

نام درس: طیف سنجی مولکولی

رشته تحصیلی: گرایش: شیمی

کد درس: ۲۲۱۴۰۹

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

۱. طول موج لیزر YAG برابر با 1064 nm می باشد، عدد موجی آن بر حسب cm^{-1} کدام است؟

الف. ۹۳۹۸/۵

ب. ۸۴۳۵/۳

ج. ۵۴۲۶/۲

د. ۱۱۱۲۴/۲

۲. برای انتقال یک الکترون والانس از یک اوربیتال مولکولی به یک اوربیتال مولکولی دیگر، انرژی در کدام ناحیه طیفی لازم

است؟

الف. ناحیه فرکانس رادیویی

ب. ناحیه مادون قرمز

ج. ناحیه مرئی و فرابنفش

۳. نشرخودبخود به کدامیک از عوامل زیر وابسته است؟

الف. دانسیته تابش

ب. جمعیت مولکولها در تراز برانگیخته

ج. جمعیت مولکولها در تراز پایه

د. هر سه مورد

۴. اگر τ مدت زمان متوسط بین برخوردها باشد و هر برخورد منجر به جهش بین دو حالت شود آنگاه پهن شدگی $\Delta\nu$ جهش

مطابق است:

الف. $4\pi\tau$ ب. $\frac{1}{4\pi\tau}$ ج. $\frac{1}{2\pi\tau}$ د. $\frac{1}{2\pi\tau}$

۵. کدام رابطه بین ممانهای اینرسی اصلی یک چرخنده متقارن دیسکی برقرار است؟

الف. $I_c = I_b = I_a$ ب. $I_c = I_b > I_a = 0$ ج. $I_c = I_b > I_a$ د. $I_c > I_b = I_a$

۶. در طیف سنجی چرخشی مولکولهای چرخنده، خطی کدام گزینه قواعد انتخاب را بدرستی بیان می کند؟

الف. $\Delta M_J = 0, \Delta J = \pm 1, \mu = 0$ ب. $\Delta M_J = \pm 1, \Delta J = 0, \pm 1, \mu \neq 0$ ج. $\Delta M_J = 0, \pm 1, \Delta J = \pm 1, \mu = 0$ د. $\Delta M_J = 0, \pm 1, \Delta J = \pm 1, \mu \neq 0$ ۷. اگر مقدار B برابر $4/698 \times 10^1$ هرتز باشد آنگاه J_{\max} در دمای 1000 K تقریباً برابر است با:

$$h = 6/63 \times 10^{-34} \text{ J.S} \quad k = 1/38 \times 10^{-23} \text{ J/K}$$

الف. ۱۱

ب. ۱۲

ج. ۱۳

د. ۱۴

۸. در طیف سنجی که موج یک مولکول دو اتمی انعطاف پذیر فاصله خطوط طیفی:

الف. با افزایش عدد موجی افزایش پیدا می کند.

ب. با افزایش عدد موجی کاهش می یابد.

ج. ثابت و برابر B است.

د. ثابت و برابر $2B$ است.۹. برای یک مولکول دو اتمی در تراز ارتعاشی V ام مقدار B_V مطابق است با:

$$B_e - \alpha(V+1)$$

$$\text{الف. } B_e + \alpha(V + \frac{1}{2})$$

$$\text{ب. } B_e - \alpha(V + \frac{1}{2})$$

$$\text{ج. } B_e + \alpha(V + 1)$$

نام درس: طیف سنجی مولکولی

رشته تحصیلی: گرایش: شیمی

کد درس: ۲۲۱۴۰۹

نیمسال دوم ۸۲-۸۳

تعداد سؤال: ۲۵ نمره: ۵ نمره: ۵

زمان امتحان: ۶۰ دقیقه نمره: ۵۰ نمره: ۵۰

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

تعداد کل صفحات: ۴

۱۰. درجه چند حالتی وابسته به ترازهای انرژی چرخشی مولکولهای چرخنده متقارن در $K \neq 0$ برابر است با:

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

۱۱. در اثر استارک هر تراز به چند مولفه شکافته می شود؟

الف. J ب. $J - 1$ ج. $J + 1$ د. $2J + 1$

۱۲. فاصله خطوط طیفی در طیف سنجی چرخشی چرخنده های خطی و کروی به ترتیب برابر است با:

الف. $B, 2B$ ب. $2B, 2B$ ج. B, B د. $2B, B$

۱۳. در طیف سنجی چرخشی رامن، طیف متشکل از دو مجموعه خطوط با فاصله یکسان می باشد.

