

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

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

سری سوال: یک ۱

عنوان درس: شیمی کوانتومی ۲

رشته تحصیلی/کد درس: شیمی (شیمی فیزیک) ۱۱۱۴۱۴۶

استفاده از ماشین حساب مهندسی مجاز است

۱- کدام جمله در مورد توابع ویژه اپراتور مستقل از زمان هامیلتونی درست است؟

۱. هر ترکیب خطی از این توابع تابع ویژه هامیلتونی است.
۲. تابع حالت برای این سیستم باید یکی از این توابع ویژه باشد.
۳. مقادیر ویژه مرتبط با این توابع ویژه باید حقیقی باشند.
۴. این توابع باید همگی با یکدیگر ارتوگونال باشند.

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

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

سری سوال: ۱ یک

عنوان درس: شیمی کوانتومی ۲

رشته تحصیلی/کد درس: شیمی (شیمی فیزیک) ۱۱۱۴۱۴۶

۲- اتم هیدروژن در یک حالت ایستا دارای تابع موج

$1/2\{\psi_{1s} \exp(it/2\hbar) + \psi_{2s} \exp(it/8\hbar) + \psi_{2p0} \exp(it/8\hbar) + \psi_{2p+1} \exp(it/8\hbar)\}$ است. کدام جمله در هر زمان

درست است؟

توابع موج حقیقی برای اتمهای هیدروژن:

$$1s = \frac{1}{\pi^{1/2}} \left(\frac{z}{a}\right)^{3/2} e^{-zr/a}$$

$$2s = \frac{1}{4(\pi)^{1/2}} \left(\frac{z}{a}\right)^{3/2} \left(2 - \frac{zr}{a}\right) e^{-zr/2a}$$

$$2p_z = \frac{1}{4(\pi)^{1/2}} \left(\frac{z}{a}\right)^{5/2} re^{-zr/2a} \cos \theta$$

$$2p_x = \frac{1}{4(\pi)^{1/2}} \left(\frac{z}{a}\right)^{5/2} re^{-zr/2a} \sin \theta \cos \phi$$

$$2p_y = \frac{1}{4(\pi)^{1/2}} \left(\frac{z}{a}\right)^{5/2} re^{-zr/2a} \sin \theta \sin \phi$$

۱. اندازه گیری انرژی با ۲۵٪ احتمال مقدار ۰/۵- هارتزی را میدهد

۲. مقدار متوسط مولفه Z گشتاور زاویه ای برابر ۰/۵ (a.u) است

۳. متوسط انرژی $\frac{7}{8}$ (a.u) است.

۴. اندازه گیری گشتاور زاویه ای کل با احتمال ۷۵٪ به میزان $\sqrt{\mu}$ (a.u) است.

۳- تابع $r \exp(-0.3r^2) \cos \theta$ بر حسب توابع موج اتم هیدروژن بسط داده می شود. این سری ممکن است سهم معینی از

کدام توابع ویژه حالت پایه داشته باشد؟

۱. همگی از نوع $px, py, pz, dxy, dyz, \dots, s$.

۲. همه نوع مگر s

۳. تنها از نوع px, py, pz

۴. تنها از نوع pz

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

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

سری سوال: ۱ یک

عنوان درس: شیمی کوانتومی ۲

رشته تحصیلی/کد درس: شیمی (شیمی فیزیک) ۱۱۴۱۴۶

۴- کدام یک بردار ویژه ماتریس زیر است؟

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -3 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{bmatrix}$$

۱. $[1 \ 0 \ 0]$ ۲. $[1 \ 0 \ 1]$ ۳. $[0 \ -3 \ 0]$ ۴. $[0 \ 0 \ -1]$

۵- تابع ویژه تخمینی برای پایین ترین حالت ذره در جعبه به صورت زیر تعریف می شود:

$$\begin{aligned} \phi &= \sqrt{3/L}(2x/L), \quad 0 \leq x \leq L/2 \\ \phi &= \sqrt{3/L}[(2(L-x)/L)], \quad L/2 \leq x \leq L \\ \phi &= 0, \quad x < 0, x > L \end{aligned}$$

