

سری سوال: یک ۱

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

تعداد سوالات: قسمتی: ۲۰ تشریحی: ۵

عنوان درس: شیمی فیزیک ۳

رشه تحصیلی/گد درس: شیمی گرایش محض، شیمی (کاربردی)، شیمی (شیمی فیزیک) ۱۱۱۴۳۵۷

استفاده از ماشین حساب ساده، ماشین حساب مهندسی مجاز است

۱- کدام عبارت زیر دانسته احتمال نامیده می شود؟

$$|\Psi|^2 d\tau \quad .4$$

$$\Psi \quad .3$$

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

$$|\Psi|^2 r d\tau \quad .1$$

۲- پاسخ عملگر \hat{D}_x بر تابع موج $\sin x$ کدام است؟

$$.4 \text{ یک}$$

$$.3 \text{ صفر}$$

$$.2 \cos x$$

$$.1 \sin x$$

۳- ضد متقارن بودن دترمینان اسلیتر ناشی از کدام مورد است؟

۱. در دترمینان اسلیتر منظومه‌ی الکترونی، دو ستون نمی‌توانند با هم برابر باشند.

۲. تعویض مختصات دو الکترون معادل با تعویض دو سطر دترمینان است.

۳. در اثر جابجایی دو سطر یا دو ستون دترمینان، علامت آن عوض می‌شود.

۴. تمام موارد صحیح است.

۴- انحراف استاندارد کمیتی مانند x از کدام رابطه زیر به دست می‌آید؟

$$(\Delta x)^2 = \langle x^2 \rangle - x \quad .2$$

$$(\Delta x)^2 = \langle x \rangle^2 - x \quad .1$$

$$(\Delta x)^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 \quad .4$$

$$(\Delta x)^2 = \langle x \rangle^2 - \langle x^2 \rangle \quad .3$$

۵- اپراتور وابسته به هر کمیت فیزیکی مشاهده پذیر چه ویژگی دارد؟

۱. خطی است.

۲. هرمیتیک است.

۳. خطی و هرمیتیک است.

۶- شرایط آغازی چیست؟

۱. شرایط یک تابع موج قابل قبول

۲. محاسبه ثابت‌های مشتق گیری

۳. شرایطی که به ازای تمام مقادیر t برای ذره‌ای که حرکت آن در فضای معین محدود شده است، صدق کند.

۴. محاسبه مشتق مرتبه اول نسبت به زمان

۷- برای چرخش در صفحه رابطه‌ی بین \hat{H} و \hat{L}^2 کدام است؟

$$\hat{H} = \frac{\hat{L}^2}{2I} \quad .4$$

$$\hat{L}^2 = \frac{\hat{H}}{2I} \quad .3$$

$$\hat{L}^2 = \frac{2\hat{H}}{I} \quad .2$$

$$\hat{L}^2 = \frac{1}{2\hat{H}} \quad .1$$

سری سوال: ۱ بک

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

تعداد سوالات: قسمتی: ۲۰ تشریحی: ۵

عنوان درس: شیمی فیزیک ۳

رشنده تحصیلی/گد درس: شیمی گرایش محض، شیمی (کاربردی)، شیمی (شیمی فیزیک) ۱۱۱۴۳۵۷

-۸- مقدار قابل انتظار تکانه برای ذره آزاد به جرم m و انرژی E در راستای مثبت محور X کدام است؟

$$k\hbar \quad .4$$

$$-\hbar \quad .3$$

$$-\sqrt{2mE} \quad .2$$

$$\sqrt{2mE} \quad .1$$

-۹- تعداد همترازی برای تراز انرژی $E = \frac{6h^2}{8ma^2}$ کدام است؟

$$6 \quad .4$$

$$1 \quad .3$$

$$2 \quad .2$$

$$3 \quad .1$$

-۱۰- کدام گزینهتابع توزیع شعاعی را به درستی نشان می دهد؟

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

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

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

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

-۱۱- کدام رابطه زیر برابر با عملگر \hat{L}_Z در چرخنده صلب است؟

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \quad .4$$

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \quad .3$$

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial \theta} \quad .2$$

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial r} \quad .1$$

-۱۲- بر اساس روش هوکل، انرژی سیستم π در حالت اصلی مولکول اتیلن کدام است؟

$$\alpha + 2\beta \quad .4$$

$$\alpha - 2\beta \quad .3$$

$$2(\alpha + \beta) \quad .2$$

$$2(\alpha - \beta) \quad .1$$

-۱۳- کدام یک از ترکیبات زیر بوزون می باشد؟

۴. فوتون

۳. نوترون

۲. پروتون

۱. الکترون

-۱۴- بار موثر هسته بر روی الکترون در اوربیتال $1s$ اتم هلیم چقدر است؟

$$1.31 \quad .4$$

$$2 \quad .3$$

$$0.31 \quad .2$$

$$1.69 \quad .1$$

-۱۵- مقدار انتگرالهای همپوشانی، S_{ij} ، در روش هوکل چقدر است؟ ($i \neq j$)

$$ij \quad .4$$

$$2ij \quad .3$$

$$1 \quad .2$$

$$0 \quad .1$$

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

تعداد سوالات: قسمتی: ۲۰ تشریحی: ۵

عنوان درس: شیمی فیزیک ۳

رشنده تحصیلی / گذ درس: شیمی گرایش محض، شیمی (کاربردی)، شیمی (شیمی فیزیک) ۱۱۱۴۳۵۷

۱۶- کدام تقریب در مدل اربیتال مولکولی هوکل بکار میرود؟

۱. تابع توصیف کننده سیستم پایی بصورت دترمینانی از اربیتالهای تک الکترونی حاصل از ترکیب خطی اربیتالهای S_2 اتمهای کربن است.

۲. اربیتالهای مولکولی مناسب با روش اختلال تعیین میشوند.

۳. انتگرالهای کولنی همگی برابر یک هستند.

۴. انتگرالهای همپوشانی دواتم مجاور همگی برابر صفر هستند.

۱۷- شکل کامل تابع موج و توابع موجی بسیار دقیق در مورد کدام اتم بدست نیامده است؟

۴. بریلیوم

۳. لیتیوم

۲. هلیوم

۱. هیدروژن

۱۸- چند حالت کوانتومی هم انرژی به سومین تراز انرژی ذره در جعبه مکعبی نسبت داده میشود؟

۴. ۴

۳. ۶

۲. ۳

۱. ۱

۱۹- کدام اپراتور زیر خطی نیست؟

\hat{D}_x^2 . ۴

\hat{D}_x . ۳

\hat{x} . ۲

$\sqrt{}$. ۱

۲۰- کدام ذره زیر فرمیون نیست؟

۴. فوتون

۳. نوترون

۲. پروتون

۱. الکترون

سوالات تشریحی

۱.۲۰ نمره

- تاثیر اپراتور $p_x^2 + x^2$ روی تابع e^{-ax^2} را بنویسید.

۱.۲۰ نمره

- در مورد مفهوم فیزیکی جابجاپذیری اپراتورها، با ذکر مثال، توضیح دهید.

۱.۲۰ نمره

- برای مولکول CO با طول پیوند ۱.۱۳ آنگستروم بر اساس تقریب چرخنده صلب سه بعدی طول موج اولین خط

$$h = 6.63 \times 10^{-34} \text{ Js}$$

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

جذبی را برحسب سانتی متر بدست آورید.

۱.۲۰ نمره

- سه عدد کوانتومی مناسب به الکترون در هر یک از حالت‌های زیر را بدست آورید.

۱.۲۰ نمره

- مولکول NO در طی چرخش در صفحه دارای اولین تراز غیر صفر $J = 3.32 \times 10^{-23}$ است. در صورتی که جرم کاسته آن $m = 1.24 \times 10^{-26} \text{ kg}$ باشد طول پیوند را بدست آورید.

شماره سوال	پاسخ صحيح	وضعیت کلید
1	ب	عادی
2	ب	عادی
3	د	عادی
4	د	عادی
5	ج	عادی
6	ج	عادی
7	د	عادی
8	الف	عادی
9	الف	عادی
10	ب	عادی
11	ج	عادی
12	ب	عادی
13	د	عادی
14	الف	عادی
15	الف	عادی
16	د	عادی
17	د	عادی
18	ب	عادی
19	الف	عادی
20	د	عادی

سری سوال: یک ۱

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

تعداد سوالات: قسمتی: ۲۰ تشریحی: ۵

عنوان درس: شیمی فیزیک ۳

رشه تحصیلی / گد درس: شیمی گرایش محض، شیمی (کاربردی)، شیمی (شیمی فیزیک) ۱۱۱۴۳۵۷

استفاده از ماشین حساب مهندسی مجاز است

۱- انرژی کدام سیستم پیوسته می باشد؟

۲. اتم تک الکترونی

۱. ذره در جعبه سه بعدی

۴. ذره در جعبه یک بعدی

۳. ذره آزاد

۲- کدام تابع می تواند تابع ویژه \hat{D}_x باشد؟

X . ۴

$\cos \alpha x$. ۳

$\sin \alpha x$. ۲

$e^{\alpha x}$. ۱

۳- تعداد حالات همترازی با انرژی $E = \frac{12h^2}{8ma^2}$ ذره در جعبه سه بعدی کدام است؟

2 . ۴

1 . ۳

3 . ۲

6 . ۱

۴- در مورد انرژی نقطه صفر نوسانگ هماهنگ کدام یک صحیح نیست؟

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.

۵- اپراتور اندازه حرکت زاویه ای در بعد Z در چرخنده صلب دو بعدی کدام است؟

$\frac{\partial}{\partial \Phi}$. ۴

$\frac{\bar{h}}{i} \frac{\partial}{\partial \Phi}$. ۳

\bar{h} . ۲

$m\bar{h}$. ۱

۶- کدامیک از دو اپراتور زیر به طور همزمان شناخته می شود؟

\hat{H}^2, \hat{L} . ۴

\hat{D}_x, \hat{X} . ۳

\hat{l}_z, \hat{l}_y . ۲

\hat{H}, \hat{l}_z . ۱

۷- اپراتور مجذور اندازه حرکت زاویه ای به کدام متغیر وابسته نیست؟

φ . ۴

θ . ۳

θ, φ . ۲

r . ۱

۸- برای چرخنده صلب در حالت اصلی کدام کمیت ها صفر می باشند؟

۲. انرژی، قدر مطلق تکانه زاویه ای و I_z

۱. انرژی

۴. انرژی، قدر مطلق تکانه زاویه ای

۳. قدر مطلق تکانه زاویه ای و I_z

۹- α تابع ویژه اپراتور \hat{S}_z چه مقدار ویژه ای دارد؟

$-h$. ۴

h . ۳

$-1/2 h$. ۲

$1/2 h$. ۱

سری سوال: ۱ بک

زمان آزمون (دقیقه): قسمی: ۶۰ تشریعی: ۵۰

تعداد سوالات: قسمی: ۲۰ تشریعی: ۵

عنوان درس: شیمی فیزیک ۳

رشه تحصیلی/گد درس: شیمی گرایش محض، شیمی (کاربردی)، شیمی (شیمی فیزیک) ۱۱۱۴۳۵۷

۱۰- ضریب نرمال کنندگی در قضیه تغییر پارامتر کدام است؟

$$\int \phi^* H \phi d\tau$$

$$(\frac{1}{\int \phi^* \phi d\tau})^{\frac{1}{2}}$$

$$\frac{1}{\int \phi^* \phi d\tau}$$

$$\int \phi^* \phi d\tau$$

۱۱- در مورد تقریب اسلیتر کدام مورد صحیح می باشد؟

۱. پتانسیل مربوط به برهمکنش ها ناچیز فرض می گردد.

۲. تابع آزمون را به صورت ترکیب خطی از توابع موج در نظر گرفته می شود

۳. در اتم اثر الکترونها بر روی الکترون معین را همانند یک اثر محافظتی متوسط در مقابل بار هسته می توان تلقی کرد.

۴. همه موارد

۱۲- کدام یک از ذرات زیر فرمیون می باشد؟

۱. الکترون

۲. فوتون

۳. هسته هلیم

۴. هسته بریلیم

۱۳- در روش اختلال، انرژی مرتبه اول اختلال کدام عبارت است؟

$$\int \Psi_i^0 * w \Psi_i^0 d\tau$$

$$E^{(0)} + \int \Psi_i^0 * w \Psi_i^0 d\tau$$

$$\int \Psi_0^* w \Psi_0 d\tau$$

۱۴- 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 هاسته ها تغییر نمی نماید.

۱۵- بر اساس روش هوکل، انرژی سیستم π در حالت اصلی مولکول اتیلن کدام است؟

$$\alpha + 2\beta$$

$$\alpha - 2\beta$$

$$2(\alpha + \beta)$$

$$2(\alpha - \beta)$$

۱۶- کدام یک از ترکیبات زیر بوزون می باشد؟

۱. الکترون

۲. پروتون

۳. نوترون

۴. فوتون

۱۷- در حالت اصلی مولکول بنزن کدام ترازهای بنزن بر اساس اوربیتال روش اوربیتال مولکولی هوکل، پر می گردد؟

$$k=3$$

$$k=\pm 2$$

$$k=0, k=\pm 1$$

$$k=\pm 1$$

سری سوال: ۱ بک

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

تعداد سوالات: قستی: ۲۰ تشریحی: ۵

عنوان درس: شیمی فیزیک ۳

رشنده تحصیلی / گد درس: شیمی گرایش محض، شیمی (کاربردی)، شیمی (شیمی فیزیک) ۱۱۱۴۳۵۷

۱۸- در حالت برانگیخته اتم هلیم، حالات همترازی چگونه است؟

۴. دو- یک

۳. یک- سه

۲. سه- سه

۱. یک- یک

۱۹- کدام اپراتورها جابجاپذیر هستند؟

S_x, S_y .۴

S_z, S_y .۳

S_2, H .۲

S, S_z .۱

۲۰- شکل کامل تابع موج و توابع موجی بسیار دقیق در مورد کدام اتم بدست نیامده است؟

۴. بریلیوم

۳. لیتیوم

۲. هلیوم

۱. هیدروژن

سوالات تشریحی

۱۰۰ نمره

-۱- مقدار قابل انتظار p_x و p_x^2 در سیستم نوسانگ هماهنگ با تابع موج زیر را محاسبه کنید؟

$$\Psi_0 = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{\alpha x^2}{2}}$$

۱۰۰ نمره

-۲- در تابع موج زیر مقدار A را بدست آورید. محدوده تغییرات x بین صفر تا ۱ است.

$$\Psi(x) = A \sin \frac{n\pi}{L} x$$

۱۰۰ نمره

-۳- سه عدد کوانتومی منتبه به الکترون در هر یک از حالت‌های زیر را بدست آورید. $\Psi_{2py}, \Psi_{1s}, \Psi_{3d_z^2}$

۱۰۰ نمره

-۴- انرژی عدم استقرار مولکول $1-3$ دی بوتادی ان را براساس نظریه اوربیتال مولکولی هوکل بدست آورید.