الف. $2B_0$ ب. $4B_0$ ج. $6B_0$ د. $8B_0$

۱۴. در طیف رامن چرخشی مولکولهای $^{16}O_2$ مطابق با زوج یا فرد بودن مقدار J تراز اولیه شدت خطوط چگونه است؟

الف. یک در میان غایب است. ب. به نسبت ۳:۱ تغییر می کند.

ج. به نسبت ۲:۱ تغییر می کند. د. تمام خطوط دارای شدتی یکسان می باشد.

۱۵. در یک نوسانگر هماهنگ، فاصله بین ترازهای انرژی با افزایش عدد کوانتایی V :

الف. کاهش می یابد. ب. افزایش می یابد. ج. بدون تغییر می ماند. د. به نوع مولکول بستگی دارد.

۱۶. از نظر فیزیکی کدام عبارت در رابطه با K (ثابت نیرو) صحیح می باشد؟

الف. K تحت تأثیر استخلاف ایزوتوپی قرار نمی گیرد.

ب. K قویاً تحت تأثیر استخلاف ایزوتوپی قرار می گیرد.

ج. فقط در مولکولهای دو اتمی ناجور هسته K تحت تأثیر استخلاف ایزوتوپی قرار می گیرد.

د. بستگی به نوع مولکول دارد.

۱۷. کدام عبارت صحیح است:

الف. ناهماهنگی الکتریکی باعث می شود تا قاعده انتخاب ارتعاشی $\Delta V = \pm 1$ در طیف سنجی مادون قرمز رامن به

$\Delta V = \pm 1, \pm 2, \dots$ تغییر نموده و توابع موج را نیز تغییر می دهد.

ب. ناهماهنگی مکانیکی فقط مقادیر ترم ارتعاشی را تغییر داده و توابع موج را تغییر نمی دهد.

ج. ناهماهنگی الکتریکی سبب تغییر هم در ترم ارتعاشی و هم در تابع موج می شود.

د. ناهماهنگی مکانیکی سبب تغییر هم در ترم ارتعاشی و هم در تابع موج می شود.

۱۸. ماکسیم انرژی ارتعاشی یک مولکول برابر است با:

الف. $\frac{1}{2} h c w$ ب. D_e ج. $D_e + \frac{1}{2} h c w$ د. $D_e + h c w$

تعداد سؤال: فیزی ۲۵ تکمیلی ۵ تشریحی ۵

نام درس: طیف سنجی مولکولی

رشته تحصیلی: گرایش: شیمی

کد درس: ۲۲۱۴۰۹

زمان امتحان: تئوری و تکمیلی ۶۰ دقیقه تشریحی ۵۰ دقیقه

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

تعداد کل صفحات: ۴

نیمسال دوم ۸۲-۸۳

۱۹. ثابت a در تابع پتانسیل مورس عبارت است از :

$$\text{الف. } a = \left(\frac{K_e}{2D_e}\right)^{\frac{1}{2}} \quad \text{ب. } a = \left(\frac{2K_e}{D_e}\right)^{\frac{1}{2}} \quad \text{ج. } a = \left(\frac{K_e}{2D_e}\right)^{\frac{1}{2}} \quad \text{د. } a = \left(\frac{2K_e}{D_e}\right)^{\frac{1}{2}}$$

۲۰. شکاف صفر (zero gap) چیست؟

$$\text{الف. فاصله بین } P(1), R(1) \quad \text{ب. فاصله بین } R(1), P(2) \\ \text{ج. فاصله بین } P(1), R(2) \quad \text{د. فاصله بین } P(1), R(0)$$

۲۱. قاعده انتخاب برای نوارهای عمودی جذبی ارتعاشی مولکولهای چرخنده متقارن عبارتند از:

$$\text{الف. } \Delta V = \pm 1, \Delta J = 0, \pm 1, \Delta K = 0, K \neq 0 \quad \text{ب. } \Delta K = \pm 1, \Delta J = 0, \pm 1, \Delta V = \pm 1 \\ \text{ج. } \Delta V = 0, \pm 1, \Delta J = \pm 1, \Delta K = \pm 1 \quad \text{د. } \Delta V = \pm 1, \Delta J = \pm 1, \Delta K = \pm 1$$

