

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

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

سری سوال: یک ۱

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

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

استفاده از ماشین حساب مهندسی مجاز است

۱- تابع موج یک سیستم تک ذره ای، تابعی است از .....

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

۲- کدام گزینه زیر از ویژگیهای تابع حالت قابل قبول برای یک سیستم تک ذره ای نیست؟

۱. پیوسته بودن  
۲. حقیقی بودن  
۳. تک مقدار بودن  
۴. محدود و معین بودن

۳- رابطه زیر بیانگر کدام ویژگی برای تابع موج  $\Psi(x, t)$  است؟

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = 1$$

۱. نرمالیزه بودن  
۲. هرمیتی بودن  
۳. تک مقدار بودن  
۴. ارتوگونال بودن

۴- از تأثیر اپراتور  $\hat{x}\hat{D}_x$  بر تابع  $x^2$  کدام گزینه زیر حاصل می شود؟

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

۵- کدام گزینه حاصل عبارت زیر را به درستی نشان می دهد؟

$$\hat{D}_x \hat{x} - \hat{x} \hat{D}_x$$

۱.  $\hat{x}$   
۲.  $\hat{x}^2$   
۳.  $2\hat{x}$   
۴.  $\hat{1}$

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

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

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

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

۸- کدام تابع زیر ویژه تابع اپراتور  $\hat{D}_x$  است؟

۱.  $\cos ax$   
۲.  $\sin ax$   
۳.  $e^{ax}$   
۴.  $x^a$

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

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

سری سوال: ۱ یک

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

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

۹- مقدار قابل انتظار هر مشاهده پذیر  $a$  در حالت  $\Psi(r, t)$  برابر است با:

$$\langle a \rangle = \frac{\int \Psi^* \hat{A} \Psi dv}{\int \Psi^* \Psi dv} \quad .1 \quad \langle a \rangle = \frac{\int \Psi^* \Psi dv}{\int \Psi^* \hat{A} \Psi dv} \quad .2$$

$$\langle a \rangle = \int \Psi^* \Psi dv \quad .3 \quad \langle a \rangle = \frac{\int \Psi \Psi dv}{\int \Psi^* \Psi dv} \quad .4$$

۱۰- انرژی ذره در کدام حالت زیر پیوسته است؟

۱. ذره در جعبه یک بعدی  
۲. ذره در جعبه سه بعدی  
۳. ذره آزاد  
۴. سیستم چند ذره ای

۱۱- انرژی تراز  $m$ ام ذره ای به جرم  $m$  در جعبه یک بعدی به طول  $L$  از چه رابطه ای به دست می آید؟

$$E_n = \frac{n^2 h^2}{8mL^2} \quad .1 \quad E_n = \frac{n^2 h^2}{2\pi m L^2} \quad .2 \quad E_n = \frac{n^2 h^2}{8mL^2} \quad .3 \quad E_n = \frac{n^2 h^2}{8mL^2} \quad .4$$

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

۱. ۱  
۲. ۶  
۳. ۳  
۴. ۴

۱۳- در مورد نمودار ترازهای انرژی الگوی سه بعدی، کدام گزینه زیر صحیح است؟

۱. ترازهای پایین تر فشرده ترند.  
۲. ترازهای بالاتر فشرده ترند.  
۳. فاصله ترازهای انرژی ثابت است.  
۴. ترازهایی با چندگانگی کمتر متراکم ترند.

۱۴- توابع ویژه قابل قبول اپراتور  $\hat{H}$  مجموعه ای ..... را تشکیل می دهند.