۱۰۰ نمره

-۵- اصول موضوعی مکانیک کوانتومی را به اختصار نوشه و توضیح دهید.

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

سری سوال: یک ۱

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

تعداد سوالات: قستی: ۲۵ تشریحی: ۵

عنوان درس: شیمی فیزیک ۳

رشه تحصیلی/ گد درس: شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی (کاربردی)، شیمی گرایش محض ۱۱۱۴۳۵۷

استفاده از ماشین حساب مهندسی مجاز است

-۱ کدام عبارت نشان دهندهٔ روش "تغییر پارامترها" است؟

$$\frac{\int \varphi^* \hat{H} \varphi d\tau}{\int \varphi^* \varphi d\tau} \geq 1$$

$$\frac{\int \varphi^* \hat{H} \varphi d\tau}{\int \varphi^* \varphi d\tau} = 1$$

$$\frac{\int \varphi^* \hat{H} \varphi d\tau}{\int \varphi^* \varphi d\tau} \geq E_0$$

$$\frac{\int \varphi^* \hat{H} \varphi d\tau}{\int \varphi^* \varphi d\tau} = E_0$$

-۲ مقادیر قابل قبول برای چرخندهٔ صلب به شکل $\Psi(\phi) = Ne^{im\phi}$ هستند. مقدار N برای تابع نرمال شدهٔ کدام است؟

$$\frac{1}{2\pi}$$

$$\frac{\sqrt{2}}{\pi}$$

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$

$$\frac{\sqrt{\pi}}{2}$$

-۳ اثر اپراتور $\hat{D}_x + \hat{x}$ بر روی تابع $f(x) = e^{ax}$ کدام است؟

$$(x+a)^2 e^{ax}$$

$$(x+a)e^{ax}$$

$$axe^{ax}$$

$$ae^{ax}$$

-۴ اگر $\Psi_1(x)$ و $\Psi_2(x)$ تابع‌های ویژه اپراتور \hat{H} برای ذره در جعبه یک بعدی باشند، مقدار کدام

است؟

$$\frac{\sqrt{2}}{L}$$

$$1$$

۲. صفر

$$\frac{L}{2}$$

-۵ برای چرخش در صفحه رابطهٔ بین \hat{H} و \hat{L}^2 کدام است؟

$$\hat{H} = \frac{\hat{L}^2}{2I}$$

$$\hat{L}^2 = \frac{\hat{H}}{2I}$$

$$\hat{L}^2 = \frac{2\hat{H}}{I}$$

$$\hat{L}^2 = \frac{1}{2\hat{H}}$$

-۶ از تابع‌های زیر کدامیک تابع ویژهٔ \hat{L} است؟

$$y = a\phi^2 + 1$$

$$y = A \sin \phi$$

$$y = \cos \phi$$

$$y = e^{im\phi}$$

-۷ اگر تابع موج سیستم با تعویض مختصات ذرهٔ ϕ با مختصات ذرهٔ θ تغییر علامت ندهد، نسبت به جابجایی چگونه است؟

۱. ضد متقارن

۲. غیر متقارن

۳. متقارن

۴. نا متقارن

سری سوال: ۱ بک

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

تعداد سوالات: قسمتی: ۲۵ تشریحی: ۵

عنوان درس: شیمی فیزیک ۳

روش تحقیلی/گد درس: شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی (کاربردی)، شیمی گرایش محض ۱۱۱۴۳۵۷

۸- ساده‌ترین مدل برای تخمین انرژی‌های الکترونی در مولکول‌های زنجیری دارای پیوند پی‌بیک در میان کدام است؟

۲. نوسانگر هارمونیک

۱. ذره در جعبه‌ی دو بعدی

۴. اوربیتال‌های مولکولی هوکل

۳. ذره‌ی مستقل

۹- مقدار قابل انتظار هر کمیت فیزیکی در یک حالت کوانتومی ایستای معین چگونه است؟

۲. با زمان تغییر می‌کند.

۱. مستقل از زمان

۴. تابع t^2 است.۳. تابع خطی از t است.۱۰- مقدار قابل انتظار p_x در ذره در جعبه‌ی کدام است؟ $\frac{a}{2}$

۳. صفر

 $\sqrt{2mE}$ ۱. a

۱۱- کدام دو اپراتور از اپراتورهای وابسته به تکانه زاویه‌ای جابجاپذیرند؟

 \hat{L}_y, \hat{L}_x \hat{L}_x, \hat{L}^2 \hat{L}_y, \hat{L}_z \hat{L}_x, \hat{L}_z

۱۲- جهت گیری‌های ممکن تکانه زاویه‌ای در چهارمین تراز انرژی چرخنده صلب فضایی چند تاست؟

۵. ۴

۱. ۳

۷. ۲

۳. ۱

۱۳- رابطه‌ی انرژی‌های مجاز چرخنده‌ی صلب در صفحه کدام است؟

 $\frac{m^2 h^2}{2I\omega}$ $\frac{m^2 h^2}{2Ir}$ $\frac{n^2 h^2}{2I}$ $\frac{m^2 \hbar^2}{2I}$ $E_n = \frac{E_H}{n^2}$ $E_n = \frac{\hbar E_H}{2n}$ $E_n = -\frac{\hbar E_H}{2n}$ $E_n = -\frac{\hbar E_H}{2n}$

۱۴- دیگر انرژی‌های مجاز اتم هیدروژن بر حسب انرژی حالت اصلی کدام است؟

۷. ۲

۱. ۳

۳. ۱

۲. $\alpha(1)\beta(2) - \beta(1)\alpha(2)$ ۱. $\alpha(1)\beta(2) + \beta(1)\alpha(2)$ ۴. $\beta(1)\beta(2)$ ۳. $\alpha(1)\alpha(2)$

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

۴. n

۳. n و ۱

۲. m و n

۱. m و ۱

زمان آزمون (دقیقه): قسمتی: ۶۰ تشریحی: ۵

تعداد سوالات: قسمتی: ۲۵ تشریحی: ۵

عنوان درس: شیمی فیزیک ۳

رشته تحصیلی/گد درس: شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی (کاربردی)، شیمی گرایش محض ۱۱۱۴۳۵۷

۱۷- بزرگی تکانه زاویه اسپین از کدام رابطه بدست می‌آید؟ (عدد کوانتومی اسپین است)

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

$$s(s+1)\hbar \quad .3$$

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

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

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

$$\vec{J} = \vec{l} - \vec{s} \quad .4$$

$$\vec{J} = \vec{l} + \vec{s} \quad .3$$

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

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

۱۹- پتانسیل اختلال در هامیلتونی اتم هلیوم کدام عبارت زیر است؟

$$\frac{1}{r_{1,2}} \quad .4$$

$$\frac{-1}{2}\nabla^2 + \frac{Z}{r} \quad .3$$

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

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

۲۰- در دترمینان اسلیتر برای یک منظومه N الکترونی، ضریب نرمال شدگی چند است؟

$$\frac{1}{N!} \quad .4$$

$$N! \quad .3$$

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

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

۲۱- کدام رابطه زیر عدم قطعیت در اندازه گیری مکان-تکانه الکترون را به درستی نشان میدهد؟

$$\Delta z \cdot \Delta P_z \leq \hbar^2 \quad .4$$

$$\Delta z \cdot \Delta P_z \geq \hbar \quad .3$$

$$\Delta z \cdot \Delta P_z \geq \frac{\hbar^2}{2} \quad .2$$

$$\Delta z \cdot \Delta P_z \leq \frac{2}{\hbar} \quad .1$$

۲۲- با تأمل در نظریه فوتونی نور و دوگانه بودن ماهیت دوگانه فوتون را بیان نمود.

۴. یانگ

۳. هایزنبرگ

۲. پلانک

۱. دوبروی

۲۳- کدام گزینه بیانگرتابع لاغرانژ است؟

$$L(\dot{x}_i, x_i) = T + V \quad .2$$

$$L(\dot{x}_i, x_i) = T - V \quad .1$$

$$L(\dot{x}_i, t) = T - V \quad .4$$

$$L(\dot{x}_i, t) = T + V \quad .3$$

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

۴. منزوی

۳. موهمی

۲. ایستا

۱. حقیقی

۲۵- کدام اپراتور زیر خطی نیست؟

$$\hat{D}_x^2 \quad .4$$

$$\hat{D}_x \quad .3$$

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

$$\sqrt{\quad} \quad .1$$

سری سوال: ۱ بک

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

تعداد سوالات: نستی: ۲۵ تشریحی: ۵

عنوان درس: شیمی فیزیک ۳

روش تحلیلی / گد درس: شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی (کاربردی)، شیمی گرایش محض ۱۱۱۴۳۵۷

سوالات تشریحی

۱.۲۰ نمره

-۱ مقدار قابل انتظار $\frac{1}{r}$ را برای الکترون در حالت $1s$ حساب کنید.

$$\Psi_{(1s)} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \alpha^{3/2} e^{-\alpha r}, \alpha = \frac{z}{a_0}, a_0 = \frac{\hbar^2}{\mu e^2}$$

یادآوری: از رابطه $\int_0^\infty x^n e^{-bx} dx = \frac{n!}{b^{n+1}}$ استفاده کنید.

۱.۲۰ نمره

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

۱.۲۰ نمره

-۳ در مورد مفهوم فیزیکی جابجاپذیر بودن اپراتورها توضیح دهید.

۱.۲۰ نمره

-۴ اصل فرانک-کوندون را به اختصار توضیح دهید.

۱.۲۰ نمره

-۵ اپراتور $\hat{P}_x^2 + x^2 -$ را بر روی تابع e^{-ax^2} تاثیر بدھید و نتیجه را بنویسید.

نماره سوال	پاسخ صحیح	وضعیت کلید
1	د	عادی
2	ب	عادی
3	ج	عادی
4	ج	عادی
5	د	عادی
6	الف	عادی
7	ج	عادی
8	د	عادی
9	الف	عادی
10	ب	عادی
11	ج	عادی
12	ب	عادی
13	الف	عادی
14	د	عادی
15	ب	عادی
16	د	عادی
17	الف	عادی
18	ج	عادی
19	د	عادی
20	الف	عادی
21	ب	عادی
22	الف	عادی
23	الف	عادی
24	ب	عادی
25	الف	عادی

سری سوال: یک ۱

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

تعداد سوالات: تستی: ۲۵ تشریحی: ۵

عنوان درس: شیمی فیزیک ۳

روش تحصیلی/گد درس: شیمی گرایش محض، شیمی (کاربردی)، شیمی (شیمی فیزیک) ۱۱۱۴۳۵۷

استفاده از ماشین حساب ساده، ماشین حساب مهندسی مجاز است

۱- کدام عبارت در مکانیک لاغرانژ صحیح است؟

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} = F_i \quad .۲$$

$$L = T + V \quad .۱$$

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} \right) = - \left(\frac{\partial V}{\partial x_i} \right) \quad .۴$$

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} = p_i \quad .۳$$

۲- کدام عبارت بیانگر رابطه دوبروی است؟

$$\frac{p}{\lambda} = h \quad .۴$$

$$\frac{h}{mv} = E \quad .۳$$

$$\frac{h}{p} = \lambda \quad .۲$$

$$\frac{h}{v} = \lambda \quad .۱$$

۳- کدام عبارت نادرست است؟

۱. دقیق بیشتر در تعیین مختصات ذره منجر به دقیق کمتر در تکانه آن ذره میشود.

۲. دقیق بیشتر در تعیین انرژی یک ذره منجر به دقیق کمتر در زمان اندازه گیری انرژی آن ذره خواهد شد.

۳. دقیق بیشتر در تعیین تکانه ذره منجر به دقیق بیشتر در تعیین مختصات آن ذره میشود.

۴. اگر تکانه الکترون کاملاً مشخص باشد، مکان آن کاملاً نامعین است.

۴- بنا بر اصل موضوع سوم کدام کمیت قابل محاسبه است؟

۲. انرژی ذره

۱. احتمال یافتن ذره

۴. تابع موج ذره

۳. خطأ در محاسبه موقعیت ذره

۵- شرایط آغازی چیست؟

۱. شرایط یک تابع موج قابل قبول

۲. محاسبه ثابت های مشتق گیری

۳. شرایطی که به ازای تمام مقادیر t برای ذره ای که حرکت آن در فضای معین محدود شده است، صدق کند.

۴. محاسبه مشتق مرتبه اول نسبت به زمان

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

تعداد سوالات: قسمتی: ۲۵ تشریحی: ۵

عنوان درس: شیمی فیزیک ۳

روش تحقیلی/گد درس: شیمی گرایش محض، شیمی (کاربردی)، شیمی (شیمی فیزیک) ۱۱۱۴۳۵۷

۶- حالتهای ایستای ذره به چه معنایی است؟

۱. وجود پیوستگی در تابع موج وابسته به زمان
۲. وجود ناپیوستگی در تابع موج وابسته به زمان
۳. وجود تابع موج وابسته به زمان
۴. وجود تابع های موج وابسته به زمان که به هر یک انرژی معین مربوط شود.

۷- به کدام تکنیک معادله شرودینگر ذره در جعبه سه بعدی قابل حل خواهد بود؟

۱. تفکیک متغیر
۲. تغییر مختصات و تفکیک متغیر
۳. تغییر مختصات

۸- کدام نتیجه از الگوی ذره در جعبه سه بعدی حاصل میشود؟

۱. در یک محدود معینی از انرژی تجمع ترازها بیشتر است.
۲. وقتی دو یا سه بعد با هم برابر باشند، پدیده چند حالتی بودن ترازها پیش میآید.
۳. مطالعه تقریبی منظومه های ذره ای میسر میشود.
۴. تمام موارد

۹- کدام عبارت در مورد حالت های نوسانگر هماهنگ درست است؟

۱. توابع موج آن همواره فرد است.
۲. در محاسبه مقادیر میانگین برای این سیستم از خاصیت پاریته توابع موج میتوان استفاده نمود
۳. پاریته این توابع همواره زوج است.
۴. هر چه عدد کوانتمی کوچکتر میشود توزیع دانسیته به حالت کلاسیک نزدیک تر میشود.

