



تعداد سوالات: تستی: ۳۵ تشریحی: --

نام درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/ کُد درس: شیمی محض - شیمی کاربردی - شیمی فیزیک ۱۱۱۴۰۲۷

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۰ تشریحی: --

مجاز است.

استفاده از: ماشین حساب

۱. تاثیر اپراتور \hat{D}_x^r بر روی تابع $f(x) = a \sin x$ کدام گزینه است؟الف. $-f(x)$. ب. $f(x)$.ج. $-af(x)$. د. $af(x)$.

۲. اپراتور وابسته به تابع هامیلتونی کدام است؟

الف. $\hat{H} = -\frac{\hbar}{2\pi m} \nabla^2 + \hat{V}$. ب. $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \hat{V}$.ج. $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\pi} \nabla^2 + \hat{V}$. د. $\hat{H} = -\frac{\hbar}{2m} \nabla^2 + \hat{V}$.۳. مقدار قابل انتظار $\langle p_x \rangle$ برای ذره آزاد کدام چه قدر است؟الف. $\pm \sqrt{2\hbar m E}$. ب. $\pm \frac{\hbar}{\sqrt{2mE}}$.ج. $\pm \frac{h}{\sqrt{2mE}}$. د. $\pm \sqrt{2mE}$.

۴. برای ذره آزاد یک بعدی، ثابت نرمال سازی تابع موجی کدام است؟

الف. $\sqrt{\frac{L}{2}}$. ب. $\frac{2}{L}$.ج. $\sqrt{\frac{1}{L}}$. د. $\sqrt{\frac{2}{L}}$.

۵. کدام رابطه ی زیر فرکانس سیستم نوسانگر هارمونیک را مشخص می کند؟

الف. $\frac{h}{\pi} \sqrt{\frac{k}{m}}$. ب. $\frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{m}}$.ج. $\frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{\hbar}{2m}}$. د. $\frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{k}{2m}}$.

۶. انرژی نقطه ی صفر در حرکت ارتعاشی کدام است؟

الف. $\frac{h}{2\pi} v$. ب. $\frac{\hbar}{2\pi} v$.ج. $\frac{\hbar}{2\pi} v_0$. د. $\frac{1}{2} hv_0$.



تعداد سوالات: تستی: ۳۵ تشریحی: --

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۰ تشریحی: --

نام درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/ کُد درس: شیمی محض - شیمی کاربردی - شیمی فیزیک ۱۱۱۴۰۲۷

مجاز است.

ماشین حساب

استفاده از:

۷. خاصیت متعامد بودن تابع های ویژه \hat{H} کدام است؟

$$\text{الف. } (i \neq j) \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_i^* \psi_j dV = 0 \quad \text{ب. } (i \neq j) \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_i^* \psi_j dV = 1$$

$$\text{ج. } (i = j) \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_i^* \psi_j dV = 1 \quad \text{د. } (i = j) \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_i^* \psi_j dV = 0$$

۸. تراز چهارم نوسانگر هماهنگ با $n = 3$ چند حالتی است؟

الف. ۳ ب. ۴ ج. ۱۰ د. ۹

۹. اگر تابع $N\Psi$ یک تابع نرمال شده باشد، ضریب نرمال سازی کدام است؟

$$\text{الف. } \sqrt{\int \psi^* \psi d\tau} \quad \text{ب. } \frac{1}{\sqrt{\int \psi^* \psi d\tau}}$$

$$\text{ج. } \sqrt{\psi^* \psi d\tau} \quad \text{د. } N^2$$

۱۰. کدام یک از تابع های زیر واجد شرایط لازم برای نمایش حالت کوانتومی یک ذره است؟

$$\text{الف. } f(x) = Ax^2 \quad \text{ب. } f(x) = \frac{A}{x+1}$$

$$\text{ج. } f(x) = Ax(x+1) \quad \text{د. } f(x) = A \sin x$$

۱۱. کدام یک از مشاهده پذیرهای زیر در حالت نوسانگر هارمونیک یک بعدی درست است؟

$$\text{الف. } \langle p \rangle \neq 0, \langle x \rangle = 0 \quad \text{ب. } \langle p \rangle \neq 0, \langle x \rangle \neq 0$$

$$\text{ج. } \langle p \rangle = 0, \langle x \rangle = 0 \quad \text{د. } \langle p \rangle = 0, \langle x \rangle \neq 0$$

۱۲. انرژی تراز چهارم ذره در جعبه ی مکعبی چند برابر انرژی تراز اول است؟

$$\text{الف. } \frac{11}{3} \quad \text{ب. } \frac{14}{3}$$

$$\text{ج. } 4^2 \quad \text{د. } \frac{17}{3}$$

۱۳. اگر انرژی ارتعاشی E_1 برای مولکول HCl برابر $10^{-21} \times 28/6$ باشد، انرژی اولین حالت برانگیخته کدام است؟

$$\text{الف. } 1/43 \times 10^{-20} \text{ J} \quad \text{ب. } 8/58 \times 10^{-20} \text{ J}$$

$$\text{ج. } 5/74 \times 10^{-20} \text{ J} \quad \text{د. } 4/29 \times 10^{-20} \text{ J}$$



تعداد سوالات: تستی: ۳۵ تشریحی: --

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۰ تشریحی: --

نام درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/ کُد درس: شیمی محض - شیمی کاربردی - شیمی فیزیک ۱۱۱۴۰۲۷

استفاده از: ماشین حساب مجاز است.

