

تعداد سؤالات: تستی: ۳۵ تشریحی: --

نام درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/ کد درس: شیمی محض- شیمی کاربردی- شیمی فیزیک ۱۱۱۴۰۲۷

--

مجاز است.

ماشین حساب

استفاده از:

۱. تاثیر اپراتور \hat{D}_x' بر روی تابع $f(x) = a \sin x$ کدام گزینه است؟

الف. $-f(x)$

ب. $f(x)$

ج. $-af(x)$

د. $af(x)$

۲. اپراتور وابسته به تابع هامیلتونی کدام است؟

الف. $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \hat{V}$

ب. $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \hat{V}$

ج. $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \hat{V}$

د. $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \hat{V}$

۳. مقدار قابل انتظار $\langle p_x \rangle$ برای ذره آزاد کدام خواهد بود؟

الف. $\pm \sqrt{2\hbar m E}$

ب. $\pm \frac{\hbar}{\sqrt{2mE}}$

ج. $\pm \frac{h}{\sqrt{2mE}}$

د. $\pm \sqrt{2mE}$

۴. برای ذره آزاد یک بعدی، ثابت نرمال سازی تابع موجی کدام است؟

الف. $\sqrt{\frac{L}{2}}$

ب. $\frac{2}{L}$

ج. $\sqrt{\frac{1}{L}}$

د. $\sqrt{\frac{2}{L}}$

۵. کدام رابطه ی زیر فرکانس سیستم نوسانگر هارمونیک را مشخص می کند؟

الف. $\frac{h}{\pi} \sqrt{\frac{k}{m}}$

ب. $\frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{m}}$

ج. $\frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{h}{2m}}$

د. $\frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{k}{2m}}$

۶. انرژی نقطه ی صفر در حرکت ارتعاشی کدام است؟

الف. $\frac{h}{2\pi} v$

ب. $\frac{h}{2\pi} v$

ج. $\frac{1}{2} h v$

د. $\frac{1}{2} h v$

تعداد سؤالات: تستی: ۳۵ تشریحی: --

نام درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/ کد درس: شیمی محض- شیمی کاربردی- شیمی فیزیک ۱۱۱۴۰۲۷

مجاز است.

ماشین حساب

استفاده از:

۷. خاصیت متعامد بودن تابع های ویژه \hat{H} کدام است ؟

الف. $(i \neq j) \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_i^* \psi_j dV = 0$. ب. $(i \neq j) \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_i^* \psi_j dV = 1$

ج. $(i = j) \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_i^* \psi_j dV = 1$. د. $(i = j) \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_i^* \psi_j dV = 0$

۸. تراز چهارم نوسانگر هماهنگ با $n = 3$ چند حالتی است ؟

الف. ۳ . ب. ۴ . ج. ۱۰ . د. ۹ .

۹. اگر تابع $N\Psi$ یک تابع نرمال شده باشد، ضریب نرمال سازی کدام است ؟

الف. $\sqrt{\int \Psi^* \Psi d\tau}$. ب. $\frac{1}{\sqrt{\int \Psi^* \Psi d\tau}}$

ج. $\sqrt{\Psi^* \Psi d\tau}$. د. $\frac{1}{N}$

۱۰. کدام یک از تابع های زیر واجد شرایط لازم برای نمایش حالت کوانتومی یک ذره است ؟

الف. $f(x) = Ax^2$. ب. $f(x) = \frac{A}{x+1}$

ج. $f(x) = Ax(x+1)$. د. $f(x) = A \sin x$

۱۱. کدام یک از مشاهد پذیرهای زیر در حالت نوسانگر هارمونیک یک بعدی درست است ؟

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

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

۱۲. انرژی تراز چهارم ذره در جعبه ی مکعبی چند برابر انرژی تراز اول است ؟

الف. $\frac{11}{3}$. ب. $\frac{14}{3}$

ج. 4^2 . د. $\frac{17}{3}$

۱۳. اگر انرژی ارتعاشی E_1 برای مولکول HCl برابر $10^{-21} \times 28/6$ باشد ، انرژی اولین حالت برانگیخته کدام است ؟

الف. $1/43 \times 10^{-21} \text{ J}$. ب. $8/58 \times 10^{-21} \text{ J}$

ج. $5/74 \times 10^{-21} \text{ J}$. د. $4/29 \times 10^{-21} \text{ J}$

تعداد سؤالات: تستی: ۳۵ تشریحی: --

نام درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/ کد درس: شیمی محض- شیمی کاربردی- شیمی فیزیک ۱۱۱۴۰۲۷

--

مجاز است.

