

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

استفاده از ماشین حساب مجاز است:

۱- جواب‌های پذیرفتنی برای چرخنده‌ی صلب به شکل $\Psi_m(\varphi) = Ae^{im\varphi}$ 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 $f(x) = e^{\alpha x}$ کدام است؟

الف - $\alpha e^{\alpha x}$ ب - $(x + \alpha)e^{\alpha x}$ ج - $\alpha x e^{\alpha x}$ د - $(x + \alpha)^2 e^{\alpha x}$

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 - $f(x) = Ae^{i\alpha x}$

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

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

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 - $y = e^{\pm im\varphi}$ 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 انرژی‌های الکترونی در مولکول‌های زنجیری دارای پیوند π یک در میان کدام است؟

الف - ذره در جعبه‌ی دو بعدی ب - نوسانگر هارمونیک

ج - ذره‌ی مستقل د - اوربیتال‌های مولکولی هوکل

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

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

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

الف - مستقل از زمان ب - با زمان تغییر می‌کند ج - تابع خطی از t است د - تابع t^2 است۱۵- مقدار قابل انتظار X و p_x در ذره در جعبه‌ی یک بعدی با طول 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 تکانه‌ی زاویه‌ای، جابه‌جایی 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- جهت‌گیری‌های ممکن تکانه‌ی زاویه‌ای در چهارمین تراز انرژی چرخنده‌ی صلب فضایی چندتا است؟

الف - ۳ ب - ۷ ج - ۱ د - ۵

۱۸- فرکانس مشخصه‌ی 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- رابطه‌ی انرژی‌های مجاز چرخنده‌ی صلب در صفحه‌ی 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 صفحه‌ی صلب 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 چرخنده‌ی 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 انرژی‌های مجاز اتم هیدروژن بر حسب انرژی حالت اصلی کدام است؟

الف - $E_n = -\frac{h E_H}{2n}$ ب - $E_n = \frac{E_H}{n^2}$ ج - $E_n = \frac{\hbar E_H}{2n}$ د - $E_n = -\frac{\hbar E_H}{2n}$ ۲۳- کدام ماتریس زیر ماتریس 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؟

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

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

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

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؟

$$\text{الف. } \beta \quad \text{ب. } \alpha \quad \text{ج. } \alpha \quad \text{د. } \alpha - E$$

ثابت های لازم

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

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

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

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

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

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

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 ان 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

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

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

www.salampnu.com

سایت مرجع دانشجوی پیام نور

- ✓ نمونه سوالات پیام نور : بیش از ۱۱۰ هزار نمونه سوال همراه با پاسخنامه
- تستی و تشریحی
- ✓ کتاب ، جزوه و خلاصه دروس
- ✓ برنامه امتحانات
- ✓ منابع و لیست دروس هر ترم
- ✓ دانلود کاملاً رایگان بیش از ۱۴۰ هزار فایل مختص دانشجویان پیام نور

www.salampnu.com

www.ShimiPedia.ir

نام درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی-گرایش: شیمی (محض و کاربردی)

کلاس درس: ۱۱۱۴۰۲۷

تعداد سؤال: نسی: ۲۶ تکمیلی: -- تشریحی: ۶

زمان آزمون (دقیقه): نسی و تکمیلی: ۶۰ تشریحی: ۶۰

* دانشجوی گرامی: لطفاً گزینه ۱ را در قسمت کد سری سؤال برگه پاسخنامه خود، علامت بزنیید. بدیهی

است، مسئولیت این امر برعهده شما خواهد بود.

***استفاده از ماشین حساب مجاز است.

**این آزمون نمره منفی ندارد.

۱-تأثیر اپراتور $\hat{x}\hat{D}_x$ نیروی تابع $\sin x$ کدام است؟الف. $-x \sin x$ ب. $x \cos x$ ج. $-x \cos x$ د. $x^2 \sin x$

۲- مقدار قابل انتظار تکانه برای ذره ی آزاد کدام است؟

الف. \sqrt{imE} ب. $\sqrt{2\hbar E}$ ج. $\sqrt{2m\hbar}$ د. $\sqrt{2mE}$

۳- در الکترومغناطیس کدام عبارت صحیح است؟

الف. شدت نور متناسب با توان دوم دامنه موج است

ب. میدان های الکترومغناطیس در راستای انتشار قرار دارند.

ج. احتمال رسیدن ذره به هر نقطه باتوان دوم ϕ متناسب است.

د. نور یک رویداد ذره ای است.

۴- کدام دو اپراتور تعویض پذیرند؟

الف. \hat{p}_x, \hat{x} ب. \hat{p}_x, \hat{x}^2 ج. \hat{D}_x, \hat{x} د. \hat{D}_x, \hat{p}_x

۵- معادله شرودینگر به کمک کدامیک از موارد زیر الهام گرفته شده است؟

الف. قانون بقای اندازه حرکت

ب. قانون بقای انرژی

ج. تابع هامیلتون

د. موارد ب و ج صحیح است

۶- کدام یک از پدیده های زیر ناشی از مستقل از زمان بودن دانسیته احتمال است؟

الف. وجود حالت های ایستای سیستم

ب. پیوسته بودن انرژی سیستم

ج. هرمیتی بودن هامیلتونی

د. نرمال بودن تابع موج

۷- کدام مورد گویای کوانتومی بودن سیستم های ذره ای است؟

الف. وجود کمیت های مشاهده پذیر

ب. وجود حالت های مقید

ج. وجود ترازهای انرژی

د. موارد ب و ج صحیح است.

۸- برای بررسی کلاسیکی نوسانگر هماهنگ از کدام تابع استفاده می شود؟

الف. هامیلتونی

ب. لاگرانژ

ج. انرژی پتانسیل

د. انرژی کل

۹- کدام عبارت در مورد سیستم نوسانگر هماهنگ صحیح است؟

الف. فاصله ترازهای انرژی از یکدیگر ثابت است.

ب. سیستم دارای انرژی صفر نمی باشد.

ج. برانگیختگی در این سیستم محدودیتی ندارد.

د. تمام موارد صحیح است.

نام درس: مبانی شیمی کوانتومی

تعداد سؤال: نسی: ۲۶ تکمیلی: -- تشریحی: ۶

رشته تحصیلی-گرایش: شیمی

زمان آزمون (دقیقه): تستی و تکمیلی: ۶۰ تشریحی: ۶۰

کد درس: ۱۱۱۴۰۲۷

۱۰- کدام گزینه صحیح است؟

الف. منحنی انرژی پتانسیل مولکول منطبق بر یک سهمی است.

ب. منحنی انرژی پتانسیل مولکول تنها در مجاورت مینیمم بر یک سهمی منطبق است.

ج. شکل انرژی پتانسیل مولکول از مرتبه دو کامل است.

د. شکل انرژی پتانسیل مولکول به صورت $-kq$ می باشد.۱۱- هرگاه انرژی نقطه صفر مولکول H_0 برابر 0.258 الکترون ولت باشد، عدد موج ارتعاش بر حسب cm^{-1} کدام است؟

الف. ۴۱۶۲

ب. ۲۰۸۱

ج. ۶۲۴۳

د. ۱۹۰۴

۱۲- شرایط مرزی سیستم چرخنده صلب کدام است؟

الف. ثابت بودن r ب. وجود نیروی مرکزی ج. سرعت های مجاز د. هیچ کدام

۱۳- کدام دو اپراتور تعویض پذیرند؟

الف. \hat{L}_x^2, \hat{p}_x^2 ب. \hat{H}, \hat{L}_x ج. \hat{H}, \hat{L}_z د. \hat{H}, \hat{L}_x

۱۴- کدام جمله صحیح است؟

الف. تکانه زاویه‌ای مضرب صحیحی از $h/2\pi$ است.ب. تکانه زاویه‌ای متناسب با $h/2\pi$ است.ج. مؤلفه z تکانه زاویه‌ای مضربی از $h/2\pi$ است.