ضرایب بسط C_n در $\phi = \sum_{n=1}^{\infty} C_n \psi_n$ که در آن

$$\psi_n = \sqrt{2/L} \sin(n\pi x/L), \quad 0 \leq x \leq L, \quad \psi_n = 0, \quad x < 0, x > L$$

۱. $C_n = 0$ برای n های فرد ۲. $C_n = 0$ برای n های زوج
۳. $C_n = \frac{4}{n^2}$ برای n های فرد ۴. $C_n = \frac{4}{n^2}$ برای n های زوج

۶- برای تابع موج پارامتری نرمال شده $\phi = [(2\xi)^7 / (4\pi 6!)]^{1/2} r^2 \exp(-\xi r)$ (بر حسب a.u) مقدار

$$\int \phi H \phi dv = \xi^2 / 10 - \xi / 3$$

است. انرژی متوسط به کمک این تابع موج کدام است؟

۱. -0.5 ۲. $-1/0$ ۳. -0.278 ۴. -0.528

۷- تابع موج پارامتری نرمال شده برای اتم هیدروژن بصورت $\phi = (\alpha^5 / 3\pi)^{1/2} r \exp(-\alpha r)$ است. (بر حسب a.u) انرژی در

حالت $\alpha = 3/2$ مینیمم است. متوسط انرژی پتانسیل به کمک این تابع چیست؟ (به جدول انتگرالها در پیوست ملاحظه شود)

۱. -0.75 ۲. 0.25 ۳. -0.65 ۴. -0.35

۸- تابع موج تقریبی نرمال شده اتم هیدروژن بر حسب مولفه هایش به صورت زیر است:

$$\phi = (1/\sqrt{2})\psi_{1s} + (1/\sqrt{4})\psi_{2s} + (1/\sqrt{8})\psi_{3s} + C_4\psi_{4s}$$

مقدار C_4 کدام است؟

۱. $1/\sqrt{4}$ ۲. $1/\sqrt{2}$ ۳. $1/\sqrt{8}$ ۴. 0

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

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

سری سوال: ۱ یک

عنوان درس: شیمی کوانتومی ۲

رشته تحصیلی/کد درس: شیمی (شیمی فیزیک) ۱۱۴۱۴۶

۹- با توجه به مسئله قبل مقدار انرژی متوسط چه مقدار است؟ (بر حسب a.u.)

۱. ۰/۴۵۲ - ۲. ۰/۵۵۰ - ۳. ۰/۱۲۵ - ۴. ۰/۲۹۲ -

۱۰- Φ_b و Φ_a یک مجموعه نرمال شده از توابع پایه بر حسب مدل LCAO برای سیستم همگن دو اتمی تک الکترونی انتخاب شده اند. هر گاه داشته باشیم:

$$\int \Phi_a^* H \Phi_a dv = -2 \quad a.u. \quad \int \Phi_b^* H \Phi_b dv = -2 \quad a.u. \quad \int \Phi_a^* H \Phi_b dv = -1 \quad a.u. \quad \int \Phi_a^* \Phi_b dv = 1/4$$

انرژی پایین ترین حالت این سیستم چیست؟ (بر حسب a.u.)

۱. -۲/۴ - ۲. ۰/۲۵ - ۳. -۱ - ۴. -۲

۱۱- با توجه به مسئله قبل تابع موج تقریبی نرمال شده بر اساس مدل LCAO چیست؟

$$\begin{aligned} \psi &= \sqrt{2/5}(\Phi_a + \Phi_b) & ۱ \\ \psi &= \sqrt{5/2}(\Phi_a + \Phi_b) & ۲ \\ \psi &= \sqrt{2/5}(\Phi_a - \Phi_b) & ۳ \\ \psi &= \sqrt{5}(\Phi_a + \Phi_b) & ۴ \end{aligned}$$

۱۲- متوسط انرژی جنبشی برای حالت پایه اتم هیدروژن کدام است؟ (بر حسب هارتری)