۱۰- از کدام تکنیک برای حل معادله شرودینگر چرخنده صلب در صفحه استفاده میشود؟

۱. تغییر متغیر
۲. تفکیک متغیر
۳. تغییر سیستم مختصات
۴. تغییر و تفکیک متغیر

۱۱- کدام دو اپراتور تعویض پذیر هستند؟

۱. مربع گشتاور زاویه ای و هامیلتونی
۲. هامیلتونی و انرژی جنبشی
۳. گشتاور زاویه ای و هامیلتونی
۴. مربع گشتاور زاویه ای و کلیه مؤلفه های آن

سری سوال: ۱ بک

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

تعداد سوالات: قستی: ۲۵ تشریعی: ۵

عنوان درس: شیمی فیزیک ۳

رشه تحصیلی/گد درس: شیمی گرایش محض، شیمی (کاربردی)، شیمی (شیمی فیزیک) ۱۱۱۴۳۵۷

۱۲- مقدار ویژه اپراتور L_z روی توابع چرخنده صلب در صفحه کدام است؟

$\pm h / 2\pi$

$mh / 2\pi$

$\pm m$

m.

۱۳- کدام یک در رابطه با سیستم چرخنده صلب سه بعدی درست است؟

۱. به هر یک از ترازهای انرژی با شماره j ، تعداد $1+2j$ حالت وابسته است.

۲. این حالتها بوسیله L_z از هم متمایز می‌شوند.

۳. جهت گیری بردار L در فضا کاملاً جهت‌های معینی دارد.

۴. تمام موارد

۱۴- در حل معادله شرودینگر اتم هیدروژن از کدام تکنیک استفاده می‌شود؟

۴. تمام موارد

۳. بسط سری توانی

۲. تغییر متغیر

۱. تغییر مختصات

۱۵- انرژی بونش اتم هیدروژن بر حسب هارتی کدام است؟

-۱.

$27/2$.

۲.

۰/۵

۱۶- قضیه ویریال کدام چیست؟

۱. انرژی جنبشی سیستم همواره نصف انرژی کل است.

۲. انرژی کل سیستم همواره با منهای انرژی جنبشی آن برابر است.

۳. انرژی پتانسیل سیستم نصف انرژی جنبشی است.

۴. انرژی کل سیستم منهای نصف انرژی پتانسیل است.

۱۷- مقادیر ویژه مولفه Z گشتاور اسپینی الکترون اتم هیدروژن کدام است؟

$\pm h / 2$

$\pm h / 4\pi$

$\pm h / 2\pi$

$\pm h / \pi$

۱.

۱۸- تکانه کل الکترون اتم هیدروژن در حالت p کدام است؟

$3/2$.

$1/2$.

$1/2$.

$1/2$.

۱.

۰ و $1/2$.

۰ و $1/2$.

$3/2$ و ۱.

۱۹- توابع ویژه اپراتور S_z و مقادیر ویژه آنها کدام است؟

$\pm \frac{\hbar}{2}$ و α و β با مقادیر ویژه

$\pm \frac{\hbar}{2\pi}$ و α و β با مقدار ویژه

α با مقدار ویژه \hbar

β با مقدار ویژه $-\hbar$

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

تعداد سوالات: قسمتی: ۲۵ تشریحی: ۵

عنوان درس: شیمی فیزیک ۳

رشنده تحصیلی / گد درس: شیمی گرایش محض، شیمی (کاربردی)، شیمی (شیمی فیزیک) ۱۱۱۴۳۵۷

- ۲۰- ضریب نرمال کنندگی دترمینان اسلیتر کدام است؟

$\sqrt{N!}$

$\frac{1}{N^2}$

$\frac{1}{\sqrt{N!}}$

$\frac{1}{\sqrt{N}}$

- ۲۱- کدام تقریب در مدل اربیتال مولکولی هوکل بکار میرود؟

۱. تابع توصیف کننده سیستم پای بصورت دترمینانی از اربیتالهای تک الکترونی حاصل از ترکیب خطی اربیتالهای ۲S اتمهای کربن است.

۲. اربیتالهای مولکولی مناسب با روش اختلال تعیین میشوند.

۳. انتگرالهای کولنی همگی برابر یک هستند.

۴. انتگرالهای همپوشانی دواتم مجاور همگی برابر صفر هستند.

- ۲۲- بر اساس تقریب هوکل انرژی مولکول اتیلن کدام است؟

$2\alpha - 2\beta$

$2\alpha + 2\beta$

$2\alpha + \beta$

$\alpha + \beta$

- ۲۳- بر اساس تقریب هوکل انرژی سیستم بوتادین کدام است؟

$4\alpha - 2\beta$

$\alpha + \beta$

$4\alpha + 4\beta$

$2\alpha + 2\beta$

- ۲۴- بر اساس تقریب هوکل انرژی رزونانس بنزن کدام است؟

$4\alpha - 2\beta$

8β

$6\alpha + 8\beta$

$6\alpha + 6\beta$

- ۲۵- چند حالت کوانتومی هم انرژی به سومین تراز انرژی ذره در جعبه مکعبی نسبت داده میشود؟

۴. ۴

۶. ۳

۳. ۲

۱. ۱

سوالات تشریحی

۱/۲۰- نمره دانسیته احتمال را برای یک حالت دلخواه ذره در جعبه که با تابع حالت زیر توصیف شده است را بنویسید.

$$\Psi(x,t) = C_1 \sin\left(\frac{\pi}{L}x\right) e^{-iE_1 t/\hbar} + C_2 \sin\left(\frac{2\pi}{L}x\right) e^{-iE_2 t/\hbar}$$

۱/۲۰- نمره بر اساس مدل ذره در جعبه نشان دهید وجود ذره الکترون (بتا) در هسته اتم به عنوان یکی از اجزای دائمی آن مردود است.

$$h = 6.64 \times 10^{-34} \text{ J.s} \quad 10^{-14} \text{ m}^9$$

سری سوال: ۱ بک

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

تعداد سوالات: تستی: ۲۵ تشریحی: ۵

عنوان درس: شیمی فیزیک ۳

وشته تحصیلی/ گد درس: شیمی گرایش محض، شیمی (کاربردی)، شیمی (شیمی فیزیک) ۱۱۱۴۳۵۷

۱/۲۰ نمره

۳- مقدار قابل انتظار فاصله الکترون از هسته در حالت ۱s را حساب کنید.

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{\mu e^2}, \alpha = \frac{Z}{a_0}, \Psi_{1s}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \alpha^{3/2} e^{-\alpha r}$$

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

۱/۲۰ نمره

۴- چهار بیان مختلف از اصل طرد پائولی را بنویسید.

۱/۲۰ نمره

۵- یک دانه بسیار کوچک به جرم ۱ میکرو گرم با سرعت ۱ سانتی متر بر ثانیه حرکت میکند. هر گاه نامعینی در سرعت آن یک درصد باشد ، نامعینی در مکان آن چقدر است؟ $s = 6.64 \times 10^{-34}$

شماره سوال	پاسخ صحیح	وضعیت کلید	
1	ج	عادی	
2	ب	عادی	
3	ج	عادی	
4	ب	عادی	
5	ج	عادی	
6	د	عادی	
7	الف	عادی	
8	د	عادی	
9	ب	عادی	
10	ج	عادی	
11	الف	عادی	
12	ج	عادی	
13	د	عادی	
14	د	عادی	
15	الف	عادی	
16	ب	عادی	
17	ج	عادی	
18	ب	عادی	
19	ب	عادی	
20	ب	عادی	
21	د	عادی	
22	ج	عادی	
23	ب	عادی	
24	ج	عادی	
25	ب	عادی	

سری سوال: یک ۱

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

تعداد سوالات: تستی: ۲۵ تشریحی: ۵

عنوان درس: شیمی فیزیک ۳

روش تحصیلی/گد درس: شیمی گرایش محض، شیمی (کاربردی)، شیمی (شیمی فیزیک) ۱۱۱۴۲۵۷

استفاده از ماشین حساب ساده، ماشین حساب مهندسی مجاز است

سوالات تشریحی

نمره ۱/۲۰

$$P = \int_{-L}^L \psi^* \psi dk = \int_{-L}^L (c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2)^* (c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2) dk$$

$$\psi = c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2$$

نمره ۱/۲۰

-۲ فصل سوم صفحه ۷۲

نمره ۱/۲۰

-۳ فصل ۶ صفحه ۱۵۹ و ۱۶۰

نمره ۱/۲۰

- ۱- تابع موج یک منظومه چند الکترونی نسبت به جابجایی هر دو الکترون از الکترونها ضد متقارن است.
- ۲- هیچ دو الکترونی نمیتواند چهار عدد کوانتومی یکسان داشته باشد.
- ۳- وجود بیش از دو الکترون در هر اربیتال مجاز نیست.
- ۴- الکترونها با اسپین مخالف در هر اربیتال قرار دارند.

نمره ۱/۲۰

$$E = \frac{h^2}{8mL^2} = \frac{6.626 \times 10^{-34} \text{ Js}}{8 \times 9.1 \times 10^{-31} \text{ kg} \times (2 \times 10^{-2} \text{ m})^2} = 1.0 \times 10^{-15} \text{ J}$$

$$E = \frac{h^2}{8mL^2} = \frac{6.626 \times 10^{-34} \text{ Js}}{8 \times 9.1 \times 10^{-31} \text{ kg} \times (2 \times 10^{-2} \text{ m})^2} = 1.0 \times 10^{-15} \text{ J}$$

$$E = \frac{6.626 \times 10^{-34} \text{ Js}}{8 \times 9.1 \times 10^{-31} \text{ kg} \times (2 \times 10^{-2} \text{ m})^2} = 1.0 \times 10^{-15} \text{ J}$$

سری سوال: یک ۱

زمان آزمون (دقیقه): قسطی: ۵۰ تشریعی: ۶۰

تعداد سوالات: قسطی: ۲۵ تشریعی: ۵

عنوان درس: شیمی فیزیک ۳

رشه تحصیلی/گد درس: شیمی گرایش محض، شیمی (کاربردی)، شیمی (شیمی فیزیک) ۱۱۱۴۳۵۷

استفاده از ماشین حساب ساده مجاز است

۱- کدام گزینه زیر الزاماً حقیقی است و نمی‌تواند موهومی باشد.

۴. دامنه احتمال

۳. عملگر مومنتم

۲. تابع موج

۱. چگالی احتمال

۲- پاسخ عملگر \hat{D}_x بر تابع موج $\sin x$ کدام است؟

۴. یک

۳. صفر

۲. $\cos x$

۱. $\sin x$

۳- کدام عملگر زیر خطی نیست؟

۴. \hat{x}

۳. \hat{D}_x^2

۲. \hat{D}_x

۱. $\sqrt{\cdot}$

۴- به هر کمیت فیزیکی مشاهده پذیر یک عملگر وابسته است.

۴. هرمیتی و خطی

۳. مشتق

۲. مکان

۱. هرمیتی

۵- متوسط مقدار x برای تابع موج ذره در جعبه یک بعدی کدام است؟

۴. $2L$

۳. $L/2$

۲. $L/4$

۱. L

۶- در چه شرایطی چگالی احتمال مستقل از زمان است؟

۲. انرژی جنبشی مستقل از مکان باشد.

۱. تابع پتانسیل مستقل از مکان باشد.

۴. تابع پتانسیل مستقل از زمان باشد.

۳. انرژی جنبشی مستقل از زمان باشد.

۷- رابطه عدد موج کدام است؟

۴. $\sqrt{\frac{2mE}{\hbar}}$

۳. $\sqrt{\frac{2m\hbar}{E}}$

۲. $\sqrt{2m\hbar}$

۱. $\sqrt{2mE}$

۸- کدام سیستم زیر دارای انرژی پیوسته می‌باشد؟

۴. ذره در جعبه

۳. ذره آزاد

۲. اتم هیدروژن

۱. مولکول هیدروژن

سری سوال: ۱ بک

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

تعداد سوالات: قستی: ۲۵ تشریحی: ۵

عنوان درس: شیمی فیزیک ۳

رشنده تحصیلی / گد درس: شیمی گرایش محض، شیمی (کاربردی)، شیمی (شیمی فیزیک) ۱۱۱۴۳۵۷

۹- کدام یک تابع موج ذره در جعبه یک بعدی است؟

$$\sqrt{\frac{2}{L}} \cos\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$

$$\sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$

$$\sqrt{\frac{L}{2}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$

$$\sqrt{\frac{L}{2}} \cos\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$

۱۰- چگالی احتمال ذره در جعبه یک بعدی به ازای $n=2$ در کدام موقعیت صفر است؟

$x=L/6$

$x=L/3$

$x=L/2$

$x=L/4$

۱۱- مقدار خطأ در انرژی تابع موج ایستای ذره در جعبه کدام است؟

۱ . ۴

۰ . ۳

$$\frac{\hbar}{2}$$

\hbar

۱۲- تعداد همترازی برای تراز انرژی کدام است؟

$$E = \frac{6h^2}{8ma^2}$$

۶ . ۴

۱ . ۳

۲ . ۲

۳ . ۱

۱۳- اگر A تابع موج مربوط به $n=1$ مدل ذره در جعبه و B تابع موج مربوط به $n=2$ مدل ذره در جعبه باشد، مقدار انتگرال

$$\int_{all\ space} A^* B \ d\tau$$

۴. بینهایت

۰ . ۳

۲ . ۲

۱ . ۱

۱۴- با افزایش عدد کوانتمی، فاصله ترازهای انرژی در نوسانگ هماهنگ چگونه تغییر می کند؟

۱. بصورت خطی با فرکانس زیاد می شود.

۲. پیوسته می شود.

۳. بدون تغییر باقی می ماند.

سری سوال: ۱ بک

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

تعداد سوالات: قسمتی: ۲۵ تشریحی: ۵

عنوان درس: شیمی فیزیک ۳

رشه تحصیلی/گد درس: شیمی گرایش محض، شیمی (کاربردی)، شیمی (شیمی فیزیک) ۱۱۱۴۳۵۷

۱۵- کدام مورد در مورد چرخنده صلب صحیح است؟

۱. تراز انرژی بصورت خطی با m تغییر می کند.
 ۲. همزمان با چرخش، نوسان نیز انجام می شود.
 ۳. تبعه‌گنی (دیژنریسی) در تمام ترازها برابر با ۲ است.
 ۴. فاصله ترازها با افزایش m زیاد می شود.