د. موارد ب و ج

۱۵- منظور از نمایش اربیتال ها چیست؟

الف. نمایش مدار و مسیر الکترون

ب. نمایش توزیع احتمال بودن الکترون در نقاط مختلف دور هسته

ج. تجسمی از مسیر حرکت الکترون در اطراف هسته

د. نمایشی از مقادیر اندازه گیری مکان الکترون در اطراف هسته

۱۶- برای ترسیم سطوح تک دانسیته از کدام عبارت استفاده می شود؟

الف. $|\psi(r, \theta, \phi)|^2 = a$ ب. $|\psi(r, \theta, \phi)| = a$ ج. $4\pi r^2 |\psi(r, \theta, \phi)|^2 = a$ د. $4\pi r^2 |\psi(r, \theta, \phi)| = a$

۱۷- انرژی یون شدن اتم هیدروژن در اولین حالت برانگیخته کدام است؟ (برحسب الکترون ولت)

الف. ۱۳/۶

ب. ۶/۸

ج. ۳/۴

د. ۲۷/۲

۱۸- مقدار قابل انتظار انرژی جنبشی اتم هیدروژن در اولین حالت برانگیخته کدام است؟ (برحسب الکترون ولت)

الف. ۱۳/۶

ب. ۶/۸

ج. ۲۷/۲

د. -۲۷/۲

۱۹- رابطه تکانه زاویه ای الکترون و ممان مغناطیس کدام است؟

الف. $\mu = -\frac{e}{2m} L$ ب. $L = -\frac{e}{2m} \mu$ ج. $\mu = -g \frac{e}{m} L$ د. $\mu = -\frac{e}{2m} L^2$

نام درس: مبانی شیمی کوانتومی

تعداد سؤال: نسی: ۲۶ تکمیلی: -- تشریحی: ۶

رشته تحصیلی-گرایش: شیمی

زمان آزمون (دقیقه): تستی و تکمیلی : ۶۰ تشریحی: ۶۰

کلاس: ۱۱۱۴۰۲۷

۲۰- کدام عبارت درست است؟

ب. $[S_x, S_y] = -\hbar S_z$

الف. $[S_x, S_y] = i\hbar S_z$

د. $[S_x, S_y] = -i\hbar S_z$

ج. $[S_x, S_y] = i\hbar S_z$

۲۱- کدام پدیده معرف وجود اسپین برای الکترون است؟

ب. انحراف اشترن - گراخ

الف. انحراف کمپتون

د. ب و ج

ج. دو تایی بودن خطوط طیفی اتم هیدروژن

۲۲- تابع موج کامل سیستم تک الکترونی شامل چند متغیر است؟

د. ۶

ج. ۴

ب. ۳

الف. ۲

۲۳- شرط وجود جواب غیر صفر برای یک دسته معادلات همگن خطی کدام است؟

ب. دترمینان ضرایب مخالف صفر باشد.

الف. مجموع ضرایب آن مساوی صفر باشد

د. دترمینان ضرایب آن مساوی صفر باشد.

ج. مجموع دترمینان ضرایب مخالف صفر باشد

۲۴- کدام عبارت در مورد سیستم های چند ذره ای تمیز ناپذیر صادق است؟

الف. تابع اسپین ارییتال آن باید تابع ویژه اپراتور تعویض پذیری باشد.

ب. تابع اسپین ارییتال آن باید نسبت به اپراتور تعویض پذیری متقارن باشد.

ج. مقدار ویژه اپراتور تعویض پذیری برابر یک باشد.

د. تمام موارد صحیح است.

۲۵- تعداد جملات موجود در دترمینان اسلیتر کدام است؟

د. $(2N)!$

ج. $\sqrt{N}!$

ب. 2^N

الف. $N!$

۲۶- کدام گزینه در مورد نظریه هوکل صحیح است؟

الف. این نظریه برای توصیف الکترون های سیستم های مزدوج صادق است.

ب. در این نظریه برای هر اتم کربن در سیستم های مزدوج تنها یک ارییتال $2p$ منظور می شود.

ج. انتگرال های کولنی همگی برابر فرض می شود.

د. انتگرال های همپوشانی همگی برابر فرض می شوند.

نام درس: مبانی شیمی کوانتومی

تعداد سؤال: نسی: ۲۶ تکمیلی: -- تشریحی: ۶

رشته تحصیلی-گرایش: شیمی

زمان آزمون (دقیقه): نسی و تکمیلی: ۶۰ تشریحی: ۶۰

کد درس: ۱۱۱۴۰۲۷

سئوالات تشریحی:

بارم هر سوال ۱/۲۵ نمره

۱. برای سیستم بنزن انرژی الکترونیهای π براساس تقریب هوکل برابر

$$1 \text{ تراز تبهگن } \alpha + 2\beta$$

$$2 \text{ تراز تبهگن } \alpha + \beta$$

$$2 \text{ تراز تبهگن } \alpha - \beta$$

$$1 \text{ تراز تبهگن } \alpha - 2\beta$$

سهم الکترون های π در انرژی پیوند و انرژی عدم استقرار آن را محاسبه کنید. روی مقادیر بدست آمده بحث کنید.۲. روش تغییر پارامتر را برای اتم هیدروژن با تابع زیر که در آن α پارامتر تغییر است بکار برده انرژی اتم هیدروژن را

$$\phi(r) = Ce^{-ar} \text{ محاسبه کنید.}$$

۳. ماکزیمم مقدار تابع توزیع شعاعی برای الکترون اتم هیدروژن در چه فاصله ای از هسته رخ می دهد آنرا بدست آورید؟

$$\psi_{1s} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} = a^{3/2} e^{-ar} \text{ نمودار این تابع را به طور تقریب رسم کنید.}$$

۴. برای مولکول XO هرگاه انرژی اولین تراز چرخشی غیر صفر براساس تقریب چرخنده صلب دو بُعدی برابر
 $2.75 \times 10^{-4} \text{ eV}$ باشد، عدد جرمی اتم X چیست؟ طول پیوند در این مولکول $1/154$ آنگستروم است.

$$5. \text{ در مختصات قطبی کروی نشان دهید: } L_y = \frac{\hbar}{i} (\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \frac{\partial}{\partial \varphi})$$

$$6. \text{ مقدار } \Delta p_x \text{ را برای حالت } v = 1 \text{ نوسانگر هماهنگ بدست آورید. } \psi_1 = \left(\frac{a}{\pi}\right)^{1/4} \sqrt{\frac{a}{2}} x e^{-ax^2/2}$$

ثابت ها و اعداد لازم

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

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

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

$$R = 8.314 \text{ J.mvl}^{-1} \text{ K}^{-1}$$



پاسخ سؤالات تشریحی درس: مکانیک کوانتومی رشته: فیزیک صفحه: ۱
 سال تحصیلی: ۸۸-۸۷ نوبت اول: ○ نوبت دوم: ⊗ نام و نام خانوادگی: علیرضا محمدی شماره دانشجویی: ۵۷۱۵۰۰۰۰۰۰۰۰

سؤال اول:

$$E = 2(\alpha + \beta) + \epsilon(\alpha + \beta)$$

$$E_R = E - 4\alpha = 1\beta$$

$$E_{DE} = 4\alpha + 1\beta - 2(2\alpha + \beta) = 2\beta$$

۲۹ ✓
(۱۲۵)

پس اینترنل میزنیم β از اینتر ادره ۵- هر الکترون از این به اینتر ادره

سؤال دوم:

$$\psi(r) = C e^{-\alpha r}$$

$$C^2 \int \psi^*(r) \psi(r) r^2 \sin\theta dr d\theta d\phi = \epsilon \pi C^2 \int_0^\infty r^2 e^{-2\alpha r} dr = 1$$

$$\epsilon \pi C^2 \times \left(\frac{r^2}{2\alpha} \right) = 1 \Rightarrow C = \left(\frac{\alpha^3}{\pi} \right)^{1/2}$$

۱۸۴ ✓
(۱۲۵)

$$\langle E \rangle = \int \psi^* \hat{H} \psi r^2 \sin\theta dr d\theta d\phi = \left(\frac{\alpha^3}{\pi} \right)^{1/2} \epsilon \pi \int_0^\infty r e^{-\alpha r} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{e^2}{r} \right] e^{-\alpha r} dr$$

$$= \epsilon \pi \left(\frac{\alpha^3}{\pi} \right)^{1/2} \int_0^\infty r^2 e^{-\alpha r} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\alpha^2 - \frac{2}{r} \alpha \right) - \frac{e^2}{r} \right] dr$$

$$= \epsilon \pi \left(\frac{\alpha^3}{\pi} \right)^{1/2} \int_0^\infty \left[-\frac{\hbar^2}{2m} r^2 \alpha^2 e^{-\alpha r} + \frac{\hbar^2 \alpha}{m} (r) e^{-\alpha r} - e^2 r e^{-\alpha r} \right] dr$$

$$= \epsilon \pi \left(\frac{\alpha^3}{\pi} \right)^{1/2} \left[-\frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m} \frac{r^2}{(2\alpha)^2} + \frac{\hbar^2 \alpha}{m} \frac{1}{(2\alpha)^2} - e^2 \frac{1}{(2\alpha)^2} \right]$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m} \alpha^2 + \frac{\hbar^2 \alpha}{m} - e^2 = \frac{1}{r} \frac{\hbar^2}{m} \alpha^2 - e^2 \alpha$$

$$\frac{\partial \langle E \rangle}{\partial \alpha} = 0 \Rightarrow \frac{\hbar^2}{m} \alpha - e^2 = 0 \Rightarrow \alpha = \frac{e^2 m}{\hbar^2}$$

$$\langle E \rangle = \frac{1}{r} \frac{\hbar^2}{m} \left(\frac{e^2 m}{\hbar^2} \right)^2 - e^2 \left(\frac{e^2 m}{\hbar^2} \right) = \frac{1}{r} \frac{e^4 m^3}{\hbar^4} - \frac{e^4 m}{\hbar^2} = -\frac{1}{r} \frac{e^4 m}{\hbar^2}$$