۱. -۱۳/۶ - ۲. ۰/۵ - ۳. ۰/۵ - ۴. ۱

۱۳- معادل انرژی یک الکترون ولت معادل چند cm^{-1} است؟

۱. ۲۳/۰۶۰۵ - ۲. ۶۲۷/۵۱۰ - ۳. ۸۰۶۵/۵ - ۴. ۱۶۰۲/۱۷

۱۴- کدام جمله زیر درست است؟

۱. برای هر سیستم دو الکترونی، عامل اسپین در تابع موج باید پاد متقارن باشد.
۲. برای هر سیستم چند فرمیونی، مبادله نشانه های دو فرمیون در تابع موج باید تابع موج را در ۱- ضرب کند.
۳. بزرگی مولفه Z گشتاور زاویه اسپینی یک ذره با اسپین غیر صفر باید همیشه کم تر از بزرگی بردار گشتاور زاویه ای اسپینی آن باشد.

۴. مقادیر مجاز عدد کوانتومی s یک الکترون $\frac{1}{2}$ و $-\frac{1}{2}$ است.

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

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

سری سوال: ۱ یک

عنوان درس: شیمی کوانتومی ۲

رشته تحصیلی/کد درس: شیمی (شیمی فیزیک) ۱۱۴۱۴۶

۱۵-

کدام گزینه در مورد ماتریس $A = \begin{pmatrix} 2 & 2 \\ 2 & -1 \end{pmatrix}$ درست است؟

۱. A هرمیتی نمی باشد.
۲. ماتریس ویژه بردار آن متعامد است.
۳. ماتریس ویژه بردار آن یکانی نمی باشد.
۴. ویژه مقادیر آن ۳ و ۲ است.

۱۶-

مقدار انتگرال $\int_0^{\infty} f(x)\delta(x)dx$ کدام است؟

۱. صفر
۲. ۱
۳. $f(0)$
۴. $\frac{1}{2}f(0)$

۱۷- برای نوسانگر غیر هماهنگ با $H' = cx^3 + dx^4$ ، انرژی مرتبه $E^{(1)}$ برای حالت پایه کدام است؟

$$\psi_0^{(0)} = (\alpha/\pi)^{1/4} e^{-\alpha x^2/2}$$

۱. $\frac{64h^2}{3\pi^4 v^2 m^2}$
۲. $\frac{3dh^2}{64\pi^4 v^2 m^2}$
۳. $\frac{3h^2}{64\pi^4 vm}$
۴. صفر

۱۸- برای اتم هلیوم با تابع موج تخمینی $\Psi_{1s2}^{(0)} = 1s(1)1s(2)$ انرژی اختلال نیافته، $E^{(0)}$ ، کدام است؟ (بر حسب الکترون ولت)

۱. $-27/2$
۲. $-108/83$
۳. $-54/4$
۴. $-128/8$

۱۹- برای اولین حالت برانگیخته اتم هلیوم چند تابع موج اختلال نیافته وجود دارد؟ اولین تصحیح انرژی در اثر هامیلتونی اختلال یافته بر روی ترازهای انرژی آن چگونه است؟

۱. ۶ تابع موج، شکافتگی در ترازها رخ نمیدهد
۲. ۸ تابع موج، ترازها به ۴ تراز شکافته می شوند.
۳. ۶ تابع موج، ترازها به ۴ تراز دو تایی شکافته می شوند.
۴. ۴ تابع موج، ترازها به دو تراز شکافته می شوند.

