

سری سوال : یک ۱

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

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

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- شرط $\psi(\varphi) = \psi(\varphi + 2\pi)$ نشان دهنده کدامیک از خصوصیات ψ است؟

- ۰.۱ حقیقی بودن ψ ۰.۲ معین بودن ψ ۰.۳ بیوسسته بودن ψ ۰.۴ تک مقداری بودن ψ

۲- چنانچه بخواهیم تعبیر درستی از نمودار تداخل ارائه کنیم باید بپذیریم که:

- ۰.۱ شدت های دو باریکه با هم جمع می شوند
 ۰.۲ دامنه های دو باریکه با هم جمع می شوند
 ۰.۳ دامنه هر نقطه متناسب است با احتمال رسیدن ذرات به آن نقطه
 ۰.۴ احتمال رسیدن ذره به هر نقطه را می توان با تابع موج احتمال، φ نشان داد

۳- کدامیک از گزینه های زیر شرط نرمال بودن تابع موج را نشان می دهد؟

۰.۱ $\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^2(x,t) dx = 1$ ۰.۲ $\int_0^{+\infty} \psi(x,t) dx = 0$ ۰.۳ $\int_V \psi^2(r,t) dv = 0$ ۰.۴ $\int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x,t) dx = 1$

۴- اصل موضوع دوم مکانیک کوانتومی چیست؟

- ۰.۱ برای هر کمیت قابل اندازه گیری، اپراتور وابسته به آن وجود دارد.
 ۰.۲ شناخت کامل از مکان و تکانه ذره را در هر لحظه در اختیار ما قرار می دهد.
 ۰.۳ مقدار قابل انتظار هر مشاهده پذیر را مشخص می کند.
 ۰.۴ احتمال حضور هر ذره را در کل فضا مشخص می کند.

۵- نتیجه تاثیر اپراتور \hat{D}_x^2 روی تابع $a \cos \alpha x$ کدام گزینه است؟

۰.۱ $-a\alpha^2 \cos \alpha x$ ۰.۲ $-a\alpha^2 \sin \alpha x$ ۰.۳ $-a^2 \alpha \cos \alpha x$ ۰.۴ $-a^2 \alpha \sin \alpha x$

۶- اپراتور هامیلتونی \hat{H} تابع چه کمیتی است؟

۰.۱ \hat{x}_i, \hat{p}_{x_i} ۰.۲ ∇^2, V ۰.۳ T, V ۰.۴ $\hat{p}_{x_i}, \frac{\partial^2}{\partial x^2}$

۷- یکی از نتایج تقارن سیستم ذره در جعبه نسبت به مرکز مسیر حرکت در طول خط کدام گزینه است؟

- ۰.۱ صفر شدن مقدار قابل انتظار مکان
 ۰.۲ صفر شدن مقدار قابل انتظار اندازه حرکت
 ۰.۳ صفر شدن مقدار قابل انتظار مکان و اندازه حرکت
 ۰.۴ صفر شدن تابع موج احتمال

سری سوال : ۱ یک

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

تعداد سوالات : تستی : ۴۰ تشریحی : ۰

عنوان درس : مبانی شیمی کوانتومی

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

۸- منظور از واژه کنسرواتيو (پایستار) چیست؟

۱. پتانسیل های مستقل از زمان
۲. پتانسیل های وابسته به زمان
۳. پتانسیل ها و نیروهای مستقل از زمان
۴. توابع مستقل از زمان

۹- کدامیک از گزینه های زیر، اصل عدم قطعیت هایزنبرگ را بدرستی بیان می کند؟

$$\Delta x \Delta P_x \geq \hbar \quad \Delta t \Delta E \geq \hbar \quad \Delta x \Delta E \geq \frac{\hbar}{2} \quad \Delta y \Delta P_x \geq \frac{\hbar}{2}$$

۱۰- مقدار عددی فاکتور زمانی در تابع موج ذره در جعبه یک بعدی برابر است با :