صفحه ۲

رشته: فیزیک

موضوع: مکانیک کوانتوم

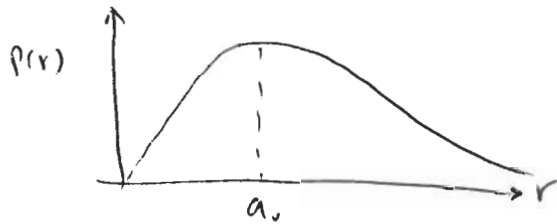
پاسخ سؤالات تشریحی درس:

نیمسال دوم

نیمسال اول ۱۷-۱۸

$$P(r) = 4\pi r^2 \psi_{1s}^2 = 4\pi r^2 e^{-2\alpha r} r^2$$

$$\frac{dP(r)}{dr} = 0 \Rightarrow r(1 - \frac{r}{a_0}) e^{-2\alpha r} = 0 \Rightarrow r = 0, r = a_0$$



سوال ۳

۱۵٪

(۱، ۱۰)

$$E = \frac{m h^2}{4\pi^2 I}, E_1 = \frac{h^2}{4\pi^2 I} = \frac{h^2}{4\pi^2 m a^2}$$

سوال ۴: ۱۱٪

(۱، ۱۰)

$$\lambda = \frac{h}{m v} = \frac{(2.2 \times 10^{-24})^2}{4\pi^2 \times 1.67 \times 10^{-27} \times (1.5 \times 10^3)^2}$$

$$\lambda = 1.25 \times 10^{-10} \text{ m}$$

$$\frac{m_0 v}{m_0 + m_x} = \frac{1/10 \times m_x}{(1/10 + m_x) \sqrt{A}} \Rightarrow m_x = 1/10 \text{ kg}$$

$$\boxed{x = \sqrt{A}}$$

سوال ۵

۱۲۳، ۱۲۴ (۱، ۱۰)

$$O_p = \lambda \left(\frac{d}{r}\right)^{1/2}$$

(۱، ۱۰)

۹۹، ۹۸

سوال ۶

www.salampnu.com

سایت مرجع دانشجوی پیام نور

- ✓ نمونه سوالات پیام نور : بیش از ۱۱۰ هزار نمونه سوال همراه با پاسخنامه
- تستی و تشریحی
- ✓ کتاب ، جزوه و خلاصه دروس
- ✓ برنامه امتحانات
- ✓ منابع و لیست دروس هر ترم
- ✓ دانلود کاملاً رایگان بیش از ۱۴۰ هزار فایل مختص دانشجویان پیام نور

www.salampnu.com

www.ShimiPedia.ir

نام درس: مبانی شیمی کوانتومی
 رشته تحصیلی و کد درس: شیمی

۱۱۱۴۰۲۷

کد سری سؤال: یک (۱)

استفاده از ماشین حساب

مجاز است.

تعداد سؤالات: تستی: ۲۶ تشریحی: ۶
 زمان آزمون: تستی: ۶۰ تشریحی: ۶۰ دقیقه
 آزمون نمره منفی دارد ○ ندارد ⊗

امام علی (ع): برتری مردم به یکدیگر، به دانش‌ها و خردهاست؛ نه به ثروت‌ها و تبارها.

۱. اصل موضوع اول کوانتم در ارتباط با کدام مورد زیر است؟

الف. Ψ ب. \hat{H} ج. $\langle a \rangle$ د. $\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$

۲. کدام مورد زیر را به عنوان تابع موج نمی‌توان در نظر گرفت؟

الف. $\sin x$ ب. x ج. $\frac{1}{x}$ د. $\frac{1}{x^2 + 1}$

۳. با فرض این که $\psi(x, t) = c \sin(\alpha x) e^{-iEt/\hbar}$ تابع موج نرمال باشد، c کدام است؟

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

۴. برای تابع موج $\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{\pi x}{L}$ مقدار $\langle x \rangle$ کدام است؟

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

۵. انرژی کدام سیستم زیر پیوسته است؟

الف. ذره در جعبه ب. ارتعاشی مولکول دو اتمی ج. چرخنده صلب د. ذره آزاد

۶. تابع $\psi(x)$ با کدام تابع زیر از دیدگاه فیزیکی غیر قابل تشخیص هستند.

الف. $\frac{d\psi(x)}{dx}$ ب. $\psi^2(x)$ ج. $e^{i\alpha}\psi(x)$ د. $4\psi(x)$

۷. برای ذره آزاد $\langle p_x \rangle$ کدام است؟

الف. $\sqrt{2mE}$ ب. $\frac{1}{2} K\hbar$ ج. $2mE$ د. $K^2\hbar$

۸. رابطه‌ی عدم قطعیت بین ΔE ، Δt کدام است؟

الف. $\Delta E \cdot \Delta t \leq \hbar$ ب. $\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar$ ج. $\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{4}$ د. $\Delta E \cdot \Delta t \leq \frac{\hbar}{4}$

۹. انتگرال فوریه در کدام مورد زیر برای ذره آزاد کاربرد دارد؟

الف. اصل عدم قطعیت ب. بسته موج ج. محاسبه انرژی د. تعیین اندازه حرکت

تعداد سوالات: تستی: ۲۶ تشریحی: ۶
زمان آزمون: تستی: ۶۰ تشریحی: ۶۰ دقیقه
آزمون نمره منفی دارد ○ ندارد ⊗

نام درس: مبانی شیمی کوانتومی
رشته تحصیلی و گد درس: شیمی
۱۱۱۴۰۲۷

کد سری سؤال: یک (۱) استفاده از ماشین حساب مجاز است.

۱۰. کدام نمودار تغییرات تابع موج ذره در جعبه یک بعدی برای $n = 3$ را نشان می‌دهد؟



۱۱. برای تابع موج $\psi_n(x,t) = \psi_n(x)e^{-iE_n t/\hbar}$ مقدار $(\Delta E)_n$ کدام است؟

الف. E_n ب. E_n^2 ج. $\sqrt{E_n}$ د. صفر

۱۲. کدام یک تابع لاگرانژ است؟

الف. $T + V$ ب. $T - V$ ج. $V - T$ د. H

۱۳. کدام جمله در مورد انرژی نقطه صفر صحیح نیست؟

الف. مستقل از دماست
ب. انرژی آغازی نوسانگراست
ج. انرژی مربوط به $V = 0$ است.
د. در صفر مطلق صفر است.

۱۴. $\langle P_x \rangle_v$ برای کدام تابع زیر صفر است؟

الف. $\psi_v = e^{-\alpha x^2/2}$ ب. $\psi_v = xe^{-\alpha x^2/2}$ ج. $\psi_v = x^2 e^{-\alpha x^2/2}$ د. هر سه مورد

۱۵. اگر $\psi_1 = A x e^{-\alpha x^2/2}$ تابع موج نوسانگرهارمونیک با $v = 1$ باشد انرژی آن کدام است؟

الف. صفر ب. $\frac{1}{2} h\nu_0$ ج. $\frac{3}{2} h\nu_0$ د. $\frac{5}{2} h\nu_0$

۱۶. فرکانس $\nu_0 = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{m'}}$ را از طریق کدام طیف نمایی زیر می‌توان تعیین کرد؟

الف. رزونانس هسته ب. ماورای بنفش ج. زیرقرمز د. امواج کوتاه

۱۷. کدام مورد برای تقریب هارمونیک صحیح است؟

الف. برای نخستین حالت‌های ارتعاشی مفید است.
ب. برای حالت‌های برانگیخته ارتعاشی مفید است.
ج. برای نخستین حالت‌های چرخشی مفید است.
د. برای حالت‌های برانگیخته چرخشی مفید است.

۱۸. کدام یک بیشترین فرکانس ارتعاش را دارد؟

الف. HI ب. HBr ج. HCl د. HF



نام درس: مبانی شیمی کوانتومی
رشته تحصیلی و کد درس: شیمی

۱۱۱۴۰۲۷

کد سری سؤال: یک (۱)

استفاده از ماشین حساب

مجاز است.