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

۱۵- مقدار انرژی نقطه صفر نوسانگر هارمونیک چقدر است؟

$$h\nu_0 \quad .1 \quad \frac{1}{2} h\nu_0 \quad .2 \quad \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{h}{v}} \quad .3 \quad 0 \quad .4$$

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

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

سری سوال: ۱ یک

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

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

۱۶- انرژی چرخنده صلب (E) در صفحه، چه رابطه ای با ممان اینرسی مولکول (I) و تکانه زاویه ای (L) دارد؟

۴.  $E = \frac{2I}{L}$

۳.  $E = \frac{2I^2}{L}$

۲.  $E = 2IL^2$

۱.  $E = \frac{L^2}{2I}$

۱۷- کدام دو اوپراتور زیر توابع ویژه مشترک ندارند؟

۴.  $\hat{H}, \hat{L}_z$

۳.  $\hat{L}^2, \hat{L}_z$

۲.  $\hat{H}, \hat{L}^2$

۱.  $\hat{L}_x, \hat{L}_z$

۱۸- در دستگاه مختصات قطبی کروی، مؤلفه Z تکانه زاویه ای ( $L_z$ ) تابعی از ..... است.

۴.  $\phi$

۳.  $r, \theta$

۲.  $\theta, \phi$

۱.  $r, \theta, \phi$

۱۹- در تراز انرژی J ام چرخنده صلب سه بعدی چند حالت همتراز وجود دارد؟

۴.  $J + 1$

۳.  $2J + 1$

۲.  $2J$

۱.  $2$

۲۰- در چرخنده صلب سه بعدی قدر مطلق تکانه زاویه ای در حالت پایه چقدر است؟

۴.  $\sqrt{2\hbar}$

۳.  $2\hbar$

۲.  $\hbar$

۱.  $0$

۲۱- ممان اینرسی یک مولکول دو اتمی با جرم کاسته  $1.14 \times 10^{-26} \text{ kg}$  و فاصله بین اتمی  $1.13 \times 10^{-10} \text{ m}$  چقدر است؟

۲.  $7.55 \times 10^{-23} \text{ kgm}^2$

۱.  $1.45 \times 10^{-46} \text{ kgm}^2$

۴.  $7.55 \times 10^{-22} \text{ kgm}^2$

۳.  $1.45 \times 10^{-47} \text{ kgm}^2$

۲۲- مقدار ویژه اپراتور  $L^2$  در سیستمهای سه بعدی مضربی است از .....

۴.  $\hbar$

۳.  $h$

۲.  $h^2$

۱.  $\hbar^2$

۲۳- عدد کوانتومی مغناطیسی (m) در یک اتم تک الکترونی، ..... را در هر حالت معین می کند.

۲. قدر مطلق تکانه زاویه ای الکترونی

۱. انرژیهای مجاز سیستم

۴. بخش شعاعی توابع موج الکترونی

۳. مؤلفه Z تکانه زاویه ای الکترونی

۲۴- در اتم تک الکترونی، در هر تراز انرژی به شماره n1، چه تعداد حالت همتراز پیش بینی می شود؟

۴.  $2n^2$

۳.  $n^2$

۲.  $2n$

۱.  $n$

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

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

سری سوال: ۱ یک

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

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

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

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

۲۶- معادله  $|\psi(r, \theta, \phi)|^2 = a$  ویژگی کدام گزینه زیر است؟ (a مقداری ثابت است).

۱. توابع حالت ارتوگونال      ۲. توابع حالت نرمال      ۳. سطوح تک پتانسیل      ۴. سطوح تک دانسیته

۲۷- مقدار انرژی تراز پایه اتم هیدروژن چقدر است؟

$$-13.56eV \quad .1 \quad -21.7eV \quad .2 \quad -13.5 \times 10^6 eV \quad .3 \quad -21.7 \times 10^6 eV \quad .4$$

۲۸- اولین خط طیفی سری بالمر از جهش الکترون از حالت ..... به تراز  $n = 2$  به وجود می آید.

$$n = 1 \quad .1 \quad n = 3 \quad .2 \quad n = 4 \quad .3 \quad n = 5 \quad .4$$

۲۹- ممان مغناطیسی غیر صفر اتم هیدروژن ناشی از چیست؟

۱. جرم الکترون      ۲. میدان مغناطیسی      ۳. بار هسته      ۴. وجود اسپین الکترونی