۱۶- کدام رابطه زیر برابر با عملگر \hat{L}_Z در چرخنده صلب است؟

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \quad -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \quad -i\hbar \frac{\partial}{\partial \theta} \quad -i\hbar \frac{\partial}{\partial r}$$

۱۷- عملگر مجدور اندازه حرکت زاویه‌ای تابع کدام متغیر نیست؟

$$\theta, \phi \quad \phi \quad \theta \quad r$$

۱۸- مقدار انرژی چرخنده صلب در فضای ۳ بعدی به ازای $J=2$ کدام است؟

$$\frac{12\hbar^2}{2I} \quad \frac{6\hbar^2}{2I} \quad \frac{2\hbar^2}{2I} \quad 0$$

۱۹- انرژی اتم هیدروژن به کدام عدد کوانتمی وابسته است؟

$$1, m \quad m \quad 1, 2 \quad n$$

۲۰- تابع موج ψ_{1s} در اتم هیدروژن به کدام متغیر زیر وابسته است؟

$$\theta, \phi \quad r, \phi \quad r, \theta \quad r$$

۲۱- ویژه مقدار تابع موج اسپینی \hat{S}_Z برای عملگر $\alpha(\sigma)$ کدام است؟

$$-\frac{\hbar}{2} \quad \frac{\hbar}{2} \quad -1/2 \quad 1/2$$

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

تعداد سوالات: قسمتی: ۲۵ تشریحی: ۵

عنوان درس: شیمی فیزیک ۳

رشه تحصیلی/گد درس: شیمی گرایش محض، شیمی (کاربردی)، شیمی (شیمی فیزیک) ۱۱۱۴۳۵۷

سری سوال: ۱ بک

۲۲- مقدار dV در فضای قطبی کروی برابر کدام مورد زیر است؟

$$r^2 dr d\theta d\phi$$

$$r dr d\theta d\phi$$

$$r^2 \sin \phi dr d\theta d\phi$$

$$r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi$$

۲۳- واحد اتمی طول و انرژی کدام است؟

۴. متر، هارتی

۳. بوهر، هارتی

۲. بوهر، ژول

۱. متر، ژول

۲۴- بار موثر هسته در تقریب اسلیتر کدام مورد زیر است. فرض کنید که b ضریب حاصل باشد.

$$Z=Z/b$$

$$Z=Z+b$$

$$Z=Z-b$$

$$Z=b \times Z$$

۲۵- کدام ذره زیر فرمیون نیست؟

۴. فوتون

۳. نوترون

۲. پروتون

۱. الکترون

سوالات تشریحی

۱۰۰ نمره

۱- مقدار متوسط \hat{P}_x را برای ذره در جعبه یک بعدی محاسبه کنید.

۱۰۰ نمره

۲- ثابت کنید که $[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i \hbar \hat{L}_z$

۱۰۰ نمره

۳- تغییرات تابع توزیع شعاعی بر حسب r برای اوربیتال $1s$ رارسم کنید.

۱۰۰ نمره

۴- تفاوت فرمیون و بوزون را توضیح دهید.

۱۰۰ نمره

۵- دترمینان اسلیتر را برای N الکترون بنویسید.

وضعية كليد
هاسخ صحيح
شماره سؤال

الرقم	الحروف	الوضعية
1	الف	عادي
2	ب	عادي
3	الف	عادي
4	د	عادي
5	ج	عادي
6	د	عادي
7	د	عادي
8	ج	عادي
9	الف	عادي
10	ب	عادي
11	ج	عادي
12	الف	عادي
13	ج	عادي
14	ج	عادي
15	د	عادي
16	ج	عادي
17	الف	عادي
18	ج	عادي
19	الف	عادي
20	الف	عادي
21	ج	عادي
22	ج	عادي
23	ج	عادي
24	ب	عادي
25	د	عادي

سری سوال: یک ۱

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

تعداد سوالات: قسمتی: ۲۰ تشریحی: ۵

عنوان درس: شیمی فیزیک ۳

روش تحصیلی/گد درس: شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی (کاربردی)، شیمی گرایش محض ۱۱۱۴۳۵۷

استفاده از ماشین حساب ساده، ماشین حساب مهندسی مجاز است

۱- کدام گزینه زیر در مورد تکانه خطی صحیح نیست؟

- ۱. کمیتی برداری است.
- ۲. همراستا با بردار سرعت است.
- ۳. بزرگی آن برابر حاصلضرب جرم در سرعت است.
- ۴. مشتق نسبت به زمان بردار موضعی ذره است.

۲- کدام گزینه زیر رابطه دوبروی در مورد ماهیت موجی - ذره ای الکترون نشان می دهد؟

$$E = \frac{1}{2} h v \quad .4$$

$$E = h \frac{v}{\lambda} \quad .3$$

$$E = h v \quad .2$$

$$\lambda = \frac{h}{mv} \quad .1$$

۳-تابع دانسیته احتمال کدام گزینه زیر است؟

$$\psi/\psi^* \quad .4$$

$$|\psi|^2 \quad .3$$

$$\psi^* \quad .2$$

$$\psi \quad .1$$

۴- شرط نرمالیزه بودن تابع موج حرکت ذره در فضای سه بعدی کدام است؟

$$\int_V |\psi(\vec{r}, t)|^2 dV = 0 \quad .2$$

$$\int_V |\psi(\vec{r}, t)|^2 dV = 1 \quad .1$$

$$\int_V |\psi(\vec{r}, t)| dV = 0 \quad .4$$

$$\int_V |\psi(\vec{r}, t)| dV = 1 \quad .3$$

۵- اپراتور وابسته به هر کمیت فیزیکی مشاهده پذیر چه ویژگی دارد؟

- ۱. خطی است.
- ۲. هرمیتیک است.
- ۳. خطی و هرمیتیک است.
- ۴. حقیقی است.

۶- مقدار قابل انتظار مؤلفه X اندازه حرکت به ازای هر مقدار از انرژی ذره آزاد، E، چقدر است؟

$$\langle P_X \rangle = 2m/E \quad .4$$

$$\langle P_X \rangle = \sqrt{2mE} \quad .3$$

$$\langle P_X \rangle = \sqrt{2m/E} \quad .2$$

$$\langle P_X \rangle = \sqrt{E/2m} \quad .1$$

۷- انرژی نخستین حالت کوانتومی ذره در جعبه یک بعدی به طول L چقدر است؟

$$\frac{mh^2}{L^2} \quad .4$$

$$\frac{h^2}{8mL^2} \quad .3$$

$$8mL^2 \quad .2$$

$$\frac{mh^2}{8L^2} \quad .1$$

۸- انرژی دومین تراز ذره در جعبه سه بعدی با ابعاد a چقدر است؟

$$\frac{h^2}{4ma^2} \quad .4$$

$$\frac{2h^2}{ma^2} \quad .3$$

$$\frac{h^2}{8ma^2} \quad .2$$

$$\frac{6h^2}{8ma^2} \quad .1$$

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

تعداد سوالات: تستی: ۲۰ تشریحی: ۵

عنوان درس: شیمی فیزیک ۳

روش تعلیمی/گد درس: شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی (کاربردی)، شیمی گرایش محض ۱۱۱۴۲۵۷

۹- مفهوم فیزیکی جابجاپذیر بودن اپراتورها چیست؟

۱. کمیتهای وابسته به آنها به طور همزمان قابل شناخت هستند.
۲. وابسته به انرژی هستند.
۳. وابسته به مکان هستند.
۴. مستقل از زمان هستند.

۱۰- انرژی تراز آم یک چرخنده صلب در فضای سه بعدی از چه رابطه‌ای پیروی می‌کند؟

$$E_{rot} = (J+1)^2 \frac{\hbar^2}{2I} \quad .2$$

$$E_{rot} = J^2 \frac{\hbar^2}{2I} \quad .1$$

$$E_{rot} = J(J+1)^2 \frac{\hbar^2}{2I} \quad .4$$

$$E_{rot} = J(J+1) \frac{\hbar^2}{2I} \quad .3$$

۱۱- در مثال ذره در جعبه سه بعدی، به دومین تراز انرژی چند حالت کوانتومی هم انرژی وابسته است؟

۴ .۴

۳ .۳

۲ .۲

۱ .۱

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

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

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

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

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

۱۳- هرگاه انرژی حالت اصلی اتم هیدروژن E_H باشد، انرژی مجاز تراز n این اتم از چه رابطه‌ای محاسبه می‌شود؟

$$E_n = \frac{n^2 E_H}{8h^2} \quad .4$$

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

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

$$E_n = \frac{E_H}{n^2} \quad .1$$

۱۴- تکانه زاویه‌ای کل (\vec{J}) چه ارتباطی با تکانه اربیتالی (\vec{l}) و تکانه اسپین تک الکترون (\vec{s}) دارد؟

$$\vec{J} = \vec{l} - \vec{s} \quad .4$$

$$\vec{J} = \vec{l} + \vec{s} \quad .3$$

$$\vec{J} = \sqrt{\vec{l} - \vec{s}} \quad .2$$

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

۱۵- پتانسیل اختلال در هامیلتونی اتم هلیم کدام جمله است؟

$$-\frac{1}{2}(\nabla_1^2 + \nabla_2^2) \quad .4$$

$$\frac{Z}{r_1} + \frac{Z}{r_2} \quad .3$$

$$\frac{Z}{r_1} \quad .2$$

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

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

تعداد سوالات: قستی: ۲۰ تشریعی: ۵

عنوان درس: شیمی فیزیک ۳

رشنده تحصیلی / گد درس: شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی (کاربردی)، شیمی گرایش محض ۱۱۱۴۳۵۷

سری سوال: ۱ بک

۱۶- ذرات دارای اسپین نیمه صحیح چه نوع تابع موجی دارند؟

۴. حقیقی

۳. موهومی

۲. ضد متقارن

۱. متقارن

۱۷- بر اساس روش تغییر پارامترها هرگاه کوچکترین مقدار ویژه هامیلتونی یک منظومه E_0 و تابع ویژه مربوط ψ_0 باشد، با هر تابع Φ غیر از ψ_0 ، خواهیم داشت:

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

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

$$\int \psi_0^* \hat{H} \psi_0 d\tau \leq E_0. \quad ۳$$

$$\int \psi_0^* \hat{H} \psi_0 d\tau \geq E_0. \quad ۴$$

۱۸- مطالعه حرکتهای چرخشی، ارتعاشی و الکترونی مولکول بطور مستقل از هم در مکانیک کوانتومی بر چه پایه‌ای انجام می‌شود؟

۲. روش اسلیتر

۱. قاعده هوند

۴. تقریب بورن – اپنهایمر

۳. قضیه کویمان

۱۹- کدام گزینه زیر در مورد نظریه هوکل صحیح است؟

۱. یک روش تجربی است.

۲. برای توصیف وضع الکترونها π به کار می‌رود.

۳. خواص مولکولهایی مانند بوتان را به درستی توصیف می‌کند.

۴. یک روش فقط برای مولکولهای خطی قابل استفاده است.

۲۰- در تقریب هوکل اریتالهای مولکولی تک الکترونی مناسب با چه روشی تعیین می‌شود؟

۲. دترمینان اسلیتر

۱. روش تغییر پارامترها

۴. ترکیب اریتالهای مولکولی

۳. روش اختلال

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

تعداد سوالات : تستی : ۲۰ تشریحی : ۵

عنوان درس : شیمی فیزیک ۳

روش تجربی / گد درس : شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی (کاربردی)، شیمی گرایش محض ۱۱۱۴۳۵۷

سوالات تشریحی

۱.۲۰ نمره

- مجموع دو اپراتور \hat{x} و \hat{D}_x را بر تابع $\sin aX$ اثر دهید.

۱.۲۰ نمره

- انرژی اولین تراز انرژی چرخشی مولکول NO به عنوان یک چرخنده صلب را محاسبه کنید. معان اینرسی این مولکول $16.5 \times 10^{-47} \text{ kg m}^2$ است.

$$h = 6.6 \times 10^{-34} \text{ Js}$$

۱.۲۰ نمره

- انرژی ترازهای صفرم تا سوم انرژی برای چرخنده صلب سه بعدی را با ذکر تعداد حالت‌های همتراز وابسته به هر تراز مشخص کنید.

۱.۲۰ نمره

- دترمینان اسلیتر را برای یک منظومه دو الکترونی بنویسید.

۱.۲۰ نمره

- تقریب‌های منظور شده در نظریه هوکل را ذکر کنید.

رقم سؤال	ماسخ صحيح	وضعية كليد	عادي
1	د	—	عادي
2	الف	— —	عادي
3	ج	— — —	عادي
4	الف	— — —	عادي
5	ج	— — — —	عادي
6	ج	— — — —	عادي
7	ج	— — — —	عادي
8	الف	— — — —	عادي
9	الف	— — — —	عادي
10	ج	— — — —	عادي
11	ج	— — — —	عادي
12	ب	— — — —	عادي
13	الف	— — — —	عادي
14	ج	— — — —	عادي
15	الف	— — — —	عادي
16	ب	— — — —	عادي
17	ب	— — — —	عادي
18	د	— — — —	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: شیمی فیزیک ۳

روش تحصیلی/گد درس: شیمی گرایش محض، شیمی (کاربردی)، شیمی (شیمی فیزیک) ۱۱۱۴۳۵۷

استفاده از ماشین حساب ساده، ماشین حساب مهندسی مجاز است

۱- فرکانس یک سیستم نوسانگر هماهنگ توسط کدام رابطه تعیین می‌شود؟

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

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

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

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

۲- ضد متقارن بودن دترمینان اسلیتر ناشی از کدام مورد است؟

۱. در دترمینان اسلیتر منظومه‌ی الکترونی، دو ستون نمی‌توانند با هم برابر باشند.

۲. تعویض مختصات دو الکترون معادل با تعویض دو سطر دترمینان است.

۳. در اثر جابجایی دو سطر یا دو ستون دترمینان، علامت آن عوض می‌شود.

۴. تمام موارد صحیح است.

۳- تعداد جملات در هامیلتونی اتم هلیوم چیست؟

۷. ۴

۴. ۳

۵. ۲

۶. ۱

۴- رابطه تکانه زاویه‌ای اسپین الکترون و ممان مغناطیس کدام است؟

$$\mu = -\frac{e}{2m}s . ۴$$

$$\mu = -g \frac{e}{2m}s^2 . ۳$$

$$\mu = -g \frac{e}{2m}s . ۲$$

$$s = -\frac{e}{2m}\mu . ۱$$

۵- پیامد جابجا پذیر بودن دو اپراتور و داشتن توابع ویژه مشترک چیست؟

۱. توابع ویژه آنها یک دنباله کامل را تشکیل نمی‌دهند.

۲. توابع ویژه آنها متعامد هستند.

۳. اصل عدم قطعیت در مورد این دو اپراتور صادق است.

۴. مشاهده پذیرهای فیزیکی آنها همزمان قابل شناخت هستند.

۶- کدام حالت نوسانگر هماهنگ دارای پاریتی فرد است؟

۲. حالت‌هایی با اعداد کوانتمویی زوج

۱. حالت‌هایی با اعداد کوانتمویی فرد

۴. هیچکدام

۳. حالت‌هایی که متوسط اندازه حرکت آنها صفر هستند.