تعداد سؤالات: تستی: ۲۶ تشریحی: ۶
زمان آزمون: تستی: ۶۰ تشریحی: ۶۰ دقیقه
آزمون نمره منفی دارد ○ ندارد ⊗

۱۹. عبارت $\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}$ در مختصات قطبی - کروی به کدام جمله تبدیل می‌شود؟

الف. $\frac{1}{r} \times \frac{\partial}{\partial \phi}$ ب. $\frac{1}{r^2} \times \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}$ ج. $\frac{1}{r^2} \times \frac{\partial}{\partial \phi}$ د. $\frac{1}{r} \times \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}$

۲۰. تابع توزیع شعاعی کدام عبارت زیر است؟

الف. rR^2 ب. r^2R^2 ج. $4\pi r^2R^2$ د. $4\pi R^2$

۲۱. دانسیته احتمال اربیتال $1S$ در کجا بیشینه است؟

الف. در فاصله‌ای برابر شعاع بوهر
ج. در فاصله‌ای نصف شعاع بوهر
ب. در فاصله‌ای دو برابر شعاع بوهر
د. در هسته

۲۲. $\langle r \rangle$ در اربیتال $1S$ کدام است؟

الف. $\frac{a_0}{z}$ ب. $\frac{1}{2} \frac{a_0}{z}$ ج. $\frac{3}{2} \frac{a_0}{z}$ د. $\frac{2}{z} a_0$

۲۳. انرژی بخش پیوسته مربوط به حالت‌های نامقید اتم هیدروژن چگونه تغییر می‌کند؟

الف. $E_n = \frac{E_H}{n^2}$ ب. $E_n = \frac{2E_H}{n^2}$ ج. $E_n = \frac{E_H}{2n^2}$ د. پیوسته است.

۲۴. ضریب نرمال شدگی دترمینان اسلیر برای منظومه‌ی N الکترونی کدام است؟

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

۲۵. مطابق با نظریه هوکل تابع موج پایدارترین تراز انرژی مولکول اتیلن کدام است؟

الف. $\psi_1 = \phi_1 + \phi_2$ ب. $\psi_1 = \phi_1 - \phi_2$
ج. $\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1 + \phi_2)$ د. $\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1 - \phi_2)$

۲۶. جمله‌ی «مختل‌ترین جهش‌ها آنهایی هستند که تغییر بسیار کم در فاصله بین هسته‌ها ایجاد کنند» مربوط به کدام اصل است؟

الف. اصل بوهر ب. اصل کوپمان ج. اصل فرانک-کوندون د. اصل عدم قطعیت

نام درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی و کد درس: شیمی

۱۱۱۴۰۲۷

کد سری سؤال: یک (۱)

استفاده از ماشین حساب

مجاز است.

تعداد سؤالات: تستی: ۲۶ تشریحی: ۶

زمان آزمون: تستی: ۶۰ تشریحی: ۶۰ دقیقه

آزمون نمره منفی دارد ○ ندارد ⊗

سؤالات تشریحی

۱. رابطه بسته موج را برای ذره آزاد نوشته و نمودار تغییرات چگالی احتمال موضعی آن را ترسیم کنید؟ (۱,۲۵ نمره)

۲. برای الکترونی در جعبه یک بعدی کمترین فرکانس انتقال مشاهده شده $S^{-1} \times 10^{14} \times 2,0$ است. طول جعبه را محاسبه کنید.

(۱,۲۵ نمره)

$$h = 6,63 \times 10^{-34} \text{ J.S}$$

$$m_e = 9,11 \times 10^{-31} \text{ kg}$$

۳. ثابت کنید ارییتال 1S اتم هیدروژن با تابع موج $\psi_{1s} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \alpha^{\frac{3}{2}} e^{-\alpha r}$ نرمال است. (۱,۲۵ نمره)

۴. تأثیر \hat{S}_z بر $\alpha(\sigma), \beta(\sigma)$ را فقط بنویسید. (۱ نمره)

۵. اصل پائولی ناشی از چیست؟ توضیح دهید. (۱,۲۵ نمره)

۶. برای محاسبات نظریه هوکل مولکول با زنجیر مزدوج با فرمول $-c = c - c = c - c = -$ با N اتم کربن

الف. چند ارییتال نیاز است.

ب. این ارییتالها از کدام توابع پایه هستند.

ج. ارییتالهای فوق روی کدام اتمها متمرکز هستند.

د. ψ را بنویسید.ه. ψ به صورت چند دترمینان نوشته می شود. (۱,۵ نمره)

www.salampnu.com

سایت مرجع دانشجوی پیام نور

- ✓ نمونه سوالات پیام نور : بیش از ۱۱۰ هزار نمونه سوال همراه با پاسخنامه
- تستی و تشریحی
- ✓ کتاب ، جزوه و خلاصه دروس
- ✓ برنامه امتحانات
- ✓ منابع و لیست دروس هر ترم
- ✓ دانلود کاملاً رایگان بیش از ۱۴۰ هزار فایل مختص دانشجویان پیام نور

www.salampnu.com

www.ShimiPedia.ir

نام درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی و گد درس: شیمی (۱۱۱۴۰۲۷)

تعداد سؤالات: تستی: ۲۶ تشریحی: ۶

زمان آزمون: تستی: ۶۰ تشریحی: ۶۰ دقیقه

آزمون نمره منفی دارد ○ ندارد ⊗

گد سری سؤال: یک (۱)

استفاده از: مائین حساب مجاز است.

امام علی^(ع): شرافت به خرد و ادب است نه به دارایی و نژاد.

۱. در حل معادله شرودینگر مستقل از زمان کدام گزینه نادرست است؟

الف. تابع پیشنهادی مستقل از زمان در نظر گرفته می شود.

ب. تابع پیشنهادی به صورت $\psi(r)\phi(t)$ در نظر گرفته می شود

ج. فرض می شود اپراتور هامیلتونی متغیر زمان را در بر ندارد

د. معادله شرودینگر به دو معادله تجزیه می شود.

^ ^

۲- تاثیر اپراتور $x D_x$ روی تابع $x \sin x$ کدام است؟الف. $x \cos x$ ب. $\sin x + x \cos x$ ج. $x \sin x + x^2 \cos x$ د. $x^2 \sin x + x \cos x$ ۳. در محاسبه مقدار قابل انتظار تکانه برای ذره در جعبه به طول L ، حدود انتگرال گیری کدام است؟الف. $-L$ تا $+L$ ب. صفر تا $2L$ ج. صفر تا $L/2$ د. صفر تا L

۴. وابسته کردن موج به الکترون براساس کدام نظریه صورت می گیرد؟

الف. نظریه فوتونی انیشتین ب. نظریه دو بروی

ج. نظریه پلانک د. نظریه هامیلتونی

۵. بین کدام دو کمیت رابطه عدم قطعیت برقرار است؟

الف. x و E ب. P_x و t ج. E و t د. x و t

۶. ضریب نرمال کنندگی توابع موج بر اساس کدام عبارت ظاهر می شود؟

الف. برابر واحد بودن کل احتمال بودن ذره ب. معین و کوچکتر از یک بودن احتمال بودن ذره

ج. شرایط تحمیل شده بر سیستم د. پیوسته بودن تابع احتمال

۷. نخستین تراز انرژی ذره در جعبه مکعبی کدام است؟

الف. $\frac{4h^2}{\lambda m a^2}$ ب. $\frac{h^2}{\lambda m} \left[\frac{1}{a^2} + \frac{1}{b^2} + \frac{1}{c^2} \right]$ ج. $\frac{3h^2}{\lambda m a^2}$ د. $\frac{h^2}{\lambda m a^2}$

۸. درجه تبهگنی (همترازی) برای سیستم چرخنده صلب در صفحه کدام است؟

الف. یک یا ۲ ب. یک یا ۳ یا ۶

ج. ۲ د. بسته به عدد کوانتومی مربوطه متفاوت است.

نام درس: مبانی شیمی کوانتومی
رشته تحصیلی و کد درس: شیمی (۱۱۱۴۰۲۷)

تعداد سؤالات: تستی: ۲۶ تشریحی: ۶
زمان آزمون: تستی: ۶۰ تشریحی: ۶۰ دقیقه
آزمون نمره منفی دارد ○ ندارد ⊗

استفاده از: ماشین حساب مجاز است.

کد سری سؤال: یک (۱)

۹. تابع موج چرخنده صلب تابع ویژه کدام اپراتور است؟

الف. هر اپراتوری که با هامیلتونی جابه‌جاپذیر باشد

ب. L^2 و p ج. L_z و p

۱۰. سطوح تک دانسیته با کدام عبارت بیان می‌شوند؟

الف. $|\psi(r, t)|^2 = a$ ب. $|\psi(r, \theta, \varphi)|^2 = a$ ج. $4\pi r^2 R(r)^2 = a$ د. $4\pi r |\psi(r, \theta, \varphi)|^2 = a$ ۱۱. توابع ویژه اپراتور S_z کدامند؟الف. $\pm \frac{1}{2} \hbar$ ب. α و β ج. σ_x و σ_y و σ_z د. σ^2

۱۲. اصل طرد پائولی برای کدام ذره‌ها صادق است؟

الف. ذره‌های تمییزناپذیر

ب. ذره‌های فرمیون

ج. ذره‌های بوزن

د. ذره‌هایی با اسپین درست

۱۳. در تقریب هوکل کدام عبارت نادرست است؟

الف. انتگرال‌های کولنی همگی برابر فرض می‌شوند.

