

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- کدامیک از گزینه های زیر در مورد تابع موج صحیح نمی باشد؟

- ۰.۱ توان دوم آن بیانگر چگالی احتمال است.
 ۰.۲ در مقادیر بی نهایت X هم محدود و هم معین است.
 ۰.۳ همواره حقیقی است.
 ۰.۴ در هر نقطه از فضا همواره تک مقداری است.

۲- نتیجه تاثیر اپراتور $\hat{D}_x \cdot \hat{x}$ روی تابع $\sin x$ کدام است؟

- ۰.۱ $x \cos x$ ۰.۲ $\sin x + x \cos x$ ۰.۳ $\cos x + x \sin x$ ۰.۴ $x \sin x$

۳- تعداد حالت همتراز انرژی به شماره n در اتم تک الکترونی کدام است؟

- ۰.۱ $2n$ ۰.۲ $2n^2$ ۰.۳ n^2 ۰.۴ n

۴- کدامیک از گزینه های زیر صحیح نمی باشد؟

- ۰.۱ به هر کمیت فیزیکی یک اپراتور خطی وابسته است
 ۰.۲ اپراتورها هیچ گاه موهومی نبوده و همواره حقیقی اند
 ۰.۳ به هر کمیت فیزیکی یک اپراتور هرمیتیک وابسته است
 ۰.۴ اپراتورهای مربوط به مختصات دکارتی ذره، مکانی هستند

۵- کدام گزینه در مورد مقدار قابل انتظار صحیح نمی باشد؟

- ۰.۱ میانگین مجموعه ای از اندازه گیری هاست.
 ۰.۲ نشان دهنده معین بودن یک کمیت است.
 ۰.۳ در یک اندازه گیری بخصوص در یک حالت بدست نمی آید.
 ۰.۴ از اصول موضوعه مکانیک کوانتومی است.

۶- کدامیک از شرایط زیر برای تابع موجی ψ صحیح نیست؟

- ۰.۱ ψ بایستی محدود باشد
 ۰.۲ ψ می بایست در هر نقطه معین، تک مقدار باشد
 ۰.۳ ψ باید مثبت باشد
 ۰.۴ ψ می بایست یک تابع پیوسته از مختصاتش باشد

۷- کدام یک از گزینه های زیر جزء خصوصیات منظومه کوانتومی شده نمی باشد؟

- ۰.۱ یک منظومه ذره ای است.
 ۰.۲ انرژی های مربوط به آن ردیف پیوسته ای را تشکیل می دهد.
 ۰.۳ مقادیر انرژی آن جدا از هم است.
 ۰.۴ دارای ردیف نامتناهی با مقادیر انرژی گسسته 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

۸- در نمودار تغییرات چگالی احتمال موضعی برای یک بسته موج، در کدام نقطه چگالی احتمال بیشترین مقدار را دارد؟

$$\begin{array}{llll}
 \frac{x}{2\pi} = 1 & .1 & \frac{x}{2\pi} = 0 & .2 \\
 x = 1 & .3 & x \neq 0 & .4
 \end{array}$$

۹- در مدل ذره در جعبه یک بعدی، در کدام ناحیه انرژی پتانسیل صفر است؟

$$\begin{array}{llll}
 -\infty < x < 0 & .1 & L < x < +\infty & .2 \\
 -\infty < x < L & .3 & 0 < x < L & .4
 \end{array}$$

۱۰- در مدل ذره در جعبه یک بعدی، تعداد گره ها در تراز سوم نمودار دانسیته احتمال چند است؟

۱. صفر
 ۲. یک
 ۳. چهار
 ۴. سه

۱۱- کدامیک از ویژگی های مدل ذره در جعبه یک بعدی نمی باشد؟

۱. تابع پتانسیل متقارن است
 ۲. تابع موجی همواره زوج است
 ۳. شرایط مرزی حاکم است
 ۴. تراز های انرژی گسسته است

۱۲- مقدار قابل انتظار مجذور انرژی در مدل ذره در جعبه یک بعدی برابر با کدام گزینه است؟

$$\begin{array}{llll}
 \text{صفر} & .1 & E_n^2 & .2 \\
 E_n & .3 & \sqrt{\langle E_n^2 \rangle - \langle E_n \rangle^2} & .4
 \end{array}$$

۱۳- طبق نظریه امواج، طول جعبه در مدل ذره در جعبه، L برابر با کدام گزینه است؟

$$\begin{array}{llll}
 \frac{\lambda}{2} & .1 & L \text{ تا } 0 & .2 \\
 +\frac{L}{2} \text{ تا } -\frac{L}{2} & .3 & \frac{n\lambda}{2} & .4
 \end{array}$$

۱۴- مقدار تابع موج ψ در محدوده $y > L_2$ در مدل ذره در جعبه سه بعدی برابر است با:

