

تعداد سوالات: تستی: ۲۶ تشریحی: ۵  
زمان آزمون: تستی: ۶۰ تشریحی: ۶۰ دقیقه  
آزمون نمره منفی دارد ○ ندارد ⊗

نام درس: مبانی شیمی کوانتومی  
رشته تحصیلی / کد درس: شیمی (۱۱۱۴۰۲۷)

کد سری سوال: یک (۱) استفاده از ماشین حساب مجاز است. منبع: --

پیامبر اعظم (ص): روزه سیر آتش جهنم است.

۱. از تاثیر اپراتور  $(\hat{x} + \hat{D}_x)$  بر تابع  $f(x) = e^{ax}$  کدام عبارت بدست می آید؟

الف.  $e^{ax}$  ب.  $xe^{ax}$  ج.  $e^{ax}(x+a)$  د.  $ae^{ax}$

۲. کدام یک از توابع می توانند تابع ویژه اپراتور  $\hat{D}_x$  باشد؟

الف.  $e^{ax}$  ب.  $xe^{ax}$  ج.  $\sin ax$  د.  $\sin^2 ax$

۳. طبق تعریف، اپراتور خطی باید دارای کدام یک از خاصیت های زیر باشد؟

۱.  $\hat{A}[cf(x)] = c[\hat{A}f(x)]$  ۲.  $\hat{A}f(x) = af(x)$

۳.  $\hat{A}[f(x) + g(x)] = \hat{A}f(x) + \hat{A}g(x)$  ۴.  $\hat{A}[f(x).g(x)] = f(x) + g(x)$

الف. ۱ و ۲ ب. ۱ و ۳ ج. ۲ و ۳ د. ۳ و ۴

۴. عبارت هامیلتونی برای ذره آزادی که تحت تاثیر هیچ نیرویی نیست عبارت است از:

الف.  $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}$  ب.  $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)$

ج.  $\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + V(x)$  د.  $\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{1}{r^2}$

۵. در الگوی ذره در جعبه یک بعدی مقدار تابع  $\psi(x)$  وقتی  $x \rightarrow l$  کدام است؟

الف.  $\infty$  ب.  $l$  ج.  $l/2$  د.  $0$

۶. مقدار قابل انتظار  $x$  در الگوی ذره در جعبه یک بعدی با تابع حالت  $\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin(\frac{\pi x}{l})$  کدام است؟

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

۷. عدم قطعیت (مقدار خطا) در انرژی حالت های ایستا برابر است با

الف.  $\hbar$  ب.  $\frac{\hbar}{2}$  ج.  $\sqrt{\frac{\hbar}{2}}$  د.  $0$

۸. در یک جعبه مکعبی ( $l_1 = l_2 = l_3 = a$ ) انرژی و چند حالتی در تراز دوم به ترتیب عبارتند از:

الف.  $\frac{3\hbar^2}{8ma^2}$  و ۱ ب.  $\frac{6\hbar^2}{8ma^2}$  و ۱

ج.  $\frac{3\hbar^2}{8ma^2}$  و ۳ د.  $\frac{6\hbar^2}{8ma^2}$  و ۳

تعداد سوالات: تستی: ۲۶ تشریحی: ۵  
زمان آزمون: تستی: ۶۰ تشریحی: ۶۰ دقیقه  
آزمون نمره منفی دارد ○ ندارد ⊗

نام درس: مبانی شیمی کوانتومی  
رشته تحصیلی / کد درس: شیمی (۱۱۱۴۰۲۷)

کد سری سوال: یک (۱) استفاده از ماشین حساب مجاز است. منبع: --

۹. رابطه طول موج دوبروی کدام است؟

الف.  $\lambda = \frac{h}{E}$       ب.  $\lambda = \frac{h}{E}$   
ج.  $\lambda = \frac{h}{p}$       د.  $\lambda = \frac{h}{p}$

۱۰. اگر  $\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_i^* \psi_j dv = 0, i \neq j$  باشد دو تابع موج نسبت به هم

الف. نرمال هستند.      ب. اورتونرمال هستند.  
ج. اورتوگونال هستند.      د. مستقل هستند.

۱۱. فاصله بین ترازهای انرژی در کدام سیستم ثابت است؟

الف. ذره در جعبه یک بعدی      ب. ذره در جعبه سه بعدی  
ج. نوسانگر هماهنگ یک بعدی      د. چرخنده صلب

۱۲. در تابع حالت  $\psi_0 = C_0 e^{-\alpha x^2/2}, \alpha = \frac{2\pi m}{h^2}$  است. ضریب  $C_0$  کدام است؟

الف.  $\hbar$       ب.  $\left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4}$   
ج.  $\frac{\alpha}{\pi}$       د.  $\left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/2}$

۱۳. انرژی نقطه صفر در حرکت ارتعاشی در تقریب اول برابر است با:

الف. ۰      ب.  $\frac{3}{4} h\nu_0$       ج.  $\frac{1}{2} h\nu_0$       د.  $h\nu_0$

۱۴. مولفه  $L_z$  اندازه حرکت با کدام یک از اپراتورهای زیر جا به جایی پذیر نیست؟

الف.  $L_z^2$       ب.  $L_x$       ج.  $L^2$       د.  $H$

۱۵. مقدار ویژه اپراتور  $L^2$  با تابع ویژه  $Y(\theta, \phi)$  کدام است؟

الف.  $J(J+1)\hbar^2$       ب.  $\sqrt{J(J+1)} \hbar$   
ج.  $m\hbar$       د.  $m\hbar^2$

