: ۵

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

روش تحقیلی/گد درس: شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی (کاربردی)، شیمی گرایش محض ۱۱۱۴۰۲۷

-۱۱ در مختصات قطبی اپراتور \hat{L} معادل کدام گزینه زیر است؟

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi} .4$$

$$\frac{\hbar}{i} \cos\phi \frac{\partial}{\partial \phi} .3$$

$$\sin\phi \frac{\partial}{\partial \phi} .2$$

$$\cos\phi \frac{\partial}{\partial \phi} .1$$

-۱۲ انرژی اتم تک الکترونی وابسته به کدام متغیر یا متغیرهای زیر است؟ (n و m به ترتیب اعداد کوانتومی اصلی و سمتی و مغناطیسی هستند).

$$n .4$$

$$1 \text{ or } n .3$$

$$m \text{ or } n .2$$

$$m \text{ or } 1 .1$$

-۱۳ بزرگی تکانه زاویه اسپین از کدام رابطه زیر به دست می آید؟ (عدد کوانتومی اسپین است).

$$2s(s+1)\hbar .4$$

$$\sqrt{2(s+1)}\hbar .3$$

$$s(s+1)\hbar .2$$

$$\sqrt{s(s+1)}\hbar .1$$

-۱۴ کدام رابطه زیر بین تکانه اوربیتالی (\vec{l}) تکانه اسپین (\vec{s}) و تکانه کل (\vec{J}) صادق است؟

$$\vec{J} = \vec{l} + \vec{s} .4$$

$$\vec{J} = \vec{l} - \vec{s} .3$$

$$j = \sqrt{\vec{l} + \vec{s}} .2$$

$$\vec{J} = \sqrt{\vec{l} - \vec{s}} .1$$

-۱۵ طبق قضیه تغییر اگر ψ_0 تابع ویژه و E_0 کوچکترین مقدار ویژه هامیلتونی یک سیستم باشد آنگاه به ازای هر تابع Φ

غیر از ψ_0 خواهیم داشت:

$$\int \Phi^* \hat{H} \psi_0 d\tau \leq E_0 .4$$

$$\int \Phi^* \hat{H} \Phi d\tau \geq E_0 .3$$

$$\int \Phi^* \hat{H} \psi_0 d\tau \geq E_0 .2$$

$$\int \Phi^* \hat{H} \Phi d\tau \leq E_0 .1$$

-۱۶ پتانسیل اختلال در هامیلتونی اتم هلیم کدام عبارت زیر است؟

$$\frac{-1}{2} \nabla^2 + \frac{Z}{r} .4$$

$$\frac{1}{r_{1,2}} .3$$

$$\frac{-1}{2} \nabla^2 .2$$

$$\frac{Z}{r} .1$$

-۱۷ تابع موجی یک منظومه چند الکترونی نسبت به جایجایی هر دو الکترون از الکترونها است.

۴. متقارن یا نامتقارن

۳. ضدمتقارن

۲. نامتقارن

۱. متقارن

-۱۸ در دترمینان اسلیتر برای یک منظومه N الکترونی ضریب نرمال شدگی کدام است؟

$$(N!)^{1/2} .4$$

$$N! .3$$

$$\frac{1}{N!} .2$$

$$\frac{1}{(N!)^{1/2}} .1$$

-۱۹ روش هوکل یک روش تقریبی است.

۴. محاسباتی تجربی

۳. نظری

۲. نیمه تجربی

۱. تجربی

سری سوال: ۱ بک

زمان آزمون (دقیقه): قسمتی: ۶۰ تشریحی: ۶۰

تعداد سوالات: قسمتی: ۲۰ تشریحی: ۵

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

روش تحقیلی/گد درس: شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی (کاربردی)، شیمی گرایش محض ۱۱۱۴۰۲۷

-۲۰- مقدار انتگرالهای همپوشانی دو اتم همسایه در روش هوکل چقدر در نظر گرفته می شود؟

$$\int \Phi_i^* \hat{H} \Phi_j d\tau$$

$$\int \Phi^* \hat{H} \Phi d\tau$$

۱ . ۲

۰ . ۱

سوالات تشریحی

۱.۴۰ نمره

-۱- اپراتور $\hat{x}\hat{D}_x$ را بر روی دوتابع $\sin x$ و x^2 اثر دهید و معین کنید کدامیک تابع ویژه این اپراتور است.
 $(\hat{D}_x = \frac{\partial}{\partial x})$

۱.۴۰ نمره

-۲- مولکول NO را یک چرخنده صلب در نظر بگیرید. ممان اینرسی این مولکول $16.5 \times 10^{-47} \text{ kg.m}^2$ است. اولین انرژی غیرصفر این مولکول چقدر است؟ ($h = 6.625 \times 10^{-34} \text{ J.s}$)

۱.۴۰ نمره

-۳- در مورد مفهوم فیزیکی جابجا پذیری اپراتورها توضیح دهید.

۱.۴۰ نمره

-۴- با توجه به اینکه انرژی تراز انرژی پایه اتم هیدروژن $21.7 \times 10^{-19} \text{ J}$ است فرکانس و طول موج جهش الکترونی از تراز $n=3$ به $n=2$ را بدست آورید.

$$h = 6.625 \times 10^{-34} \text{ J.s}$$

$$c = 3 \times 10^8 \text{ m/s}$$

۱.۴۰ نمره

-۵- انرژی الکترونهای π در بنزن برابر 8β و انرژی الکترونهای π در مولکول اتیلن 2β است. انرژی عدم استقرار در بنزن را محاسبه کنید. (β یک مقدار ثابت است).

