

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- حاصل اثر دادن اپراتور $[\hat{x}^2 + \hat{D}_x]$ روی تابع $f(x) = e^{2ax}$ کدام است؟

۰.۱ $e^{2ax}(x+2a)$ ۰.۲ $e^{2ax}(x^2+2a)$ ۰.۳ $e^{ax}(x+2a)$ ۰.۴ $e^{ax}(x+a)$

۲- اپراتور انرژی جنبشی مطابق با کدام گزینه است؟

۰.۱ $-\frac{\hbar^2}{2m}(\hat{P}_x^2 + \hat{P}_y^2 + \hat{P}_z^2)$ ۰.۲ $-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$

۰.۳ $-\frac{\hbar^2}{2m}(\hat{P}_x + \hat{P}_y + \hat{P}_z)$ ۰.۴ $-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$

۳- اپراتور مربوط به انرژی پتانسیل:

- ۰.۱ فقط تابع مختصات است
۰.۲ فقط تابع تکانه خطی است
۰.۳ تابع مختصات و تکانه خطی است
۰.۴ تابع مختصات و زمان است

۴- کدام از گزینه های زیر معرف خطای اندازه گیری است؟

۰.۱ $\langle \Delta x \rangle = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$ ۰.۲ $\langle \Delta x \rangle = (\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2)^{\frac{1}{2}}$
۰.۳ $\langle \Delta x \rangle = \langle x \rangle^2 - \langle x^2 \rangle$ ۰.۴ $\langle \Delta x \rangle = (\langle x \rangle^2 - \langle x^2 \rangle)^{\frac{1}{2}}$

۵- کدامیک از توابع زیر نمیتواند موهومی باشد؟

۰.۱ ψ ۰.۲ ψ^* ۰.۳ $\psi^*\psi$ ۰.۴ $a\psi$ (a: ثابت)

۶- بخش زمانی تابع موج ذره در جعبه یک بعدی کدام است؟

۰.۱ $e^{i\omega t}$ ۰.۲ $e^{-i\omega t}$ ۰.۳ $e^{\frac{iEt}{\hbar}}$ ۰.۴ $e^{\frac{iEt}{h}}$

۷- کدامیک از اپراتور های زیر جابجا شدنی هستند؟

۰.۱ $\hat{D}_x \cdot \hat{x}$ ۰.۲ $\hat{x} \cdot \hat{D}_x$ ۰.۳ $-\hat{P}_x^2 \cdot \hat{x}^2$ ۰.۴ $\hat{x} \cdot \sin ax$

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- بسته موج عبارت است از:

۱. مجموعه ای که ردیف پیوسته ای از k یا P داشته باشد.
۲. مجموعه ای که ردیف پیوسته ای از k یا E داشته باشد.
۳. انرژی بسته موج را میتوان به صورت انتگرال فوریه بیان کرد
۴. گزینه ۱ و ۳

۹- مقدار قابل انتظار انرژی در هر زمان در مدل ذره در جعبه یک بعدی از کدام رابطه بدست می آید؟

$$\langle E \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x,t) \hat{H} \psi(x,t) dx \quad .1$$

$$\langle E \rangle = \int_0^L \psi^*(x,t) \hat{H} \psi(x,t) dx \quad .2$$

$$\langle E \rangle = \int_{-L/2}^{+L/2} \psi^*(x) \hat{H} \psi(x) dx \quad .3$$

$$\langle E \rangle = \int_0^L \psi^*(x) \hat{H} \psi(x) dx \quad .4$$

۱۰- هنگامیکه حجم فضای سه بعدی ذره در جعبه بسیار بزرگ شود، انرژی:

۱. همواره کمیتی است گسسته
۲. پیوسته می شود
۳. هر مقداری را می پذیرد
۴. برابر با صفر می گردد

۱۱- در صورتیکه انرژی تراز اول در مورد ذره در جعبه سه بعدی مکعبی معادل $2.42 \times 10^4 \text{ e.V}$ باشد. انرژی تراز چهارم آن چند است؟

$$7.26 \times 10^4 \text{ e.V} \quad .1 \quad 8.87 \times 10^4 \text{ e.V} \quad .2 \quad 3.22 \times 10^4 \text{ e.V} \quad .3 \quad 5.11 \times 10^4 \text{ e.V} \quad .4$$

۱۲- نتیجه ای که از پدیده چند حالتی حاصل می شود کدام گزینه است؟

۱. در یک گستره از انرژی، تعداد حالتها از تعداد ترازها بیشتر است.
۲. در یک گستره از انرژی، تعداد توابع موجی از تعداد حالتها بیشتر است.
۳. در یک گستره از انرژی، تعداد ترازها از تعداد حالتها بیشتر است.
۴. در یک گستره از انرژی، تعداد توابع موجی از تعداد حالتها کمتر است.