۲۰- بر اساس نظریه اختلال وابسته به زمان، شرط برهم کنش نور با ماده چیست؟

۱. مخالف صفر بودن ممان دو قطبی مولکول
۲. مخالف صفر بودن انتگرال ممان انتقال در طی برهم کنش
۳. مخالف صفر بودن $|b_m(t')|$
۴. مخالف صفر بودن مربع انتگرال ممان انتقال در طی برهم کنش

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

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

سری سوال: ۱ یک

عنوان درس: شیمی کوانتومی ۲

رشته تحصیلی/کد درس: شیمی (شیمی فیزیک) ۱۱۴۱۴۶

۲۱- کدام جمله در مورد انتقالات مجاز طی برهم کنش نور با ماده صادق است؟

۱. ممان انتقال برای ذره در جعبه یک بعدی با شرط $\Delta n = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$ مخالف صفر میشود.
۲. ممان انتقال برای نوسانگر هماهنگ با شرط $\Delta v = 0, \pm 1$ مخالف صفر میشود.
۳. ممان انتقال برای چرخنده صلب دو ذره ای با شرط $\Delta j = 0, \pm 1$ مخالف صفر میشود.
۴. ممان انتقال برای ذره در جعبه یک بعدی با شرط $\Delta n = \pm 1, \pm 3, \pm 5, \dots$ مخالف صفر میشود.

۲۲- برای یک سیستم اختلال نیافته با درجه همترازی دو و مقادیر انتگرال های اختلال یافته به شکل زیر ، انرژی تصحیح مرتبه اول $E(1)$ کدام است؟

$$\langle \psi_j^{(0)} | \psi_k^{(0)} \rangle = \delta_{jk} \quad \text{و} \quad H'_{11} = 6b \quad \text{و} \quad H'_{11} = 2b \quad \text{و} \quad H'_{11} = 4b$$

۱. $\pm \sqrt{5}b$ ۲. $(5 \pm \sqrt{5})b$ ۳. $(5 \pm \sqrt{5})^{1/2}b$ ۴. $(5 \pm \sqrt{5})^2 b$

۲۳- برای ذره در جعبه مربعی با اختلال $\frac{1}{4}L \leq x \leq \frac{3}{4}L$ and $\frac{1}{4}L \leq y \leq \frac{3}{4}L$ $H' = b$, for $\frac{1}{4}L \leq x \leq \frac{3}{4}L$ and $\frac{1}{4}L \leq y \leq \frac{3}{4}L$ $E(0)$ مقدار برای حالت پایه کدام است؟

۱. $(1 \pm 2/\pi)^2 b/2$ ۲. $(1 \pm 2/\pi)^2 b/4$ ۳. $(1 + 2/\pi)^{1/2} b/4$ ۴. $(1 \pm 2/\pi)b/4$

۲۴- کدام جمله درست است؟

۱. هر ترکیب خطی از جواب های معادله شرودینگر مستقل از زمان، جوابی برای این معادله است.
۲. هر ترکیب خطی از جواب های معادله شرودینگر وابسته به زمان، جوابی برای این معادله است.
۳. $E^{(1)} = \langle \psi^{(0)} | H' | \psi^{(0)} \rangle$ تنها برای حالت پایه بکار میرود.
۴. تمام موارد درست است.

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

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

سری سوال: ۱ یک

عنوان درس: شیمی کوانتومی ۲

رشته تحصیلی/کد درس: شیمی (شیمی فیزیک) ۱۱۴۱۴۶

۲۵- برای نوسانگر غیر هماهنگ با انرژی پتانسیل $\frac{1}{2}kx^2 + cx^3$ انرژی تصحیح مرتبه اول $E^{(1)}$ در حالتی با عدد کوانتومی n کدام است؟

$$\langle \psi_v^{(0)} | x^3 | \psi_v^{(0)} \rangle = [(v+1)(v+2)(v+3)/8\alpha^3]^{1/2} \delta_{v',v+3} + 3[(v+1)/2\alpha]^{3/2} \delta_{v',v+1} + 3(v/2\alpha)^{3/2} \delta_{v',v-1} + [v(v-1)(v-2)/8\alpha^3]^{1/2} \delta_{v',v-3}$$

۱. $c^2/8\alpha^3 hv$ ۲. $30n^2 c^2/8\alpha^3 hv$
۳. صفر ۴. $(30n^2 - 30n + 11)c^2/8\alpha^3 hv$