ماشین حساب

استفاده از:

۱۴. تابع توزیع شعاعی احتمال حضور الکترون از یک قشر کروی به قشر دیگر کدام است؟

الف. $4\pi r^2 R^2 dr$

ب. $|\psi|^2 dr$

ج. $\pi R^2 \psi^2 dr$

د. $4\pi r^2 \psi^2 dr$

۱۵. در نظریه ی اوربیتال مولکولی هوکل کدام فرض زیر درست است؟

الف. $S_{ii} = \alpha$

ب. $H_{ii} = \alpha$

ج. $H_{ij} = 1$

د. $S_{ij} = \beta$

۱۶. مقدار قابل انتظار فاصله ی الکترون از هسته برای اوربیتال اتمی ۱s توسط کدام انتگرال زیر به دست می آید؟

الف. $\langle r \rangle = \int 4\pi r^2 \psi_{1s}^2 dr$

ب. $\langle r \rangle = \int \psi_{1s}^* \hat{H} \psi_{1s} dr$

ج. $\langle r \rangle = \int \psi_{1s}^* r \psi_{1s} dr$

د. $\langle r \rangle = \int \psi_{1s}^* \psi_{1s} dr$

۱۷. مقدار قابل انتظار X بین صفر تا L برای ذره در جعبه ی یک بعدی کدام است؟

الف. $\frac{L}{2}$

ب. $\frac{2}{L}$

ج. $\frac{1}{L}$

د. $\frac{1}{L}$

۱۸. در حالت ذره در جعبه ی مکعبی انرژی دومین تراز آن چقدر است؟

الف. $\frac{3h^2}{8ma^2}$

ب. $\frac{4h^2}{8ma^2}$

ج. $\frac{5h^2}{8ma^2}$

د. $\frac{6h^2}{8ma^2}$

۱۹. در حالت ذره در جعبه ی مکعبی چند حالت کوانتومی هم انرژی به سومین تراز مربوط می شود؟

الف. ۳

ب. ۲

ج. ۵

د. ۶

۲۰. کدام رابطه انرژی های مجاز چرخنده ی صلب در صفحه را نشان می دهد؟

الف. $\frac{m^2 h^2}{2I}$

ب. $\frac{n^2 h^2}{2I}$

ج. $\frac{m^2 h^2}{2I \omega}$

د. $\frac{m^2 h^2}{2I}$

۲۱. در رابطه ی $\mu = -g \frac{e}{2m} \vec{s}$ ، g نماد چیست؟

الف. ضریب لاگرانژ

ب. فاکتور لانده

ج. فاکتور پاولی

د. ضریب اینهایمر

تعداد سؤالات: تستی: ۳۵ تشریحی: --

نام درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/ کد درس: شیمی محض- شیمی کاربردی- شیمی فیزیک ۱۱۱۴۰۲۷

--

مجاز است.

ماشین حساب

استفاده از:

۲۲. کدام ماتریس زیر، ماتریس اپراتور σ_x پاولی است؟

ب. $\begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{vmatrix}$

الف. $\begin{vmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{vmatrix}$

د. $\begin{vmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{vmatrix}$

ج. $\begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{vmatrix}$

۲۳. کدام رابطه زیر مقیاس واحد انرژی هارتری است؟

ب. $\frac{\hbar^2}{\mu e^2}$

الف. $\frac{m_e e^4}{\hbar^2}$

د. $\frac{m_e e^4}{2\hbar^2}$

ج. $\frac{m_e e^4}{\hbar^2}$

۲۴. رابطه ی اپراتور \hat{L}_z برای چرخنده صلب در صفحه کدام است؟

ب. $-i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}$

الف. $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi}$

د. $i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}$

ج. $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi}$

۲۵. انرژی کل مولکول بوتادی ین براساس تقریب هوکل $\beta/472 + \alpha/4$ و انرژی کل هر پیوند اتیلنی $\beta/472 + \alpha/2$ است. انرژی

رزونانس پیوند دوگانه ی نامسقر در بوتادی ین کدام است؟

ب. $\beta/472$

الف. $\beta/472$

د. $\beta/236$

ج. $\beta/236$

۲۶. فرکانس مشخصه ارتعاش در بررسی کلاسیک مولکول، با فرکانس جذبی تجربی در کدام ناحیه برابر است؟

د. زیر قرمز

ج. فرابنفش

ب. قرمز

الف. ریز موج

تعداد سؤالات: تستی: ۳۵ تشریحی: --

نام درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/ کد درس: شیمی محض- شیمی کاربردی- شیمی فیزیک ۱۱۱۴۰۲۷

--

مجاز است.

