

نام درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی: گرایش: شیمی (محض و کاربردی)

کد درس: ۱۱۱۴۰۲۷

تعداد سؤال: ۲۶ نسبی ۲۶ تکمیلی ۵ تشریحی

زمان امتحان: تستی و تکمیلی ۶۰ نسبت تشریحی ۶۰ نسبت

تعداد کل صفحات: ۳

استفاده از ماشین حساب مجاز است:

۱- جواب‌های پذیرفتنی برای چرخنده‌ی صلب به شکل $\Psi_m(\phi) = Ae^{im\phi}$ هستند. مقدار A برای تابع نرمال شده کدام است؟

الف - $\frac{\sqrt{\pi}}{2}$ ب - $\frac{\sqrt{2}}{\pi}$ ج - $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$ د - $\frac{1}{2\pi}$

۲- براساس اصل موضوع اول تابع حالت وابسته به سیستم باید چگونه باشد؟

الف - تک مقدار، پیوسته و معین ب - پیوسته و معین
ج - همیشه مقدار مثبت داشته باشد د - یک تابع مثلثاتی باشد

۳- اثر اپراتور $\hat{D}_x + \hat{x}$ بر روی تابع $f(x) = e^{ax}$ کدام است؟

الف - ae^{ax} ب - $(x + a)e^{ax}$ ج - axe^{ax} د - $(x + a)^2 e^{ax}$

۴- جا به جا گر اپراتورهای \hat{D}_x و \hat{x}^2 کدام است؟

الف - $-2x^2$ ب - $2x^2$ ج - $2x$ د - $4x$

۵- کدام یک از تابع‌های زیر واجد شرایط لازم برای نمایش حالت فیزیکی یک ذره نیست؟

الف - $f(x) = A \sin \alpha x$ ب - $f(x) = \frac{A}{x+1}$ ج - $f(x) = A \cos bx$ د - $f(x) = Ae^{iax}$

۶- اگر $\psi_1(x)$ و $\psi_2(x)$ تابع‌های ویژه‌ی اپراتور \hat{H} برای ذره در جعبه‌ی یک بعدی باشند، مقدار

$\int_0^L \psi_1^*(x) \psi_2(x) dx$ کدام است؟

الف - $\frac{L}{2}$ ب - صفر ج - ۱ د - $\frac{\sqrt{2}}{L}$

۷- برای ذره در جعبه‌ی مکعبی دومین تراز انرژی آن دارای چند حالت کوانتومی هم انرژی است؟

الف - ۳ ب - ۲ ج - ۱ د - ۶

۸- برای چرخش در صفحه رابطه‌ی بین \hat{H} و \hat{L}^2 کدام است؟

الف - $\hat{L}^2 = \frac{I}{2\hat{H}}$ ب - $\hat{L}^2 = \frac{2\hat{H}}{I}$ ج - $\hat{L}^2 = \frac{\hat{H}}{2I}$ د - $\hat{H} = \frac{\hat{L}^2}{2I}$

۹- احتمال بودن الکترون در لایه‌ی کروی واقع بین دو کره به شعاع‌های r و r + dr کدام است؟

الف - $4\pi r^2 dr$ ب - $4\pi R^2(r) dr$ ج - $4\pi r^2 R^2(r) dr$ د - $4\pi^2 r R(r) dr$

۱۰- از تابع‌های زیر کدام یک تابع ویژه‌ی \hat{L}_z است؟

الف - $y = e^{\pm im\phi}$ ب - $y = \cos \phi$ ج - $y = A \sin \phi$ د - $y = a\phi^2 + 1$

۱۱- اگر تابع موج سیستم با تعویض مختصات ذره‌ی i با مختصات ذره‌ی j تغییر علامت ندهد، نسبت به جا به جایی چگونه

است؟

الف - ضد متقارن ب - غیر متقارن ج - متقارن د - نامتقارن

نام درس: مبانی شیمی کوانتومی

تعداد سؤال: ۲۶ تکمیلی تشریحی ۵

رشته تحصیلی: گرایش: شیمی (محض و کاربردی)

زمان امتحان: تستی و تکمیلی ۶۰ دقیقه تشریحی ۶۰ دقیقه

کد درس: ۱۱۱۴۰۲۷

تعداد کل صفحات: ۳

۱۲- ساده‌ترین مدل برای تخمین انرژی های الکترونی در مولکول های زنجیری دارای پیوند π یک در میان کدام است؟

الف - ذره در جعبه ی دو بعدی ب - نوسانگر هارمونیک

ج - ذره ی مستقل د - اوربیتال های مولکولی هوکل

۱۳- کدام رابطه ی زیر در هر حالت کوانتومی نوسانگر هارمونیک یک بعدی صحیح است؟

الف - $\langle p_x \rangle = 0, \langle x \rangle = 0$ ب. $\langle p_x \rangle \neq 0, \langle x \rangle \neq 0$

ج. $\langle p_x \rangle = 0, \langle x \rangle = 0$ د. $\langle p_x \rangle \neq 0, \langle x \rangle \neq 0$

۱۴- مقدار قابل انتظار هر کمیت فیزیکی در یک حالت کوانتومی ایستای معین چگونه است؟

الف - مستقل از زمان ب - با زمان تغییر می کند ج - تابع خطی از t است د - تابع t^2 است

۱۵- مقدار قابل انتظار x و p_x در ذره در جعبه ی یک بعدی با طول یال a به ترتیب کدام است؟

الف - a و صفر ب - a و $\sqrt{2mE}$ ج - $\frac{a}{2}$ و صفر د - $\frac{a}{2}$ و $\sqrt{2mE}$