۷- کدام مقدار انرژی برای ذره در جعبه سه بعدی صادق است؟ ($\epsilon = h^2/8ma^2$)

۱۶۸ . ۴

۱۴۸ . ۳

۴۸ . ۲

۱۰۸ . ۱

۸- اهمیت هرمیتی بودن یک اپراتور بر اساس کدام اصل موضوعه بیان می‌شود؟

۴. چهارم

۳. اول

۲. دوم

۱. سوم

سری سوال: ۱ بک

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

تعداد سوالات: قسمتی: ۲۰ تشریعی: ۵

عنوان درس: شیمی فیزیک ۳

رشنده تحصیلی / گد درس: شیمی گرایش محض، شیمی (کاربردی)، شیمی (شیمی فیزیک) ۱۱۱۴۳۵۷

۹- نمایش توزیع زاویه‌ای احتمال برای الکترون به چه طریقی قابل ترسیم است؟

۱. ثابت گرفتن r و θ
۲. ثابت گرفتن زاویه ϕ
۳. ثابت گرفتن زاویه θ
۴. ثابت گرفتن r

۱۰- برای حل معادله شرودینگر چرخنده صلب از چه تکنیکی استفاده می‌شود؟

۱. بسط سری توانی
۲. تغییر متغیرها
۳. تفکیک متغیرها
۴. تغییر مختصات

۱۱- کدام گزینه در مورد نظریه هوکل صحیح نیست؟

۱. انتگرهای همپوشانی همگی برابر یک فرض می‌شوند.

۲. این نظریه برای توصیف الکترونها سیستم‌های مزدوج صادق است.

۳. در این نظریه برای هر اتم کربن در سیستم‌های مزدوج یک اربیتال $2p$ منظور می‌شود.

۴. انتگرهای کولنی همگی برابر فرض می‌شوند.

۱۲- معادل ماتریسیتابع اسپینی β کدام است؟

$$\begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}$$

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

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

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

۱۳- کدام عبارت درست است؟

۱. $[S_x, S_y] = -\hbar S_z$
۲. $[S_x, S_y] = -i\hbar S_z$
۳. $[S_x, S_y] = \hbar S_z$
۴. $[S_x, S_y] = i\hbar S_z$

۱۴- کدام جمله صحیح است؟

۱. تکانه زاویه‌ای مضرب صحیحی از $h/2\pi$ است.
۲. مؤلفه Z تکانه زاویه‌ای مضربی از $h/2\pi$ است.
۳. تکانه زاویه‌ای متناسب با h است.
۴. موارد ب و ج

۱۵- شرایط مرزی سیستم چرخنده صلب کدام است؟

۱. سرعت‌های مجاز
۲. ثابت بودن r
۳. وجود نیروی مرکزی
۴. هیچ کدام

۱۶- کدام دو اپراتور تعویض پذیرند؟

$$D_x, x^4 \quad p_x, x^2 \quad p_x, x^2 \quad D_x, p_x$$

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

تعداد سوالات : تستی : ۲۰ تشریحی : ۵

عنوان درس : شیمی فیزیک ۳

وشته تحصیلی / گد درس : شیمی گرایش محض، شیمی (کاربردی)، شیمی (شیمی فیزیک) ۱۱۱۴۳۵۷

۱۷- کدام عبارت در مورد سیستم های چند ذره ای تمییز ناپذیر صادق است؟

۱. مقدار ویژه اپراتور تعویض پذیری برابر یک باشد.

۲. تابع اسپین اربیتال آن باید تابع ویژه اپراتور تعویض پذیری باشد.

۳. تابع اسپین اربیتال آن باید نسبت به اپراتور تعویض پذیری متقارن باشد.

۴. تمام موارد صحیح است.

۱۸- رابطه $\frac{\hbar}{4\pi} \geq \Delta z \Delta p_z$ ، بیانگر کدام اصل است؟

۱. اصل محدودیت

۲. اصل عدم قطعیت

۳. اصل متناظر بودن

۴. اصل دوبروی

۱۹- برای بررسی کلاسیکی نوسانگر هماهنگ از کدام تابع استفاده می شود؟

۱. هامیلتونی

۲. انرژی کل

۳. لاغرانژ

۴. انرژی پتانسیل

۲۰- تابع موج کامل سیستم تک الکترونی شامل چند متغیر است؟

۱. ۲

۲. ۳

۳. ۴

۴. ۶

سری سوال: ۱ بک

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

تعداد سوالات: قسمتی: ۲۰ تشریحی: ۵

عنوان درس: شیمی فیزیک ۳

وشته تحصیلی / گد درس: شیمی گرایش محض، شیمی (کاربردی)، شیمی (شیمی فیزیک) ۱۱۱۴۳۵۷

سوالات تشریحی

۱.۲۰ نمره

-۱ تاثیر اپراتور $p_x^2 + x^2$ روی تابع e^{-ax^2} را بنویسید.

۱.۲۰ نمره

-۲ چند جمله‌ای های هرمیت بصورت زیر تعریف می‌شوند: $H_n(\zeta) = (-1)^n e^{\zeta^2} \frac{d^n}{d\zeta^n}(e^{-\zeta^2})$ مقادیر تابع هرمیت از مرتبه‌های $n=0$ تا $n=3$ را بدست آورید.

۱.۲۰ نمره

-۳ برای مولکول CO با طول پیوند ۱.۱۳ آنگستروم بر اساس تقریب چرخنده صلب سه بعدی طول موج اولین خط جذبی را بر حسب سانتی متر بدست آورید.

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

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

۱.۲۰ نمره

-۴ مقدار قابل انتظار فاصله الکترون اتم هیدروژن از هسته در حالت S₁ بدست آورید.

$$\Psi_{1s}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{a_0} \right)^{3/2} e^{-r/a_0}$$

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

۱.۲۰ نمره

-۵ توابع ویژه اپراتور S_z و مقادیر ویژه هر کدام از آنها را بنویسید. ماتریس نمایش دهنده اپراتور S^2 را بدست آورید.

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

سری سوال: یک ۱

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

تعداد سوالات: قسمتی: ۲۰ تشریحی: ۵

عنوان درس: شیمی فیزیک ۳

روش تحقیلی/گد درس: شیمی گرایش محض، شیمی (کاربردی)، شیمی (شیمی فیزیک) ۱۱۱۴۳۵۷

استفاده از ماشین حساب ساده مجاز است

۱- کدام عبارت زیر دانسیته احتمال نامیده می شود؟

$$|\Psi|^2 d\tau \quad .4$$

$$\Psi \quad .3$$

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

$$|\Psi|^2 r d\tau \quad .1$$

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

۴. هرمیتیک

۳. اورتوگنال

۲. متعامد

۱. خطی و هرمیتیک

($\hat{D}_x \equiv \frac{d}{dx}$) با مقدار ویژه e^{ax} -3 تابع ویژه \hat{D}_x است.

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

$$ax^2 \quad .3$$

$$ax \quad .2$$

$$a \quad .1$$

۴- انحراف استاندارد کمیتی مانند x از کدام رابطه زیر به دست می آید؟

$$(\Delta x)^2 = \langle x^2 \rangle - x \quad .2$$

$$(\Delta x)^2 = \langle x \rangle^2 - x \quad .1$$

$$(\Delta x)^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 \quad .4$$

$$(\Delta x)^2 = \langle x \rangle^2 - \langle x^2 \rangle \quad .3$$

۵- انرژی اولین تراز مجاز ذره ای به جرم m در جعبه یک بعدی به طول L چقدر است؟

$$\frac{h}{4mL^2} \quad .4$$

$$\frac{h^2}{4mL^2} \quad .3$$

$$\frac{h^2}{8mL^2} \quad .2$$

$$0 \quad .1$$

۶- در مثال ذره در جعبه یک بعدی نمودار تغییرات دانسیته احتمال بر حسب فاصله به ازای $n=1$ چند گره دارد؟

$$3 \quad .4$$

$$2 \quad .3$$

$$1 \quad .2$$

$$0 \quad .1$$

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

$$4 \quad .4$$

$$3 \quad .3$$

$$2 \quad .2$$

$$1 \quad .1$$

۸- ممان اینرسی مولکول دو اتمی با جرم کاسته m' و طول پیوند r از کدام رابطه زیر به دست می آید؟

$$I = m' r^2 \quad .4$$

$$I = m' r \quad .3$$

$$I = m' / r^2 \quad .2$$

$$I = m' / r \quad .1$$

۹- اپراتور تکانه زاویه ای در راستای Z معادل کدام گزینه زیر است؟

$$\hat{L}_z = \frac{\hbar^2}{i} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \quad .4$$

$$\hat{L}_z = \frac{\hbar^2}{i} \frac{\partial^2}{\partial \phi \partial \theta} \quad .3$$

$$\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi} \quad .2$$

$$\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \quad .1$$

سری سوال: ۱ بک

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

تعداد سوالات: قستی: ۲۰ تشریعی: ۵

عنوان درس: شیمی فیزیک ۳

روش تحقیلی/گد درس: شیمی گرایش محض، شیمی (کاربردی)، شیمی (شیمی فیزیک) ۱۱۱۴۳۵۷

۱۰- انرژی اولین تراز یک چرخنده صلب در فضای سه بعدی چقدر است؟

$$\frac{2\hbar}{I} \cdot ۴$$

$$\frac{\hbar}{I} \cdot ۳$$

$$\frac{\hbar^2}{I} \cdot ۲$$

۰ . ۱

۱۱- در یک چرخنده صلب در فضای سه بعدی، به هر تراز انرژی با شماره J ، چند حالت وابسته است؟

$J(J+1)$. ۴

$2J+1$. ۳

$J(2J+1)$. ۲

۱ . ۱

۱۲- کدام عبارت زیر تابع توزیع شعاعی را به درستی نشان می دهد؟

$$P(r) = 4\pi r R^2(r) \cdot ۲$$

$$P(r) = 4\pi r R(r) \cdot ۱$$

$$P(r) = 4\pi r^2 R^2(r) \cdot ۴$$

$$P(r) = 4\pi r^2 \cdot ۳$$

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

$4n$. ۴

$2n$. ۳

$2n^2$. ۲

n^2 . ۱

۱۴- اولین خط طیفی سری بالمر، ناشی از چه نوع جهشی بین ترازهای اصلی اتم هیدروژن است؟

$4 \rightarrow 1$. ۴

$2 \rightarrow 1$. ۳

$3 \rightarrow 1$. ۲

$3 \rightarrow 2$. ۱

۱۵- در کدام روش حل معادله شرودینگر از یک تابع آزمون استفاده می شود؟

۱. حل دقیق معادله شرودینگر برای اتم هیدروژن

۴. روش محاسبه اختلال

۲. حل دقیق معادله شرودینگر برای اتم هیلیم

۳. روش تغییر پارامترها

۱۶- ذراتی با اسپین نیمه صحیح تابع موجی دارند.

۴. موهمی

۳. زوج

۲. ضد متقارن

۱. متقارن

۱۷- برای تعیین تابع موجی ضد متقارن منظومه های چند الکترونی از استفاده می کنیم.

۴. اصل آفبا

۳. دترمینان اسلیتر

۲. اثر زیمان

۱. قضیه کویمان

۱۸- نظریه هوکل برای بررسی کدام مولکول زیر کاربرد ندارد؟

۴. بوتادی ان

۳. اتیلن

۲. سیکلووهگزان

۱. بنزن

۱۹- در روش هوکل اوربیتالهای مولکولی تک الکترونی مناسب، با چه روشی به دست می آیند؟

۲. ترکیب اوربیتالهای اتم هیدروژن

۴. تغییر پارامترها

۱. ترکیب اوربیتالهای اتم هیلیم

۳. اختلال

سری سوال: ۱ بک

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

تعداد سوالات: قستی: ۲۰ تشریحی: ۵

عنوان درس: شیمی فیزیک ۳

رشنده تحصیلی / گد درس: شیمی گرایش محض، شیمی (کاربردی)، شیمی (شیمی فیزیک) ۱۱۱۴۳۵۷

-۲۰- مقدار انتگرالهای همپوشانی، S_{ij} ، در روش هوکل چقدر است؟ ($j \neq i$)

$ij . ۴$

$2ij . ۳$

۱ . ۲

۰ . ۱

سوالات تشریحی

۱،۲۰

-۱- اپراتور $\hat{x}\hat{D}_x$ را بر روی دو تابع $\sin x$ و x^2 تأثیر دهید.

۱،۲۰

-۲- سه تراز اول انرژی را برای ذره ای به جرم m در جعبه سه بعدی مکعبی با ابعاد a با ذکر تعداد حالتها وابسته به آنها مشخص کنید.

۱،۲۰

-۳- در مورد مفهوم فیزیکی جابجاپذیری اپراتورها، با ذکر مثال، توضیح دهید.

۱،۲۰

-۴- در مورد ماهیت هریک از اعداد کوانتومی n, l, m که با استفاده از آنها اوربیتال اتمی $(\psi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi))$ توصیف می شوند، توضیح دهید.

۱،۲۰

-۵- هامیلتونی اتم هلیم را بنویسید و در مورد هر یک از جملات آن به اختصار توضیح دهید.

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

سری سوال: یک ۱

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

تعداد سوالات: قسمتی: ۲۰ تشریعی: ۵

عنوان درس: شیمی فیزیک ۳

رشنده تحصیلی / گد درس: شیمی گرایش محض، شیمی (کاربردی) ۱۱۱۴۳۵۷

استفاده از ماشین حساب ساده، ماشین حساب مهندسی مجاز است

۱- تعداد جملات در هامیلتونی اتم هلیوم چیست؟

۷. ۴

۴. ۳

۶. ۲

۵. ۱

۲- تکانه زاویه‌ای اسپینی الکترون کدام است؟

$\frac{3}{4}\hbar^2$

$\frac{1}{2}\hbar$

$\frac{\sqrt{3}}{2}\hbar$

$\frac{\sqrt{3}}{4}\hbar^2$

۳- اهمیت هرمیتی بودن یک اپراتور بر اساس کدام اصل موضوعه بیان می‌شود؟

۴. چهارم

۳. سوم

۲. دوم

۱. اول

۴- تأثیر اپراتور $\hat{x} \hat{D}_x^\alpha$ روی تابع $e^{\alpha x}$ کدام است؟

$x^2 \alpha e^{\alpha x}$

$\alpha e^{\alpha x}$

$x \alpha e^{\alpha x}$

$x e^{\alpha x}$

۵- کدام عبارت بیانگر انرژی‌های مجاز اتم هیدروژن است؟ (EH انرژی حالت پایه اتم هیدروژن است)

$E_n = -E_H / n^2$

$E_n = E_H / n^2$

$E_n = n^2 / E_H$

$E_n = E_H n^2$

۶- شرط تبدیل معادله شرودینگر تابع زمان به دو معادله مستقل کدام است؟

۲. اندازه حرکت ثابت باشد.

