

سری سوال: یک ۱

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

تعداد سوالات: نستی: ۴۰ تشریحی: ۰

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

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

۱- کدام عبارت زیر بیانگر دامنه احتمال است؟

۱.  $\Psi$       ۲.  $\Psi^2$       ۳.  $|\Psi^2|$       ۴.  $\Psi\Psi^*$

۲- اگر منظومه ای متشکل از دو ذره متحرک در فضای سه بعدی باشد تابع موج این مجموعه تابع چند متغیر است؟

۱. ۳      ۲. ۴      ۳. ۶      ۴. ۷

۳- حاصل اثر اپراتور  $\hat{D}_x$  بر تابع  $\sin x$  کدام گزینه زیر است؟

۱.  $x \sin x$       ۲.  $\cos x$       ۳.  $x \cos x$       ۴.  $-\sin x$

۴- برای یک منظومه تک ذره ای اپراتور انرژی جنبشی کدام گزینه زیر است؟

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

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

۱.  $ae^{ax}$       ۲.  $ax$       ۳.  $a$       ۴.  $x$

۶- مقدار مشاهده پذیر  $a$  که اپراتور وابسته به آن  $\hat{A}$  است در حالت نرمال  $\Psi(r, t)$  کدام گزینه زیر است؟

۱.  $\langle a \rangle = \int \Psi^* \hat{A} \Psi dv$       ۲.  $\langle a \rangle = \int \Psi^* \Psi dv$       ۳.  $\langle a \rangle = \int \hat{A} \Psi dv$       ۴.  $\langle a \rangle = \int \hat{A} \Psi^* dv$

۷- قسمت زمانی تابع حالت ذره در جعبه یک بعدی به کدام شکل زیر است؟

۱.  $\phi(t) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin \frac{n\pi x}{l}$       ۲.  $\phi(t) = \sqrt{\frac{l}{2\pi}} \sin \frac{nx}{l}$   
۳.  $\phi(t) = e^{-iEt/\hbar}$       ۴.  $\phi(t) = \sqrt{\frac{l}{2}} \sin \frac{n\pi x}{l} e^{-iEt/\hbar}$

۸- انرژی ذره در چه حالتی پیوسته است؟

۱. ذره در جعبه سه بعدی      ۲. ذره در جعبه دو بعدی  
۳. ذره در جعبه یک بعدی      ۴. ذره آزاد

۹- اگر انرژی یک ذره آزاد به جرم  $m$  به اندازه  $E$  باشد؛ تکانه در راستای  $x$  از کدام رابطه زیر به دست می آید؟

۱.  $2mE$       ۲.  $\sqrt{2mE}$       ۳.  $\sqrt{\frac{\hbar^2}{2mE}}$       ۴.  $\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$

سری سوال: ۱ یک

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

تعداد سوالات: نستی: ۴۰ تشریحی: ۰

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

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

۱۰- مقادیر مجاز انرژی ذره ای به جرم  $m$  در جعبه یک بعدی به طول  $L$  از کدام رابطه زیر به دست می آید؟

۱.  $\frac{n^2 \hbar^2}{8mL^2}$       ۲.  $\frac{n^2 h^2}{8mL^2}$       ۳.  $\frac{n^2 \pi^2 h^2}{8mL^2}$       ۴.  $\frac{8mL^2}{n^2 \pi^2 h^2}$

۱۱- در مثال ذره در جعبه یک بعدی کوچکترین مقدار برای عدد کوانتومی  $n$  کدام است؟

۱.  $-\infty$       ۲. ۰      ۳. ۱      ۴. ۲

۱۲- در مثال ذره در جعبه یک بعدی در کدام حالت زیر به حد پیوستگی انرژی نزدیک می شویم؟

۱. افزایش جرم ذره و کاهش طول جعبه  
۲. افزایش جرم ذره و طول جعبه  
۳. کاهش جرم ذره و طول جعبه  
۴. کاهش جرم ذره و افزایش طول جعبه

۱۳- چند حالت کوانتومی هم انرژی به دومین تراز انرژی ذره در جعبه سه بعدی مربوط می شود؟

۱. ۱      ۲. ۲      ۳. ۳      ۴. ۴

۱۴- کدام یک از گزینه های زیر از شرایط لازم برای توابع ویژه قابل قبول اپراتور هامیلتونی نیست؟

۱. نرمال بودن      ۲. نامتعامد بودن      ۳. هرمیتی بودن      ۴. خطی بودن

۱۵- اختلاف انرژی بین سومین و چهارمین تراز در نوسانگر هارمونیک چقدر است؟ ( $V_0$  فرکانس مشخصه سیستم است).

۱.  $4hV_0$       ۲.  $3hV_0$       ۳.  $\frac{1}{2}hV_0$       ۴.  $hV_0$

۱۶- انرژی نقطه صفر در حرکت ارتعاشی چقدر است؟ ( $V_0$  فرکانس مشخصه سیستم است).