۱۶- کدام دو اپراتور از اپراتورهای وابسته به تکانه ی زاویه ای، جابه جایی پذیرند؟

الف - \hat{L}_y, \hat{L}_x ب - \hat{L}_x, \hat{L}_z ج - \hat{L}_x, \hat{L}^2 د - \hat{L}_z, \hat{L}_y

۱۷- جهت گیری های ممکن تکانه ی زاویه ای در چهارمین تراز انرژی چرخنده ی صلب فضایی چندتا است؟

الف - ۳ ب - ۷ ج - ۱ د - ۵

۱۸- فرکانس مشخصه ی ارتعاش در بررسی کلاسیک مولکول با فرکانس جذبی تجربی در کدام ناحیه برابر است؟

الف - ریز موج ب - قرمز ج - فرابنفش د - زیر قرمز

۱۹- رابطه ی انرژی های مجاز چرخنده ی صلب در صفحه کدام است؟

الف - $\frac{m^2 \hbar^2}{2I}$ ب - $\frac{n^2 \hbar^2}{2I}$ ج - $\frac{m^2 \hbar}{2Ir}$ د - $\frac{m^2 \hbar^2}{2I\omega}$

۲۰- کدام رابطه ، اپراتور \hat{L}_z برای چرخش در صفحه است؟

الف - $\frac{i}{\hbar} \frac{\partial}{\partial \phi}$ ب - $-i\hbar \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}$ ج - $-i\hbar \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}$ د - $-i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}$

۲۱- برای یک چرخنده ی صلب سه بعدی با $J = 1$ مقدار L کدام است؟

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

۲۲- دیگر انرژی های مجاز اتم هیدروژن بر حسب انرژی حالت اصلی کدام است؟

الف - $E_n = -\frac{h}{2} \frac{E_H}{n}$ ب - $E_n = \frac{E_H}{n^2}$ ج - $E_n = \frac{\hbar}{2} \frac{E_H}{n}$ د - $E_n = -\frac{\hbar}{2} \frac{E_H}{n}$

۲۳- کدام ماتریس زیر اپراتور σ_y پاولی است؟

الف - $\begin{vmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{vmatrix}$ ب - $\begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{vmatrix}$ ج - $\begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{vmatrix}$ د - $\begin{vmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{vmatrix}$

نام درس: مبانی شیمی کوانتومی

تعداد سؤال: ۲۶ تکمیلی تشریحی ۵

رشته تحصیلی: گرایش: شیمی (محض و کاربردی)

زمان امتحان: تستی و تکمیلی ۶۰ دقیقه تشریحی ۶۰ دقیقه

کد درس: ۱۱۱۴۰۲۷

تعداد کل صفحات: ۳

۲۴- برپایه ی اصل پاولی کدام تابع اسپینی ضد متقارن است؟

الف - $\alpha_{(1)}\beta_{(2)} + \beta_{(1)}\alpha_{(2)}$ ب - $\alpha_{(1)}\alpha_{(2)}$ ج - $\beta_{(1)}\beta_{(2)}$ د - $\alpha_{(1)}\beta_{(2)} - \beta_{(1)}\alpha_{(2)}$

۲۵- برای سیستم C^{2+} ، ضریب نرمال شوندهگی تابع موجی به کمک بسط دترمینان اسلیتر مربوطه کدام است؟

الف. $\frac{1}{\sqrt{5!}}$ ب. $\frac{1}{\sqrt{6!}}$ ج. $\frac{1}{\sqrt{2!}}$ د. $\frac{1}{\sqrt{4!}}$

۲۶- عضو سوم از سطر دوم دترمینان ضرایب در روش اربیتال مولکولی درکل برای بررسی تابع موج سیستم π مولکول

۳و۱- بوتادی ان کدام است؟

الف. β ب. α ج. $\alpha - E$ د. α

ثابت های لازم

$$h = 6.626 \times 10^{-34} \text{ J.s}$$

$$\hbar = 1.055 \times 10^{-34} \text{ J.s}$$

$$k_B = 1.3807 \times 10^{-23} \text{ J.K}^{-1}$$

$$c = 2.9979 \times 10^8 \text{ m.s}^{-1}$$

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

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

سوال های تشریحی

۱- تابع موجی He^+ ، $\psi = r^{-2r/a_0}$ است. آن را نرمال سازی کنید، ضریب نرمال سازی N را به دست آورید و تابع موجی نرمال شده را بنویسید.

۲- مقدار قابل انتظار $\langle r \rangle$ فاصله ی الکترون تا هسته اتم هیدروژن را بدست آورده آنرا حساب کنید. معادله ی موجی الکترون

$$\text{هیدروژن } \psi = \sqrt{\frac{1}{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0} \text{ و } a_0 = 52.9 \text{ pm} \text{ است.}$$

۳- برای ذره در جعبه ی یک بعدی، احتمال بودن ذره در فاصله ی $x = 0$ و $x = a/2$ را محاسبه کنید. تابع موجی ذره

$$\psi = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a} \text{ است.}$$

۴- ترازهای انرژی کاتیون پروپنیل $\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CH}_2^+$ ، بر مبنای روش هوکل را به دست آورید و انرژی رزونانس آن را حساب کنید.

۵- دو اپراتور (عملگر) $\hat{A} = 3x^2$ و $\hat{B} = \frac{\partial}{\partial x}$ را بر تابع f_x تاثیر دهید و نشان دهید که جا به جا پذیر نیستند.

روابط مفید

$$d\tau = r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi$$

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