

نام درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی: گرایش: شیمی

کد درس: ۲۲۱۲۸۹

تعداد سؤال: ۲۵ نمره: ۵ تشریحی: ۵

زمان امتحان: تستی و تکمیلی ۶۰ نمره تشریحی ۵۰ نمره

[استفاده از ماشین حساب مجاز است ☆ سوالات تستی نمره منفی دارد]

تعداد کل صفحات: ۴

نیمسال دوم ۸۲-۸۳

۱. رابطه‌ی بین انرژی پتانسیل و نیرو کدام است؟

الف. $\vec{F} = -\nabla V$ ب. $\vec{F} = -\frac{\partial V}{\partial t}$ ج. $\vec{V} = -\nabla F$ د. $F = -\frac{\partial^2 V}{\partial x^2}$

۲. در مکانیک کلاسیک مسیر ذره و تکانه‌ی آن در هر لحظه چگونه است؟

الف. نامعین است. ب. کاملاً معین است. ج. وابسته به سرعت آن است. د. وابسته به مکان آن است.

۳. طول موج الکترون در رابطه‌ی دو بروی کدام است؟

الف. $\lambda = \frac{h}{pm}$ ب. $\lambda = \frac{ch}{p}$ ج. $\lambda = \frac{p}{hv}$ د. $\lambda = \frac{h}{p}$

۴. اگر نوری دارای عدد موجی $1.45 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ باشد فرکانس آن کدام است؟

الف. $8.1 \times 10^{11} \text{ Hz}$ ب. $3.85 \times 10^9 \text{ Hz}$ ج. $3.75 \times 10^{14} \text{ Hz}$ د. $3.45 \times 10^{12} \text{ Hz}$

۵. مقدار قابل انتظار P_x برای ذره‌ی آزاد کدام است؟

الف. $\sqrt{2mE}$ ب. $\frac{h}{\sqrt{2mE}}$ ج. $\frac{h}{K}$ د. $\frac{\sqrt{2mE}}{i\hbar}$

۶. کدام تابع زیر، تابع ویژه اپراتور \hat{D}_x است؟

الف. kx ب. $a \cos kx$ ج. ae^{-kx} د. e^{-kx^2}

۷. مقدار قابل انتظار P_x برای ذره در جعبه یک بعدی کدام است؟

الف. $\frac{L}{2}$ ب. صفر ج. $\sqrt{2mE}$ د. $\hbar k$

۸. برای ذره در جعبه‌ی یک بعدی ثابت نرمال سازی تابع موجی $\psi = A \sin \frac{n\pi}{L} x$ کدام است؟

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

۹. برای ذره در جعبه‌ی مکعبی انرژی تراز اصلی اول کدام است؟

الف. $\frac{3h^2}{8ma^2}$ ب. $\frac{h^2}{8ma^2}$ ج. $\frac{h^2}{\lambda ma^2}$ د. $\frac{3h^2}{\lambda ma^2}$

۱۰. الکترونی در مدل ذره در جعبه‌ی یک بعدی بین دو نقطه به فاصله 0.1 nm حرکت می‌کند. انرژی تراز دوم اصلی آن کدام

است؟

الف. $6.03 \times 10^{-18} \text{ J}$ ب. $1.22 \times 10^{-17} \text{ J}$ ج. $3.016 \times 10^{-18} \text{ J}$ د. $2.41 \times 10^{-17} \text{ J}$

نام درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی: گرایش: شیمی

کد درس: ۲۲۱۲۸۹

تعداد سؤال: ۲۵ نمره: ۵ تشریحی ۵

زمان امتحان: تستی و تکمیلی ۶۰ نمره تشریحی ۵۰ نمره

[استفاده از ماشین حساب مجاز است ☆ سوالات تستی نمره منفی دارد]

تعداد کل صفحات: ۴

نیمسال دوم ۸۲-۸۳

۱۱. جهت گیریهای ممکن تکانه زاویه ای و تعداد حالتها در چهارمین تراز انرژی چرخندهی صلب سه بعدی چندتا است؟