۳۰- عدد کوانتومی تکانه زاویه ای کل برای اتم تک الکترونی در اربیتال ۱s چقدر است؟

$$0 \quad .1 \quad \frac{1}{2} \quad .2 \quad \frac{3}{2} \quad .3 \quad \frac{1}{2}, \frac{3}{2} \quad .4$$

۳۱- تابع موجی کامل وابسته به الکترون تابعی از چند متغیر است؟

$$3 \quad .1 \quad 4 \quad .2 \quad 5 \quad .3 \quad 6 \quad .4$$

۳۲- کدام گزینه زیر حل دقیق معادله شرودینگر را برای اتمهای چند الکترونی غیرممکن می کند؟

۱. پتانسیل برهمکنش بین ذرات      ۲. انرژی جنبشی الکترونها  
۳. انرژی جنبشی هسته      ۴. وجود میدانهای خارجی

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

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

سری سوال: ۱ یک

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

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

۳۳- طبق قضیه تغییر، هرگاه کوچکترین مقدار ویژه هامیلتونی یک منظومه  $E_0$  و تابع ویژه مربوط  $\psi_0$  باشد، با هر تابع  $\Phi$  غیر از  $\psi_0$  خواهیم داشت:

$$\int \psi_0^* \hat{H} \Phi d\tau \geq E_0 \quad .1 \quad \int \Phi^* \hat{H} \psi_0 d\tau \geq E_0 \quad .2$$

$$\int \Phi^* \hat{H} \Phi d\tau \geq E_0 \quad .3 \quad \int \Phi^* \hat{H} \psi_0 d\tau \leq E_0 \quad .4$$

۳۴- عبارت "هیچ دو الکترونی از الکترونهاى اتم نمیتوان یافت که در یک مجموعه از مقادیر چهار عدد کوانتومی مشترک باشند" بیانگر کدام اصل است؟

۱. اصل تغییر      ۲. اصل هوند      ۳. اصل ماکزیمم هوند      ۴. اصل طرد پائولی

۳۵- کدام جمله در هامیلتونی غیر نسبیتی اتم چند الکترونی معرف پتانسیل جاذبه بین الکترونها و هسته است؟

$$\sum_i \frac{z}{r_i} \quad .1 \quad \sum_{i,j} \frac{1}{r_{ij}} \quad .2 \quad \frac{1}{2} \sum_i \nabla_i^2 \quad .3 \quad \frac{m_0 e^4}{2\hbar^2} \quad .4$$

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

۱. دافعه بین دو الکترون      ۲. جاذبه بین الکترونها و هسته  
۳. انرژی جنبشی الکترونها      ۴. انرژی جنبشی هسته

۳۷- ذراتی با اسپین نیمه صحیح چه نوع تابع موجی دارند؟

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

۳۸- ضریب نرمال شدگی دترمینان اسلیتر برای یک منظومه  $N$  الکترونی چند است؟

$$\sqrt{N!} \quad .1 \quad \frac{1}{\sqrt{N!}} \quad .2 \quad \frac{1}{\sqrt{N}} \quad .3 \quad \sqrt{N} \quad .4$$

۳۹- تقریب هوکل برای چه نوع سیستمهایی کاربرد دارد؟

۱. ترکیبات عناصر واسطه      ۲. سیستمهای حلقوی  
۳. زنجیره های کربنی رادیکالی      ۴. سیستمهای مزدوج

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

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

سری سوال: ۱ یک

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

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

۴۰- انرژی الکترونهای  $\pi$  مولکول اتیلن  $2\beta$  و انرژی الکترونهای  $\pi$  بنزن  $8\beta$  است. انرژی عدم استقرار بنزن چقدر است؟

۴.  $8\beta$ ۳.  $6\beta$ ۲.  $4\beta$ ۱.  $2\beta$