۲۶- ضریب نرمال کننده برای تابع موج دترمینانی $|1s1s2s\rangle$ کدام است؟

۱. $\frac{1}{\sqrt{3}}$ ۲. $\frac{1}{\sqrt{3!}}$ ۳. $\frac{1}{\sqrt{6!}}$ ۴. $\frac{1}{\sqrt{2}}$

۲۷- برای اتم لیتیموم در حالت پایه، انرژی اختلال نیافته کدام است؟ (بر حسب الکترون ولت)

۱. $-۱۳/۶$ ۲. $-۲۷۵/۵$ ۳. $-۱۰۸/۸$ ۴. $-۲۷/۲$

۲۸- برای اتم لیتیموم در حالت پایه، انرژی تصحیح مرتبه اول کدام عبارت است؟

۱. $E^{(1)} = J_{1s2s} + 2J_{1s1s} - K_{1s2s}$ ۲. $E^{(1)} = J_{1s2s} + 2J_{1s1s} - 2K_{1s2s}$
۳. $E^{(1)} = 2J_{1s2s} + J_{1s1s} - K_{1s2s}$ ۴. $E^{(1)} = 2J_{1s2s} - J_{1s1s} - K_{1s2s}$

۲۹- کدام عبارت زیر درست است؟

۱. $(\hat{S}_+ + \hat{S}_-)\alpha = \hbar\alpha$ ۲. $(\hat{S}_+ + \hat{S}_-)\alpha = i\hbar\alpha$ ۳. $(\hat{S}_+ - \hat{S}_-)\beta = \hbar\alpha$ ۴. $(\hat{S}_+ + \hat{S}_-)\beta = i\hbar\beta$

۳۰- زاویه ای که بردار اسپین S الکترون با تابع اسپین α با محور Z می سازد کدام است؟

۱. $\text{Arccos}(1/2)$ ۲. $\text{Arccos}(\sqrt{2}/3)$ ۳. $\text{Arccos}(\sqrt{3}/3)$ ۴. $\text{Arctg}(\sqrt{3}/2)$

۳۱- کدام اپراتور هرمیتی نیست؟

۱. P_{12} ۲. $\frac{\partial^2}{\partial y^2}$ ۳. $P_x^2 + P_y^2$ ۴. $\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

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

سری سوال: ۱ یک

عنوان درس: شیمی کوانتومی ۲

رشته تحصیلی/کد درس: شیمی (شیمی فیزیک) ۱۱۴۱۴۶

۳۲- اگر الکترون ها دارای اسپین صفر باشند، آرایش حالت پایه اتم لیتیموم کدام است؟

۱. $1s(1)1s(2)1s(3)$.۱ ۲. $1s(1)\overline{1s(2)}1s(3)$.۲ ۳. $1s(1)1s(2)2s(3)$.۳ ۴. $1s(1)\overline{1s(2)}2s(3)$.۴

۳۳- کدام تابع زیر تابع ویژه S_x با مقدار ویژه $\frac{1}{2}\hbar$ است؟

۱. $\frac{\alpha + \beta}{2}$.۱ ۲. $\frac{\alpha - \beta}{2}$.۲ ۳. $\frac{\alpha + \beta}{\sqrt{2}}$.۳ ۴. $\frac{\alpha - \beta}{\sqrt{2}}$.۴

۳۴- ماتریس نمایش دهنده S_2 کدام است؟

۱. $\frac{1}{2}\hbar \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{vmatrix}$.۱ ۲. $\frac{1}{2}\hbar \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -i \end{vmatrix}$.۲ ۳. $\frac{1}{2}\hbar \begin{vmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{vmatrix}$.۳ ۴. $\frac{1}{4}\hbar \begin{vmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 3 \end{vmatrix}$.۴

۳۵- تراز پایه آرایش اتم اکسیژن کدام است؟

۱. $3P_2$.۱ ۲. $3P_{1/2}$.۲ ۳. $1D_2$.۳ ۴. $3D_2$.۴

۳۶- انرژی برهم کنش در اثر زیمان کدام است؟

۱. $E_B = \beta_e B M_J$.۱ ۲. $E_B = \beta_e B g < M_J >$.۲ ۳. $E_B = \beta_e B < L_z > + M_J$.۳ ۴. $E_B = \beta_e B M_J + \beta_e B \hbar^{-1} < S_z >$.۴