نمبر سوان	ياسخ صحيح	وصعب الكلب	عادي
1	الف		عادي
2	الف		عادي
3	ج		عادي
4	الف		عادي
5	ب		عادي
6	ج		عادي
7	د		عادي
8	ب		عادي
9	ج		عادي
10	ب		عادي
11	د		عادي
12	د		عادي
13	الف		عادي
14	د		عادي
15	ج		عادي
16	ج		عادي
17	ج		عادي
18	الف		عادي
19	ب		عادي
20	الف		عادي

سری سوال: یک ۱

زمان آزمون (دقیقه): قسمتی: ۶۰ تشریحی: ۵۰

تعداد سوالات: قسمتی: ۲۰ تشریحی: ۵

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

روش تحقیلی/گد درس: شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی (کاربردی)، شیمی گرایش محض ۱۱۱۴۰۲۷

استفاده از ماشین حساب ساده مجاز است

۱- دامنه احتمال با کدام تابع زیر معین می شود؟

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \quad .4$$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial x} \quad .3$$

$$|\Psi|^2 \quad .2$$

$$\Psi \quad .1$$

۲- اپراتور انرژی جنبشی کدام است؟

$$T = \frac{\hbar^2}{2m^2} \nabla^2 \quad .2$$

$$T = -\frac{\hbar^2}{2im} \nabla^2 \quad .1$$

$$T = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \quad .4$$

$$T = -\frac{\hbar}{2m^2} \nabla^2 \quad .3$$

۳- فرم عمومی فاکتور زمانی برای حالت‌های ایستا کدام است؟

$$\phi(t) = \frac{iEt}{\hbar} \quad .4$$

$$\phi(t) = e^{-iEt/\hbar} \quad .3$$

$$\phi(t) = \frac{-iEt}{\hbar} \quad .2$$

$$\phi(t) = \frac{e^{-iEt}}{\hbar} \quad .1$$

-۴

مقدار قابل انتظار تکانه خطی در راستای x (p_x) کدام است؟

$$\langle p_x \rangle = \sqrt{2mE} \quad .2$$

$$\langle p_x \rangle = 0 \quad .1$$

$$\langle p_x \rangle = \hbar/2 \quad .4$$

$$\langle p_x \rangle = \hbar \quad .3$$

۵- در مثال ذره در جعبه سه بعدی مکعبی چند حالت کوانتومی هم انرژی (همتراز) به دو میان تراز انرژی مربوط می شود؟

۴. چهار

۳. سه

۲. دو

۱. یک

سری سوال: ۱ بک

زمان آزمون (دقیقه): قستی: ۶۰ تشریحی: ۵۰

تعداد سوالات: قستی: ۲۰ تشریحی: ۵

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

روش تحقیلی/گد درس: شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی (کاربردی)، شیمی گرایش محض ۱۱۱۴۰۲۷

۶- توابعی که از شرایط زیر پیروی کنند چه نامیده می‌شوند؟

$$i = j \Rightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_i^* \psi_j dv = 1$$

$$i \neq j \Rightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_i^* \psi_j dv = 0$$

۴. متعامد

۳. نرمال

۲. ارتونرمال

۱. ارتوگونال

۷- چرخنده صلب در صفحه به ازای هریک از مقادیر کوانتومی انرژی چند حالت همتراز دارد؟

۴. چهار

۳. سه

۲. دو

۱. یک

۸- اپراتور \hat{L}_z (مولفه تکانه زاویه ای در راستای Z) در کدام گزینه به درستی نشان داده شده است؟

$$\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi} \quad .4 \quad \hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} \quad .3 \quad \hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} \quad .2 \quad \hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial^2}{\partial y \partial x} \quad .1$$

۹- بین تکانه زاویه ای کل (L^2) و انرژی چرخشی (E_{rot}) یک مولکول خطی (به فرض اینکه چرخنده صلب باشد) چه رابطه ای وجود دارد؟ (I ممان اینرسی مولکول است).

$$E_{rot} = \frac{\hbar^2}{2I} L^2 \quad .4 \quad E_{rot} = \frac{2I}{L^2} \quad .3 \quad E_{rot} = \frac{L^2}{2I} \quad .2 \quad E_{rot} = 2IL^2 \quad .1$$

۱۰- برای چرخنده‌های صلب در فضای سه بعدی در تراز انرژی J چند حالت همتراز وجود دارد؟

$$2J(J+1) \quad .4 \quad J(J+1) \quad .3 \quad 2J \quad .2 \quad 2J+1 \quad .1$$

۱۱- انرژیهای مجاز الکترونی در اتمهای تک الکترونی وابسته به کدام عدد کوانتومی است؟

۲. عدد کوانتومی سمتی

۱. عدد کوانتومی اصلی

۴. عدد کوانتومی اسپین

۳. عدد کوانتومی مغناطیسی

سری سوال: ۱ بک

زمان آزمون (دقیقه): قستی: ۶۰ تشریحی: ۵۰

تعداد سوالات: قستی: ۲۰ تشریحی: ۵

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

روش تحقیلی/گد درس: شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی (کاربردی)، شیمی گرایش محض ۱۱۱۴۰۲۷

-۱۲ توابع ویژه اپراتور هامیلتونی ($\psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi)$)
(مجموعه ای تشکیل می دهند.

