

تعداد سؤال: ۲۶ تکمیلی — تشریحی ۶
زمان امتحان: تستی و تکمیلی ۶۰ دقیقه تشریحی ۶۰ دقیقه
تعداد کل صفحات: ۴

نام درس: نظریه گروه در شیمی
رشته تحصیلی: گرایش: شیمی (محض)
کد درس: ۱۱۱۴۰۴۹

«توجه: استفاده از ماشین حساب مجاز است.»

- ۱- مولکول چهاروجهی منتظم چند صفحه تقارن دارد؟
الف. ۴ ب. ۲ ج. ۶ د. ۵
- ۲- کدام مولکول زیر محور دوران محض از مرتبه بالاتری دارد؟
الف. CH_4 ب. $[\text{PtCl}_4]^{2-}$ ج. F_2SO د. سیکلوپنتادی ان
- ۳- حاصلضرب $C_2(x) C_2(y)$ روی نقطه ای با مختصات (x_1, y_1, z_1) منجر به ایجاد کدام عمل زیر می شود؟
الف. σ_{xy} ب. i ج. $C_2(z)$ د. S_2
- ۴- مرتبه گروه کدام گروه نقطه ای زیر از بقیه بزرگتر است؟
الف. $D_{\infty h}$ ب. O_h ج. T_d د. C_{4v}
- ۵- گروه نقطه ای اسید بوریک B(OH)_3 چیست؟
الف. C_{3v} ب. C_{3h} ج. D_{3h} د. D_{3d}
- ۶- ماهیت ماتریس عمل تقارنی $C_2(Z)$ در گروه نقطه ای C_{2v} عبارتست از؟
الف. ۳ ب. ۱- ج. ۳- د. ۱
- ۷- گروه نقطه ای C_{3v} دارای چند طبقه است؟
الف. ۴ ب. ۲ ج. ۳ د. ۶
- ۸- انتگرال $\int \Phi_i \Phi_j d\tau$ بیانگر چیست؟
الف. انرژی اربیتال اتمی i, j ب. انرژی برهم کنش بین اربیتالها
ج. انتگرال همپوشانی د. انرژی کل واکنش
- ۹- اگر نمایش یک بعدی نسبت به محور اصلی C_n غیرمتقارن و نیز نسبت به C_2 عمود بر C_n غیرمتقارن باشد آن را با چه نمادی نشان می دهند؟
الف. A_1 ب. B_2 ج. A_2 د. B_1
- ۱۰- انرژی اربیتالی مولکولی π برای سیستم C_3H_3 بر اساس محاسبات هوکل عبارتست از؟
الف. $\alpha + 2\beta$ ب. $\alpha - 2\beta$ ج. α د. $\alpha - \beta$
- ۱۱- جهت تشکیل تعدادی ترکیب خطی از اربیتالهای اتمی در مولکولی با گروه نقطه ای D_{3h} جهت سهولت عملیات از کدام گروه زیر می توان استفاده کرد؟
الف. D_{3d} ب. C_{3v} ج. C_{3h} د. C_3
- ۱۲- ماهیت عمل تقارنی C_4 در گروه نقطه ای C_{4v} برای نمایش کاهش پذیر Γ_σ (پنج اربیتال σ) کدام است؟
الف. ۵ ب. ۴ ج. ۳ د. ۱
- ۱۳- برای آرایش الکترونی $t_{2g}^1 e_g^1$ چند حالت مختلف وجود دارد؟
الف. ۴ ب. ۶ ج. ۲۴ د. ۱۵
- ۱۴- کدام رابطه زیر در ارتباط با سطح انرژی اربیتال های d در آرایش الکترونی O_h و T_d صحیح است؟
الف. $d_{Oh}^7 \equiv d_{Td}^3$ ب. $d_{Oh}^7 \equiv d_{Oh}^3$ ج. $d_{Td}^7 \equiv d_{Td}^3$ د. $d_{Oh}^7 \equiv d_{Td}^7$

تعداد سؤال: ۲۶ تکمیلی — تشریحی ۶
زمان امتحان: تستی و تکمیلی ۶۰ دقیقه تشریحی ۶۰ دقیقه
تعداد کل صفحات: ۴

نام درس: نظریه گروه در شیمی
رشته تحصیلی: گرایش: شیمی (محض)
کد درس: ۱۱۱۴۰۴۹

۱۵- برای کمپلکس $[V(H_2O)_6]^{+3}$ چند نوار جذبی پیش بینی می کنید و عملاً چند نوار مشاهده می شود (به ترتیب از راست به چپ)؟

الف. ۳ و ۲ ب. ۳ و ۲ ج. ۲ و ۳ د. ۲ و ۲

۱۶- نماد طیفی (تقارنی) $a_{1g}b_{1g}$ عبارتست از؟

الف. B_{1g} ب. A_{1g} و B_{1g} ج. A_{1g} د. A_{2g} و B_{2g}

۱۷- کدام انتقال زیر مجاز است؟

الف. $s \rightarrow d$ ب. $p \rightarrow f$ ج. $d \rightarrow p$ د. $d \rightarrow d$