۱. نیرو پایستار باشد.

۴. پتانسیل تابع زمان باشد.

۳. پتانسیل ثابت باشد.

۷- در مدل هوکل انرژی عدم استقرار چگونه تعریف می‌شود؟

۱. اختلاف بین انرژی سیستم P هیدورکربن N اتمی با انرژی الکترونهای P مربوط به $2N$ مولکول اتیلن

۲. اختلاف بین انرژی سیستم P هیدورکربن N اتمی با انرژی الکترونهای P مربوط به $N/2$ مولکول اتیلن

۳. اختلاف بین انرژی سیستم P هیدورکربن N اتمی با انرژی الکترونهای P مربوط به N مولکول اتیلن

۴. اختلاف بین انرژی سیستم P هیدورکربن N اتمی با انرژی الکترونهای P مربوط به مولکول اتیلن

سری سوال: ۱ بک

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

تعداد سوالات: قسمتی: ۲۰ تشریعی: ۵

عنوان درس: شیمی فیزیک ۳

رشه تحصیلی/گد درس: شیمی گرایش محض، شیمی (کاربردی) ۱۱۱۴۳۵۷

۸- پیامد جابجا پذیر بودن دو اپراتور و داشتن توابع ویژه مشترک چیست؟

۱. توابع ویژه آنها متعامد هستند.

۲. مشاهده پذیر های فیزیکی آنها همزمان قابل شناخت هستند.

۳. توابع ویژه آنها یک دنباله کامل را تشکیل نمی دهند.

۴. اصل عدم قطعیت در مورد این دو اپراتور صادق است.

۹- کدام مقدار انرژی برای ذره در جعبه سه بعدی صادق است؟ ($e=h^2/8ma^2$)

۱۶۴ .۴

۱۴۴ .۳

۱۰۴ .۲

۴۴ .۱

۱۰- درجه همترازی چرخنده صلب در صفحه کدام است؟

۴. ۲ یا ۱ است.

۳. همواره ۲ است.

$2j+1$.۲

۱. همواره ۳ است.

۱۱- حل معادله شرویدینگر نوسانگر هماهنگ منجر به کدام معادله می شود؟

۴. لاغر

۳. لاگرانژ

۲. هرمیت

۱. لزاندر

۱۲- هر گاه برای مولکول F_2 با جرم مولکولی ۳۸ ثابت نیرو ۰.۰۰۴۵ نیوتون بر متر باشد، انرژی نقطه صفر کدام است؟ (بر حسب الکترون ولت)

۰/۲۳۲ .۴

۰/۱۱۶ .۳

۰/۱۱۰ .۲

۰/۰۵۵ .۱

۱۳- ماتریس های پائولی معرف چیست؟

۱. معرف مقادیر ویژه اپراتور گشتاور زاویه ای اسپینی

۲. بیانگر مقادیر ویژه مولفه های اپراتور گشتاور زاویه ای اسپینی

۳. بیانگر مؤلفه های گشتاور زاویه ای اسپینی

۴. بیانگر حالت های اسپینی

۱۴- برای حل معادله شرویدینگر چرخنده صلب از چه تکنیکی استفاده می شود؟

۴. تغییر متغیر

۳. تغییر مختصات

۲. بسط سری توانی

۱. تفکیک متغیرها

۱۵- برای چرخنده صلب سه بعدی کدام عبارت صحیح است؟

$L^2 = \sqrt{j(j+1)}\hbar^2$.۴

$E = j^2\hbar^2/2I$.۳

$E = j\hbar^2/2I$.۲

$H = L^2/2I$.۱

سری سوال: ۱ بک

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

تعداد سوالات: نستی: ۲۰ تشریحی: ۵

عنوان درس: شیمی فیزیک ۳

رشنده تحصیلی / گد درس: شیمی گرایش محض، شیمی (کاربردی) ۱۱۱۴۳۵۷

۱۶- کدام عبارت بیانگر قضیه تغییر است؟

۱. انرژی واقعی سیستم همواره از انرژی محاسبه ای کوچکتر است.

۲. انرژی محاسبه ای همواره کوچکتر از انرژی واقعی سیستم است.

۳. انرژی تنها به نوع هامیلتونی وابسته بوده و مقدار آن همواره از مقدار تئوری کوچکتر است.

۴. هامیلتونی تنها وابسته به مختصان مکانی ذره بوده و انرژی همواره کوچکتر از مقدار محاسبه ای است.

۱۷- در سیستم چرخنده صلب کدام مورد موجب ایجاد عدد کوانتموی می شود؟

۱. تک مقدار بودن تابع موج

۲. پیوسته بودن تابع موج

۳. متعامد بودن توابع موج

۱۸- مقدار قابل انتظار انرژی پتانسیل در اتم هیدروژن کدام است؟ (بر حسب الکترون ولت)

-27.2 .۴ 27.2 .۳ -13.6 .۲ 13.6 .۱

۱۹- توابع ویژه اپراتور S_z^2 کدامند؟

۱. توابع ویژه اپراتور S_z

۲. توابع پاولینگ

۲۰- نمایش توزیع زاویه ای احتمال برای الکترون به چه طریقی قابل ترسیم است؟

۱. ثابت گرفتن زاویه θ

۲. ثابت گرفتن r و θ

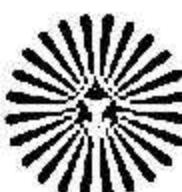
۳. ثابت گرفتن r

۴. الف و ج

β, α

۳. β, α

۴. ثابت گرفتن زاویه φ



سری سوال: ۱ بک

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

تعداد سوالات: تستی: ۲۰ تشریحی: ۵

عنوان درس: شیمی فیزیک ۳

وشته تحصیلی/گد درس: شیمی گرایش محض، شیمی (کاربردی) ۱۱۱۴۳۵۷

سوالات تشریحی

۱ نمره -۱ برای مولکول بوتادین بر اساس تقریب هوکل مقادیر انرژی الکترون‌های P را بدست آورده انرژی عدم استقرار را محاسبه کنید.

۱ نمره -۲ $S^2 = -\frac{3}{4}\hbar \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$ ثابت کنید؟

۱ نمره -۳ مقدار ΔP_x را برای حالت $v=0$ نوسانگ هماهنگ بدست آورید.

$$\psi_0 = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/2} e^{-\alpha x^2/2}$$

$$\int_0^\infty x^2 e^{-\alpha x^2} dx = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha^3}} \quad \text{و} \quad \int_0^\infty x e^{-\alpha x^2} dx = \frac{1}{2\alpha} \quad \text{و} \quad \int_0^\infty e^{-\alpha x^2} dx = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$$

می دانیم:

۱ نمره -۴ نشان دهید: $L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}$

۱ نمره -۵ ضریب نرمال گندگی توابع موج چرخنده صلب دو بعدی را بدست آورید.

1114357 - 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	5	-	ج - د
15	-	-	ج - د
16	-	-	ج - د
17	-	-	ج - د
18	+	-	ج - د
19	+	-	ج - د
20	-	-	ج - د

استفاده از ماشین حساب مهندسی مجاز است

۱- کدام گزینه زیر بیان کننده اصل موضوعه سوم مکانیک کوانتوم است؟

$$dP = |\psi|^2 dV \quad .\ ۴$$

$$\hat{H}\psi = E\psi \quad .\ ۳$$

$$\langle \Delta x \rangle^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 \quad .\ ۲$$

$$\langle a \rangle = \frac{\int \Psi^* \hat{A} \Psi dV}{\int \Psi^* \Psi dV} \quad .\ ۱$$

۲- کدام گزینه در مورد تابع موج سیستم صحیح نیست؟

۱. شامل همه معلومات فیزیکی قابل دسترس در آن حالت است.

۲. تابعی از مختصات مکانی و زمان است.

۳. چگالی احتمال بودن ذره در حجم کوچک $dV = |\psi|^2 dV$ بصورت محاسبه می شود.

۴. در تمام فضا پیوسته و حقیقی است

۳- کدام مورد از خواص اپراتور کمیتهای فیزیکی مشاهده پذیر می باشد؟

۴. خطی و هرمیتی

۳. موهومنی

۲. حقیقی

۱. غیر خطی

۴- کدام گزینه درست نیست؟

$$\hat{H}\Psi = E\Psi \quad .\ ۴$$

$$\hat{p}_x^2 = -\frac{\hbar^2}{i^2} \hat{D}_x^2 \quad .\ ۳$$

$$\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \quad .\ ۲$$

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \quad .\ ۱$$

۵- تأثیر اپراتور $\hat{D}_x \hat{x}$ بر روی تابع $e^{\alpha x}$ کدام است؟

$$xe^{\alpha x} \quad .\ ۴$$

$$e^{\alpha x} \quad .\ ۳$$

$$(1 + \alpha x)e^{\alpha x} \quad .\ ۲$$

$$\alpha e^{\alpha x} \quad .\ ۱$$

۶- قسمت زمانی تابع حالت، $(t)\varphi$ ، کدام است؟

$$e^{iht/E} \quad .\ ۴$$

$$e^{-iht/E} \quad .\ ۳$$

$$e^{iEt/\hbar} \quad .\ ۲$$

$$e^{-iEt/\hbar} \quad .\ ۱$$

۷- مقدار قابل انتظار نکانه برای ذره آزاد به جرم m و انرژی E در راستای مثبت محور x کدام است؟

$$k\hbar \quad .\ ۴$$

$$-\hbar \quad .\ ۳$$

$$-\sqrt{2mE} \quad .\ ۲$$

$$\sqrt{2mE} \quad .\ ۱$$

۸- توابع ویژه قابل قبول اپراتور \hat{H} مجموعه‌ای را تشکیل می‌دهند.

۴. هارمونیک

۳. متعامد و نرمال

۲. نرمال

۱. متعامد

۹- کدام گزینه جابجاپذیری اپراتورها را بدرستی نشان می‌دهد؟

$$[\hat{L}^2, \hat{H}] \neq 0 \quad .\ ۴$$

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_y] \neq 0 \quad .\ ۳$$

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_y] = 0 \quad .\ ۲$$

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = 0 \quad .\ ۱$$

سری سوال: ۱ بک

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

تعداد سوالات: قسمتی: ۲۰ تشریعی: ۵

عنوان درس: شیمی فیزیک ۳

رشنده تخصصی / گد درس: شیمی گرایش محض، شیمی (کاربردی) ۱۱۱۴۳۵۷

۱۰- هم ترازی چرخنده صلب سه بعدی به ازای هر مقدار کوانتومی انرژی چگونه است؟

J-1 . ۴

J2+1 . ۳

2J . ۲

۱. بدون هم ترازی

۱۱- پتانسیل حاکم بر منظومه های تک الکترونی کدام است؟

$-\frac{1}{2}kx^2$. ۴

$\frac{1}{2}kx^2$. ۳

$K \frac{Ze^2}{r}$. ۲

$-K \frac{Ze^2}{r}$. ۱

۱۲- کدام گزینه درست نمی باشد؟

۱. انرژی منظومه تک الکترونی فقط به عدد کوانتومی n وابسته است.

۲. عدد کوانتومی ۱ تعیین کننده قدر مطلق تکانه زاویه ای الکترونی است.

۳. عدد کوانتومی m تعیین کننده مولفه تکانه زاویه ای نسبت به محور OZ است.

۴. در منظومه تک الکترونی $2n^2$ حالت هم تراز پیش بینی می شود.

۱۳- حل معادله شرودینگر برای کدامیک از منظومه های زیر بطور دقیق امکان پذیر نمی باشد؟

C^{2+} . ۴

Li^{2+} . ۳

He^+ . ۲

H . ۱

۱۴- انرژی حالت پایه اتم هیدروژن $E = -13/56 \text{ eV}$ است. کدام گزینه انرژی تراز سوم را نشان می دهد؟

-6/78 eV . ۴

-3/39 eV . ۳

-4/52 eV . ۲

-1/51 eV . ۱

۱۵- کدامیک از گزینه های زیر درست است؟

$\hat{S}_z \alpha(\sigma) = -\frac{\hbar}{2} \beta(\sigma)$. ۴

$\hat{S}_z \alpha(\sigma) = \frac{\hbar}{2} \beta(\sigma)$. ۳

$\hat{S}_z \beta(\sigma) = -\frac{\hbar}{2} \beta(\sigma)$. ۲

$\hat{S}_z \beta(\sigma) = \frac{\hbar}{2} \beta(\sigma)$. ۱

۱۶- کدام مورد از روش های تقریبی برای حل منظومه های چند الکترونی نمی باشد؟

۴. اصل پاولی

۳. تقریب اسلیتر

۲. محاسبه اختلال

۱. تغییر پارامترها

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

۴. جابجای پذیر

۳. ضد متقارن

۲. جابجای پذیر

۱. متقارن

۱۸- کدام گزینه در مورد نظریه هوکل درست نمی باشد؟

۱. یک روش تقریبی است.

۲. مشتق از نظریه MO-LCAO است.

۳. برای توصیف الکترونها P در پیوندهای دو گانه بکار می رود.

۴. روشی کاملاً نظری است.

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

تعداد سوالات: قسمتی: ۲۰ تشریحی: ۵

عنوان درس: شیمی فیزیک ۳

رشنده تحصیلی/گد درس: شیمی گرایش محض، شیمی (کاربردی) ۱۱۱۴۳۵۷

۱۹- بر اساس اصل فرانک-کوندون کدام گزینه محتملترين جهش را نشان می دهد؟

۱. فاصله بین هسته ها تغییر جزیی داشته باشد.
۲. انرژی جنبشی مولکولها تغییر زیادی داشته باشد.
۳. فاصله بین هسته ها تغییر زیادی داشته باشد.
۴. انرژی پتانسیل تغییر جزیی داشته باشد.

۲۰- بار موثر هسته بر روی الکترون در اوربیتال $1s$ اتم هلیم چقدر است؟

- | | | | | | | | |
|------|----|---|----|------|----|------|----|
| ۱.۳۱ | .۴ | ۲ | .۳ | ۰.۳۱ | .۲ | ۱.۶۹ | .۱ |
|------|----|---|----|------|----|------|----|

سوالات تشریحی

۱- تابع موج ذره در جعبه یک بعدی بصورت زیر است. آن را نرمال کنید.

$$\psi_n(x) = A \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$

۲- Δx و Δp_x را برای حالت پایه نوسانگر هارمونیک بدست آورده و اصل عدم قطعیت هیزنبرگ را تحقیق کنید.

$$\psi_0 = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} e^{-\alpha x^2/2}$$

$$\int_0^\infty e^{-\alpha x^2} dx = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$$

$$\int_0^\infty x e^{-\alpha x^2} dx = \frac{1}{2\alpha}$$

$$\int_0^\infty x^2 e^{-\alpha x^2} dx = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha^3}}$$

۳- یک منظومه الکترونی دارای عدد کوانتموی اسپینی $S = \frac{3}{2}$ است. اندازه تکانه زاویه های اسپینی را بدست آورید.