۳۷- کدام عبارت بیانگر انتگرال مبادله ای است؟

۱. $\langle \theta_i(1)\theta_j(2) | e^{i^2/r_{12}} | \theta_i(1)\theta_j(2) \rangle$.۱ ۲. $\langle \theta_i(1)\theta_j(2) | e^{i^2/r_{12}} | \theta_i(2)\theta_j(1) \rangle$.۲ ۳. $\langle \theta_i(1)\theta_j(1) | e^{i^2/r_{12}} | \theta_i(1)\theta_j(1) \rangle$.۳ ۴. $\langle \theta_i(1)\theta_i(2) | e^{i^2/r_{12}} | \theta_j(1)\theta_j(2) \rangle$.۴

۳۸- مقدار ویژه S_2 برای تابع $3^{-1/2}[\alpha(1)\alpha(2)\alpha(3) + \alpha(1)\beta(2)\alpha(3) + \beta(1)\alpha(2)\alpha(3)]$ کدام است؟

۱. $\frac{1}{2}\hbar^2$.۱ ۲. $\frac{3}{15}\hbar^2$.۲ ۳. $\frac{15}{4}\hbar^2$.۳ ۴. $\frac{3}{15}\hbar$.۴

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

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

سری سوال: ۱ یک

عنوان درس: شیمی کوانتومی ۲

رشته تحصیلی/کد درس: شیمی (شیمی فیزیک) ۱۱۱۴۱۴۶

۳۹- کدام جمله درست است؟

۱. چندگانگی اسپینی هر جمله از اتم با تعداد زوج الکترون، باید یک عدد فرد باشد.
۲. چندگانگی اسپینی یک جمله از اتم همواره برابر با تعداد ترازهای آن جمله است.
۳. روش SCF هارتری، انرژی یک اتم را برابر با مجموع انرژی های اربیتال الکترون ها می داند.
۴. روش هارتری- فاک قادر است انرژی غیر نسبیتی اتم چند الکترونی را آرایه دهد.

۴۰- اختلاف جدایی انرژی بین دو حالت با $M_J = \frac{1}{2}$ و $M_J = -\frac{1}{2}$ برای حالت های $^2P_{1/2}$ اتم هیدروژن وقتی میدان مغناطیس خارجی برابر ۲/۰ تسلا باشد چیست؟ (بر حسب الکترون ولت)