۱. ۱
۲. صفر
۳. $\sqrt{\frac{2}{l}}$
۴. می بایست محاسبه گردد

۱۱- اصل همخوانی Correspondance Principle بیان می کند که :

۱. با افزایش طول جعبه، مقادیر انرژی گسسته می شود.
۲. با افزایش طول جعبه، مقادیر انرژی پیوسته می شود.
۳. با افزایش عدد کوانتومی، مقادیر انرژی گسسته می شود.
۴. با افزایش عدد کوانتومی، مقادیر انرژی پیوسته می شود.

۱۲- کدامیک از گزینه های زیر در مورد ذره در جعبه سه بعدی صحیح است؟

$$E = E_x + E_y + E_z \quad \psi^2 = \psi_x^2 + \psi_y^2 + \psi_z^2 \quad E = E_x \times E_y \times E_z \quad \psi = \psi_x + \psi_y + \psi_z$$

۱۳- در کدام مورد تجمع ترازها در یک محدوده معینی از انرژی، بیشتر است ؟

۱. ذره در جعبه یک بعدی
۲. ذره در جعبه دوبعدی
۳. ذره در جعبه سه بعدی
۴. در هر سه یکسان است

۱۴- حاصل عبارت $\frac{\partial L}{\partial x}$ برابر با کدام گزینه است؟

$$m\ddot{x} \quad m\dot{x} \quad -kx \quad kx$$

۱۵- انرژی نقطه صفر در نوسانگر هارمونیک :

۱. صفر بوده چرا که مستقل از دماست.
۲. انرژی آغازی نوسانگر است و مقدار آن صفر نیست.
۳. مقدار آن $\frac{1}{2} h\nu_0$ و مستقل از دماست.
۴. گزینه های ۳ و ۲ صحیح است

سری سوال: ۱ یک

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

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

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

۱۶- منظور از چرخنده صلب چیست؟

۱. چرخنده ای که در اثر چرخش، عمل نوسان را نیز انجام دهد.

۲. چرخنده ای که در اثر چرخش، فاصله بین دو اتم (طول پیوند) تغییر نکند.

۳. چرخنده ای که حرکت آن منحصر به جابجایی در فضا باشد.

۴. چرخنده ای که حول مرکز جرم خود دارای دوران آزاد باشد.

۱۷- ضریب ثابت m^2 در معادله شرودینگر در مدل چرخنده صلب، بیانگر کدام از گزینه های زیر است؟

$$\begin{array}{cccc}
 \frac{\hbar^2}{2m_0 r^2 E} \quad .4 & \frac{2m_0 r^2 E}{\hbar^2} \quad .3 & \frac{2mr^2 E}{\hbar^2} \quad .2 & \frac{\hbar^2}{2mr^2 E} \quad .1
 \end{array}$$

۱۸- مقدار \dot{x} در رابطه $x = r \cos \varphi$ برای چرخنده صلب مطابق با کدام گزینه است؟

$$\begin{array}{cccc}
 -r \cos \varphi \times \dot{\varphi} \quad .4 & r \sin \varphi \times \dot{\varphi} \quad .3 & -r \sin \varphi \times \dot{\varphi} \quad .2 & r \cos \varphi \times \dot{\varphi} \quad .1
 \end{array}$$

۱۹- مقدار \hat{L}_y برابر با کدام گزینه است؟

$$\begin{array}{cccc}
 zP_x - xP_z \quad .4 & xP_z - zP_x \quad .3 & zP_y - yP_z \quad .2 & yP_z - zP_y \quad .1
 \end{array}$$

۲۰- در تراز دوم انرژی چرخشی، مقدار انرژی و L برابر است با:

$$\begin{array}{cccc}
 -\hbar, 0, \hbar, \frac{\hbar^2}{I} \quad .4 & \sqrt{2}\hbar, \frac{\hbar^2}{I} \quad .3 & \sqrt{2}\hbar, 2\frac{\hbar^2}{I} \quad .2 & 0, \frac{\hbar^2}{I} \quad .1
 \end{array}$$