۱. ارتونرمال ۲. نرمال ۳. متعامد و نرمال ۴. ارتوگونال

-۱۳ کدام عبارت زیر تابع توزیع شعاعی نامیده می شود؟

$$P(r) = \frac{1}{4\pi r^2} R^2(r) \quad .۱$$

$$P(r) = \frac{4}{3}\pi r^3 R^2(r) \quad .۲$$

-۱۴ رابطه عمومی بین تکانه زاویه ای ($\vec{\mu}$) و مuman مغناطیسی (\vec{L}) کدام است؟ (جرم الکترون و e بار آن است.)

$$\vec{\mu} = -\frac{e\hbar}{m_e} \vec{L} \quad .۳$$

$$\vec{\mu} = -\frac{1}{2em_e} \vec{L} \quad .۴$$

-۱۵ قضیه بیان می کند که هرگاه کوچکترین مقدار ویژه هامیلتونی یک منظومه ψ_0 و تابع ویژه مربوط E_0 باشد، با

هر تابع Φ غیر از ψ_0 خواهیم داشت:

۱. اختلال ۲. تغییر پارامترها ۳. کوپیمان ۴. زیمن

-۱۶ عدد اتمی مؤثر در تقریب اسلیتر (Z^*) چه رابطه ای با عدد اتمی معمول (Z) دارد؟

$$Z^* = Z - b \quad .۱$$

$$Z^* = Z - \frac{b}{2} \quad .۲$$

$$Z^* = 2Z - b \quad .۳$$

$$Z^* = Z - 2b \quad .۴$$

-۱۷ همه ذره های با اسپین صفر یا عدد صحیح، تابع موج دارند.

۱. متقارن ۲. ضدمتقارن ۳. نامتقارن ۴. پادمتقارن

تعداد سوالات: قسمی: ۲۰ تشریحی: ۵
زمان آزمون (دقیقه): قسمی: ۶۰ تشریحی: ۵۰

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

روش تحقیلی/گد درس: شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی (کاربردی)، شیمی گرایش محض ۱۱۱۴۰۲۷

۱۸- نظریه هوکل روش تقریبی نیمه تجربی برای توصیف است.

۱. الکترونهاي سیستمهاي اشباع

۲. الکترونهاي سیستمهاي که داري يك يا تعداد بيشتری موضع راديکالی باشند.

۳. الکترونهاي π در مولکولهاي که شامل پيوندهای يك در میان ساده و دوگانه باشند.

۴. الکترونهاي سیستمهاي که اتمهاي شركت كنند در آنها فلزی يا نافلزی باشند.

۱۹- مقدار انترالهای تبادلی برای اتمهایی که همسایه نیستند، در نظریه هوکل چقدر است؟

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(\Phi_1 - \Phi_2) \quad .۱$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(\Phi_1 + \Phi_2) \quad .۲$$

۲۰- انرژی رزونانس در بوتادین معادل تفاوت انرژی کل بوتادین و است.

۱. دو پیوند اتیلنی

۲. چهار پیوند کربن-کربن یگانه

سوالات تشریحی

۱. نمره

نیسان دهید که تابع $\hat{D}_x^2 \sin ax$ تابع ویژه اپراتور D_x^2 است. همچنین مقدار ویژه آن را به دست آورید. (

$$\hat{D}_x \equiv \frac{d}{dx}^a \quad \text{عددی ثابت است.)}$$

۲. نمره

با استفاده از الگوی ذره در جعبه، انرژی ذره بنای اتمی را که شاعع هسته آن $5 \times 10^{-15} m$ و جرم آن $m = 9.1 \times 10^{-31} kg$ است محاسبه کنید.

$$h = 6.63 \times 10^{-34} m^2 kg/s$$

سری سوال: ۱ بک

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۶۰ تشریحی: ۵۰

تعداد سوالات: تستی: ۲۰ تشریحی: ۵

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

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

۱،۴۰ نمره

۳- فرکانس مربوط به اولین خط طیفی سری بالمر یک اتم هیدروژن مانند چقدر است؟

$$E_H = -21.7 \times 10^{-19} J$$

$$h = 6.63 \times 10^{-34} \text{ J.s}$$

۱،۴۰ نمره

۴- عبارتی برای هامیلتونی اتم هلیم بنویسید و پتانسیل اختلال آور را معین کنید.

۱،۴۰ نمره

۵- با استفاده از روش هوکل انرژی تراز های انرژی وتابع موج مربوط به الکترونهای π مولکول اتیلن را بدست آورید.

نمبر سوار	واسطه صحيح	وضعیت كلبد	عادي
1	الف		عادي
2	د		عادي
3	ج		عادي
4	ب		عادي
5	ح		عادي
6	ح		عادي
7	ب		عادي
8	د		عادي
9	ب		عادي
10	الف		عادي
11	الف		عادي
12	د		عادي
13	ج		عادي
14	الف		عادي
15	ب		عادي
16	د		عادي
17	الف		عادي
18	ج		عادي
19	د		عادي
20	الف		عادي

سری سوال : یک ۱

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

تعداد سوالات : تستی : ۴۰ تشریحی : ۰

عنوان درس : مبانی شیمی کوانتومی

روش تحقیلی/گد درس : شیمی گرایش محض، شیمی (کاربردی)، شیمی (شیمی فیزیک) ۱۱۱۴۰۲۷

استفاده از ماشین حساب مهندسی مجاز است

-۱ حاصل تاثیر اپراتور $\hat{D}_x \cdot \hat{x}$ روی تابع x^2 کدام است؟

x^3

$2x^3$

$3x^2$

$2x^2$

x^4

\hat{D}_x^3

\hat{D}_x^2

\sqrt{x}

-۲ کدامیک از اپراتور های زیر خطی نمی باشد؟

۲. هیچ گاه موهومی نمی باشد

-۳ مقدار ویژه یک اپراتور؟

۱. فقط حقیقی است

۴. فقط مشتب است

۳. حقیقی یا موهومی است

-۴ همواره مقدار قابل انتظار:

۲. کمیتی تجربی و موهومی است

۱. کمیتی تجربی و حقیقی است

۴. کمیتی غیر تجربی و حقیقی است

۳. کمیتی غیرتجربی و موهومی است

-۵ کدامیک از روابط زیر نشان دهنده معادله شرودینگر وابسته به زمان است؟

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d\psi}{dx} + V\psi = i\hbar \frac{\partial\psi}{\partial t} \quad ۲$$

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V\psi = i\hbar \frac{\partial\psi}{\partial t} \quad ۱$$

$$\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V\psi = i\hbar \frac{\partial\psi}{\partial t} \quad ۴$$