الف. ۳ ب. ۲ ج. ۷ د. ۵

۱۲. انرژی چرخندهی صلب سه بعدی با $J = ۳$ کدام است؟
 الف. $\frac{18}{2I} \hbar^2$ ب. $\frac{12}{2I} \hbar^2$ ج. $\frac{16}{2I} \hbar^2$ د. $\frac{12}{2I} \hbar^2$
۱۳. مؤلفه ی تکانه ی زاویه ای L_z را کدام عدد کوانتومی مشخص می کند؟الف. $m\hbar$ ب. $J(J+1)$ ج. m_J د. $2J+1$

۱۴. برای منظومه ای با پتانسیل مرکزی مانند اتم هیدروژن، رابطه ی پتانسیل کدام است؟

 الف. $-k \frac{ze^2}{r}$ ب. $k \frac{ze^2}{r^2}$ ج. $k \frac{z^2 e^2}{r}$ د. $k \frac{z^2 e^2}{r^2}$
۱۵. ماتریس اپراتور σ_y پاولی کدام است؟
 الف. $\begin{vmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{vmatrix}$ ب. $\begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{vmatrix}$ ج. $\begin{vmatrix} 0 & i \\ i & 0 \end{vmatrix}$ د. $\begin{vmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{vmatrix}$

۱۶. کدام رابطه مقیاس واحد انرژی هارتری را به دست می دهد؟

 الف. $\frac{m_e e^4}{\hbar^2}$ ب. $\frac{\hbar^2}{m_e e^4}$ ج. $\frac{h^2}{m_e e^4}$ د. $\frac{m_e e^4}{h^2}$

۱۷. کدام جهش الکترونی بنابر قواعد انتخاب ممنوع است؟

 الف. $^2D_{5/2} \leftarrow ^2P_{1/2}$ ب. $^2D_{5/2} \leftarrow ^2S_{1/2}$ ج. $^2P_{3/2} \leftarrow ^1S_{1/2}$ د. $^2D_{5/2} \leftarrow ^2P_{3/2}$
۱۸. جمله های طیفی مربوط به $S=1, L=3$ کدامند؟
 الف. $^3D_3, ^3D_2, ^3D_1$ ب. $^3S_2, ^3S_1, ^3S_0$ ج. $^3P_2, ^3P_1, ^3P_0$ د. $^3F_4, ^3F_3, ^3F_2$
۱۹. تراز اصلی اتم کربن با آرایش $2p^2$ کدام است؟
 الف. 3P_2 ب. 3P_1 ج. 3P_0 د. 1D_2

۲۰. مطالعه حرکت های الکترونی، چرخشی و ارتعاشی مولکول به طور مستقل از هم در مکانیک کوانتومی بر پایه ی کدام تقریب

انجام می گیرد؟

الف. اسلیرت ب. کوپمان ج. بورن-اینهایمر د. قضیه ویرال

۲۱. ویژه مقادیر اپراتور \hat{L}^2 کدام است؟
 الف. $J(J+1)\hbar^2$ ب. $J(J+1)\hbar$ ج. $\sqrt{J(J+1)}\hbar$ د. $m^2\hbar^2$

نام درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی: گرایش: شیمی

کد درس: ۲۲۱۲۸۹

نیمسال دوم ۸۲-۸۳

تعداد سؤال: ۲۵ نمره: ۵ تکمیلی ۵ تشریحی ۵

زمان امتحان: تستی و تکمیلی ۶۰ نمره تشریحی ۵۰ نمره

[استفاده از ماشین حساب مجاز است ☆ سوالات تستی نمره منفی دارد]

تعداد کل صفحات: ۴

۲۲. کدام انتگرال، انتگرال یا انرژی تبادل نام دارد؟

الف. انتگرال J ب. انتگرال I ج. انتگرال S د. انتگرال I+J

۲۳. ضریب نرمال کنندگی تابع موج حالت پایه اتم هلیوم براساس دترمینال اسلیتر کدام است؟

الف. $\frac{1}{\sqrt{6}}$ ب. $\frac{1}{2}$ ج. $\frac{1}{\sqrt{8}}$ د. $\frac{1}{\sqrt{2}}$