۱. 1.0×10^{-5} ۲. 7.7×10^{-6} ۳. 3.5×10^{-6} ۴. 7.0×10^{-5}

تعداد سوالات: تستی: ۴۰: تشریحی: ۰

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

سری سوال: ۱ یک

عنوان درس: شیمی کوانتومی ۲

رشته تحصیلی/کد درس: شیمی (شیمی فیزیک) ۱۱۱۴۱۴۶

| مقدار گاوسی | مقدار SI | ثابت و نشانه ^b | توضیح |
|--|--|---------------------------|-------------------|
| $2.99792458 \times 10^{10}$ cm/s | 2.99792458×10^8 m/s | c | سرعت نور در خلأ |
| 4.803207×10^{-10} statC | 1.602177×10^{-19} C | e | بار پروتون |
| | | e' | |
| | $8.8541878 \times 10^{-12}$ C ² /N-m ² | ϵ_0 | گذردهی خلأ |
| 6.02214×10^{23} mol ⁻¹ | 6.02214×10^{23} mol ⁻¹ | N_A | ثابت آووگادرو |
| 9.10939×10^{-28} g | 9.10939×10^{-31} kg | m_e | جرم سکون الکترون |
| 1.672623×10^{-24} g | 1.672923×10^{-27} kg | m_p | جرم سکون پروتون |
| 1.674929×10^{-24} g | 1.674929×10^{-27} kg | m_n | جرم سکون نوترون |
| 6.62608×10^{-27} erg s | 6.62608×10^{-34} J s | h | ثابت پلانک |
| | 96485.3 C/mol | F | ثابت فاراده |
| | $4\pi \times 10^{-7}$ N C ⁻² s ² | μ_0 | نفوذپذیری خلأ |
| 0.5291772×10^{-8} cm | 5.291772×10^{-11} m | a_0 | شعاع بور |
| | 9.27402×10^{-24} J/T | β_e | مگنتون بور |
| | 5.05079×10^{-27} J/T | β_N | مگنتون هسته‌ای |
| 2.0023193044 | 2.0023193044 | g_e | مقدار g الکترون |
| 5.585695 | 5.585695 | g_p | مقدار g پروتون |
| 8.3145×10^7 erg/mol-K | 8.3145 J/mol-K | R | ثابت گاز |
| 1.38066×10^{-16} erg/K | 1.38066×10^{-23} J/K | k | ثابت بولتسمن |
| 6.673×10^{-8} cm ³ /g-s ² | 6.673×10^{-11} m ³ /kg-s ² | G | ثابت گرانشی |

a مستخرج از E. R. Cohen and B. N. Taylor, Rev. Mod. Phys., 59, 1121 (1987).

$${}^b F = N_A e, e' = e / (4\pi\epsilon_0)^{1/2}, a_0 = \hbar^2 / m_e e^2 = 4\pi\epsilon_0 \hbar^2 / m_e e^2, \beta_e = e\hbar / 2m_e, \beta_N = e\hbar / 2m_p, \hbar = h / 2\pi, k = R / N_A$$

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

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

سری سوال: ۱ یک

عنوان درس: شیمی کوانتومی ۲

رشته تحصیلی/کد درس: شیمی (شیمی فیزیک) ۱۱۱۴۱۴۶

جدول A - ۵ انتگرالها

$$\int x \sin bx \, dx = \frac{1}{b^2} \sin bx - \frac{x}{b} \cos bx \quad (\text{A.1})$$

$$\int \sin^2 bx \, dx = \frac{x}{2} - \frac{1}{4b} \sin (2bx) \quad (\text{A.2})$$

$$\int x \sin^2 bx \, dx = \frac{x^2}{4} - \frac{x}{4b} \sin (2bx) - \frac{1}{8b^2} \cos (2bx) \quad (\text{A.3})$$

$$\int x^2 \sin^2 bx \, dx = \frac{x^3}{6} - \left(\frac{x^2}{4b} - \frac{1}{8b^3} \right) \sin (2bx) - \frac{x}{4b^2} \cos (2bx) \quad (\text{A.4})$$

$$\int x e^{bx} \, dx = \frac{e^{bx}}{b^2} (bx - 1) \quad (\text{A.5})$$

$$\int x^2 e^{bx} \, dx = e^{bx} \left(\frac{x^2}{b} - \frac{2x}{b^2} + \frac{2}{b^3} \right) \quad (\text{A.6})$$

$$\int_0^{\infty} x^n e^{-qx} \, dx = \frac{n!}{q^{n+1}}, \quad n > -1, q > 0 \quad (\text{A.7})$$

$$\int_0^{\infty} e^{-bx^2} \, dx = \frac{1}{2} \left(\frac{\pi}{b} \right)^{1/2}, \quad b > 0 \quad (\text{A.8})$$

$$\int_0^{\infty} x^{2n} e^{-bx^2} \, dx = \frac{1 \cdot 3 \cdots (2n-1)}{2^{n+1}} \left(\frac{\pi}{b^{2n+1}} \right)^{1/2}, \quad b > 0, n = 1, 2, 3, \dots \quad (\text{A.9})$$

$$\int_1^{\infty} z^n e^{-az} \, dz = \frac{n!}{a^{n+1}} e^{-a} \left(1 + at + \frac{a^2 t^2}{2!} + \dots + \frac{a^n t^n}{n!} \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots, a > 0 \quad (\text{A.10})$$