۱. ∞
 ۲. صفر
 ۳. قابل اندازه گیری نیست
 ۴. یک

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

۱۵- تابع موج ذره در جعبه یک بعدی به صورت $\psi = A \sin \frac{n\pi}{L} x$ می باشد. چنانچه ثابت A را دو برابر کنیم در این صورت مقدار انرژی ذره:

۱. دو برابر می شود
 ۲. چهار برابری شود
 ۳. تغییر نمی کند
 ۴. $\sqrt{2}$ برابری شود

۱۶- منظور از چند حالتی چیست؟

۱. تعداد حالت‌های مختلف که دارای انرژی یکسان باشند.
 ۲. تعداد حالت‌های مختلف که دارای انرژی متفاوت باشند.
 ۳. تعداد حالت‌های مختلف که دارای تابع موج یکسان باشند.
 ۴. تعداد حالت‌های مختلف که دارای انرژی متفاوت باشند.

۱۷- کدامیک از گزینه های زیر نشان دهند خاصیت ارتوگونال بودن توابع موجی است؟

۱. $\int_0^L \psi_i^* \psi_j dx = 0$ ۲. $\int_0^L \psi_i^* \psi_j dx = 1$ ۳. $\int_0^L \psi_i^* \psi_i dx = 1$ ۴. $\int_0^L \psi_i^* \psi_i dx = 0$

۱۸- متغیرهای تابع لاگرانژ عبارتند از:

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

۱۹- حاصل عبارت $\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}$ برای نوسانگر هارمونیک برابر با کدام گزینه است؟

۱. $m\ddot{x}$ ۲. $m\dot{x}$ ۳. $-kx$ ۴. kx

۲۰- انرژی در نوسانگر هارمونیک از دیدگاه کوانتومی (ذره ای):

۱. تابعی پیوسته و مقدار آن به دامنه نوسان بستگی دارد.
 ۲. تابعی گسسته و اختلاف بین انرژی ترازاها مقداری ثابت است.
 ۳. تابعی پیوسته با فواصل $h\nu_0$ است.
 ۴. تابعی پیوسته با فواصل $\hbar\nu_0$ است.

۲۱- انرژی کل ارتعاشی یک نوسانگر دو ذره ای برابر با کدام گزینه است؟

۱. $\frac{1}{2}m\dot{q}^2 + V(q)$ ۲. $\frac{1}{2}m'q^2 + V(q)$ ۳. $\frac{1}{2}m'\dot{q}^2 + V(q)$ ۴. $\frac{1}{2}m^2\dot{q}^2 + V(q)$

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

۲۲- رابطه بین تکانه زاویه ای و ممان اینرسی در چرخنده صلب عبارت است از:

۴. $L = \frac{I}{2\dot{\phi}^2}$

۳. $L = I\dot{\phi}^2$

۲. $L = I\dot{\phi}$

۱. $L = \frac{1}{2}I\dot{\phi}^2$

۲۳- حاصل $[L_x, L_z]$ کدام است؟

۴. $-i\hbar\hat{L}_y$

۳. $\hbar\hat{L}_y$

۲. $-\hbar\hat{L}_y$

۱. $i\hbar\hat{L}_y$

۲۴- اگر حرکت در صفحه ثابت انجام بگیرد، کدام گزینه برابر با صفر است؟

۴. $[L_x, L_y]$

۳. \hat{L}_x, \hat{L}_z

۲. \hat{L}_x, \hat{L}_y

۱. \hat{L}_z

۲۵- درجه انحطاط تراز سوم انرژی در چرخنده صلب سه بعدی برابر با چند است؟

۴. ۷

۳. ۵

۲. ۳

۱. ۱

۲۶- در یک سیستم دو ذره ای (دو سیستم تک ذره مستقل) کدامیک از گزینه های زیر صحیح نمی باشد؟