ب. تابع موج مولکول به دو فاکتور یکی تابعی برای پیوندهای سیگما و دیگری برای سیستم π تجزیه می‌شود

ج. انتگرال‌های تبادل همگی برابر و مخالف صفر فرض می‌شوند

د. انتگرال‌های کولنی همگی برابر صفر فرض می‌شوند.

۱۴. نمودار ترازهای انرژی اربیتال‌های π در بنزن بر اساس مدل هوکل چگونه است؟

الف. دارای شش تراز انرژی بدون درجه همترازی است

ب. دارای چهار تراز که دو تای آن درجه همترازی دو دارد

ج. دارای سه تراز با درجه همترازی دو است

د. دارای دو تراز با درجه همترازی ۳ است.

۱۵. دترمینان اسلیتر به چه منظوری به کار گرفته می‌شود؟

الف. تقریبی از انرژی کل سیستم الکترونی

ب. تقریبی از توابع موج اسپینی سیستم چند الکترونی

ج. تقریبی از توابع موج اسپین اربیتالی سیستم چند الکترونی

د. تقریبی از انرژی الکترونی سیستم چند الکترونی

۱۶. انرژی یونش الکترون یون هیدروژن مانند He^+ بر حسب الکترون ولت کدام است؟

الف. ۱۳/۶

ب. ۲۷/۲

ج. ۵۴/۴

د. ۳/۴

نام درس: مبانی شیمی کوانتومی
 رشته تحصیلی و کد درس: شیمی (۱۱۱۴۰۲۷)

 تعداد سؤالات: تستی: ۲۶ تشریحی: ۶
 زمان آزمون: تستی: ۶۰ تشریحی: ۶۰ دقیقه
 آزمون نمره منفی دارد ○ ندارد ⊗

استفاده از: مائین حساب مجاز است.

کد سری سؤال: یک (۱)

۱۷. انرژی چرخنده صلب سه بعدی در حالت $J=3$ کدام است؟

الف. $\frac{\hbar^2}{2I}$ ب. $\frac{\hbar^2}{2I}$ ج. $\frac{\hbar^2}{12I}$ د. $\frac{\hbar^2}{9I}$

۱۸. چند جمله‌ای‌های لژاندر در حل کدام معادله استفاده می‌شوند؟

الف. معادله شرودینگر برای چرخنده صلب دو بعدی ب. معادله شرودینگر برای نوسانگر هماهنگ

ج. قسمت شعاعی معادله شرودینگر برای اتم هیدروژن د. معادله ویژه مقدار اپراتور L^2

۱۹. رابطه بین انرژی چرخشی و تکانه زاویه‌ای کدام است؟

الف. $E = \frac{L}{2m}$ ب. $E = \frac{L}{2I}$ ج. $E = \frac{L^2}{2m}$ د. $E = \frac{L^2}{2I}$

۲۰. کدام عبارت در مورد منحنی انرژی پتانسیل یک مولکول دو اتمی صحیح است؟

الف. منطبق بر یک سهمی است ب. از الگوی نوسانگر هماهنگ تبعیت می‌کند

ج. داری یک مینیمم و یک ماکزیمم است د. تقعر آن همواره به سمت پایین است

۲۱. کدام گزینه درست است؟

الف. توابع ویژه قابل قبول اپراتور H مجموعه‌ای متقارن هستند

ب. درجه همترازی برای ذره در جعبه یک بعدی ۱ یا ۳ است

ج. به طور کلی خاصیت ارتوگونال بودن توابع ویژه هامیلتونی عمومی است.

د. اپراتورهای جابه‌جاپذیر دارای ویژه مقادیر یکسان هستند.

۲۲. ضریب نرمال‌کنندگی تابع موج ذره در جعبه سه بعدی کدام است؟

الف. $\sqrt{\frac{8}{a^3}}$ ب. $\sqrt{\frac{2}{a}}$ ج. $\sqrt{\frac{8}{abc}}$ د. $\sqrt{\frac{1}{2\pi}}$

۲۳. معادله دیفرانسیلی حرکت نوسانگر هماهنگ در مکانیک کلاسیک کدام است؟

الف. $m \frac{d^2x}{dt^2} = \frac{1}{2} kx^2$ ب. $m \frac{d^2x}{dt^2} = kx^2$ ج. $m \frac{d^2x}{dt^2} = -kx$ د. $\frac{d^2x}{dt^2} = -\frac{1}{2m} kx$

۲۴. جایگزین پذیر بودن ذره به معنی چیست؟

الف. بیشینه بودن دانسیته احتمال موضعی

ب. کمینه بودن دانسیته احتمال موضعی

ج. مستقل بودن دانسیته احتمال موضعی از زمان

د. بیشینه بودن دانسیته احتمال موضعی در یک لحظه معین و اندک بودن در نقاط دیگر

تعداد سوالات: تستی: ۲۶ تشریحی: ۶
زمان آزمون: تستی: ۶۰ تشریحی: ۶۰ دقیقه
آزمون نمره منفی دارد ○ ندارد ⊗

نام درس: مبانی شیمی کوانتومی
رشته تحصیلی و کد درس: شیمی (۱۱۱۴۰۲۷)

استفاده از: ماشین حساب مجاز است.

کد سری سؤال: یک (۱)

۲۵. کدام تابع ویژه اپراتور D_x^2 است؟
- الف. e^{-ax^2} ب. $\sin ax^2$ ج. $e^{-ax} + \sin ax$ د. $\sin ax$
۲۶. مقدار کدام کمیت برای نوسانگر هماهنگ مخالف صفر است؟
- الف. $\langle x \rangle$ ب. $\langle Px \rangle$ ج. Δp_x د. تمام موارد

«سوالات تشریحی»

* بارم هر سؤال ۱/۲۵ نمره.

۱. با استفاده از داده های زیر برای مولکول HCl، فرکانس ارتعاش و انرژی نقطه صفر (بر حسب کیلو کالری بر مول) را برای مولکول DCI محاسبه کنید؟ $\bar{\nu} = 2988 \text{ cm}^{-1}$ و $k = 5.16 \times 10^2 \text{ N/m}$ و جرم کلر ۳۵/۵ گرم بر مول است.
 $c = 3 \times 10^8 \text{ m/s}$ و $h = 6.62 \times 10^{-34} \text{ J.s}$

۲. نشان دهید توابع ویژه چرخنده صلب متعامد هستند. تابع موج به صورت $\psi_m(\varphi) = \sqrt{\frac{1}{2\pi}} e^{im\varphi}$ است.

۳. مقدار قابل انتظار انرژی پتانسیل در حالت اصلی اتم هیدروژن را محاسبه کنید؟
 $\psi_{1s} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-Zr/a_0}$ و

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

۴. مولکول CO را در تقریب چرخنده صلب در نظر بگیرید. اگر ممان اینرسی این مولکول برابر $I = 1.475 \times 10^{-47} \text{ kg.m}^2$ باشد، طول موج مربوط به اولین خط جذبی ارتعاشی چقدر است؟ و مربوط به کدام ناحیه است؟

$$h = 6.625 \times 10^{-34} \text{ J.s}$$

$$c = 3 \times 10^8 \text{ m.s}^{-1}$$

تعداد سؤالات: تستی: ۲۶ تشریحی: ۶

زمان آزمون: تستی: ۶۰ تشریحی: ۶۰ دقیقه

آزمون نمره منفی دارد ○ ندارد ⊗

نام درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی و کد درس: شیمی (۱۱۱۴۰۲۷)

کد سری سؤال: یک (۱)

استفاده از ماشین حساب مجاز است.

۵. برای سیستم بوتادیان ترازهای انرژی الکترون‌های π به دست آمده از مدل هوکل به صورت $E = \alpha \pm 1.618\beta$ و $E = \alpha \pm 0.618\beta$ است. با رسم نمودار انرژی و اوربیتالی، انرژی رزونانس سیستم را محاسبه کنید. بر روی علامت آن بحث کنید.