۱۴. تابع توزیع شعاعی احتمال حضور الکترون از یک قشر کروی به قشر دیگر کدام است؟

- الف . $4\pi r^2 R^2 dr$ ب . $|\psi|^2 dr$
- ج . $\pi R^2 \psi^2 dr$ د . $4\pi r^2 \psi^2 dr$

۱۵. در نظریه ی اوربیتال مولکولی هوکل کدام فرض زیر درست است؟

- الف . $S_{ii} = \alpha$ ب . $H_{ii} = \alpha$
- ج . $H_{ij} = 1$ د . $S_{ij} = \beta$

۱۶. مقدار قابل انتظار فاصله ی الکترون از هسته برای اوربیتال اتمی ۱s توسط کدام انتگرال زیر به دست می آید؟

- الف . $\langle r \rangle = \int 4\pi r^2 \psi_{1s}^2 dr$ ب . $\langle r \rangle = \int \psi_{1s}^* \hat{H} \psi_{1s} dr$
- ج . $\langle r \rangle = \int \psi_{1s}^* r \psi_{1s} dr$ د . $\langle r \rangle = \int \psi_{1s}^* \psi_{1s} dr$

۱۷. مقدار قابل انتظار X بین صفر تا L برای ذره در جعبه ی یک بعدی کدام است؟

- الف . $\frac{L}{2}$ ب . $\frac{2}{L}$ ج . L د . $\frac{1}{L}$

۱۸. در حالت ذره در جعبه ی مکعبی انرژی دومین تراز آن چقدر است؟

- الف . $\frac{3h^2}{8ma^2}$ ب . $\frac{4h^2}{8ma^2}$
- ج . $\frac{5h^2}{8ma^2}$ د . $\frac{6h^2}{8ma^2}$

۱۹. در حالت ذره در جعبه ی مکعبی چند حالت کوانتومی هم انرژی به سومین تراز مربوط می شود؟

- الف . ۳ ب . ۲ ج . ۵ د . ۶

۲۰. کدام رابطه انرژی های مجاز چرخنده ی صلب در صفحه را نشان می دهد؟

- الف . $\frac{m^2 h^2}{2I}$ ب . $\frac{n^2 h^2}{2I}$
- ج . $\frac{m^2 \hbar^2}{2I}$ د . $\frac{m^2 h^2}{2I \omega}$

۲۱. در رابطه ی $\mu = -g \frac{e}{2m} \bar{s}$ ، g نماد چیست؟

- الف ضریب لاگرانژ ب . فاکتور لانده
- ج . فاکتور پاولی د . ضریب اسپین



تعداد سوالات: تستی: ۳۵ تشریحی: --

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۰ تشریحی: --

نام درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/ کُد درس: شیمی محض - شیمی کاربردی - شیمی فیزیک ۱۱۱۴۰۲۷

مجاز است.

ماشین حساب

استفاده از:

۲۲. کدام ماتریس زیر، ماتریس اپراتور σ_x پاولی است؟

$$\text{ب. } \begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{vmatrix}$$

$$\text{الف. } \begin{vmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{vmatrix}$$

$$\text{د. } \begin{vmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{vmatrix}$$

$$\text{ج. } \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{vmatrix}$$

۲۳. کدام رابطه زیر مقیاس واحد انرژی هارتری است؟

$$\text{ب. } \frac{\hbar^2}{\mu e^2}$$

$$\text{الف. } \frac{m_0 e^4}{\hbar^2}$$

$$\text{د. } \frac{m_0 e^4}{2\hbar^2}$$

$$\text{ج. } \frac{m_0 e^4}{\hbar^2}$$

۲۴. رابطه ی اپراتور L_z برای چرخنده صلب در صفحه کدام است؟

$$\text{ب. } -i\hbar \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}$$

$$\text{الف. } \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi}$$

$$\text{د. } i\hbar \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}$$

$$\text{ج. } \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi}$$

۲۵. انرژی کل مولکول بوتادیین براساس تقریب هوکل β $2/472 + \alpha$ و انرژی کل هر پیوند اتیلنی β $2 + \alpha$ است. انرژی