۱.  $\frac{1}{2}hV_0$       ۲.  $hV_0$       ۳.  $\frac{1}{2}hV_0$       ۴.  $hV_0$

۱۷- با چه شرطی یک تابع می تواند تابع ویژه دو اپراتور باشد؟

۱. دو اپراتور با هم جابجایی پذیر باشند.  
۲. دو اپراتور هرمیتی باشند.  
۳. تابع نرمال باشد.  
۴. تابع حقیقی باشد.

۱۸- مؤلفه  $x$  تکانه زاویه ای از کدام رابطه زیر به دست می آید؟ ( $p$  تکانه خطی است).

۱.  $L_x = xp_y - yp_x$       ۲.  $L_x = xp_z - zp_y$       ۳.  $L_x = yp_z - zp_y$       ۴.  $L_x = zp_y - yp_z$



سری سوال: ۱ یک

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

تعداد سوالات: نستی: ۴۰ تشریحی: ۰

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

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

۱۹- کدام عبارت زیر در مورد رابطه بین مؤلفه های اپراتور تکانه زاویه صحیح است؟

$$\hat{L}_x \hat{L}_y - \hat{L}_y \hat{L}_x = \hat{L}_z \quad .۲$$

$$\hat{L}_x \hat{L}_y - \hat{L}_y \hat{L}_x = -\hbar^2 \hat{L}_z \quad .۱$$

$$\hat{L}_x \hat{L}_y - \hat{L}_y \hat{L}_x = -i\hbar^2 \quad .۴$$

$$\hat{L}_x \hat{L}_y - \hat{L}_y \hat{L}_x = i\hbar \hat{L}_z \quad .۳$$

۲۰- کمیت‌های وابسته به کدام دو اپراتور زیر را می توان به طور همزمان اندازه گیری کرد؟

$$\hat{L}_x, \hat{L}_z \quad .۴$$

$$\hat{L}_x, \hat{L}_y \quad .۳$$

$$\hat{p}_x, \hat{x} \quad .۲$$

$$\hat{L}_x, \hat{H} \quad .۱$$

۲۱- مؤلفه Z تکانه زاویه ای با کدام عبارت زیر معادل است؟

$$\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi} \quad .۴$$

$$\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \cos \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \quad .۳$$

$$\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \quad .۲$$

$$\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} \quad .۱$$

۲۲- به هر مقدار از انرژیهای مجاز کوانتومی سیستم چرخنده صلب سه بعدی چند حالت وابسته است؟ (J شماره تراز انرژی است.)

$$J(2J+1) \quad .۴$$

$$J(J+1) \quad .۳$$

$$2J+1 \quad .۲$$

$$J+1 \quad .۱$$

۲۳- در مثال چرخنده صلب سه بعدی انرژی حالت پایه چرخشی چقدر است؟ (I ممان اینرسی مولکول است.)

$$\frac{I}{2\hbar^2} \quad .۴$$

$$\frac{\hbar^2}{2I} \quad .۳$$

$$\frac{\hbar^2}{2i} \quad .۲$$

$$0 \quad .۱$$

۲۴- انرژی الکترونی تراز n ام اتم هیدروژن چه رابطه ای با شماره تراز دارد؟

$$E_n \propto \frac{1}{n} \quad .۴$$

$$E_n \propto n \quad .۳$$

$$E_n \propto \frac{1}{n^2} \quad .۲$$

$$E_n \propto n^2 \quad .۱$$

۲۵- در مساله اتم هیدروژن به ازای هر عدد کوانتومی اصلی n چه تعداد جواب برای معادله شرودینگر خواهیم داشت؟

$$\frac{n}{2} \quad .۴$$

$$n^2 \quad .۳$$

$$n \quad .۲$$

$$1 \quad .۱$$

۲۶- کدام عبارت زیر تابع توزیع شعاعی اتم هیدروژن را به درستی نشان می دهد؟

$$P(r) = 4\pi r^2 R^2(r) dr \quad .۲$$

$$P(r) = R^2(r) dr \quad .۱$$

$$P(r) = 4\pi r^2 R^2(r) \quad .۴$$

$$P(r) = R^2(r) \quad .۳$$

سری سوال: ۱ یک

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

تعداد سوالات: نستی: ۴۰ تشریحی: ۰

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

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

۲۷- اولین خط طیفی سری بالمر مربوط به کدام جهش الکترونی است؟

۱. از تراز شماره ۳ به تراز شماره ۲  
۲. از تراز شماره ۳ به تراز شماره ۱  
۳. از تراز شماره ۱ به تراز شماره ۳  
۴. از تراز شماره ۲ به تراز شماره ۳

۲۸- ممان مغناطیسی اتم هیدروژن از کدام رابطه زیر پیروی می کند؟

۱.  $\mu = -\frac{e}{2m_e} \bar{L}$       ۲.  $\mu = \frac{e\hbar}{2m_e}$       ۳.  $\mu = \frac{e\hbar}{2m_e} l(l+1)$       ۴.  $\mu = -\frac{e\hbar}{2m_e} l(l+1)$

۲۹- مؤلفه Z تکانه زاویه اسپین با کدام گزینه زیر تعیین می شود؟ ( $m_s$  عدد کوانتومی اسپین است).