۶. اگر $\sigma^z = \frac{3}{4} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$ باشد نشان دهید: $S = \frac{3}{4} \hbar^2$

می‌دانیم $\sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$ و $\sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}$ و $\sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$

| وضعیت کلید | پاسخ صحیح | د | ج | ب | الف | شماره سوال |
|------------|-----------|---|---|---|-----|------------|
| عادي | | | | | | ۱ |
| عادي | | | | | X | ۲ |
| عادي | | | | | | ۳ |
| عادي | | | | X | | ۴ |
| عادي | | | | | X | ۵ |
| عادي | | | | | X | ۶ |
| عادي | | | | | X | ۷ |
| عادي | | | | | X | ۸ |
| عادي | | | | X | | ۹ |
| عادي | | | | X | | ۱۰ |
| عادي | | | | X | | ۱۱ |
| عادي | | | | X | | ۱۲ |
| عادي | | | | | X | ۱۳ |
| عادي | | | | | X | ۱۴ |
| عادي | | | | X | | ۱۵ |
| عادي | | | | | X | ۱۶ |
| عادي | | | | X | | ۱۷ |
| عادي | | | | X | | ۱۸ |
| عادي | | | | | X | ۱۹ |
| عادي | | | | X | | ۲۰ |
| عادي | | | | X | | ۲۱ |
| عادي | | | | X | | ۲۲ |
| عادي | | | | X | | ۲۳ |
| عادي | | | | X | | ۲۴ |
| عادي | | | | | X | ۲۵ |
| عادي | | | | | X | ۲۶ |

بانک کامل نمونه سئوالات پیام نور همراه با جواب را فقط از مرکز کامپیوتر دانشگاه پیام نور لامرد بخواهید .

آدرس: لامرد- بلوار شهید مطهری- محله دهنو- موسسه عالی تابناک- مرکز کامپیوتر و کتابخانه دانشگاه پیام نور-
تلفن: ۰۷۸۲-۰۲۲۱۲۶۶۶- ۰۲۲۰۱۰۵

نام درس: ...

کد درس: ۱۱۱۴۰۴۷

رشته تحصیلی: ...

مقطع: کارشناسی

صفحه: ۱ از ۲

سوال ۱۲۵

بارم: ۶
نوع سوال: اول، دوم، تابستان

$$\bar{\nu}_{HCl} = 2911 \text{ cm}^{-1}$$

$$K_{HCl} = 2.14 \times 10^5 \text{ N/m}$$

$$\frac{\bar{\nu}_{DCl}}{\bar{\nu}_{HCl}} = \sqrt{\frac{\mu_{DCl}}{\mu_{HCl}}} = \sqrt{\frac{m_D m_H / (m_D + m_H)}{m_H m_H / (m_D + m_H)}} \quad (1)$$

$$= \sqrt{\frac{2 \times 35.5}{1 \times 2 \times 35.5}} = 1.395 \quad (1.5)$$

$$\bar{\nu}_{DCl} = 2152 \text{ cm}^{-1}$$

$$E_0 = \frac{1}{2} h c \bar{\nu}_{DCl} = \frac{1}{2} \times 6.625 \times 10^{-34} \times 3 \times 10^8 \times 2152$$

$$\times \frac{1}{2.12} \times \frac{1}{1000} \times 71.2 \times 10^3$$

$$= 21.5 \text{ kcal/mol}$$

شرایط:

$$\int_0^{2\pi} \psi_m^*(\varphi) \psi_n(\varphi) d\varphi = \delta_{mn} = \begin{cases} 1, & m=n \\ 0, & m \neq n \end{cases} \quad (2)$$

$$m=n \Rightarrow \int_0^{2\pi} \frac{1}{r\alpha} e^{-im\varphi} \cdot e^{im\varphi} d\varphi = \frac{1}{r\alpha} \int_0^{2\pi} d\varphi = 1$$

$$m \neq n \Rightarrow \int_0^{2\pi} \frac{1}{r\alpha} e^{-im\varphi} \cdot e^{in\varphi} d\varphi = \frac{1}{r\alpha} \int_0^{2\pi} e^{i\varphi(n-m)} d\varphi$$

$$= \frac{1}{r\alpha} \frac{1}{i(n-m)} e^{i\varphi(n-m)} \Big|_0^{2\pi}$$

$$= \frac{1}{r\alpha} \frac{1}{i(n-m)} [e^{2\pi i(n-m)} - 1]$$

$$= \frac{1}{r\alpha} \frac{1}{i(n-m)} [\cos[2\pi(n-m)] + i \sin[2\pi(n-m)] - 1]$$

$n, m \Rightarrow m - n = \text{عدد صحیح} \Rightarrow \cos[2\pi(n-m)] = 1$
 $\sin[2\pi(n-m)] = 0$

نام درس: ...

کد درس: ...

رشته تحصیلی: ...

مقطع: ...

صفحه: ... از ...

سوال ۱۲۵

سال تحصیلی: ۸۸-۸۹ نیمسال: اول دوم تابستان

(۳) از اول:

$$\langle E \rangle = \frac{\langle V \rangle}{r} \Rightarrow \langle V \rangle = r \langle E \rangle$$

$$\langle E \rangle = -12.4 \text{ eV} \Rightarrow \langle V \rangle = -12.4 \text{ eV}$$

$$\langle V \rangle = \int \psi^* \hat{V} \psi d\tau = \int \int \int \frac{1}{\pi} \left(\frac{1}{a_0}\right)^3 e^{-\frac{r}{a_0}} \cdot \frac{e^2}{r} r^2 \sin\theta dr d\theta d\phi$$

$$= \frac{4\pi e^2}{\pi a_0^3} \int_0^\infty r e^{-\frac{r}{a_0}} dr = \frac{4\pi e^2}{\pi a_0^3} \frac{1!}{\left(\frac{r}{a_0}\right)^r}$$

$$= \frac{4e^2}{4a_0} = \frac{e^2}{a_0} = -12.4 \text{ eV}$$

$$E_{j=0} = 0$$

$$E_{j=1} = 2 \frac{h^2}{4\pi^2 I} = \frac{(9.1 \times 10^{-31})^2}{4 \times \pi^2 \times (1.5 \times 10^{-14})} = 1.08 \times 10^{-23} \text{ J}$$

$$v_{0 \rightarrow 1} = \frac{E_1 - E_0}{h} \quad E_0 = 0$$

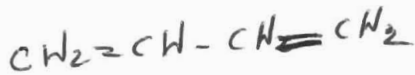
$$\lambda = \frac{c}{v} = \frac{ch}{E_1}$$

$$\lambda = \frac{(3 \times 10^8) \times (9.1 \times 10^{-31})^2}{1.08 \times 10^{-23}} = 1.243 \text{ cm}$$

در ناحیه ریزش موج فرار دارد

سال تحصیلی: ۸۸-۸۹ نیمسال: اول دوم تابستان بهار

(۵) مدارک B متغیر در جهت مثبت است لذا: ۲۹۴



$$E_{\pi} = 2(\alpha + 1,918\beta) + 2(\alpha + 1,918\beta)$$

$$= 4\alpha + 7,672\beta$$

$$E_{\text{استوار}} = 4(\alpha + \beta) = 4\alpha + 4\beta$$

$$E_{\text{زیادگی}} = E_{\pi} - E_{\text{استوار}} = 3,672\beta < 0$$

بنابراین انرژی سیستم در حالت استوار است.

$$\hat{S}_2 = \frac{1}{\hbar} \hat{S}_2 \Rightarrow \hat{S}_2 = \frac{\hbar}{r} \hat{S}_2$$

$$\hat{S}_u = \frac{\hbar}{r} \hat{S}_u, \quad \hat{S}_v = \frac{\hbar}{r} \hat{S}_v$$

$$\hat{S} = \hat{S}_u + \hat{S}_v + \hat{S}_2 = \frac{\hbar}{r} (\hat{S}_u + \hat{S}_v + \hat{S}_2)$$

$$\hat{S}_u = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\hat{S}_v = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\hat{S}_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\hat{S} = \frac{\hbar}{r} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\hat{S}_u + \hat{S}_v + \hat{S}_2 = \begin{bmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 3 \end{bmatrix}$$

www.salampnu.com

سایت مرجع دانشجوی پیام نور

- ✓ نمونه سوالات پیام نور : بیش از ۱۱۰ هزار نمونه سوال همراه با پاسخنامه
- تستی و تشریحی
- ✓ کتاب ، جزوه و خلاصه دروس
- ✓ برنامه امتحانات
- ✓ منابع و لیست دروس هر ترم
- ✓ دانلود کاملاً رایگان بیش از ۱۴۰ هزار فایل مختص دانشجویان پیام نور

www.salampnu.com

www.ShimiPedia.ir

تعداد سوالات: تستی: ۲۶ تشریحی: ۵

زمان آزمون: تستی: ۶۰ تشریحی: ۶۰ دقیقه

آزمون نمره منفی دارد ○ ندارد ⊗

نام درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی / کد درس: شیمی (۱۱۱۴۰۲۷)

کُد سری سؤال: یک (۱) استفاده از ماشین حساب مجاز است. منبع: --

پیامبر اعظم (ص): روزه سپر آتش جهنم است.

