

نام درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی و کد درس: شیمی

۱۱۱۴۰۲۷

کد سری سؤال: یک (۱)

استفاده از ماشین حساب

مجاز است.

تعداد سؤالات: تستی: ۲۶ تشریحی: ۶

زمان آزمون: تستی: ۶۰ تشریحی: ۶۰ دقیقه

آزمون نمره منفی دارد ○ ندارد ⊗

امام علی<sup>(ع)</sup>: برتری مردم به یکدیگر، به دانش‌ها و خردهاست؛ نه به ثروت‌ها و تبارها.

۱. اصل موضوع اول کوانتم در ارتباط با کدام مورد زیر است؟

- الف.  $\Psi$       ب.  $\hat{H}$       ج.  $\langle a \rangle$       د.  $\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$

۲. کدام مورد زیر را به عنوان تابع موج نمی‌توان در نظر گرفت؟

- الف.  $\sin x$       ب.  $x$       ج.  $\frac{1}{x}$       د.  $\frac{1}{x^2 + 1}$

۳. با فرض این که  $\psi(x, t) = c \sin(\alpha x) e^{-iEt/\hbar}$  تابع موج نرمال باشد،  $c$  کدام است؟

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

۴. برای تابع موج  $\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{\pi x}{L}$  مقدار  $\langle x \rangle$  کدام است؟

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

۵. انرژی کدام سیستم زیر پیوسته است؟

- الف. ذره در جعبه      ب. ارتعاشی مولکول دو اتمی      ج. چرخنده صلب      د. ذره آزاد

۶. تابع  $\psi(x)$  با کدام تابع زیر از دیدگاه فیزیکی غیر قابل تشخیص هستند.

- الف.  $\frac{d\psi(x)}{dx}$       ب.  $\psi^*(x)$       ج.  $e^{i\alpha} \psi(x)$       د.  $4\psi(x)$

۷. برای ذره آزاد  $\langle p_x \rangle$  کدام است؟

- الف.  $\sqrt{2mE}$       ب.  $\frac{1}{2} K \hbar$       ج.  $2mE$       د.  $K^2 \hbar$

۸. رابطه‌ی عدم قطعیت بین  $\Delta E, \Delta t$  کدام است؟

- الف.  $\Delta E \cdot \Delta t \leq \hbar$       ب.  $\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar$       ج.  $\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{4}$       د.  $\Delta E \cdot \Delta t \leq \frac{\hbar}{4}$

۹. انتگرال فوریه در کدام مورد زیر برای ذره آزاد کاربرد دارد؟

- الف. اصل عدم قطعیت      ب. بسته موج      ج. محاسبه انرژی      د. تعیین اندازه حرکت

تعداد سؤالات: تستی: ۲۶ تشریحی: ۶  
زمان آزمون: تستی: ۶۰ تشریحی: ۶۰ دقیقه  
آزمون نمره منفی دارد ○ ندارد ⊗

نام درس: مبانی شیمی کوانتومی  
رشته تحصیلی و کد درس: شیمی  
۱۱۱۴۰۲۷

کد سری سؤال: یک (۱) استفاده از ماشین حساب مجاز است.

۱۰. کدام نمودار تغییرات تابع موج ذره در جعبه یک بعدی برای  $n = 3$  را نشان می‌دهد؟



۱۱. برای تابع موج  $\psi_n(x,t) = \psi_n(x)e^{-iE_n t/\hbar}$  مقدار  $(\Delta E)_n$  کدام است؟

الف.  $E_n$  ب.  $E_n^2$  ج.  $\sqrt{E_n}$  د. صفر

۱۲. کدام یک تابع لاگرانژ است؟

الف.  $T + V$  ب.  $T - V$  ج.  $V - T$  د.  $H$

۱۳. کدام جمله در مورد انرژی نقطه صفر صحیح نیست؟

الف. مستقل از دماست  
ب. انرژی آغازی نوسانگراست  
ج. انرژی مربوط به  $V = 0$  است.  
د. در صفر مطلق صفر است.

۱۴.  $\langle P_x \rangle_v$  برای کدام تابع زیر صفر است؟

الف.  $\psi_v = e^{-\alpha x^2/2}$  ب.  $\psi_v = xe^{-\alpha x^2/2}$  ج.  $\psi_v = x^2 e^{-\alpha x^2/2}$  د. هر سه مورد

۱۵. اگر  $\psi_1 = A x e^{-\alpha x^2/2}$  تابع موج نوسانگرهارمونیک با  $V = 1$  باشد انرژی آن کدام است؟

الف. صفر ب.  $\frac{1}{2} \hbar \nu_0$  ج.  $\frac{3}{2} \hbar \nu_0$  د.  $\frac{5}{2} \hbar \nu_0$

۱۶. فرکانس  $\nu_0 = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{m'}}$  را از طریق کدام طیف نمایی زیر می‌توان تعیین کرد؟

الف. رزونانس هسته ب. ماورای بنفش ج. زیرقرمز د. امواج کوتاه

۱۷. کدام مورد برای تقریب هارمونیک صحیح است؟

الف. برای نخستین حالت‌های ارتعاشی مفید است.  
ب. برای حالت‌های برانگیخته ارتعاشی مفید است.  
ج. برای نخستین حالت‌های چرخشی مفید است.  
د. برای حالت‌های برانگیخته چرخشی مفید است.