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V\psi = i\hbar \frac{\partial\psi}{\partial t} \quad ۳$$

-۶ را جابجاگر دو اپراتور \hat{A} و \hat{B} گویند. جابجاگر اپراتور های \hat{x} و \hat{D}_x کدام است؟

$$x^2 \frac{df}{dx} + 2xf \quad ۴$$

$$x^2 \frac{df}{dx} - 2xf \quad ۳$$

$$+ 2xf \quad ۲$$

$$- 2xf \quad ۱$$

-۷ در مدل ذره آزاد کدام گزینه همواره پیوسته است؟

$$P_x \quad ۲$$

$$E \quad ۱$$

۴. دانسیته احتمال

۳. در این مدل کوانتومی هیچ کمیتی پیوسته نیست

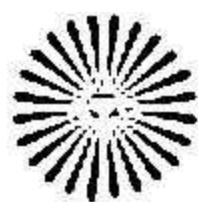
-۸ در مدل ذره در جعبه یک بعدی منظور از ثابت α^2 چیست؟

$$\frac{2mE}{\hbar} \quad ۴$$

$$\sqrt{\frac{2mE}{\hbar}} \quad ۳$$

$$\frac{2mE}{\hbar^2} \quad ۲$$

$$\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad ۱$$



سری سوال: ۱ یک

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

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

روش تحصیلی/گد درس: شیمی گوایش مخصوص، شیمی (کاربردی)، شیمی (شیمی فیزیک) ۱۱۱۴۰۲۷

-۹- طبق نظریه امواج، در مدل ذره در جعبه یک بعدی، یکی از نقاطی که در آن تابع موج به ماکریتم مقدار خود می رسد مطابق کدام گزینه است؟

۱. $x = \infty$ ۲. $x = \frac{L}{2}$ ۳. $x = L$ ۴. $x = 0$

-۱۰- چندحالتی برای ذره در جعبه سه بعدی مکعبی شکل که دارای انرژی $\frac{14h^2}{8mL^2}$ می باشد، برابر است با:

۱. ۳

۲. ۶

۳. ۲

۴. ۱

-۱۱- دو مدل ذره در جعبه یک بعدی و سه بعدی در کدام مورد با یکدیگر تفاوت چشمگیر دارند؟

۱. حدود پیوستگی و ناپیوستگی

۲. درجه چند حالتی

۳. مطالعه منظمه های ذره ای

۴. فاصله بین ترازها

-۱۲- کدامیک از گزینه های زیر نشان دهنده هرمیتیک بودن اپراتور \hat{H} است؟

$$\int (\psi_2 H) \psi_1^* dx = \int (H \psi_2)^* \psi_1 dx \quad \text{۱.} \quad \text{۲.}$$

$$\int (\psi_2 H)^* \psi_1 dx = \int (H \psi_2) \psi_1^* dx \quad \text{۱.} \quad \text{۲.}$$

$$\int (H \psi_1) \psi_2^* dx = \int (H \psi_2)^* \psi_1 dx \quad \text{۳.} \quad \text{۴.}$$

$$\int (H \psi_2)^* \psi_1 dx = \int (H \psi_1) \psi_2^* dx \quad \text{۱.} \quad \text{۲.}$$

-۱۳- بررسی نوسانگر هارمونیک از دیدگاه کلاسیکی چه تفاوتی با دیدگاه کوانتومی دارد؟

۱. انتخاب تابع پتانسیل

۲. انتخاب متغیر x

۳. انتخاب ثابت نیرو

۴. انتخاب جرم ذره

-۱۴- انرژی ارتعاشی یک نوسانگر هارمونیک ساده مطابق با کدام گزینه است؟

$$E_v = (v + \frac{1}{2})\hbar v_0 \quad \text{۱.} \quad \text{۲.} \quad \text{۳.}$$

$$E_v = (v + \frac{1}{2})\hbar v_0 \quad \text{۱.} \quad \text{۲.}$$

$$E_v = (v + \frac{1}{2})\hbar \omega_0 \quad \text{۱.}$$

-۱۵- انرژی جنبشی یک نوسانگر که دارای حرکات انتقالی و ارتعاشی است تابع چه کمیاتی است؟

۱. (x, y, z, r) ۲. (x, y, z, r) ۳. $(\dot{x}, \dot{y}, \dot{z}, r)$ ۴. $(\ddot{x}, \ddot{y}, \ddot{z}, r)$

سری سوال: ۱ یک

زمان آزمون (دقیقه): قسمی: ۱۲۰ تشریعی: ۰

تعداد سوالات: قسمی: ۴۰ تشریعی: ۰

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

روش تحصیلی/گد درس: شیمی گوایش محض، شیمی (کاربردی)، شیمی (شیمی فیزیک) ۱۱۱۴۰۲۷

۱۶- اپراتور هامیلتون در مدل چرخنده صلب به صورت کدامیک از گزینه های زیر بیان میگردد؟

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0r^2} \left(\frac{d^2}{\partial\varphi^2} \right)$$

۴. هر سه گزینه صحیح است.