رزونانس پیوند دوگانه ی نامسقر در بوتادیین کدام است؟

$$\text{ب. } \beta / 472$$

$$\text{الف. } \beta / 472$$

$$\text{د. } \beta / 236$$

$$\text{ج. } \beta / 236$$

۲۶. فرکانس مشخصه ارتعاش در بررسی کلاسیک مولکول، با فرکانس جذبی تجربی در کدام ناحیه برابر است؟

د. زیر قرمز

ج. فرابنفش

ب. قرمز

الف. ریز موج



تعداد سوالات: تستی: ۳۵ تشریحی: --

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۰ تشریحی: --

نام درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/ کُد درس: شیمی محض - شیمی کاربردی - شیمی فیزیک ۱۱۱۴۰۲۷

استفاده از: ماشین حساب مجاز است.

۲۷. برای مولکولهای خطی CO در تقریب چرخنده صلب با مشخصات زیر اولین انرژی چرخشی غیر صفر آن بر حسب الکترون

ولت کدام است؟ (حجم کاسته شده $h = 6.62 \times 10^{-34} \text{ Js}, r = 1.13 \text{ \AA}, 1.14 \times 10^{-26} \text{ kg}$)

الف. 7.67×10^{-4} ب. 4.8×10^{-4} ج. 7.67×10^{-33} د. 4.8×10^{-4}

۲۸. یک الکترون در طول یک نانومتر مقید است (حرکت را یک بعدی فرض کنید) کم ترین انرژی حالت اصلی آن بر حسب ژول

کدام است؟ (جرم الکترون $9.11 \times 10^{-31} \text{ kg}$)

الف. 6.02×10^{-10} ب. 6.02×10^{-20} ج. 24.08×10^{-20} د. 18.06×10^{-20}

۲۹. برای تابع موج $\Psi = Ne^{-\frac{2r}{a}}$ ضریب نرمال کنندگی کدام است؟

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

الف. $\sqrt{\frac{8}{\pi}}$ ب. $\sqrt{\frac{\pi a_0^3}{\pi}}$ ج. $\sqrt{\frac{8}{\pi a_0^3}}$ د. $\sqrt{\frac{25}{\pi a_0^4}}$

۳۰. معادله شرودینگر نوسانگر هماهنگ پس از تغییر متغیر به کدام معادله منجر می گردد؟

الف. لاگرانژ ب. لژاندر ج. لاگر. د. هر میت

۳۱. کدام رابطه بیانگر قضیه ویریا است؟

الف. $E = \frac{\langle V \rangle}{2}$ ب. $T = -\langle V \rangle$

ج. $E = -2\langle T \rangle$ د. همه موارد صحیح است

۳۲. ماتریس نمایش دهنده تابع اسپینی β کدام است؟

الف. $\begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}$ ب. $\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$

ج. $\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$ د. $\begin{bmatrix} 0 \\ -i \end{bmatrix}$

۳۳. کدام گزینه در مورد H_{ij} برای مولکول بوتادی ان بر اساس تقریب هوکل درست است؟

الف. $H_{11} = H_{33} = \beta$ ب. $S_{11} = S_{33} = 0$

ج. $H_{22} = H_{44} = \alpha$ د. $H_{22} = H_{33} = H_{13} = \beta$



کُد سری سؤال: یک (۱)

حضرت علی(ع): ارزش هر کس به میزان دانایی و تخصص اوست.

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۰ تشریحی: --

تعداد سوالات: تستی: ۳۵ تشریحی: --

نام درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/ کُد درس: شیمی محض - شیمی کاربردی - شیمی فیزیک ۱۱۱۴۰۲۷

مجاز است.

ماشین حساب

استفاده از:

۳۴. تعداد جملات پتانسیل دافعه الکترونی برای اتم کربن در معادله شرودینگر چیست؟

۱۵.د

۱۰.ج

۲۰.ب

۳۰.الف

۳۵. کدام رابطه صحیح است؟

$$\frac{\partial r}{\partial y} = \sin \theta \sin \varphi \quad \text{ب.}$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial y} = \frac{\cos \theta \cos \varphi}{r} \quad \text{الف.}$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial z} = -\frac{\sin \theta}{r} \quad \text{د.}$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial x} = \frac{-\sin \theta}{r \sin \varphi} \quad \text{ج.}$$

ثابت ها و اعداد مورد نیاز

$$h = 6.626 \times 10^{-34} \text{ Js} \quad \hbar = 1.055 \times 10^{-34} \text{ Js}$$

$$a_0 = 5.29 \times 10^{-11} \text{ m} \quad m_e = 9.11 \times 10^{-31} \text{ kg}$$

$$c = 3 \times 10^8 \text{ ms}^{-1} \quad eV = 1.602 \times 10^{-19} \text{ J}$$