۱۸. کدام یک بیشترین فرکانس ارتعاش را دارد؟

الف.  $HI$  ب.  $HBr$  ج.  $HCl$  د.  $HF$

نام درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی و کد درس: شیمی

۱۱۱۴۰۲۷

کد سری سؤال: یک (۱)

استفاده از ماشین حساب

مجاز است.

تعداد سؤالات: تستی: ۲۶ تشریحی: ۶

زمان آزمون: تستی: ۶۰ تشریحی: ۶۰ دقیقه

آزمون نمره منفی دارد ○ ندارد ⊗

۱۹. عبارت  $\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}$  در مختصات قطبی - کروی به کدام جمله تبدیل می شود؟

الف.  $\frac{1}{r} \times \frac{\partial}{\partial \phi}$       ب.  $\frac{1}{r^2} \times \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}$       ج.  $\frac{1}{r^2} \times \frac{\partial}{\partial \phi}$       د.  $\frac{1}{r} \times \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}$

۲۰. تابع توزیع شعاعی کدام عبارت زیر است؟

الف.  $rR^2$       ب.  $r^2R^2$       ج.  $4\pi r^2R^2$       د.  $4\pi R^2$

۲۱. دانسیته احتمال اربیتال  $1s$  در کجا بیشینه است؟

الف. در فاصله ای برابر شعاع بوهر  
ج. در فاصله ای نصف شعاع بوهر  
ب. در فاصله ای دو برابر شعاع بوهر  
د. در هسته

۲۲.  $\langle r \rangle$  در اربیتال  $1s$  کدام است؟

الف.  $\frac{a_0}{2}$       ب.  $\frac{1}{2} \frac{a_0}{2}$       ج.  $\frac{3}{2} \frac{a_0}{2}$       د.  $\frac{2a_0}{2}$

۲۳. انرژی بخش پیوسته مربوط به حالت های نامقید اتم هیدروژن چگونه تغییر می کند؟

الف.  $E_n = \frac{E_H}{n^2}$       ب.  $E_n = \frac{2E_H}{n^2}$       ج.  $E_n = \frac{E_H}{2n^2}$       د. پیوسته است.

۲۴. ضریب نرمال شدگی دترمینان اسلیر برای منظومه ی  $N$  الکترونی کدام است؟

الف.  $\frac{1}{N!}$       ب.  $\frac{1}{2N!}$       ج.  $\frac{1}{\sqrt{N!}}$       د.  $\frac{1}{\sqrt{2N!}}$

۲۵. مطابق با نظریه هوکل تابع موج پایدارترین تراز انرژی مولکول اتیلن کدام است؟

الف.  $\psi_1 = \phi_1 + \phi_2$       ب.  $\psi_1 = \phi_1 - \phi_2$   
ج.  $\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1 + \phi_2)$       د.  $\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1 - \phi_2)$

۲۶. جمله ی «مختل ترین جهش ها آنهایی هستند که تغییر بسیار کم در فاصله بین هسته ها ایجاد کنند» مربوط به کدام اصل است؟

الف. اصل بوهر      ب. اصل کوپمان      ج. اصل فرانک-کوندون      د. اصل عدم قطعیت

تعداد سؤالات: تستی: ۲۶ تشریحی: ۶  
 زمان آزمون: تستی: ۶۰ تشریحی: ۶۰ دقیقه  
 آزمون نمره منفی دارد ○ ندارد ⊗

نام درس: مبانی شیمی کوانتومی  
 رشته تحصیلی و کد درس: شیمی  
 ۱۱۱۴۰۲۷  
 کد سری سؤال: یک (۱)

استفاده از ماشین حساب مجاز است.

### سؤالات تشریحی

۱. رابطه بسته موج را برای ذره آزاد نوشته و نمودار تغییرات چگالی احتمال موضعی آن را ترسیم کنید؟ (۱/۲۵ نمره)

۲. برای الکترونی در جعبه یک بعدی کمترین فرکانس انتقال مشاهده شده  $S^{-1} \times 10^4$  است. طول جعبه را محاسبه کنید. (۱/۲۵ نمره)

$$h = 6.63 \times 10^{-34} \text{ J.s}$$

$$m_e = 9.11 \times 10^{-31} \text{ kg}$$

۳. ثابت کنید اربیتال 1s اتم هیدروژن با تابع موج  $\psi_{1s} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \alpha^{\frac{3}{2}} e^{-\alpha r}$  نرمال است. (۱/۲۵ نمره)

۴. تأثیر  $\hat{S}_z$  بر  $\alpha(\sigma), \beta(\sigma)$  را فقط بنویسید. (۱ نمره)

۵. اصل پائولی ناشی از چیست؟ توضیح دهید. (۱/۲۵ نمره)

۶. برای محاسبات نظریه هوکل مولکول با زنجیر مزدوج با فرمول  $-C = C - C = C - C = -$  با N اتم کربن الف. چند اربیتال نیاز است.

ب. این اربیتال‌ها از کدام توابع پایه هستند.

ج. اربیتال‌های فوق روی کدام اتم‌ها متمرکز هستند.

د.  $\psi$  را بنویسید.

ه.  $\psi$  به صورت چند دترمینان نوشته می‌شود. (۱/۵ نمره)