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2I} \left(\frac{d^2}{\partial\varphi^2} \right)$$

۱۷- قابع موج تراز صفرم انرژی در مدل چرخنده صلب برابر کدام گزینه است؟

۲. یک

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$

۴. نیاز به محاسبه و اطلاعات بیشتر دارد

۳. صفر

۱۸- کدامیک از دو کمیت زیر به طور همزمان قابل اندازه گیری هستند؟

$$P_x, x$$

$$L^2, L_z$$

$$\lambda, x$$

$$E, t$$

-۱۹ حاصل $[\hat{x}, \hat{P}_x]$ برابر است با:

$$-i\hbar$$

۳. صفر

$$\frac{\hbar}{i}$$

$$-\frac{\hbar}{i}$$

-۲۰ حاصل $[\hat{x}^2, \hat{P}_x]$ برابر است:

۴. صفر

$$-2x \frac{\hbar}{i}$$

$$-i\hbar$$

$$-\frac{\hbar}{i}$$

۲۱- مطابق مدل نیمه کلاسیک بور، کدام گزینه در مورد انرژی صحیح میباشد؟

$$E_n \propto \frac{-n}{Z^2}$$

$$E_n \propto \frac{-Z^2}{n^2}$$

$$E_n \propto \frac{-Z^2}{n}$$

$$E_n \propto \frac{-n^2}{Z^2}$$

۲۲- تعداد حالت کوانتومی ممکن برای یک اتم برابر است با؟

$$l^2$$

$$l$$

$$n^2$$

$$n$$

۲۳- کدامیک از توابع موج زیر تابع $\Psi(\theta, \phi)$ نیستند؟

$$\Psi_{2s} \text{ و } \Psi_{2p_z}$$

$$\Psi_{2s} \text{ و } \Psi_{2p_y}$$

$$\Psi_{2s} \text{ و } \Psi_{1s}$$

$$\Psi_{2s} \text{ و } \Psi_{2p_x}$$

سری سوال: ۱ یک

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

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریعی: ۰

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

روش تحصیلی/گد درس: شیمی گوایش مخصوص، شیمی (کاربردی)، شیمی (شیمی فیزیک) ۱۱۱۴۰۲۷

-۲۴- سطوح تک دانسیته را به صورت کدام گزینه می توان نشان داد؟

$$|\psi(r)|^2 = a \quad .4$$

$$|\psi(r)|^2 = 1 \quad .3$$

$$|\psi(r, \theta, \phi)|^2 = a \quad .2$$

$$|\psi(r, \theta, \phi)|^2 = 1 \quad .1$$

-۲۵- انرژی های مجاز اتم هیدرژن با درنظر گرفتن انرژی حالت اصلی آن به عنوان یک ثابت فیزیکی برابر با کدام گزینه است؟

$$n^2 E_H \quad .4$$

$$nE_H \quad .3$$

$$\frac{E_H}{n^2} \quad .2$$

$$\frac{E_H}{n} \quad .1$$

-۲۶- حرکت تقدیمی لارمور بیانگر چه حرکتی است؟

۱. دوران دوقطبی حول راستای میدان Z

۴. هرسه گزینه صحیح است.

۲. دوران دوقطبی حول محور Z با زاویه θ

-۲۷- حاصل عبارت $[\hat{S}_x, \hat{S}_z]$ برابر با کدام گزینه است؟

$$-\left[\hat{S}_x, \hat{S}_z \right] \quad .4$$

$$+ \quad .3$$

$$-i\hbar \hat{S}_y \quad .2$$

$$i\hbar \hat{S}_y \quad .1$$

-۲۸- $|\phi(\sigma')|^2$ بیانگر چه احتمالی است؟

$$m_s = -\frac{1}{2} \quad .2$$

احتمال حالتی با

$$m_s = \frac{1}{2} \quad .1$$

احتمال حالتی با

$$m_s = 1 \quad .4$$

احتمال حالتی با

$$m_s = \pm \frac{1}{2} \quad .3$$

احتمال حالتی با

-۲۹- مقدار $E_i^{(1)}$ (مقدار انرژی در اختلال مرتبه اول) برابر با کدام گزینه است؟

$$\int \psi_i^* \epsilon w \psi_i d\tau \quad .4$$

$$\int \psi_i^{0*} \epsilon w \psi_i^0 d\tau \quad .3$$

$$\int \psi_i^{0*} w \psi_i^0 d\tau \quad .2$$

$$\int \psi_i^{1*} w \psi_i^1 d\tau \quad .1$$

-۳۰- جمله اختلال آور در مدل ذره مستقل کدام است؟

$$-\sum \frac{1}{r_{ij}} \quad .4$$

$$\sum \frac{1}{r_{ij}} \quad .3$$

$$\sum \frac{z}{r_i} \quad .2$$

$$-\sum \frac{z}{r_i} \quad .1$$

-۳۱- اربیتال ۲S:

۲. به $\sin \theta$ بستگی دارد.

۱. مستقل از زاویه ها می باشد.

۴. به $\sin \theta \cos \theta$ بستگی دارد.

۳. به $\cos \theta$ بستگی دارد.

سری سوال : ۱ یک

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

تعداد سوالات : تستی : ۴۰ تشریحی : ۰

عنوان درس : مبانی شیمی کوانتومی

روش تحصیلی/گد درس : شیمی گرایش مخصوص، شیمی (کاربردی)، شیمی (شیمی فیزیک) ۱۱۱۴۰۲۷

-۳۲ در صورتی که $\frac{h^2}{8ma^2} = P$ باشد تفاوت انرژی دو تراز متواالی انتقالی یک مولکول گاز در یک محور کدام است؟

$(2n-1) \times P$.۴

$(2n+1) \times P$.۳

$2n \times P$.۲

$n^2 \times P$.۱

-۳۳ حاصل عبارت $[\hat{L}_y, (\hat{L}_y, \hat{L}_z)]$ کدام است؟

$-i\hbar^2 L_x$.۴

$\hbar L_x$.۳

$\hbar^2 L_z$.۲

$-i\hbar L_z$.۱

-۳۴ بنابر اصل موضوع سوم، مقدار قابل انتظار مشاهده پذیر a در حالت ψ به شرط اینکه ψ نرمال باشد کدام است؟

$\langle a \rangle = \int \psi^* \hat{A} \psi$.۴

$\langle a \rangle = |\psi|^2 dv$.۳

$\langle a \rangle = \int \psi^* \hat{A} \psi dv$.۲

$\langle a \rangle = \int \psi^* \psi dv$.۱

-۳۵ برای یک حالت ایستا در جعبه یک بعدی با $\psi_n(x, t) = \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}$ خطأ در انرژی چقدر است؟