۲۱- بیشترین تعداد مشاهده پذیرهای فیزیکی در چرخنده صلب، به کدامیک از گزینه های زیر محدود نمی شود؟

۱. انرژی

۲. قدرمطلق تکانه زاویه ای

۳. مولفه LZ تکانه زاویه ای

۴. دانسیته ی احتمال

۲۲- وابستگی انرژی اتم هیدروژن به جرم کاهش یافته چگونه است؟

$$\begin{array}{cccc}
 \mu \quad .1 & \mu^2 \quad .2 & \mu^{-1} \quad .3 & \frac{1}{\mu^2} \quad .4
 \end{array}$$

۲۳- در هر اتم تک الکترونی، انرژی وابسته به کدام کمیت است؟

$$\begin{array}{cccc}
 n \quad .1 & n^2 \quad .2 & l \quad .3 & l^2 \quad .4
 \end{array}$$

سری سوال: ۱ یک

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

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

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

۲۴- کدامیک از توابع زیر متعامدند؟

$$\begin{array}{llll}
 \psi_{2p_z} \text{ و } \psi_{1s} & \cdot 1 & \psi_{2p_y} \text{ و } \psi_{1s} & \cdot 2 \\
 \psi_{2p_x} \text{ و } \psi_{1s} & \cdot 3 & \text{تمام موارد} & \cdot 4
 \end{array}$$

۲۵- تابع توزیع شعاعی تابع چه کمیتی است؟

$$\begin{array}{llll}
 r & \cdot 1 & \theta & \cdot 2 \\
 \theta & \cdot 3 & \theta \text{ و } r & \cdot 4
 \end{array}$$

۲۶- مقدار قابل انتظار فاصله الکترون از هسته در حالت ۱s برابر با کدام است؟ $\Psi_{1s} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \alpha^{3/2} e^{-\alpha r}$ و $\alpha = z/a_0$

$$\begin{array}{llll}
 \frac{3}{2} a_0 z & \cdot 1 & \frac{3}{2} a_0 & \cdot 2 \\
 a_0 & \cdot 3 & \frac{3}{2} \frac{a_0}{z} & \cdot 4
 \end{array}$$

۲۷- توزیع بار حاصل از سه اوربیتال ۲p چه نوع توزیعی است؟

۱. یک توزیع با تقارن دمبلی
۲. توزیع با تقارن استوانه ای
۳. توزیع با تقارن کروی
۴. توزیع با تقارن محوری

۲۸- مقدار عددی ممان مغناطیسی در راستای محور Z برابر با کدام گزینه است؟

$$\begin{array}{llll}
 \mu_z = \frac{-e\hbar}{2m_e} m_l & \cdot 1 & \mu_z = \frac{e\hbar}{2m_e} m_l & \cdot 2 \\
 \mu_z = \frac{2m_e}{e\hbar} m_l & \cdot 3 & \mu_z = \frac{-2m_e}{e\hbar} m_l & \cdot 4
 \end{array}$$

۲۹- اندازه تکانه زاویه ای اسپین الکترون برابر با کدام گزینه است؟

$$\begin{array}{llll}
 \pm \frac{\sqrt{3}}{2} \hbar & \cdot 1 & \pm \frac{1}{2} \hbar & \cdot 3 \\
 \pm \frac{1}{2} \hbar & \cdot 4 & \frac{\sqrt{3}}{2} \hbar & \cdot 2
 \end{array}$$

۳۰- کدامیک از خصوصیات روش تقریبی نمی باشد؟

۱. در این روش ها، پتانسیل مربوط به برهم کنش ها در هامیلتونی وارد می شود.
۲. هنگامی از این روش ها استفاده می گردد که معادله ی شرودنیر غیر قابل حل می شود.
۳. انرژی های به دست آمده از این روش، مقادیر مطلق هستند. (تقریبی نیستند)
۴. در این روش می توان تابع آزمونی را به صورت ترکیب خطی از توابع موجی بیان کرد.

