



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 گرایش محض، شیمی (کاربردی)، شیمی (شیمی فیزیک) ۱۱۱۴۰۲۷

استفاده از ماشین حساب مهندسی مجاز است

-۱ حاصل  $[\hat{x}, \hat{D}_x]$  کدامیک است؟

۱. -۱      ۲. ۱      ۳. صفر      ۴. x

-۲ کدامیک از اپراتورهای زیر خطی نیست؟

۱.  $\frac{d^2}{dx^2}$       ۲.  $\frac{h}{i} \frac{d}{dx}$       ۳.  $i\sqrt{\quad}$       ۴.  $i \frac{d}{dx}$

-۳ کدام تابع می تواند ویژه اپراتور  $\hat{D}_x^2$  باشد؟

۱.  $e^{ax}$       ۲.  $\cos ax$       ۳.  $4x^3$       ۴. موارد ۱ و ۲

-۴ مقدار متوسط  $p_x$  برای ذره در جعبه یک بعدی با تابع موج زیر کدام است؟

$$\psi(x, t) = \left(\frac{2}{l}\right)^{1/2} e^{-iEt/h} \sin \frac{n\pi x}{l}$$

۱.  $\frac{l}{2}$       ۲. صفر      ۳.  $\frac{2}{l}$       ۴. -۱

-۵ در مورد حالت های ایستای یک سیستم، کدام یک میتواند صحیح باشد؟

۱. دانسیته احتمال در هر یک از حالات و در هر نقطه از فضا مستقل از زمان نیست.

۲. تابع پتانسیل مستقل از زمان است

۳. ویژه توابع مشخصی دارند.

۴. می تواند موارد ۲ و ۳ صحیح باشد.

-۶ انرژی کدام ذره پیوسته میباشد؟

۱. نوسانگر هماهنگ

۲. ذره در جعبه یک بعدی

۳. ذره آزاد

۴. ذره در جعبه سه بعدی



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 گرایش محض، شیمی (کاربردی)، شیمی (شیمی فیزیک) ۱۱۴۰۲۷

۷- تعداد حالات همترازی یا حالات کوانتومی هم انرژی در ذره در جعبه سه بعدی با انرژی  $E = \frac{9h^2}{8ma^2}$  کدام است؟

۱. ۲      ۲. ۳      ۳. ۱      ۴. ۶

۸- ضریب N در تابع موج نوسانگر هماهنگ حالت پایه کدام است؟

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}, \quad \Psi = Ne^{-\frac{ax^2}{2}}$$

۱.  $2\left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}$       ۲.  $\frac{\alpha}{\pi}$       ۳.  $\left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}}$       ۴.  $\left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}$

۹- برای هر تراز انرژی چرخنده صلب دو بعدی با  $m=1$  چند تابع موج با انرژی یکسان می توان یافت؟

۱. ۳      ۲. ۲      ۳. ۱      ۴. صفر

۱۰- کدامیک از اپراتورها جابجا پذیر نیستند؟

۱.  $\hat{L}_z, \hat{H}$       ۲.  $\hat{L}^2, \hat{H}$       ۳.  $\hat{L}^2, \hat{L}_z$       ۴.  $\hat{L}_x, \hat{L}_y$

۱۱- نتیجه (پیامد) جابجا پذیر بودن دو اپراتور کدام است؟

۱. مقادیر ویژه آنها به طور همزمان شناخته می شود.  
۲. مقادیر انرژی یکسان دارند.  
۳. توابع ویژه مشترکی دارند.  
۴. هیچکدام

۱۲- چرخنده صلب سه بعدی در حالت  $j = 2$  کدام مقدار  $L_z$  را نمی تواند داشته باشد؟

۱.  $-2\hbar$       ۲.  $-\hbar$       ۳. صفر      ۴.  $-3\hbar$

۱۳- حالات همترازی هر تراز انرژی چرخنده صلب کدام یک می باشد؟

۱.  $j$       ۲.  $2j + 1$       ۳.  $j(j + 1)$       ۴.  $j + 1$

۱۴- انرژی چرخشی تراز اول مولکول CO با طول پیوند  $0.113nm$  کدامیک است؟

$$Mw C = 12gr/mol \quad Mw O = 16gr/mol \quad h = 6.626 \times 10^{-34} j/sec$$

۱.  $7.55 \times 10^{-5}$       ۲.  $7.55 \times 10^5$       ۳.  $7.55 \times 10^{-23}$       ۴.  $7.55 \times 10^{23}$



تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

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

سری سوال: ۱ یک

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

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

۱۵- تابع توزیع شعاعی کدام است؟

۱.  $|\psi(r, \theta, \phi)|^2$       ۲.  $|R(r)|^2$       ۳.  $4\pi |R(r)|^2$       ۴.  $4\pi r^2 |R(r)|^2$

۱۶- محتمل ترین فاصله الکترون از هسته در اوربیتال ۱s کدام است؟

۱.  $\frac{\mu e^2}{\hbar^2}$       ۲.  $\frac{\hbar^2}{\mu e^2}$       ۳.  $\frac{z}{a_0}$       ۴.  $\frac{\hbar^2}{e^2}$

۱۷-  $\langle r \rangle$  برای اوربیتال ۱s اتم هیدروژن با تابع زیر کدام است؟

$$\psi_{1s} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \alpha^{\frac{3}{2}} e^{-\alpha r}$$

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

۱.  $\frac{3}{2\alpha}$       ۲.  $\frac{1}{\alpha}$       ۳.  $-\alpha^2$       ۴.  $\alpha$

۱۸- ماتریس تابع اسپینی  $\alpha$  کدام است؟

۱.  $\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$       ۲.  $\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$       ۳.  $\begin{bmatrix} i \\ 1 \end{bmatrix}$       ۴.  $\begin{bmatrix} 0 \\ -i \end{bmatrix}$

۱۹- در مورد انتگرال همپوشانی  $S_{ij}$  کدام مورد صحیح است؟

۱.  $S_{11} = 0$       ۲.  $S_{12} = 1$       ۳.  $S_{11} = 1$       ۴.  $S_{22} = 0$

۲۰- در صورتیکه با استفاده از روش تغییر پارامتر و تابع آزمایشی انرژی زیر برای اتم هیدروژن بدست آید، مقدار  $E$  چقدر خواهد بود؟

$$E = \left(\frac{2\alpha'}{\pi}\right)^{\frac{3}{4}} e^{-\alpha r^2}$$

۱.  $-13.6\text{ev}$       ۲.  $-11.53\text{ev}$       ۳.  $11.53\text{ev}$       ۴.  $13.6\text{ev}$

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 گرایش محض، شیمی (کاربردی)، شیمی (شیمی فیزیک) ۱۱۴۰۲۷

۲۱- یک هارتری:

۱.  $6.9cal$     ۲.  $627.5ev$     ۳.  $27.3ev$     ۴.  $43.5J$

۲۲- جمله اختلال حالت اصلی اتم هلیم کدام است؟

۱.  $-\frac{1}{r_{12}}$     ۲.  $-\frac{1}{r_{12}}$     ۳.  $-\frac{2}{r_{12}}$     ۴.  $-\frac{1}{r_2} - \frac{1}{r_1}$

۲۳- ضریب نرمال شدگی تابع اسپین - اوربیتال کدام است؟

۱.  $N!$     ۲.  $\frac{1}{(N!)^2}$     ۳.  $\frac{1}{(N!)^2}$     ۴.  $\frac{1}{N!}$

۲۴- کدام یک از ذرات، اسپین صحیح یا صفر و تابع موج متقارن دارند؟

۱. الکترون    ۲. پروتون    ۳. نوترون    ۴. هسته اتم هلیم

۲۵- کدام تابع موج بر اساس اصل پائولی برای اتم هلیم مناسب است؟

۱.  $\psi_{1s}(1)\alpha(1)\psi_{1s}(2)\alpha(2)$   
 ۲.  $\psi_{1s}(1)\beta(1)\psi_{1s}(2)\alpha(2)$   
 ۳.  $\psi_{1s}(1)\alpha(1)\psi_{1s}(2)\beta(2) - \psi_{1s}(1)\beta(1)\psi_{1s}(2)\alpha(2)$   
 ۴.  $\psi_{1s}(1)\alpha(1)\psi_{1s}(2)\beta(2) + \psi_{1s}(1)\beta(1)\psi_{1s}(2)\alpha(2)$

۲۶- در اتم هایی که  $l=0$  است، تکانه زاویه ای فقط مربوط به کدام مورد است؟

۱. اوربیتال    ۲. اسپین - اوربیتال    ۳. اسپین    ۴. هیچکدام

۲۷- وجود اسپین، انرژی الکترونی را چگونه تغییر می دهد؟

۱. کاهش    ۲. افزایش    ۳. تغییری نمی نماید    ۴. موارد ۱ و ۲

۲۸- برای مولکولی با زنجیر مزدوج با N اتم کربن، کدام تابع موج اوربیتال مولکولی را می توان پیشنهاد داد؟