۴. $\hat{E} = \hat{E}_I + \hat{E}_{II}$

۳. $\psi = \psi_I + \psi_{II}$

۲. $\psi = \psi_I \times \psi_{II}$

۱. $\hat{H} = \hat{H}_I + \hat{H}_{II}$

۲۷- پارامتر A در اتم های تک الکترونی معرف کدام است؟

۲. عدد کوانتومی اصلی

۱. عدد کوانتومی مغناطیسی

۴. عدد کوانتومی اربیتال

۳. عدد کوانتومی اسپین

۲۸- منظور از مرتبه انحطاط در اتم های چند الکترونی چیست؟

۲. تعداد m_l متفاوت با ۱ یکسان

۱. تعداد ۱ های متفاوت با ۱ یکسان

۴. موارد ۲ و ۳ صحیح است

۳. تعداد جهت گیری های متفاوت تکانه زاویه ای در فضا

۲۹- تابع توزیع شعاعی به صورت کدام گزینه بیان می شود؟

۴. $4\pi(r+dr)^2 R^2 dr$

۳. $4\pi(r+dr)^2 dr$

۲. $4\pi r^2 R^2 dr$

۱. $4\pi r^2 R^2$

۳۰- رابطه نهایی بین تکانه زاویه ای با ممان مغناطیسی در الکترون کدام است؟

۴. $\vec{\mu} = \pm \frac{e}{2m_e} \vec{L}$

۳. $\mu_z = \frac{e\hbar}{2m}$

۲. $\mu_z = \pm \frac{e\hbar}{2m}$

۱. $\vec{\mu} = \frac{-e}{2m_e} \vec{L}$

۳۱- اپراتور هامیلتون در روش اختلال به چه صورتی بیان می شود؟

۴. $\hat{H}_0 = \hat{H} + \varepsilon w$

۳. $\hat{H} = \hat{H}_0 + \varepsilon w$

۲. $\hat{H}^{(1)} = \hat{H} + \varepsilon w$

۱. $\hat{H} = \hat{H}^{(1)} + \varepsilon w$

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- انرژی اتم هلیوم مطابق مدل ذره مستقل چه مقدار بدست می آید؟

$$\begin{array}{llll}
 ۱. & -8E_H & ۲. & -4E_H \\
 ۳. & -2E_H & ۴. & -\frac{1}{2}E_H
 \end{array}$$

۳۳- تراز سه تایی در اتم هلیوم:

۱. قسمت اسپینی آنها متقارن است
۲. قسمت فضایی آنها متقارن است
۳. قسمت اسپینی آنها ضد متقارن است
۴. قسمت فضایی آنها ضد متقارن است

۳۴- ضریب نرمالیزاسیون در دترمینان اسلیتر برای اتم بریلیم برابر با کدام گزینه است؟

$$\begin{array}{llll}
 ۱. & (4!)^{-1/2} & ۲. & \sqrt{4!} \\
 ۳. & \frac{1}{4!} & ۴. & \frac{1}{\sqrt{4}}
 \end{array}$$

۳۵- انرژی سیستم π در اولین حالت برانگیخته مولکول اتیلن مطابق با روش هوکل کدام گزینه است؟

$$\begin{array}{llll}
 ۱. & \alpha + \beta & ۲. & \alpha - \beta \\
 ۳. & 2(\alpha - \beta) & ۴. & 2\alpha
 \end{array}$$

۳۶- کدامیک از گزینه های زیر بیان درستی از اصل فرانک- کوندون نمی باشد؟

۱. جهش الکترونی با برانگیختگی ارتعاشی همراه است
۲. به هنگام جذب تابش، تغییرات انرژی جنبشی از تغییرات انرژی پتانسیل مولکول بیشتر است
۳. در هنگام جهش الکترونی - ارتعاشی فاصله بین هسته ها تغییر نمی کند
۴. جهش های صورت گرفته از نوع جهش های قائم است

۳۷- مطابق اصل فرانک- کوندون، رابطه بین شدت جهش با فاکتور فرانک- کوندون از توان چند برخوردار است؟

$$\begin{array}{llll}
 ۱. & \text{یک} & ۲. & \text{صفر} \\
 ۳. & \text{دو} & ۴. & \text{سه}
 \end{array}$$

۳۸- بر پایه اصل طرد پاولی، تابع اسپینی مناسب برای یک سیستم دو الکترونی مانند He کدام است؟

$$\begin{array}{ll}
 ۱. & \alpha(1)\alpha(2) \\
 ۲. & \beta(1)\beta(2) \\
 ۳. & \alpha(1)\beta(2) - \beta(1)\alpha(2) \\
 ۴. & \alpha(1)\beta(2) + \beta(1)\alpha(2)
 \end{array}$$

۳۹- مقدار قابل انتظار فاصله الکترون از هسته در اوربیتال اتمی $1s$ از کدام رابطه زیر بدست می آید؟

$$\begin{array}{llll}
 ۱. & \langle r \rangle = \int 4\pi r^2 \psi_{1s}^2 dr & ۲. & \langle r \rangle = \int \psi_{1s}^* r \psi_{1s} dV \\
 ۳. & \langle r \rangle = \int \psi_{1s}^2 dr & ۴. & \langle r \rangle = \int \psi_{1s}^2 dV
 \end{array}$$

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

۴۰- حاصل مطالعات گودسمیت و اولنیک منجر به شناسایی کدامیک از خصوصیات زیر گردید؟

۱. اندازه حرکت زاویه ای اوربیتالی الکترون
۲. اندازه حرکت زاویه ای اسپینی الکترون
۳. اندازه حرکت زاویه ای اوربیتالی هسته ای
۴. اندازه حرکت زاویه ای اسپینی هسته ای