۲۴. کدام مورد در زیر در نظریه ی اوربیتال مولکولی هوکل صحیح است؟

الف. $S_{ii} = 0$ ب. $H_{ij} = \beta$ ج. $H_{ii} = 1$ د. $S_{ij} = 1$

۲۵. هامیلتونی غیر نسبیاتی بدون در نظر گرفتن انواع برهم کنشها برای یک اتم سه الکترونی دارای چند جمله است؟

الف. ۷ ب. ۱۲ ج. ۹ د. ۱۰

سوالات تکمیلی

۱. اپراتورها را می توان جمع یا تفریق یا ضرب کرد، اما حاصل ضرب آنها در حالت کلی نیست.

۲. در منظومه های چند الکترونی حالت هایی که n یکسان اما متفاوت دارند نیستند.

۳. براساس تقریب هوکل، انرژی سیستم π در حالت اصلی مولکول اتیلن برابر است.

۴. تشکیل یک مولکول پایدار از عناصر در حالت اصلی آنها با افزایش در و کاهش در همراه است.

۵. نظریه هوکل در واقع روشی مشتق از نظریه های MO-LCAO است که برای توصیف وضع الکترونی های π در مولکول هایی که شامل پیوندهای یک در میان ساده و دوگانه اند ارایه شده است.

سوالات تشریحی

۱. طول موج دوبروی را برای الکترون با انرژی 13.6 eV حساب کنید. نسبت این طول موج به شعاع اولین مدار بوهر چقدر است؟

۲. تابع نرمال شده ی ذره ی آزاد $\psi_x = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx}$ است که در آن $K = \sqrt{\frac{pmE}{\hbar^2}}$ می باشد. مقدار قابل انتظار P_x را برای

این ذره بین $-\frac{L}{2}$ و $+\frac{L}{2}$ حساب کنید.

نام درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی: گرایش: شیمی

کد درس: ۲۲۱۲۸۹

نیمسال دوم ۸۲-۸۳

تعداد سؤال: ۲۵ نمره: ۵ تکمیلی ۵ تشریحی ۵

زمان امتحان: تستی و تکمیلی ۶۰ دقیقه تشریحی ۵۰ دقیقه

[استفاده از ماشین حساب مجاز است ☆ سوالات تستی نمره منفی دارد]

تعداد کل صفحات: ۴

۳. مولکول خطی CO را به عنوان چرخنده‌ی صلب در نظر می‌گیریم. اگر جرم کاسته‌ی آن $1.14 \times 10^{-26} \text{ kg}$ و فاصله‌ی دو اتم (از هسته‌ی O تا هسته‌ی C) در حالت الکترونی - ارتعاشی اصلی $1.13 \times 10^{-10} \text{ m}$ باشد، اولین انرژی چرخشی غیر صفر آن را به دست آورید. طول موج اولین خط جذبی چرخشی مولکول خطی CO را به دست آورید.

۴. عدد اتمی مؤثر و انرژی اوربیتال $1s, 2s$ اتم برلیوم را حساب کنید. انرژی الکترونی کل برلیوم و انرژی یونش آن را حساب کنید. (بنا بر قاعده‌ی اسلیر)

۵. ترازهای انرژی را برای کاتیون پروتونیل $CH_p^+ = CH - CH_p^+$ بر مبنای روش هوکل به دست آورید و انرژی رزونانس را حساب کنید.

اعداد و مقادیر ثابت

$$a = 52/9 \text{ pm}$$

شعاع اتمی بوهر

$$h = 6.626 \times 10^{-34} \text{ Js}$$

ثابت پلانک

$$\hbar = 1.055 \times 10^{-34} \text{ Js}$$

ثابت پلانک

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

جرم الکترون

$$m_p = 1.67 \times 10^{-27} \text{ kg}$$

جرم پروتون

$$1 \text{ eV} = 1.602 \times 10^{-19} \text{ J}$$

$$c = 3 \times 10^8 \text{ ms}^{-1}$$

سرعت نور در خلاء