۱. N تابع از نوع  $2p\pi$     ۲. N تابع از نوع  $2p\delta$   
 ۳. N-1 تابع از نوع  $2p\pi$     ۴. N-1 تابع از نوع  $2p\delta$



تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

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

سری سوال: ۱ یک

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

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

۲۹- کدامیک در مورد انتگرالهای کولنی مولکول سیکلو بوتن صحیح نیست؟

$$H_{34} = H_{43} \quad .4 \quad H_{11} = H_{12} \quad .3 \quad H_{12} = H_{21} \quad .2 \quad H_{11} = H_{22} \quad .1$$

۳۰- انرژی سیستم  $\pi$  مولکول اتیلن با استفاده از قانون هوکل کدام است؟

$$2(\alpha - \beta) \quad .4 \quad 2(\alpha + \beta) \quad .3 \quad \alpha + \beta \quad .2 \quad \alpha - \beta \quad .1$$

۳۱- در مورد مولکول او ۳ دی بوتادی ان کدامیک صحیح نیست؟

$$H_{14} = \beta \quad .4 \quad H_{11} = \alpha \quad .3 \quad S_{11} = 1 \quad .2 \quad S_{13} = 0 \quad .1$$

۳۲- میزان پایداری مولکول او ۳ دی بوتادی ان در مقایسه با دو مولکول اتیلن کدام است؟

$$2.472\beta \quad .4 \quad 0.472\beta \quad .3 \quad 2\beta \quad .2 \quad \beta \quad .1$$

۳۳- انرژی الکترونی کل حلقه بنزن کدامیک است؟

$$8\beta + 6E_{\sigma} \quad .4 \quad 6\alpha + 8\beta \quad .3 \quad 8\beta \quad .2 \quad 6(\alpha + \beta) \quad .1$$

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

$$kx \quad .4 \quad -kx \quad .3 \quad m\dot{x} \quad .2 \quad m\ddot{x} \quad .1$$

۳۵- اگر انرژی یک ذره آزاد به جرم m به اندازه E باشد متوسط تکانه خطی در راستای x از کدام رابطه بدست می آید؟

$$\sqrt{\frac{\hbar^2}{2mE}} \quad .4 \quad \sqrt{2mE} \quad .3 \quad \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad .2 \quad 2mE \quad .1$$

۳۶- انرژی نقطه صفر حرکت ارتعاشی کدام است؟ (فرکانس مشخصه سیستم  $\nu$ )

$$\frac{3}{2}h\nu \quad .4 \quad h\nu \quad .3 \quad \frac{1}{2}h\nu \quad .2 \quad 2h\nu \quad .1$$

۳۷- کدام گزینه در مورد تقریب هوکل صحیح نیست؟

۱. روش تقریبی است.
۲. برای پیوندهای یگانه کاربرد دارد.
۳. روش نیمه تجربی است.
۴. بر پایه MO-LCAO بنا شده است.



تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

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

سری سوال: ۱ یک

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

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

۳۸- بر اساس قضیه کوپمان، انرژی های یونش قائم برابر است با:

۱. منفی انرژی های اوربیتالی به روش SCF  
 ۲. انرژی های اوربیتالی به روش SCF  
 ۳. مجموع انرژی های اتم های هیدروژن مانند  
 ۴. تفاضل انرژی های اتم های هیدروژن مانند

۳۹- در اتم تک الکترونی در هر تراز انرژی ( $E_n$ ) چند حالت همترزی وجود دارد؟

۱.  $n$   
 ۲.  $\frac{1}{n^2}$   
 ۳.  $n^2$   
 ۴.  $\frac{1}{n}$

۴۰- بر اساس اصل فرانک-کوندون، به هنگام جذب فوتون، انرژی پتانسیل مولکول و انرژی جنبشی چه تغییری می نماید تا

فاصله بین هسته ها تغییر ننماید؟

۱. انرژی پتانسیل افزایش و انرژی جنبشی افزایش  
 ۲. انرژی پتانسیل کاهش و انرژی جنبشی کاهش  
 ۳. انرژی پتانسیل افزایش و انرژی جنبشی کاهش  
 ۴. انرژی پتانسیل کاهش و انرژی جنبشی افزایش