۱۸- حاصل انتگرال $\int \psi_g X \psi_g d\tau$ که در آن X بردار گشتاور دوقطبی می باشد عبارتست از؟

الف. ۱ ب. ۰ ج. A_{1g} د. B_{1g}

۱۹- در مولکول متان (CH_4) چند درجه آزادی داخلی (ارتعاشی) وجود دارد؟

الف. ۵ ب. ۱۰ ج. ۹ د. ۴

۲۰- مقدار $\chi(C_4)$ برای اربیتال d برابر است با؟

الف. ۱ ب. ۲ ج. ۰ د. -۱

۲۱- در مولکول PCl_3 اربیتال d_{xz} به کدام نمایش زیر در جدول ماهیت گروه تعلق دارد؟

الف. A_1 ب. A_2 ج. E د. T_1

۲۲- در مولکول C_5H_5 تعداد دسته اربیتال های π هم ارز عبارتست از؟

الف. ۳ ب. ۵ ج. ۴ د. ۶

۲۳- تعداد اعمال تقارنی گروه نقطه ای C_{4v} عبارتست از؟

الف. ۴ ب. ۱۶ ج. ۱۲ د. ۸

۲۴- با توجه به جدول ضرب گروه $G_6^{(1)}$ مزدوج A عبارتست از؟

الف. E ب. C, B ج. F, D د. F, B

۲۵- از حاصل عمل S_6-i چه گروهی حاصل می شود؟

الف. C_{3v} ب. C_{3h} ج. C_3 د. D_3

۲۶- حاصل عمل تقارنی $c_4(z)[x, y, z]$ کدام است؟

الف. $[y, x, \bar{z}]$ ب. $[\bar{x}, y, z]$ ج. $[y, \bar{x}, z]$ د. $[\bar{y}, x, \bar{z}]$

سؤالات تشریحی

۱- عناصر و اعمال تقارنی را برای یک هشت وجهی منتظم نوشته و مرتبه گروه را به دست آورید.

۲- اربیتال های هیبرید شده برای تشکیل پیوند π در مولکول مسطح مثلثی AB_3 را به دست آورید؟

نام درس: نظریه گروه در شیمی

رشته تحصیلی: گرایش: شیمی (محض)

کد درس: ۱۱۱۴۰۴۹

تعداد سؤال: ۲۶ نیمی تکمیلی — تشریحی ۶

زمان امتحان: تستی و تکمیلی ۶۰ دقیقه تشریحی ۶۰ دقیقه

تعداد کل صفحات: ۴

۳- با استفاده از تقارن مولکولی تعداد شیوه های نرمال ارتعاشی را برای مولکول هرمی AB_3 به دست آورده و فعالیت آنها را در رامان و زیر قرمز مشخص نمایند.

۴- توابع اربیتال مولکولی (SALC) را برای یون آلیل به دست آورده و انرژی آنها را محاسبه کنید؟

۵- فرمول گسترده مولکولی هر یک از ایزومرهای هندسی کمپلکس $M(AA)_2B_2C_2$ را که در آن AA لیگاند دو دندانه ای متقارن است رسم و مشخص کنید کدام نامتقارن و فعال نوری است؟

۶- شدت انتقالات الکترونی مختلف را با توجه به قواعد انتخاب شرح دهید.

جداول مورد نیاز پیوست می باشد.

$D_{\pi k}$	E	ψC_T	ψC_T	σ_k	ψS_T	$\psi \sigma_z$		
A'_1	۱	۱	۱	۱	۱	۱	R_z	$x^2 + y^2, z^2$
A'_2	۱	۲	-۱	۱	۱	-۱		
E'	۲	-۱	۰	۲	-۱	۰	(x, y)	$(x^2 - y^2, xy)$
A''_1	۱	۱	۱	-۱	-۱	-۱	z	
A''_2	۱	۱	-۱	-۱	-۱	۱		
E''	۲	-۱	۰	-۲	۱	۰	(R_x, R_y)	(xz, yz)

نام درس: نظریه گروه در شیمی

رشته تحصیلی: گرایش: شیمی (محض)

کد درس: ۱۱۱۴۰۴۹

تعداد سؤال: ۲۶ نمره تکمیلی — تشریحی ۶

زمان امتحان: تستی و تکمیلی ۶۰ دقیقه تشریحی ۶۰ دقیقه

تعداد کل صفحات: ۴

C_{2v}	E	C_2	$\sigma_v(xz)$	$\sigma'_v(yz)$		
A_1	۱	۱	۱	۱	z	x^2, y^2, z^2
A_2	۱	۱	-۱	-۱	R_z	xy
B_1	۱	-۱	۱	-۱	x, R_y	xz
B_2	۱	-۱	-۱	۱	y, R_x	yz

C_{2v}	E	$2C_2$	$2\sigma_v$	
A_1	۱	۱	۱	z
A_2	۱	۱	-۱	R_z
E	۲	-۱	۰	$(x, y)(R_x, R_y)$

$G_7^{(1)}$	E	A	B	C	D	F
E	E	A	B	C	D	F
A	A	E	D	F	B	C
B	B	F	E	D	C	A
C	C	D	F	E	A	B
D	D	C	A	B	F	E
F	F	B	C	A	E	D