۳۱- در مدل ذره مستقل، از کدام جمله عبارت هامیلتون صرف نظر می شود؟

$$\begin{array}{llll}
 -\sum \frac{z}{r_i} & \cdot 1 & +\sum \frac{z}{r_{ij}} & \cdot 3 \\
 +\sum \frac{z}{r_i} & \cdot 2 & -\sum \frac{1}{r_{ij}} & \cdot 4
 \end{array}$$

سری سوال : ۱ یک

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

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

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

۳۲- کدامیک از عبارات زیر در مورد بوزون ها صحیح نمی باشد؟

۱. اسپین آنها صفر و یا صحیح است
۲. عدد جرمی آنها زوج است
۳. تابع موج نسبت به جابجایی دو ذره متقارن است
۴. فوتون ها و نوترون ها در دسته بوزون ها قرار دارند

۳۳- پروتون ها ذراتی هستند که:

۱. دارای اسپین صحیح هستند
۲. هسته آنها دارای عدد جرمی زوج است
۳. جزء فرمیون ها هستند
۴. گزینه های ۲ و ۳ صحیح است

۳۴- تراز یکتایی اتم هلیوم:

۱. قسمت فضایی متقارن و قسمت اسپینی ضد متقارن است
۲. هر دو قسمت فضایی و اسپینی ضد متقارن است
۳. قسمت فضایی ضد متقارن و قسمت اسپینی متقارن است
۴. هر دو قسمت فضایی و اسپینی متقارن است

۳۵- کدامیک از خصوصیات نظریه هوکل نمی باشد؟

۱. روش نیمه تجربی و تقریبی است
۲. مشتق شده از نظریه MO-LCAO است
۳. در مولکولهایی مانند بنزن کاربرد دارد
۴. در مولکولهایی مانند هگزادی ان کاربرد دارد

۳۶- انرژی سیستم π در حالت اصلی مولکول اتیلن مطابق با روش هوکل کدام گزینه است؟

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

۳۷- بر اساس قضیه کوپمان، چه موقع پیک یونش به صورت یک پیک پهن در می آید؟

۱. هنگامی که الکترون کنده شده از یک اوربیتال ناپیوندی باشد
۲. هنگامی که الکترون کنده شده از یک اوربیتال پیوندی باشد
۳. هنگامی که الکترون کنده شده از یک اوربیتال ضد پیوندی باشد
۴. هنگامی که الکترون کنده شده از یک اوربیتال اتمی باشد

۳۸- محاسبه تقریبی ساختمان الکترونی توسط نظریه هوکل برای کدام سیستم صادق است؟

۱. هیدرو کربن های اشباع نشده
۲. هیدروکربن با پیوند دوگانه مزدوج
۳. هیدروکربن های اشباع نشده دارای پیوند دوگانه
۴. تمام هیدروکربن های آلی

سری سوال : ۱ یک

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

تعداد سوالات : تستی : ۴۰ تشریحی : ۰

عنوان درس : مبانی شیمی کوانتومی

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

۳۹- کدام گزینه در مورد الکترون و نوترون صحیح است؟

۱. الکترون ذره بوزون و فوتون ذره فرمیون است

۲. هر دو از ذرات بوزون می باشند

۳. الکترون ذره فرمیون و فوتون ذره بوزون است

۴. هر دو از ذرات فرمیون می باشند

۴۰- کدام مورد زیر بنا بر نظریه اوربیتالی هوکل نادرست است؟

۱. $H_{ii} = 1$ ۲. $S_{ii} = 1$ ۴. $H_{ij} = \beta$ برای دو اتم همسایه۳. $H_{ij} = 0$ جز برای دو اتم همسایه