۱۳- در مدل نوسانگر هارمونیک، مقدار ω برابر است با:

$$2\pi\nu \quad .1 \quad 4\pi^2\nu^2 \quad .2 \quad \frac{k}{m} \quad .3 \quad \text{گزینه ۱ و ۳} \quad .4$$

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

۱۴- مقدار فرکانس مشخصه سیستم در مدل نوسانگر هارمونیک برابر کدام گزینه است؟

۱. $\frac{k}{m}$ ۲. $2\pi v$ ۳. $4\pi^2 v^2$ ۴. $\frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{m}}$

۱۵- کدام عبارت درست است؟

۱. انرژی نقطه صفر به دما وابسته است.
۲. اختلاف دو بدوی انرژی حالت‌های نوسانگر هماهنگ مقدار ثابتی است.
۳. عبارت کلاسیک انرژی پتانسیل نوسانگر هماهنگ یک کمیت ناپیوسته است.
۴. برای انرژی نوسانگر محدودیت انرژی وجود دارد.

۱۶- کدامیک از سیستم‌های زیر دارای انرژی نقطه صفر است؟

۱. ذره درجه یک بعدی
۲. ذره آزاد
۳. نوسانگر هارمونیک
۴. چرخنده صلب

۱۷- مقدار اپراتور \hat{L}^2 در مدل چرخنده صلب برابر با کدام گزینه است؟

۱. $-\frac{\hbar^2}{2I} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$ ۲. $-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$ ۳. $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}$ ۴. $-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}$

۱۸- حاصل $[\hat{L}^2, \hat{L}_x]$ کدام است؟

۱. $i\hbar \hat{L}_y$ ۲. صفر ۳. $-i\hbar \hat{L}_y$ ۴. $i\hbar$

۱۹- اپراتور \hat{L}^2 مستقل از کدامیک از کمیات زیر است؟

۱. r ۲. θ ۳. φ ۴. \hbar

۲۰- مقدار E_{rot} در چرخنده صلب سه بعدی برابر با کدام گزینه است؟

۱. $\frac{L^2}{2\hbar}$ ۲. $\frac{J(J+1)\hbar^2}{2I}$ ۳. $m\hbar$ ۴. گزینه ۱ و ۲

۲۱- تعداد حالات L_z در تراز سوم انرژی چرخشی برابر با چند است؟

۱. ۱ ۲. ۳ ۳. ۵ ۴. ۷

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- مقادیر ویژه توان دوم تکانه زاویه ای در سیستم دو ذره ای اتم هیدروژن برابر با کدام است؟

$$\sqrt{l(l+1)}\hbar \quad .1 \quad l(l+1)\hbar^2 \quad .2 \quad J(J+1)\hbar^2 \quad .3 \quad \sqrt{J(J+1)}\hbar \quad .4$$

۲۳- مطابق مدل بور، رابطه بین انرژی با بارالکترون چگونه است؟

$$-e \quad .1 \quad -e^2 \quad .2 \quad -e^4 \quad .3 \quad -e^{-1} \quad .4$$

۲۴- مقدار عدد کوانتومی مغناطیسی m_l در کدام توابع موجی برابر با صفر است؟

$$\Psi_{2s} \quad \text{و} \quad \Psi_{3d_{x^2-y^2}} \quad .2 \quad \Psi_{2s} \quad \text{و} \quad \Psi_{2p_x} \quad .1$$

$$\Psi_{2s} \quad \text{و} \quad \Psi_{2p_z} \quad .4 \quad \Psi_{2s} \quad \text{و} \quad \Psi_{2p_y} \quad .3$$

۲۵- سطوح تک دانسیته برای چه اوربیتال هایی به صورت کره هایی هم مرکز است؟

$$s \quad .1 \quad p \quad .2 \quad d \quad .3 \quad \text{بستگی به نوع ابر الکترونی دارد} \quad .4$$

۲۶- طیف مربوط به سری اول بالمر مربوط به چه جهشی می باشد؟

$$n=3 \quad \text{به} \quad n=2 \quad .1 \quad \text{جهش الکترون از} \quad n=3 \quad \text{به} \quad n=2 \quad .2 \quad n=2 \quad \text{به} \quad n=1 \quad .3 \quad \text{جهش الکترون از} \quad n=2 \quad \text{به} \quad n=1 \quad .4$$

۲۷- مقدار عددی m_s برابر است با:

$$+\frac{1}{2} \quad .1 \quad -\frac{1}{2} \quad .2 \quad \pm\frac{1}{2} \quad .3 \quad \pm\frac{1}{2}\hbar \quad .4$$