$\frac{1}{2} h$.۴

E_n .۳

۲. صفر

$\frac{1}{2} \hbar$.۱

-۳۶ فاصله بین ترازهای انرژی در کدام سیستم ثابت است؟

۲. ذره در جعبه سه بعدی

۱. ذره در جعبه یک بعدی

۴. چرخنده صلب

۳. نوسانگ هماهنگ یک بعدی

λ .۴

k .۳

V .۲

E_0 .۱

-۳۷ کدام خاصیت در ارتعاش دو مولکول $H^{37}Cl$ و $H^{35}Cl$ برابر است؟

$6 \frac{\hbar^2}{2I}$.۴

$\sqrt{6}\hbar$.۳

$12 \frac{\hbar^2}{2I}$.۲

$\sqrt{12}\hbar$.۱

-۳۸ انرژی چرخشی برای چرخنده صلب در فضای سه بعدی با عدد کوانتومی $J=2$ کدام است؟

$zp_y - yp_z$.۴

$xp_z - zp_x$.۳

$zp_x - xp_z$.۲

$yp_z - zp_y$.۱

-۳۹ مولفه تکانه زاویه ای y کدام است؟

LCAO .۴

۳. تغییر پارامترها

۲. اختلال

MO .۱

-۴۰ بهترین روش در مورد تقریب اسلیتر در خصوص بر همکنش الکترونها استفاده از چه روشی است؟

1114027 - 94-95-3

نمبر سوار	واسع صفحه	واعبت تلبد	حادي
1	ب		حادي
2	لـ		حادي
3	جـ		حادي
4	كـ		حادي
5	لـ		حادي
6	لـ		حادي
7	لـ		حادي
8	بـ		حادي
9	جـ		حادي
10	جـ		حادي
11	دـ		حادي
12	دـ		حادي
12	لـ، بـ، جـ، دـ		حادي
14	دـ		حادي
15	لـ		حادي
16	دـ		حادي
17	لـ		حادي
18	جـ		حادي
19	لـ		حادي
20	جـ		حادي
21	جـ		حادي
22	بـ		حادي
23	بـ		حادي
24	بـ		حادي
25	بـ		حادي
26	دـ		حادي
27	لـ		حادي
28	بـ		حادي
29	بـ		حادي
30	جـ		حادي
31	لـ		حادي
32	جـ		حادي
33	بـ		حادي
34	بـ		حادي
35	بـ		حادي
36	جـ		حادي
37	جـ		حادي
38	دـ		حادي
39	بـ		حادي
40	جـ		حادي

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

تعداد سوالات : تستی : ۴۰ تشریحی : ۰

عنوان درس : مبانی شیمی کوانتومی

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

سری سوال : یک ۱

۱- کدام مورد از اصول موضوعه مکانیک کوانتومی نمی باشد؟

۱. به هر کمیت فیزیکی مشاهده پذیر یک اپراتور خطی و هرمیتی وابسته می باشد.
۲. تابع حالت تابعی از مکان و زمان است و دارای شرایط مرزی و نرمال می باشد.
۳. به هر کمیت فیزیکی مشاهده پذیر یک اپراتور خطی غیر هرمیتی وابسته می باشد.
۴. توابع حالت قابل قبول از جواب های معادله شرودینگرند، از آن دسته جواب هایی که واجد شرایط تحمیل شده بر تابع حالت نیز باشند.

۲- حاصل کدامیک اپراتور واحد می شود؟

$$[\hat{x}^2, \hat{D}_x] .\ ۴$$

$$[\hat{x}^2, \hat{D}_x^2] .\ ۳$$

$$[\hat{x}, \hat{D}_x^2] .\ ۲$$

$$[\hat{D}_x, \hat{x}] .\ ۱$$

۳- حاصل اثر اپراتور \hat{D}_x بر تابع $\sin x$ کدام گزینه زیر است؟

$$-\sin x .\ ۴$$

$$x \cos x .\ ۳$$

$$\cos x .\ ۲$$

$$x \sin x .\ ۱$$

۴- انرژی کدام سیستم پیوسته می باشد؟

۱. ذره در جعبه یک بعدی

۲. ذره در جعبه سه بعدی

۳. ذره آزاد

۵- بخش زمانی تابع موج وابسته به زمان سیستم ذره در جعبه یک بعدی کدام است؟

$$\frac{+iEt}{e^{-h}} .\ ۴$$

$$\frac{-iEt}{e^{-h}} .\ ۳$$

$$\frac{Et}{e^{-h}} .\ ۲$$

$$\frac{-Et}{e^{-h}} .\ ۱$$

۶- کدام تابع می تواند تابع ویژه \bar{D}_X باشد؟

$$X .\ ۴$$

$$\cos \alpha X .\ ۳$$

$$\sin \alpha X .\ ۲$$

$$e^{\alpha X} .\ ۱$$

۷- حالت ایستای سیستم دارای چه شرایطی می باشد؟

۱. تابع وابسته به مکان و زمان

۲. تابع پتانسیل مستقل از زمان

۳. پتانسیل وابسته به مکان و زمان

۴. تابع وابسته به زمان

سری سوال: ۱ یک

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

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

روش تحصیلی/گد درس: شیمی گرایش مخصوص، شیمی (کاربردی)، شیمی (شیمی فیزیک) ۱۱۱۴۰۲۷

-۸- درتابع موج زیر مقدار Λ کدام یک می تواند باشد؟

$$\Psi(x) = A \sin \frac{n\pi x}{L}$$

$$\left(\frac{L}{2}\right)^{\frac{1}{2}}$$

$$\left(\frac{L}{2}\right)$$

$$\left(\frac{2}{L}\right)^{\frac{1}{2}}$$

$$\frac{2}{L}$$

-۹- اگر ابعاد جعبه سه بعدی خیلی بزرگ باشد، مقدار انرژی ذره در جعبه سه بعدی چگونه می باشد؟