۲۲. بزرگی بردار اندازه حرکت زاویه‌ای اسپین کل یک اتم و ممان مغناطیسی مربوط به آن بر حسب $(\sqrt{s(s+1)})S^*$ به ترتیب از راست به چپ برابر است با :

$$\text{الف. } -g_e \frac{e\hbar}{2m} S^*, S^* \hbar \quad \text{ب. } g_e \frac{e\hbar}{2m} S^*, S^* \hbar \\ \text{ج. } g_e \frac{e\hbar}{2m} S^*, S^* \hbar \quad \text{د. } -g_e \frac{e\hbar}{2m} S^*, S^* \hbar$$

۲۳. جمله پایه و مرتبه پیوند مولکول O_2 به ترتیب عبارتند از :

$$\text{الف. } 1, \sum g^+ \quad \text{ب. } 1, \sum g^- \quad \text{ج. } 2, \sum g^- \quad \text{د. } 2, \sum g^+$$

۲۴. کدام جهش در اتم لیتیم مجاز نیست؟

$$\text{الف. } 4f \leftrightarrow 3d \quad \text{ب. } 3d \leftrightarrow 3p \quad \text{ج. } 3d \leftrightarrow 3s \quad \text{د. } 3s \leftrightarrow 3p$$

۲۵. جملات طیفی مربوط به آرایش الکترونی $s^1 p^1$ کدام است؟

$$\text{الف. } 1p, 3p \quad \text{ب. } 1s, 3s \quad \text{ج. } 1s, 3p \quad \text{د. } 3s, 1p$$

سوالات تکمیلی:

۱. شدت کل یک نوار برابر است با وسعت سطح زیرمنحنی جذب که نامیده می‌شود.

۲. در بخش اعظم تابش پراکنده شده، طول موج λ تغییر نمی‌کند و به موسوم است.

۳. معمولاً یک نوسانگر هماهنگ، نوسانگری است که از نظر هماهنگ باشد.

۴. به شکافتگی خطوط طیفی تحت تأثیر میدان مغناطیسی خارجی اثر گویند.

۵. جهش‌های ارتعاشی همراه با یک جهش الکترونی را جهش می‌نامند.

نام درس: طیف سنجی مولکولی

رشته تحصیلی: گرایش: شیمی

کد درس: ۲۲۱۴۰۹

تعداد سؤال: ۲۵ 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

نیمسال دوم ۸۲-۸۳

سؤالات تشریحی:

۱. نشان دهید که ضریب جذب انتگرال گیری شده مطابق رابطه زیر بدست می آید.

$$\int_{\bar{\nu}_1}^{\bar{\nu}_2} \epsilon(\bar{\nu}) d\bar{\nu} = \frac{N_A h \bar{\nu}_{mn} B_{nm} (\bar{\nu}_{nm})}{Ln_{10}}$$

۲. اگر فاصله بین دو خط متوالی در طیف کیهان یون CN^+ برابر $3/13 \text{ cm}^{-1}$ باشد. طول پیوند در این یون را محاسبه کنید.

$$M_C = 12/011 \text{ g/mol}$$

$$M_N = 14/0067 \text{ g/mol}$$

$$h = 6/63 \times 10^{-34} \text{ J.S} \quad C = 3 \times 10^{10} \text{ cm/s}$$

۳. اگر برای مولکول BH ، انرژی دو تراز اول ارتعاشی نسبت به مینیمم محلی پتانسیل به ترتیب برابر $1171/75 \text{ cm}^{-1}$ و $3441/75 \text{ cm}^{-1}$ باشد، مقدار W_e و ثابت ناهماهنگی $x_e W_e$ را محاسبه کنید. با این اطلاعات انرژی تراز سوم را بدست آورید.

۴. ضریب g لاندیه را برای جمله های الف) 1S ب) 1P ج) 3S د) 3P حساب کنید.

۵. مبدأ یک جهش در C_m ، در 19378 cm^{-1} مشاهده شده است و ساختار ظریف چرخشی نشان می دهد که ثابت های

چرخشی C_m در حالت برانگیخته و پایه عبارتند از: $B' = 1/7527 \text{ cm}^{-1}$ و $B'' = 1/6326 \text{ cm}^{-1}$. موقعیت رأس نوار را تخمین بزنید. فاصله بین دو هسته در کدام حالت بیشتر است.