ماشین حساب

استفاده از:

۲۷. برای مولکولهای خطی CO در تقریب چرخنده صلب با مشخصات زیر اولین انرژی چرخشی غیر صفر آن بر حسب الکترون

ولت کدام است؟ (حجم کاسته شده $h = 6.62 \times 10^{-34} Js, r = 1.13 \text{ \AA}, 1.14 \times 10^{-26} kg$)

الف. 7.67

ب. 4.8×10^{-4}

ج. 7.67×10^{-23}

د. 4.8

۲۸. یک الکترون در طول یک نانومتر مقید است (حرکت را یک بعدی فرض کنید) کمترین انرژی حالت اصلی آن بر حسب ژول

کدام است؟ (جرم الکترون $9.11 \times 10^{-31} kg$)

الف. 6.02×10^{-10}

ب. 6.02×10^{-20}

ج. 24.08×10^{-20}

د. 18.06×10^{-20}

۲۹. برای تابع موج $\Psi = Ne^{\frac{-2r}{a}}$ ضریب نرمال‌کنندگی کدام است؟

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

$$\sqrt{\frac{25}{\pi a_0^3}}$$

$$\sqrt{\frac{8}{\pi a_0^3}}$$

$$\sqrt{\frac{\pi a_0^3}{\pi}}$$

$$\sqrt{\frac{8}{\pi}}$$

۳۰. معادله شرودینگر نوسانگر هماهنگ پس از تغییر متغیر به کدام معادله منجر می‌گردد؟

الف. لاگرانژ

ب. لژاندر

ج. لاگر

د. هر میت

۳۱. کدام رابطه بیانگر قضیه ویرال است؟

$$T = -\langle V \rangle$$

$$E = \frac{\langle V \rangle}{2}$$

$$E = -2\langle T \rangle$$

د. همه موارد صحیح است

۳۲. ماتریس نمایش دهنده تابع اسپینی β کدام است؟

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 0 \\ -i \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

۳۳. کدام گزینه در مورد H_{ij} برای مولکول بوتادی ان بر اساس تقریب هوکل درست است؟

$$S_{11} = S_{pp} = 0$$

$$H_{11} = H_{pp} = \beta$$

$$H_{pp} = H_{pp} = H_{1p} = \beta$$

$$H_{pp} = H_{pp} = \alpha$$

تعداد سؤالات: تستی: ۳۵ تشریحی: --

نام درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/ کد درس: شیمی محض- شیمی کاربردی- شیمی فیزیک ۱۱۱۴۰۲۷

--

مجاز است.

ماشین حساب

استفاده از:

۳۴. تعداد جملات پتانسیل دافعه الکترونی برای اتم کربن در معادله شرودینگر چیست؟

۱۵.د

۱۰.ج

۲۰.ب

۳۰.الف

۳۵. کدام رابطه صحیح است؟

ب. $\frac{\partial r}{\partial y} = \sin \theta \sin \varphi$

الف. $\frac{\partial \varphi}{\partial y} = \frac{\cos \theta \cos \varphi}{r}$

$\frac{\partial \varphi}{\partial z} = -\frac{\sin \theta}{r}$

ج. $\frac{\partial \varphi}{\partial x} = \frac{-\sin \theta}{r \sin \varphi}$

ثابت ها و اعداد مورد نیاز

$h = 6.625 \times 10^{-34} \text{ Js}$ $\hbar = 1.055 \times 10^{-34} \text{ Js}$

$a_0 = 5.29 \times 10^{-11} \text{ m}$ $m_e = 9.11 \times 10^{-31} \text{ kg}$

$c = 3 \times 10^8 \text{ m/s}$ $1 \text{ eV} = 1.602 \times 10^{-19} \text{ J}$