۴- ترازهای انرژی الکترونی π در مولکول بوتا دیان بصورت زیر است. ضمن رسم ترازهای انرژی و آرایش الکترونی، انرژی کل و انرژی رزونانس را بدست آورید.

$$\alpha + 1.618\beta$$

$$\alpha - 1.618\beta$$

$$\alpha + 0.618\beta$$

$$\alpha - 0.618\beta$$

۵- مولکول NO در طی چرخش در صفحه دارای اولین تراز غیر صفر $J = 3.32 \times 10^{-23}$ است. در صورتی که جرم کاسته آن $1.24 \times 10^{-26} kg$ باشد طول پیوند را بدست آورید.

$$h = 6.626 \times 10^{-34} Js$$

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

سری سوال: یک ۱

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

تعداد سوالات: قستی: ۲۰ تشریعی: ۵

عنوان درس: شیمی فیزیک ۳

رشنده تحصیلی / گد درس: شیمی گرایش محض، شیمی (کاربردی) ۱۱۱۴۳۵۷

استفاده از ماشین حساب ساده، ماشین حساب مهندسی مجاز است

۱- اهمیت هرمیتی بودن یک اپراتور بر اساس کدام اصل موضوعه بیان می شود؟

۱. اول ۲. دوم ۳. سوم ۴. چهارم

۲- شرط تبدیل معادله شرودینگر تابع زمان به دو معادله مستقل کدام است؟

۱. نیرو پایستار باشد.
۲. اندازه حرکت ثابت باشد.
۳. پتانسیل ثابت باشد.
۴. پتانسیل تابع زمان باشد.

۳- کدام مقدار انرژی برای ذره در جعبه سه بعدی صادق است؟ ($e=h^2/8ma^2$)

۱. ۱۶۴ ۲. ۱۰۴ ۳. ۱۴۴ ۴. ۱۶

۴- حل معادله شرودینگر نوسانگر هماهنگ منجر به کدام معادله می شود؟

۱. لزاندر ۲. هرمیت ۳. لاگرانژ ۴. لاغر

۵- هر گاه برای مولکول F_2 با جرم مولکولی ۳۸ ثابت نیرو ۰,۰۰۴۵ نیوتون بر متر باشد، انرژی نقطه صفر کدام است؟ (بر حسب الکترون ولت)

۱. ۰/۰۵۵ ۲. ۰/۱۱۰ ۳. ۰/۱۱۶ ۴. ۰/۲۳۲

۶- برای حل معادله شرودینگر چرخنده صلب از چه تکنیکی استفاده می شود؟

۱. تفکیک متغیرها ۲. بسط سری توانی ۳. تغییر مختصات ۴. تغییر متغیر

۷- پیامد جابجا پذیر بودن دو اپراتور و داشتن توابع ویژه مشترک چیست؟

۱. توابع ویژه آنها متعامد هستند.
۲. مشاهده پذیر های فیزیکی آنها همزمان قابل شناخت هستند.
۳. توابع ویژه آنها یک دنباله کامل را تشکیل نمی دهند.
۴. اصل عدم قطعیت در مورد این دو اپراتور صادق است.

۸- برای چرخنده صلب سه بعدی کدام عبارت صحیح است؟

۱. $H = L^2 / 2I$ ۲. $E = j\hbar^2 / 2I$ ۳. $E = j^2 \hbar^2 / 2I$ ۴. $L^2 = \sqrt{j(j+1)} \hbar^2$

۹- کدام عبارت بیانگر انرژی های مجاز اتم هیدروژن است؟ (EH انرژی حالت پایه اتم هیدروژن است)

۱. $E_n = E_H n^2$ ۲. $E_n = n^2 / E_H$ ۳. $E_n = E_H / n^2$ ۴. $E_n = -E_H / n^2$

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

تعداد سوالات: قسمی: ۲۰ تشریعی: ۵

عنوان درس: شیمی فیزیک ۳

رشنده تحصیلی / گد درس: شیمی گرایش محض، شیمی (کاربردی) ۱۱۱۴۳۵۷

سری سوال: ۱ بک

- ۱۰- مقدار قابل انتظار انرژی پتانسیل در اتم هیدروژن کدام است؟ (بر حسب الکترون ولت)
۱. -13.6 ۲. -27.2 ۳. 27.2 ۴. -27.2
- ۱۱- تکانه زاویه‌ای اسپینی الکترون کدام است؟
۱. $\frac{\sqrt{3}}{2}\hbar^2$ ۲. $\frac{1}{2}\hbar$ ۳. $\frac{3}{4}\hbar^2$ ۴. $\frac{\sqrt{3}}{4}\hbar^2$
- ۱۲- توابع ویژه اپراتور S_z^2 کدامند؟
۱. توابع ویژه اپراتور S_z ۲. توابع پاولینگ ۳. β, α ۴. الف و ج
- ۱۳- در سیستم چرخنده صلب کدام مورد موجب ایجاد عدد کوانتومی می‌شود؟
۱. تک مقدار بودن تابع موج ۲. پیوسته بودن تابع موج ۳. نرمال بودن تابع موج ۴. متعامد بودن تابع موج
- ۱۴- نمایش توزیع زاویه‌ای احتمال برای الکترون به چه طریقی قابل ترسیم است؟
۱. ثابت گرفتن زاویه θ ۲. ثابت گرفتن r و θ ۳. ثابت گرفتن r ۴. ثابت گرفتن زاویه φ
- ۱۵- کدام عبارت بیانگر قضیه تغییر است؟
۱. انرژی واقعی سیستم همواره از انرژی محاسبه‌ای کوچکتر است. ۲. انرژی محاسبه‌ای همواره کوچکتر از انرژی واقعی سیستم است ۳. انرژی تنها به نوع هامیلتونی وابسته بوده و مقدار آن همواره از مقدار تئوری کوچکتر است ۴. هامیلتونی تنها وابسته به مختصان مکانی ذره بوده و انرژی همواره کوچکتر از مقدار محاسبه‌ای است.
- ۱۶- در مدل هوکل انرژی عدم استقرار چگونه تعریف می‌شود؟
۱. اختلاف بین انرژی سیستم p هیدورکربن N اتمی با انرژی الکترونهای p مربوط به $2N$ مولکول اتیلن ۲. اختلاف بین انرژی سیستم p هیدورکربن N اتمی با انرژی الکترونهای p مربوط به $N/2$ مولکول اتیلن ۳. اختلاف بین انرژی سیستم p هیدورکربن N اتمی با انرژی الکترونهای p مربوط به N مولکول اتیلن ۴. اختلاف بین انرژی سیستم p هیدورکربن N اتمی با انرژی الکترونهای p مربوط به مولکول اتیلن

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

تعداد سوالات: قسمتی: ۲۰ تشریحی: ۵

عنوان درس: شیمی فیزیک ۳

رشنده تحصیلی/گد درس: شیمی گرایش محض، شیمی (کاربردی) ۱۱۱۴۳۵۷

-۱۷- ماتریس های پائولی معرف چیست؟

۱. معرف مقادیر ویژه اپراتور گشتاور زاویه ای اسپینی

۲. بیانگر مقادیر ویژه مولفه های اپراتور گشتاور زاویه ای اسپینی

۳. بیانگر مؤلفه های گشتاور زاویه ای اسپینی

۴. بیانگر حالت های اسپینی

-۱۸- تأثیر اپراتور $\hat{x} D_x^{\alpha}$ روی تابع $e^{\alpha x}$ کدام است؟

$$x^2 \alpha e^{\alpha x} . . . ۴$$

$$\alpha e^{\alpha x} . . . ۳$$

$$x \alpha e^{\alpha x} . . . ۲$$

$$x e^{\alpha x} . . . ۱$$

-۱۹- تعداد جملات در هامیلتونی اتم هلیوم چیست؟

۷ . ۴

۴ . ۳

۶ . ۲

۵ . ۱

-۲۰- درجه همترازی چرخنده صلب در صفحه کدام است؟

۴ . ۲ یا ۱ است.

۳. همواره ۲ است.

۲j+1 . ۲

۱. همواره ۳ است.

سوالات تشریحی

۱.۲۰ نمره

مقدار ΔP_x را برای حالت $v=0$ نوسانگر هماهنگ بدست آورید.

$$\int_0^\infty x^2 e^{-\alpha x^2} dx = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha^3}} \quad \text{و} \quad \int_0^\infty x e^{-\alpha x^2} dx = \frac{1}{2\alpha} \quad \text{و} \quad \int_0^\infty e^{-\alpha x^2} dx = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$$

میدانیم:

$$S^2 = -\frac{3}{4}\hbar \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

ثابت کنید؟

۱.۲۰ نمره

-۳- ضریب نرمال کنندگی توابع موج چرخنده صلب دو بعدی را بدست آورید.

۱.۲۰ نمره

-۴- برای مولکول بوتادین بر اساس تقریب هوکل مقادیر انرژی الکترونهای p را بدست آورده انرژی عدم استقرار را محاسبه کنید.

۱.۲۰ نمره

$$L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}$$

نشان دهید:

شماره سؤال	ماسنح صحيح	وضعیت کلبد	
1	ب	عادي	
2	الف	عادي	
3	ج	عادي	
4	ب	عادي	
5	الف	عادي	
6	ج	عادي	
7	ب	عادي	
8	الف	عادي	
9	ج	عادي	
10	د	عادي	
11	ب	عادي	
12	د	عادي	
13	الف	عادي	
14	ب	عادي	
15	الف	عادي	
16	ب	عادي	
17	د	عادي	
18	ب	عادي	
19	الف	عادي	
20	د	عادي	

سری سوال: یک ۱

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

تعداد سوالات: قسمتی: ۲۰ تشریعی: ۵

عنوان درس: شیمی فیزیک ۳

رشه تحصیلی/گد درس: شیمی گرایش محض، شیمی (کاربردی) ۱۱۱۴۳۵۷

استفاده از ماشین حساب ساده، ماشین حساب مهندسی مجاز است

۱- کدام عبارت در مورد اصل فرانک-کوندون درست است؟

۱. جهش های ارتعاشی همراه با برانگیختگی الکترونی است.
۲. به هنگام جذب تابش جهش الکترونی-ارتعاشی طوری روی می دهد که فاصله بین هسته ها تغییری نکند.
۳. محتمل ترین جهشها آنهایی هستند که با تغییر زیاد در فاصله بین هسته ها همراه باشد.
۴. همواره انتقالات از نوع جهش های موازی خواهند بود.

۲- سهم الکترونهای π در انرژی پیوند سیستم آروماتیک بنزن کدام است؟

۱. 8β
۲. معادل با انرژی رزونانس است.
۳. الف و ب درست است.
۴. 6α

۳- تاثیر عملگر واورنگی I روی اربیتال چگونه است؟

۱. متقارن
۲. ضد متقارن
۳. نامعین
۴. الف و ب درست است.

۴- کدام یک از تقریب تئوری اربیتال مولکولی هوکل محسوب می شود؟

۱. تابع موج کل سیستم متشکل از دو تابع موج مستقل است.
۲. انتگرالهای کولنی همگی برابر یک هستند.
۳. از روش اختلال استفاده می کند.

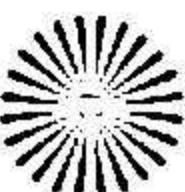
۴. انتگرالهای همپوشانی S_{ij} برابر صفر و S_{ii} برابر یکدیگر هستند.

۵- کدام عملگر فقط تابع مختصه ϕ است؟

۱. گشتاور زاویه ای
۲. مؤلفه X گشتاور زاویه ای
۳. مؤلفه Z گشتاور زاویه ای
۴. اندازه حرکت خطی

۶- توابع ویژه عملگر مربع گشتاور زاویه ای وابسته به کدام متغیرها می باشند؟

۱. θ, r
۲. ϕ, θ, r
۳. ϕ, r
۴. ϕ, θ



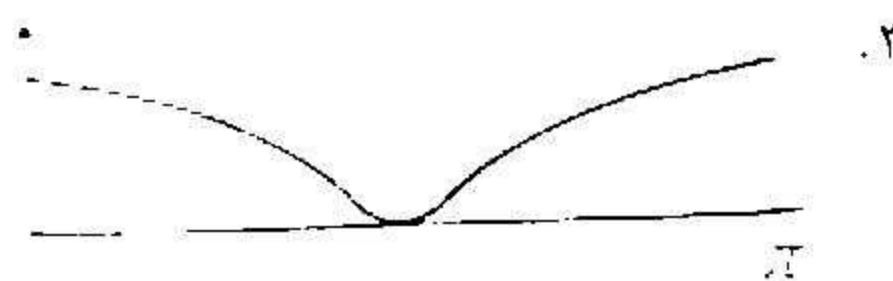
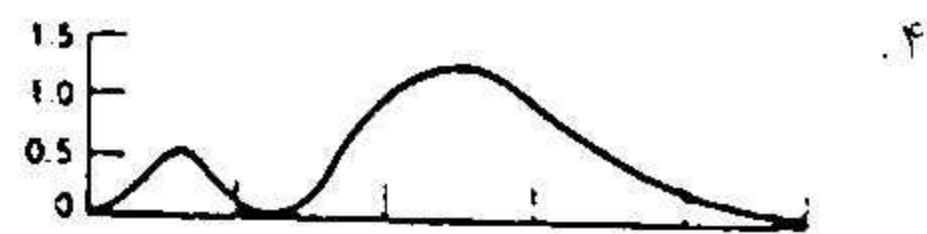
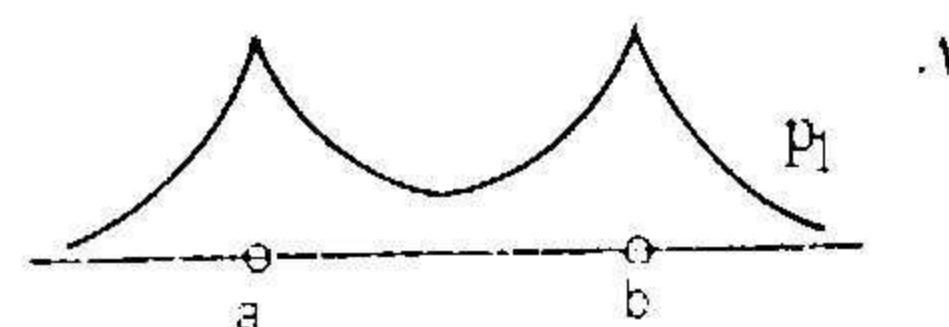
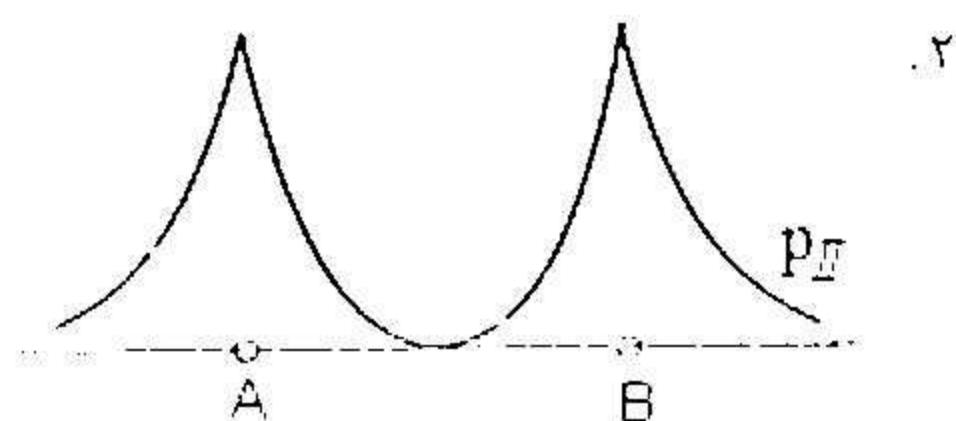
سری سوال: ۱ بک