۱. از تاثیر اپراتور $(\hat{x} + \hat{D}_x)$ بر تابع $f(x) = e^{ax}$ کدام عبارت بدست می آید؟

الف. e^{ax} ب. xe^{ax} ج. $e^{ax}(x+a)$ د. ae^{ax}

۲. کدام یک از توابع می توانند تابع ویژه اپراتور \hat{D}_x باشد؟

الف. e^{ax} ب. xe^{ax} ج. $\sin ax$ د. $\sin^2 ax$

۳. طبق تعریف، اپراتور خطی باید دارای کدام یک از خاصیت های زیر باشد؟

۱. $\hat{A}[cf(x)] = c[\hat{A}f(x)]$ ۲. $\hat{A}f(x) = af(x)$

۳. $\hat{A}[f(x) + g(x)] = \hat{A}f(x) + \hat{A}g(x)$ ۴. $\hat{A}[f(x).g(x)] = f(x) + g(x)$

الف. ۱ و ۲ ب. ۱ و ۳ ج. ۲ و ۳ د. ۳ و ۴

۴. عبارت هامیلتونی برای ذره آزادی که تحت تاثیر هیچ نیرویی نیست، عبارت است از:

الف. $\hat{H} = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)$ ب. $\hat{H} = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)$

ج. $\hat{H} = \frac{\hat{P}_x^2}{2m} + V(x)$ د. $\hat{H} = \frac{\hat{P}_x^2}{2m} + \frac{1}{r^2}$

۵. در الگوی ذره در جعبه یک بعدی مقدار تابع $\psi(x)$ وقتی $x \rightarrow l$ کدام است؟

الف. ∞ ب. l ج. $l/2$ د. 0

۶. مقدار قابل انتظار x در الگوی ذره در جعبه یک بعدی با تابع حالت $\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin(\frac{\pi x}{l})$ کدام است؟

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

۷. عدم قطعیت (مقدار خطا) در انرژی حالت های ایستا برابر است با

الف. \hbar ب. $\frac{\hbar}{2}$ ج. $\sqrt{\frac{\hbar}{2}}$ د. 0

۸. در یک جعبه مکعبی ($l_1 = l_2 = l_3 = a$) انرژی و چند حالتی در تراز دوم به ترتیب عبارتند از:

الف. 1 و $\frac{3h^2}{8ma^2}$ ب. 1 و $\frac{6h^2}{8ma^2}$

ج. 2 و $\frac{3h^2}{8ma^2}$ د. 3 و $\frac{6h^2}{8ma^2}$

نام درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/کد درس: شیمی (۱۱۱۴۰۲۷)

تعداد سوالات: تستی: ۲۶ تشریحی: ۵

زمان آزمون: تستی: ۶۰ تشریحی: ۶۰ دقیقه

آزمون نمره منفی دارد ○ ندارد ⊗

کُد سری سؤال: یک (۱)

استفاده از ماشین حساب

مجاز است.

منبع: --

۹. رابطه طول موج دوبروی کدام است؟

الف. $\lambda = \frac{\hbar}{E}$

ب. $\lambda = \frac{h}{E}$

ج. $\lambda = \frac{h}{p}$

د. $\lambda = \frac{\hbar}{p}$

۱۰. اگر $\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_i^* \psi_j dv = 0, i \neq j$ باشد دو تابع موج نسبت به هم

الف. نرمال هستند.

ب. اورتونرمال هستند.

ج. اورتوگونال هستند.

د. مستقل هستند.

۱۱. فاصله بین ترازهای انرژی در کدام سیستم ثابت است؟

الف. ذره در جعبه یک بعدی

ب. ذره در جعبه سه بعدی

ج. نوسانگر هماهنگ یک بعدی

د. چرخنده صلب

۱۲. در تابع حالت $\psi_0 = C_0 e^{-\alpha x^2/2}, \alpha = \frac{2\pi v m}{h}$ است. ضریب C_0 کدام است؟

الف. \hbar

ب. $\left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4}$

ج. $\frac{\alpha}{\pi}$

د. $\left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/2}$

۱۳. انرژی نقطه صفر در حرکت ارتعاشی در تقریب اول برابر است با:

الف. ۰

ب. $\frac{3}{4} h\nu_0$

ج. $\frac{1}{2} h\nu_0$

د. $h\nu_0$

۱۴. مولفه L_z اندازه حرکت با کدام یک از اپراتورهای زیر جا به جا پذیر نیست؟

الف. L_z^2

ب. L_x

ج. L^2

د. H

۱۵. مقدار ویژه اپراتور L^2 با تابع ویژه $Y(\theta, \phi)$ کدام است؟

الف. $J(J+1)\hbar^2$

ب. $\sqrt{J(J+1)} \hbar$

ج. $m\hbar$

د. $m\hbar^2$

۱۶. ترازهای انرژی در چرخنده صلب دارای چند حالت همتران هستند؟

الف. ۱

ب. J

ج. $J(J+1)$

د. $(2J+1)$

۱۷. ψ_{210} برابر است با:

الف. ψ_{1s}

ب. ψ_{2s}

ج. ψ_{2p_x}

د. ψ_{2p_z}

نام درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/کد درس: شیمی (۱۱۱۴۰۲۷)

تعداد سؤالات: تستی: ۲۶ تشریحی: ۵

زمان آزمون: تستی: ۶۰ تشریحی: ۶۰ دقیقه

آزمون نمره منفی دارد ○ ندارد ⊗

کُد سری سؤال: یک (۱)

استفاده از ماشین حساب

مجاز است.

منبع: --

۱۸. تابع توزیع شعاعی ($P(r)$) کدام است؟

الف. $P(r) = R^2(r)$

ب. $P(r) = 4\pi r^2 R^2(r)$

ج. $P(r) = R(r)$

د. $P(r) = 4\pi r^2 R(r)$

۱۹. مقدار ویژه A در $\hat{S}_z \alpha(\sigma) = A\alpha(\sigma)$ چیست؟

الف. \hbar

ب. $-\hbar$

ج. $\frac{1}{2}\hbar$

د. $-\frac{1}{2}\hbar$

۲۰. در روش تغییر پارامتر: اگر $J = \frac{\int \phi^* \hat{H} \phi d\tau}{\int \phi^* \phi d\tau}$ (ϕ تابع آزمون) باشد کدام عبارت درست است؟

الف. $J \leq E_0$

ب. $J = E_0$

ج. $J \geq E_0$

د. $J = 1$

۲۱. در تقریب اسلیتر عدد موثر هسته کدام است؟

الف. $Z^* = bZ$

ب. $Z^* = (Z - b)$

ج. $Z^* = (Z - 2b)$

د. $Z^* = 2bZ$

۲۲. طبق اصل تمیزناپذیری ذرات همه ذرات با اسپین صفر یا عدد صحیح دارای

الف. تابع موجی متقارن هستند.

ب. تابع موجی نامتقارن هستند.

ج. تابع موجی ضد متقارن هستند.

د. تابع موجی بدون تقارن مشخص هستند.

۲۳. براساس اصل طرد پاولی تابع اسپینی مناسب برای یک سیستم دو الکترونی کدام است؟

الف. $\alpha(1)\alpha(2)$

ب. $\beta(1)\beta(2)$

ج. $\alpha(1)\beta(2) + \alpha(2)\beta(1)$

د. $\alpha(1)\beta(2) - \alpha(2)\beta(1)$

۲۴. انتگرال های کولونی H_{ij} در تقریب هوکل برای اتم های غیر همسایه برابر است با

الف. ۱

ب. صفر

ج. α

د. β

۲۵. در تابع موج نرمال $N\psi$ ضریب N کدام است؟

الف. $\frac{1}{(\int \psi^* \psi d\tau)^{\frac{1}{2}}}$

ب. $\frac{1}{\int \psi^* \psi d\tau}$

ج. $(\int \psi^* \psi d\tau)^{\frac{1}{2}}$

د. $\int \psi^* \psi d\tau$

۲۶. کدام خاصیت در ارتعاش دو مولکول $H^{35}Cl$ و $H^{37}Cl$ برابر است؟

الف. E_0

ب. ν

ج. k

د. λ



تعداد سوالات: تستی: ۲۶ تشریحی: ۵

زمان آزمون: تستی: ۶۰ تشریحی: ۶۰ دقیقه

آزمون نمره منفی دارد ○ ندارد ⊗

نام درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/کد درس: شیمی (۱۱۱۴۰۲۷)

منبع: --

مجاز است.