۱۶. ترازهای انرژی در چرخنده صلب دارای چند حالت همتران هستند؟

الف. ۱      ب. J      ج.  $J(J+1)$       د.  $(2J+1)$

۱۷.  $\psi_{210}$  برابر است با:

الف.  $\psi_{1s}$       ب.  $\psi_{2s}$       ج.  $\psi_{2p_x}$       د.  $\psi_{2p_z}$

تعداد سوالات: تستی: ۲۶ تشریحی: ۵  
زمان آزمون: تستی: ۶۰ تشریحی: ۶۰ دقیقه  
آزمون نمره منفی دارد ○ ندارد ⊗

نام درس: مبانی شیمی کوانتومی  
رشته تحصیلی / کد درس: شیمی (۱۱۱۴۰۲۷)

کد سری سوال: یک (۱) استفاده از ماشین حساب مجاز است. منبع: --

۱۸. تابع توزیع شعاعی ( $P(r)$ ) کدام است؟

الف.  $P(r) = R^2(r)$

ب.  $P(r) = 4\pi r^2 R^2(r)$

ج.  $P(r) = 4\pi r^2 R(r)$

د.  $P(r) = R(r)$

۱۹. مقدار  $\hat{S}_z \alpha(\sigma) = A \alpha(\sigma)$  بر  $\hat{S}_z$  چیست؟

الف.  $\hbar$

ب.  $-\hbar$

ج.  $\frac{1}{2}\hbar$

د.  $-\frac{1}{2}\hbar$

۲۰. در روش تغییر پارامتر: اگر  $J = \frac{\int \phi^* H \phi d\tau}{\int \phi^* \phi d\tau}$  (تابع آزمون) باشد کدام عبارت درست است؟

الف.  $J \leq E_0$

ب.  $J = E_0$

ج.  $J \geq E_0$

د.  $J = 1$

۲۱. در تقریب اسلیتر عدد موثر هسته کدام است؟

الف.  $Z^* = bZ$

ب.  $Z^* = (Z - b)$

ج.  $Z^* = (Z - 2b)$

د.  $Z^* = 2bZ$

۲۲. طبق اصل تمیزناپذیری ذرات همه ذرات با اسپین صفر یا عدد صحیح دارای

الف. تابع موجی متقارن هستند.

ب. تابع موجی نامتقارن هستند.

ج. تابع موجی ضد متقارن هستند.

د. تابع موجی بدون تقارن مشخص هستند.

۲۳. براساس اصل طرد پاولی تابع اسپینی مناسب برای یک سیستم دو الکترونی کدام است؟

الف.  $\alpha(1)\alpha(2)$

ب.  $\beta(1)\beta(2)$

ج.  $\alpha(1)\beta(2) + \alpha(2)\beta(1)$

د.  $\alpha(1)\beta(2) - \alpha(2)\beta(1)$

۲۴. انتگرال های کولونی  $H_{ij}$  در تقریب هوکل برای اتم های غیر همسایه برابر است با

الف. ۱

ب. صفر

ج.  $\alpha$

د.  $\beta$

۲۵. در تابع موج نرمال  $N\psi$  ضریب  $N$  کدام است؟

الف.  $\frac{1}{(\int \psi^* \psi d\tau)^{\frac{1}{2}}}$

ب.  $\frac{1}{\int \psi^* \psi d\tau}$

ج.  $(\int \psi^* \psi d\tau)^{\frac{1}{2}}$

د.  $\int \psi^* \psi d\tau$

۲۶. کدام خاصیت در ارتعاش دو مولکول  $H^{35}Cl$  و  $H^{37}Cl$  برابر است؟

الف.  $E_0$

ب.  $\nu$

ج.  $k$

د.  $\lambda$

تعداد سوالات: تستی: ۲۶ تشریحی: ۵  
زمان آزمون: تستی: ۶۰ تشریحی: ۶۰ دقیقه  
آزمون نمره منفی دارد ☐ ندارد ☒

نام درس: مبانی شیمی کوانتومی  
رشته تحصیلی/کد درس: شیمی (۱۱۱۴۰۲۷)

کد سری سوال: یک (۱) استفاده از ماشین حساب مجاز است. منبع: --

«سوالات تشریحی»

۱. معادله شرودینگر وابسته به زمان  $\hat{H}\Psi(x,t) = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}$  می باشد. با تجزیه این معادله، معادله مستقل از زمان و  $\phi(t)$  را بدست آورید. به چه شرطی این تجزیه امکان پذیر است؟ (۲ نمره)

۲. اصل عدم قطعیت هایزنبرگ  $(\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2})$  را در حالت پایه نوسانگر هماهنگ ساده  $(\psi_0 = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\alpha x^2/2})$  بدست آورید. (۲ نمره)

۳. ثابت کنید:  $[L_x, L_y] = i\hbar L_z$  (۱ نمره)

۴. مقدار قابل انتظار فاصله الکترون از هسته را در حالت ۱s حساب کنید. (۱ نمره)  
 $\psi_{1s} = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \alpha e^{-\alpha r}, \alpha = \frac{Z}{a_0}$

۵. با استفاده از تقریب هوکل انرژی ترازهای انرژی را برای مولکول بوتادی ان بدست آورید. (۵ نمره)

انتگرال های مورد نیاز :

$$\int_0^{\infty} e^{-bx^2} dx = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{b}}$$

$$\int_0^{\infty} x^{2n} e^{-bx^2} dx = \frac{1.3.....(2n-1)}{2^{n+1}} \sqrt{\frac{\pi}{b^{2n+1}}}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

$$\int_0^{\infty} x^n e^{-bx} dx = \frac{n!}{b^{n+1}}, \quad n > -1, b > 0$$