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

تعداد سوالات: قستی: ۲۰ تشریعی: ۵

عنوان درس: شیمی فیزیک ۳

رشنده تحصیلی / گد درس: شیمی گرایش محض، شیمی (کاربردی) ۱۱۱۴۳۵۷

۷- کدام نمودار تغییرات چگالی توزیع بار بر حسب فاصله دو هسته را برای اربیتال $+p_z$ نشان می‌دهد؟۸- کدام نمودار تغییرات تابع توزیع شعاعی اربیتال $2p_z$ را نشان می‌دهد؟۹- بار مؤثر هسته برای الکترون $2S_{1/2}$ اتم لیتیم بر اساس ضرایب حائل کدام است؟

۱/۳۰ .۴

۱/۷۰ .۳

۰/۸۵ .۲

۲ .۱

۱۰- تابع موج برای ذراتی با اسپین صحیح چگونه است؟

۲. نسبت به اصل طریق پائولی متقارن است.

۱. نسبت به اپراتور جابجایی متقارن است.

۴. نسبت به عملگر وارونگی ضد متقارن است.

۳. نسبت به تمییر ناپذیری ذرات ، متقارن است.

۱۱- انرژی الکترون یون He^+ بر حسب هارتی چیست؟

-0/5 .۴

-1/5 .۳

-2 .۲

-1 .۱

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

تعداد سوالات: قسمتی: ۲۰ تشریعی: ۵

عنوان درس: شیمی فیزیک ۳

رشنده تحصیلی/گد درس: شیمی گرایش محض، شیمی (کاربردی) (۱۱۱۴۳۵۷)

۱۲- انرژی بونش اتم هیدروژن بر حسب الکترون ولت کدام است؟

۱۳/۶ .۴

-۱۳/۶ .۳

۱ .۲

-۱ .۱

۱۳- هر یک الکترون ولت چند کیلوکالری برمول است؟

۲۷/۲ .۴

۰/۰۳۶ .۳

۲۳ .۲

۶۲۷ .۱

۱۴- کدام عبارت در مورد ماتریس های پائولی درست است؟

$$\sigma_y = \frac{2}{\hbar} \hat{S}_y \quad .۲$$

$$\sigma_y \sigma_x - \sigma_x \sigma_y = 2i \sigma_z \quad .۱$$

$$\sigma_x \sigma_y = \sigma_y \sigma_x \quad .۴$$

$$\sigma_z \sigma_x = \sigma_y \quad .۳$$

۱۵- کدامیک از دوتابع نسبت به یکدیگر متعامد هستند؟

Ψ_{2px}, Ψ_{2s} .۲

Ψ_{2px}, Ψ_{1s} .۱

۴. تمام موارد درست است.

Ψ_{2px}, Ψ_{2py} .۳

۱۶- تعداد جملات دافعه الکترونی در هامیلتونی اتم هیدروژن چیست؟

۰ .۴

۳ .۳

۲ .۲

۱ .۱

۱۷- درجه چندگانگی (تبهگانی) برای چرخنده صلب سه بعدی چیست؟

$2j+1$.۴

$2J-1$.۳

۲J .۲

۲ .۱

۱۸- تعداد جهت‌گیری‌های بردار گشتاور زاویه‌ای الکترون در حالت Ψ_{3d} کدام است؟

6 .۴

5 .۳

4 .۲

3 .۱

۱۹- مقادیر ویژه مربع گشتاور زاویه‌ای در حالت Ψ_{4p} کدام است؟

$12\hbar^2$.۴

$12\hbar$.۳

$2\hbar^2$.۲

$20\hbar^2$.۱

۲۰- انرژی چرخنده صلب دو بعدی کدام است؟

$$E = \frac{m^2}{2I\hbar} \quad .۴$$

$$E = \frac{m^2\hbar^2}{2I} \quad .۳$$

$$E = \frac{m\hbar^2}{2I} \quad .۲$$

$$E = 2m / I \quad .۱$$

سوالات تشریحی

- ۱- برای سیستم بوتادین بر اساس مدل هوکل انرژی سیستم را بدست آورده و نمودار تراز انرژی الکترونهاي π را رسم کنید.
- ۲- ماتریس نمایش دهنده عملگر S^2 را بدست آورید؟
- ۳- از معادله قسمت زمانی معادله شرودینگر یعنی $\frac{d\varphi}{dt} = \frac{E}{i\hbar} dt$ شروع کرده قسمت زمانی تابع حالت را بصورت نرمال شده بدست آورید؟ فرم کلی تابع حالت (حالت های ایستا) را بنویسید.
- ۴- اپراتور هرمتی را تعریف کنید. نشان دهید مؤلفه Z اندازه حرکت خطی (\hat{p}_z) یک اپراتور هرمتی است.
- ۵- فرکانس اولین خط سری بالمر در ناحیه مرئی مربوط به طیف اتم هیدروژن را بدست آورید؟

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

$$e = 1.6 \times 10^{-19} \text{ C}$$

$$\epsilon_0 = 8.85 \times 10^{-12} \text{ C}^2 \text{ N}^{-1} \text{ m}^{-2}$$

$$m_e = 9.1 \times 10^{-31} \text{ kg}$$

$$R = 1.097 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$$

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

سری سوال: یک ۱

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

تعداد سوالات: قسمتی: ۲۰ تشریحی: ۵

عنوان درس: شیمی فیزیک ۳

رشنده تحصیلی / گد درس: شیمی گرایش محض، شیمی (کاربردی) ۱۱۱۴۳۵۷

استفاده از ماشین حساب ساده، ماشین حساب مهندسی مجاز است

-۱ معلومات فیزیکی یک سیستم از قابل حصول است.

۱. تابع موجی ۲. تابع احتمال ۳. تابع توزیع شعاعی ۴. تابع توزیع زاویه ای

-۲ کدام گزینه زیر شرط نرمالیزه بودن تابع $\Psi(\vec{r}, t)$ را نشان می دهد؟

۱. $\int_V |\Psi(\vec{r}, t)|^2 dV = -\infty$ ۲. $\int_V |\Psi(\vec{r}, t)| dV = +\infty$ ۳. $\int_V |\Psi(\vec{r}, t)|^2 dV = +\infty$ ۴. $\int_V |\Psi(\vec{r}, t)| dV = 1$

-۳ کدام اپراتور زیر خطی نیست؟ $(\hat{D}_x = \frac{\partial}{\partial x})$

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

-۴ مقدار قابل انتظار P_x (مؤلفه X تکانه خطی) در مثال ذره در جعبه یک بعدی چقدر است؟

۱. $i\hbar$ ۲. \hbar ۳. 0 ۴. $-i\hbar$

-۵ مقدار ویژه اپراتور \hat{D}_x^2 وقتی بر تابع $\sin ax$ اثر می کند، کدام است؟ $(\hat{D}_x = \frac{\partial}{\partial x})$

۱. ax ۲. $-a^2$ ۳. $-ax$ ۴. $-a^2 x$

-۶ مقادیر مجاز انرژی ذره ای به جرم m در جعبه یک بعدی به طول L از کدام رابطه زیر پیروی می کند؟

۱. $E_n = \frac{n^2 h^2}{8mL^2}$ ۲. $E_n = \frac{n\pi^2 h^2}{8mL^2}$ ۳. $E_n = \frac{h^2}{8mn^2 L^2}$ ۴. $E_n = \frac{h^2 L^2}{8mn^2}$

-۷ در مثال ذره در جعبه یک بعدی نمودار تغییرات $(x)^2$ بر حسب x در حالت n=1 چند گره دارد؟

۱. ۰ ۲. ۱ ۳. ۲ ۴. ۳

-۸ در یک نوسانگر هماهنگ با فرکانس مشخصه v_0 ، انرژی نقطه صفر در حرکت ارتعاشی چه مقدار است؟

۱. 0 ۲. $h v_0$ ۳. $\frac{h v_0}{2}$ ۴. $\frac{v_0}{2h}$

-۹ تکانه زاویه ای (\tilde{L}) چه رابطه ای با بردار موضعی (\vec{r}) و تکانه خطی (\vec{p}) دارد؟

۱. $\tilde{L} = \frac{\vec{p}^2}{2\vec{r}}$ ۲. $\tilde{L} = \vec{r} \times \vec{p}$ ۳. $\tilde{L} = \frac{\vec{r}^2}{\vec{p}}$ ۴. $\tilde{L} = \frac{\vec{p}^2}{2h\vec{r}}$

سری سوال: ۱ بک

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

تعداد سوالات: قستی: ۲۰ تشریعی: ۵

عنوان درس: شیمی فیزیک ۳

رشه تحصیلی/گد درس: شیمی گرایش محض، شیمی (کاربردی) ۱۱۱۴۳۵۷

۱۰- انرژی مربوط به اولین تراز چرخشی در یک چرخنده صلب در فضای سه بعدی چقدر است؟ (معان اینرسی مولکول است.)

$$3\frac{\hbar^2}{I} \cdot ۴$$

$$\frac{\hbar^2}{I} \cdot ۳$$

$$\frac{\hbar^2}{2I} \cdot ۲$$

۰ . ۱

۱۱- به هر تراز انرژی چرخشی با شماره J ، تعداد حالت وابسته است.

$$2J+1 \cdot ۴$$

$$J+1 \cdot ۳$$

$$J \cdot ۲$$

۲ . ۱

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

$$2n^2 \cdot ۴$$

$$n^2 \cdot ۳$$

$$2n \cdot ۲$$

$\frac{n}{2} \cdot ۱$

۱۳- کدام گزینه زیر تابع توزیع شعاعی را نشان می دهد؟

$$P(r) = r^2 R^2(r) \cdot ۴$$

$$P(r) = 4\pi r^2 \cdot ۳$$

$$P(r) = 4\pi r^2 R^2(r) \cdot ۲$$

$$P(r) = 4\pi R^2(r) \cdot ۱$$

۱۴- تابع ویژه اپراتور \hat{S}_z است، با مقدار ویژه

$$-1, \beta \cdot ۴$$

$$+\frac{1}{2}, \alpha \cdot ۳$$

$$-1, \alpha \cdot ۲$$

$$+1, \beta \cdot ۱$$

۱۵- پتانسیل اختلال در هامیلتونی اتم هلیم ناشی از چیست؟

۱. حرکت هسته

۱. حرکت الکترونها

۲. دافعه بین الکترونها

۳. جاذبه بین الکترونها و هسته

۱۶- برای به دست آوردن انرژی اتم هلیم از چه روشی می توان استفاده کرد؟

۱. تغییر متغیر و اختلال

۲. اختلال

۱. تغییر متغیر

۱۷- همه ذره های با اسپین نیمه صحیح، تابع موجی دارند.

۱. ضدمتقارن

۲. فرد

۱. زوج

۱۸- در تقریب هوکل اربیتالهای مولکولی تک الکترونی با روش تعیین می شود.

۱. اختلال

۲. تغییر پارامترها

۱. اختلال

۱۹- از تقریب هوکل در بررسی کدام سیستم مولکولی زیر می توان استفاده کرد؟

۱. متان

۲. اتان

۱. متان

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

تعداد سوالات : قسطی : ۲۰ تشریحی : ۵

عنوان درس : شیمی فیزیک ۳

رشه تحصیلی / گد درس : شیمی گرایش محض، شیمی (کاربردی) ۱۱۱۴۳۵۷

-۲۰- کدام یک از روش‌های زیر نیمه تجربی است؟

LCAO ۴. روش

۳. روش اختلال

۲. روش تغییر پارامتر

۱. تقریب هوکل

سوالات تشریحی

۱.۲۰ نمره

$$-\text{۱} \quad \text{اپراتور } \hat{x}\hat{D}_x \text{ را بر روی تابع } x^2 \text{ تأثیر دهد.} \quad (\hat{D}_x = \frac{\partial}{\partial x})$$

۱.۲۰ نمره

-۲- عبارت انرژی و چندگانگی تراز سوم انرژی ذره ای به جرم m در جعبه سه بعدی مکعبی با ابعاد a را معین کنید.

۱.۲۰ نمره

-۳- عبارت کلاسیکی معادل انرژی جنبشی یک منظومه تک ذره ای به صورت زیر است:

$$T = \frac{1}{2m} (\hat{P}_x^2 + \hat{P}_y^2 + \hat{P}_z^2)$$

با استفاده از این رابطه، اپراتور انرژی جنبشی را به دست آورید.

۱.۲۰ نمره

-۴- دترمینان اسلیتر را برای اتم دو الکترونی هلیم بنویسید.

۱.۲۰ نمره

-۵- با استفاده از روش هوکل انرژی سیستم π در حالت اصلی مولکول اتیلن را بر حسب نمادهای α و β (انتگرالهای کولنی و تبادلی) به دست آورید.

نوع شماره	واسطع صبح	وضعیت کلبد	معدی
1	الف		معدی
2	د		معدی
3	ب		معدی
4	د		معدی
5	ب		معدی
6	الف		معدی
7	الف		معدی
8	ح		معدی
9	ب		معدی
10	الف		معدی
11	د		معدی
12	ح		معدی
13	ب		معدی
14	ح		معدی
15	د		معدی
16	د		معدی
17	د		معدی
18	ب		معدی
19	ح		معدی
20	الف		معدی