۴. هیچکدام

۳. ناپیوسته

۲. پیوسته

۱. صفر

-۱۰- مقادیر مجاز انرژی ذره ای به جرم m در جعبه یک بعدی به طول L از کدام رابطه زیر به دست می آید؟

$$\frac{8mL^2}{n^2\pi^2h^2}$$

$$\frac{n^2\pi^2h^2}{8mL^2}$$

$$\frac{n^2h^2}{8mL^2}$$

$$\frac{n^2\hbar^2}{8mL^2}$$

۲. ۴

۳. ۳

۱. ۲

۶. ۱

-۱۱- تعداد حالات همترازی با انرژی $E = \frac{12h^2}{8ma^2}$ ذره در جعبه سه بعدی کدام است؟

۲. صفر است.

۱. مستقل از دما است.

۴. در دمای صفر مطلق هم حفظ می شود.

۳. مستقل از دما است و غیرصفر است.

-۱۲- اپراتور اندازه حرکت زاویه ای در بعد Z در چرخنده صلب دو بعدی کدام است؟

$$\frac{\partial}{\partial\Phi}$$

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial\Phi}$$

$$\hbar$$

$$m\hbar$$

-۱۳- چرخنده صلب در صفحه به ازای هریک از مقادیر کوانتومی انرژی چند حالت همترازی دارد؟

۳. ۴

۰. ۳

۱. ۲

۲. ۱

-۱۴- کدامیک از دو اپراتور زیر به طور همزمان شناخته می شود؟

$$\hat{H}, \hat{L}$$

$$\hat{H}^2, \hat{L}$$

$$\hat{D}_x, \hat{x}$$

$$\hat{l}_z, \hat{l}_y$$

سری سوال : ۱ یک

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

تعداد سوالات : تستی : ۴۰ تشریحی : ۰

عنوان درس : مبانی شیمی کوانتومی

روش تحصیلی/گد درس : شیمی گوایش مخصوص، شیمی (کاربردی)، شیمی (شیمی فیزیک) ۱۱۱۴۰۲۷

۱۶- اپراتور مجدور اندازه حرکت زاویه ای به کدام متغیر وابسته نیست؟

$$\varphi, \theta .^4$$

$$\theta .^3$$

$$\varphi .^2$$

$$r .^1$$

۱۷- مقدار انرژی در تراز اول انرژی چرخشی کدام است؟

$$\frac{3h^2}{2I} .^4$$

$$\frac{h^2}{I} .^3$$

$$0 .^2$$

$$\frac{2h^2}{I} .^1$$

۱۸- مقدار \hat{l}_z بر حسب مختصات دکارتی کدام است؟

$$.^4$$
 هیچکدام

$$\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y .^3$$

$$\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x .^2$$

$$\hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z .^1$$

۱۹- برای چرخنده صلب در حالت اصلی کدام کمیت ها صفر می باشند؟

۱. انرژی و قدر مطلق تکانه زاویه ای و l_z

۲. انرژی، قدر مطلق تکانه زاویه ای و l_z

۳. فقط انرژی

۴. انرژی و l_z

۲۰- انرژی الکترونی اتم هیدروژن وابسته به کدام کمیت ها می باشد؟

$$\mu .^4$$

$$n^2, \mu, z^2 .^3$$

$$n^2, z .^2$$

$$n^2 .^1$$

۲۱- مقدار عدد کوانتومی مغناطیسی کدام اوربیتال صفر است؟

$$\Psi_{3dz2}, \Psi_{1s}, \Psi_{2py} .^2$$

$$\Psi_{3dz2}, \Psi_{1s}, \Psi_{2pz} .^1$$

$$\Psi_{3dz2}, \Psi_{2px}, \Psi_{2pz} .^4$$

$$\Psi_{3dz2}, \Psi_{2s}, \Psi_{2px} .^3$$

۲۲- مقدار dv در مختصات قطبی کدام می باشد؟

$$drd\theta d\phi .^2$$

$$4\pi r^2 \sin \theta drd\theta d\phi .^1$$

$$r^2 drd\theta d\phi .^4$$

$$r^2 \sin \theta drd\theta d\phi .^3$$

۲۳- یک مگنتون بوهر ممان مغناطیسی برابر با کدام کمیت می باشد؟

$$\frac{\hbar}{2} .^4$$

$$\frac{e\hbar}{m_e} .^3$$

$$\frac{\hbar}{2m_e} .^2$$

$$\frac{e\hbar}{2m_e} .^1$$

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰
زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۲۰ تشریحی: ۰

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

روش تحصیلی/گد درس: شیمی گوایش مخصوص، شیمی (کاربردی)، شیمی (شیمی فیزیک) ۱۱۱۴۰۲۷

-۲۴- α تابع ویژه اپراتور \hat{S}_Z چه مقدار ویژه‌ای دارد؟

$$-\frac{1}{2} \quad .4$$

$$\hbar \quad .3$$

$$\frac{1}{2} \quad .2$$

$$\hbar \quad .1$$

-۲۵- کدام اپراتورها جابجاپذیر هستند؟

$$S_z, S_x \quad .4$$

$$S_z, S_y \quad .3$$

$$S^2, S_z \quad .2$$

$$S, S_z \quad .1$$

-۲۶- ضریب نرمال گنندگی در قضیه واریاسیون کدام است؟

$$\int \phi^* H \phi d\tau \quad .4$$

$$\left(\frac{1}{\phi^* \phi d\tau}\right)^{\frac{1}{2}} \quad .3$$

$$\frac{1}{\int \phi^* \phi d\tau} \quad .2$$

$$\int \phi^* \phi d\tau \quad .1$$

-۲۷- یک بوهر چند آنگستروم است؟

$$1 \quad .4$$

$$0.2700 \quad .3$$

$$0.5292 \quad .2$$

$$0.627 \quad .1$$

-۲۸- در مورد تقریب اسلیتر کدام مورد صحیح می‌باشد؟

۱. پتانسیل مربوط به برهمکنش‌ها ناجائز فرض می‌گردد.