۱.  $s_z = \pm \frac{1}{2}$       ۲.  $s_z = m_s \hbar$       ۳.  $s_z = \sqrt{s(s+1)} \hbar$       ۴.  $s_z = s(s+1) \hbar$

۳۰- تکانه زاویه ای کل ( $\vec{J}$ ) چه نسبتی با تکانه اوربیتالی ( $\vec{L}$ ) و تکانه اسپین ( $\vec{s}$ ) دارد؟

۱.  $\vec{J} = |\vec{L} + \vec{s}|$       ۲.  $\vec{J} = |\vec{L} - \vec{s}|$       ۳.  $\vec{J} = \vec{L} + \vec{s}$       ۴.  $\vec{J} = \vec{L} - \vec{s}$

۳۱- طبق قضیه تغییر پارامترها هر گاه کوچکترین مقدار ویژه هامیلتونی یک منظومه  $E_0$  و تابع ویژه مربوطه  $\psi_0$  باشد، با هر

تابع نرمال  $\Phi$  غیر از  $\psi_0$  خواهیم داشت:

۱.  $\int \psi^* \hat{H} \Phi d\tau \geq E_0$       ۲.  $\int \Phi^* \hat{H} \psi d\tau \leq E_0$       ۳.  $\int \Phi^* \hat{H} \Phi d\tau \geq E_0$       ۴.  $\int \Phi^* \hat{H} \Phi d\tau \leq E_0$

۳۲- هامیلتونی اختلال در مسأله اتم هلیم مربوط به کدام گزینه زیر است؟

۱. دافعه الکترونها  
۲. مجموع دافعه الکترونها و جاذبه الکترونها-هسته  
۳. جاذبه الکترونها و هسته  
۴. حرکت الکترونها

۳۳- بار مؤثر هسته در تقریب اسلیتر از کدام رابطه زیر به دست می آید؟ ( $Z$  بار هسته،  $b$  ضریب حایل و  $n$  شماره تراز اصلی می باشند).

۱.  $Z^* = (Z + nb)$       ۲.  $Z^* = n(Z - b)$       ۳.  $Z^* = Z - nb$       ۴.  $Z^* = Z - b$

۳۴- چه ذراتی دارای تابع موج متقارن می باشند؟

۱. ذرات دارای اسپین صفر  
۲. ذرات دارای اسپین عدد صحیح  
۳. ذرات دارای اسپین نیمه صحیح  
۴. ذرات دارای اسپین صفر یا عدد صحیح

سری سوال: ۱ یک

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

تعداد سوالات: نستی: ۴۰ تشریحی: ۰

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

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

۳۵- دترمینان اسلیتر کدام شرط را برای تابع موج کلی سیستم محقق می سازد؟

۱. متقارن بودن      ۲. ضد متقارن بودن      ۳. هرمیتی بودن      ۴. خطی بودن

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

۱. یک روش تقریبی است.      ۲. یک روش نیمه تجربی است.  
۳. برای پیوندهای یگانه کاربرد دارد.      ۴. بر پایه نظریه MO-LCAO بنا شده است.

۳۷- در تقریب هوکل برای اجرای روش تغییر پارامترها، مقدار انتگرال همپوشانی  $S_{ij}$  چند فرض می شود؟

۱. ۱  
۲. ۱  
۳. برای اتمهای همسایه مقدار مشخص و برای اتمهایی که با فاصله از هم قرار گرفته اند صفر است.  
۴. برای اتمهای همسایه صفر و برای اتمهایی که با فاصله از هم قرار گرفته اند مقدار مشخص دارد.

۳۸- انرژی الکترونیهای  $\pi$  هر مولکول اتیلن  $2\beta$  و انرژی سیستم  $\pi$  بنزن  $8\beta$  است. انرژی عدم استقرار بنزن کدام است؟

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

۳۹- کدام گزینه زیر مطابق با اصل فرانک-کوندون است؟

۱. به هنگام جذب تابش انرژی پتانسیل مولکول ثابت است.  
۲. به هنگام جذب تابش انرژی جنبشی مولکول به شدت تغییر می کند.  
۳. به هنگام جذب تابش جهش الکترونی-ارتعاشی طوری روی می دهد که فاصله بین هسته ها تغییر چندانی نکند.  
۴. به هنگام جذب تابش انرژی جنبشی و پتانسیل مولکول به شدت تغییر می کند.

۴۰- طبق قضیه کوپمان انرژیهای یونش قائم برابرند با:

۱. انرژیهای اوربیتالی که با روش هارتری-فوک تعیین می شوند.  
۲. منفی انرژیهای اوربیتالی که با روش هارتری-فوک تعیین می شوند.  
۳. انرژیهای بدست آمده برای اتمهای هیدروژن و هیدروژن مانند  
۴. منفی انرژیهای بدست آمده برای اتمهای هیدروژن و هیدروژن مانند