۲۸- اپراتور $\hat{\sigma}_y$ برابر با کدام گزینه است؟

$$\frac{\hbar}{2}\hat{S}_y \quad .1 \quad \frac{2}{\hbar}\hat{S}_y \quad .2 \quad \frac{\hbar}{i}\hat{S}_y \quad .3 \quad i\hbar\hat{S}_y \quad .4$$

۲۹- مقدار $\hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_x$ برابر است با:

$$i\hat{\sigma}_y \quad .1 \quad -i\hat{\sigma}_y \quad .2 \quad -\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y \quad .3 \quad \text{صفر} \quad .4$$

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

۳۰- کدامیک از گزینه های زیر مشخص کننده حالت ذره نمی باشد؟

۱. انرژی
۲. مولفه Z تکانه زاویه ای اوربیتالی
۳. مولفه Z اسپین
۴. اسپین

۳۱- روش اختلال:

۱. فقط در مواردی کاربرد دارد که عامل اختلال کوچک باشد.
۲. فقط برای اتم هیدروژن کاربرد دارد.
۳. فقط در مواردی کاربرد دارد که تابع قابل حدس زدن باشد.
۴. در تمام موارد فوق قابل استفاده است.

۳۲- عبارت ψ_i^1 در روش اختلال مطابق با کدام گزینه است؟

$$\begin{aligned} & \psi_i^0 + \sum \frac{\mathcal{E}W_{ij}}{E_i^0 - E_j^0} \psi_j^0 \quad .1 \\ & \psi_i^0 + \sum \frac{\mathcal{E}W_{ij}}{E_i^0 - E_j^0} \psi_i^0 \quad .2 \\ & \psi_i^0 + \sum \frac{\mathcal{E}W_{ji}}{E_j^0 - E_i^0} \psi_j^0 \quad .3 \\ & \psi_i^0 + \sum \frac{\mathcal{E}W_{ji}}{E_j^0 - E_i^0} \psi_i^0 \quad .4 \end{aligned}$$

۳۳- انرژی اتم هلیوم با استفاده از روش اختلال مطابق با کدام گزینه بدست می آید؟

$$\begin{aligned} & Z^2 + \frac{5}{8}Z \quad .1 \\ & Z + \frac{5}{8}Z \quad .2 \\ & Z - \frac{5}{8}Z \quad .3 \\ & -Z^2 + \frac{5}{8}Z \quad .4 \end{aligned}$$

۳۴- در روش هوکل، منظور از انتگرالهای نرمال شدگی و تبادلی به ترتیب کدام است؟

$$\begin{aligned} & H_{ii} \text{ و } S_{ij} \quad .1 \\ & H_{ij} \text{ و } S_{ij} \quad .2 \\ & H_{ij} \text{ و } S_{ii} \quad .3 \\ & H_{ii} \text{ و } S_{ii} \quad .4 \end{aligned}$$

۳۵- مقدار کمیت β در مولکول بوتادین طبق مدل هوکل برابر با کدام گزینه است؟

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{2}(E_{c=c} - E_{c-c}) \quad .1 \\ & \frac{1}{2}(E_{c=c} - E_{c-c}) \quad .2 \\ & (E_{c-c} - E_{c=c}) \quad .3 \\ & (E_{c=c} - E_{c-c}) \quad .4 \end{aligned}$$

۳۶- انرژی مولکول بنزن مطابق با روش هوکل برابر با کدام گزینه است؟

$$\begin{aligned} & 6\alpha + 6\beta \quad .1 \\ & 6\alpha + 8\beta \quad .2 \\ & 6\alpha - 6\beta \quad .3 \\ & 6\alpha - 8\beta \quad .4 \end{aligned}$$

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

۳۷- انرژی یک فوتون با طول موج $0.01A^0$ بر حسب eV چقدر است؟ $h = 6.63 \times 10^{-34} J.s$ و $ev = 1.6 \times 10^{-19} J$

۱. 1.2×10^6 ۲. 1.2×10^4 ۳. 1.2×10^8 ۴. 1.2×10^2

۳۸- حاصل عبارت $[\hat{A}, \hat{A}^3]$ کدام است؟

۱. A ۲. صفر ۳. A^2 ۴. ۱

۳۹- فرکانس مشخصه ارتعاش در بررسی کلاسیک مولکول، با فرکانس جذبی در کدام ناحیه برابر است؟

۱. ریز موج ۲. قرمز ۳. فرابنفش ۴. زیر قرمز

۴۰- کدام مورد زیر درباره تقریب هوکل صحیح نیست؟

۱. برای توصیف وضع الکترونهای π است
۲. برای ترکیباتی که پیوند π مزدوج دارند قابل استفاده است
۳. مشتق از نظریه LCAO - MO است
۴. انرژی پیوند σ را به صورت تقریبی محاسبه می کند