۲. در اتم اثر الکترونها بر روی الکترون معین را همانند یک اثر محافظتی متوسط در مقابل بار هسته می‌توان تلقی کرد.

۳. تابع آزمون را به صورت ترکیب خطی از توابع موج در نظر گرفته می‌شود

۴. همه موارد

-۲۹- کدام یک از ذرات زیر فرمیون می‌باشد؟

۴. موارد یک و سه

۳. هسته هلیم

۲. فوتون

۱. الکترون

-۳۰- در حالت برانگیخته اتم هلیم، حالات همترازی چگونه است؟

۴. دو-یک

۳. یک-یک

۲. یک-سه

۱. سه-سه

-۳۱- در روش اختلال، انرژی مرتبه اول اختلال کدام عبارت است؟

$$\int \Psi_0^* w \Psi_1 d\tau \quad .2$$

$$E^{(0)} + \int \Psi_1^* w \Psi_1 d\tau \quad .1$$

$$\int \Psi_i^* w \Psi_1 d\tau \quad .4$$

$$\int \Psi_1^* w \Psi_1 d\tau \quad .3$$

سری سوال: ۱ یک

زمان آزمون (دقیقه): قسطی: ۱۲۰ تشریعی: ۰

تعداد سوالات: قسطی: ۴۰ تشریعی: ۰

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

روش تحصیلی/گد درس: شیمی گوایش محض، شیمی (کاربردی)، شیمی (شیمی فیزیک) ۱۱۱۴۰۲۷

- ۳۲- بر اساس روش هوکل، انرژی سیستم π در حالت اصلی مولکول اتیلن کدام است؟

$$\alpha + 2\beta \quad .4$$

$$2(\alpha + \beta) \quad .3$$

$$\alpha - 2\beta \quad .2$$

$$2(\alpha - \beta) \quad .1$$

- ۳۳- انرژی عدم استقرار مولکول ۱-۳ دی بوتادی ان کدام یک است؟

$$0.472\beta \quad .4$$

$$\beta \quad .3$$

$$-0.472\beta \quad .2$$

$$2\beta \quad .1$$

- ۳۴- کدامیک در مورد اصل فرانک کوندون صحیح نیست؟

۱. به هنگام جذب فوتون انرژی پتانسیل کاهش می یابد.

۲. به هنگام جذب فوتون، انرژی پتانسیل افزایش می یابد.

۳. به هنگام جذب فوتون، انرژی جنبشی بسیار کم تغییر می نماید.

۴. به هنگام جذب فوتون، فاصله بین هسته ها تغییر نمی نماید.

- ۳۵- انرژی سیستم π در حالت اصلی مولکول بنزن با استفاده از روش هوکل کدام است؟

$$4\alpha + 6\beta \quad .4$$

$$6\alpha + 8\beta \quad .3$$

$$2\alpha + 4\beta \quad .2$$

$$2\alpha + 2\beta \quad .1$$

- ۳۶- در مولکول آلیل، بر اساس روش هوکل کدام گزینه صحیح نمی باشد؟

$$H_{13} = \beta \quad .4$$

$$S_{22} = 1 \quad .3$$

$$H_{11} = \alpha \quad .2$$

$$H_{13} = 0 \quad .1$$

- ۳۷- در حالت اصلی مولکول بنزن کدام ترازهای بنزن براساس اوربیتال روش اوربیتال مولکولی هوکل، پر می گردد؟

$$K = \pm 1 \quad .4$$

$$k=0, K=\pm 1 \quad .3$$

$$k=\pm 2 \quad .2$$

$$k=3 \quad .1$$

- ۳۸- کدام یک از ترکیبات زیر بوزون می باشد؟

۴. فوتون

۳. نوترون

۲. پروتون

۱. الکترون

- ۳۹- چه تفاوتی میان انرژی اتم هلیوم با استفاده از روش اختلال و بدون تقریب وجود دارد؟

۰ .۴

$$\frac{5}{8}Z^2 \quad .3$$

$$\frac{5}{8}Z \quad .2$$

$$-Z^2 \quad .1$$

- ۴۰- شرط تک مقدار بودن تابع موج کدام است؟

$$\Psi(\phi) = \Psi(\phi - \pi) \quad .2$$

$$\Psi(\phi) = \Psi(\phi + \pi) \quad .1$$

$$\Psi(\phi) = \Psi(\phi + 2\pi) \quad .4$$

$$\Psi(\phi) = \Psi(-\phi) \quad .3$$

1114027 - 94-95-2

نوع	راسبع صنبع	وضعیت تلبد	حاجی
1	ج		حاجی
2	لی		حاجی
3	ب		حاجی
4	ج		حاجی
5	ج		حاجی
6	لی		حاجی
7	ب		حاجی
8	ب		حاجی
9	ب		حاجی
10	ب		حاجی
11	ب		حاجی
12	ب		حاجی
13	ج		حاجی
14	لی		حاجی
15	د		حاجی
16	ک		حاجی
17	ج		حاجی
18	ب		حاجی
19	ب		حاجی
20	ج		حاجی
21	لن		حاجی
22	ب		حاجی
23	لی		حاجی
24	ب		حاجی
25	ب		حاجی
26	ج		حاجی
27	ب		حاجی
28	ب		حاجی
29	لی		حاجی
30	ب		حاجی
31	د		حاجی
32	ج		حاجی
33	د		حاجی
34	لی		حاجی
35	ج		حاجی
36	د		حاجی
37	ب		حاجی
38	د		حاجی
39	ب		حاجی
40	د		حاجی