استفاده از ماشین حساب

کد سری سؤال: یک (۱)

«سوالات تشریحی»

۱. معادله شرودینگر وابسته به زمان $\hat{H}\Psi(x,t) = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}$ می باشد. با تجزیه این معادله، معادله مستقل از زمان و $\phi(t)$ را بدست آورید. به چه شرطی این تجزیه امکان پذیر است؟ (۲ نمره)

۲. اصل عدم قطعیت هایزنبرگ ($\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$) را در حالت پایه نوسانگر هماهنگ ساده ($\psi_0 = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\alpha x^2/2}$) بدست آورید. (۲ نمره)

۳. ثابت کنید: $[L_x, L_y] = i\hbar L_z$ (۱ نمره)

۴. مقدار قابل انتظار فاصله الکترون از هسته را در حالت ۱s حساب کنید. (۱ نمره)

$$\psi_{1s} = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \alpha e^{-\alpha r}, \alpha = \frac{Z}{a_0}$$

۵. با استفاده از تقریب هوکل انرژی ترازهای انرژی را برای مولکول بوتادی ان بدست آورید. (۱/۵ نمره)

انتگرال های مورد نیاز:

$$\int_0^{\infty} e^{-bx^2} dx = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{b}}$$

$$\int_0^{\infty} x^{2n} e^{-bx^2} dx = \frac{1.3 \dots (2n-1)}{2^{n+1}} \sqrt{\frac{\pi}{b^{2n+1}}}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

$$\int_0^{\infty} x^n e^{-bx} dx = \frac{n!}{b^{n+1}}, \quad n > -1, b > 0$$

www.salampnu.com

سایت مرجع دانشجوی پیام نور

- ✓ نمونه سوالات پیام نور : بیش از ۱۱۰ هزار نمونه سوال همراه با پاسخنامه
- تستی و تشریحی
- ✓ کتاب ، جزوه و خلاصه دروس
- ✓ برنامه امتحانات
- ✓ منابع و لیست دروس هر ترم
- ✓ دانلود کاملاً رایگان بیش از ۱۴۰ هزار فایل مختص دانشجویان پیام نور

www.salampnu.com

www.ShimiPedia.ir

تعداد سوالات: تستی: ۲۶ تشریحی: ۶
زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۶۰ تشریحی: ۶۰

نام درس: مبانی شیمی کوانتومی
رشته تحصیلی / کد درس: شیمی (محض - کاربردی) ۱۱۱۴۰۲۷

کد سری سؤال: یک (۱) استفاده از: ماشین حساب مجاز است.

امام خمینی^(ع): این محرم و صفر است که اسلام را زنده نگه داشته است.

۱. کدام یک از گزینه‌های زیر به شرط نرمال بودن تابع حالت اشاره می‌کند؟

الف. $p = \int_0^{\infty} |\psi(x, t)|^2 dx = 1$ ب. $p = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x, t)|^2 dx = 1$

ج. $p = \int_0^{\infty} \psi(x, t) dx = 1$ د. $p = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x, t) dx = 1$

۲. اصل اول از اصول موضوع مکانیک کوانتومی در مورد کدام گزینه است؟

- الف. تعریف عملگر هرمیتی
ب. تعریف تابع حالت
ج. تعریف مقدار مشاهده‌پذیر
د. معادله شرودینگر

۳. حاصل تاثیر \hat{D}_x^n بر تابع $f(x) = \sin x$ کدام است؟

الف. اگر $\frac{n}{p}$ زوج باشد $\cos x$ است. ب. اگر $\frac{n}{p}$ زوج باشد $\sin x$ است.

ج. اگر n زوج باشد $\cos x$ است. د. اگر n زوج باشد $\sin x$ است.

۴. کدام عملگر زیر خطی نمی‌باشد؟

الف. \hat{x} ب. \hat{D}_x ج. \hat{P}_x د. $\sqrt{\quad}$

۵. رابطه عملگر تکانه خطی ذره یک بعدی و عملگر انرژی جنبشی یک بعدی کدام است؟

الف. $\hat{T}_x = \hat{P}_x$ ب. $\hat{T}_x = \frac{1}{2m} \hat{P}_x$ ج. $\hat{T}_x = \frac{1}{2m} \hat{P}_x^2$ د. $\hat{T}_x = \hat{P}_x^2$

۶. عبارت عملگر لاپلاسی کدام گزینه است؟

الف. $-\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right)$ ب. $-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right)$

ج. $P_x^2 + P_y^2 + P_z^2$ د. $\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$

نام درس: مبانی شیمی کوانتومی
رشته تحصیلی / گد درس: شیمی (محض - کاربردی) ۱۱۱۴۰۲۷

تعداد سوالات: تستی: ۲۶ تشریحی: ۶
زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۶۰ تشریحی: ۶۰

کد سری سؤال: یک (۱) استفاده از: ماشین حساب مجاز است.

۷. در یک سیستم حالت ایستا تابع حالت

- الف. حاصلضرب تابع مکان در تابع زمان است. ب. حاصلضرب انرژی در تابع مکان است.
ج. حاصل جمع تابع مکان و تابع زمان است. د. همان تابع خط حالت در سیستم وابسته به زمان می باشد.

۸. شرایط مرزی در یک سیستم ذره در جعبه یک بعدی به طول L کدام است؟

- الف. $\psi(x) = 0$, $\psi(x) = 0$ ب. $\psi(x) = 0$, $\psi(x) = 0$
 $x \rightarrow 0$ $x \rightarrow \infty$ $x \rightarrow 0$ $x \rightarrow L$
ج. $\psi(x) = 0$, $\psi(x) = 0$ د. $\psi(x) = 0$, $\psi(x) = 0$
 $x \rightarrow -\infty$ $x \rightarrow +\infty$ $x \rightarrow L$ $x \rightarrow +\infty$

۹. مقدار قابل انتظار انرژی در هر حالت ایستا $\langle E \rangle_n$ کدام است؟

- الف. E_n^2 ب. $e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$ ج. E_n د. $e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$

۱۰. برای ذره در جعبه مکعبی سه بعدی به طول a تعداد حالت‌هایی که دارای انرژی $\frac{\sqrt{h^2}}{4ma^2}$ هستند کدام مورد زیر است؟

- الف. ۳ ب. ۶ ج. ۴ د. ۱

۱۱. توابع ویژه اپراتور \hat{H} ارتو نرمال هستند. چرا؟

- الف. چون \hat{H} عملگر انرژی است. ب. چون تابع پتانسیل صفر است.
ج. چون توابع موج مربوطه ایستا هستند. د. چون \hat{H} هرمیتیک است.

۱۲. انرژی نقطه صفر در نوسانگر هارمونیک کدام است؟

- الف. $\frac{1}{2}h$ ب. h ج. $\frac{1}{2}hv_0$ د. hv_0

نام درس: مبانی شیمی کوانتومی
رشته تحصیلی / گد درس: شیمی (محض - کاربردی) ۱۱۱۴۰۲۷

تعداد سوالات: تستی: ۲۶ تشریحی: ۶
زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۶۰ تشریحی: ۶۰

کد سری سؤال: یک (۱) استفاده از: ماشین حساب مجاز است.

۱۳. مقدار متوسط P_x برای هر تراز ν نوسانگر هماهنگ کدام است؟

- الف. $\frac{\alpha}{2} \hbar^2$ ب. $\alpha \hbar^2$ ج. $2\alpha \hbar^2$ د. صفر

۱۴. مقدار عبارت (Δp_x) ، (Δx) برای سیستم نوسانگر هماهنگ کدام است؟

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

۱۵. مولفه x تکانه زاویه‌ای کدام گزینه است؟

- الف. $yp_z - zp_y$ ب. $zp_x - xp_z$ ج. $xp_y - yp_x$ د. $xp_x - yp_y$

۱۶. اپراتور L_z با کدام اپراتور جا به جا پذیر نمی‌باشد؟

- الف. \hat{A} ب. \hat{H} ج. L_x د. L^2

۱۷. مقدار ویژه اپراتور L^2 در سیستم چرخنده صلب کدام است؟

- الف. $m\hbar^2$ ب. $m\hbar$ ج. $J(J+1)\hbar^2$ د. $J(J+1)\hbar$

۱۸. مقدار انرژی پائین‌ترین تراز انرژی چرخشی کدام است؟

- الف. صفر ب. $\frac{h^2}{8\pi^2 I}$ ج. $\frac{h^2}{8\pi^2 I}$ د. \hbar

۱۹. در یک سیستم دو ذره‌ای مانند اتم هیدروژن اپراتور انرژی پتانسیل کدام است؟

- الف. صفر ب. $-k \frac{ze^2}{r}$ ج. kx^2 د. $\frac{ke^2}{x^2}$

۲۰. تابع توزیع شعاعی کدام گزینه است؟

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

نام درس: مبانی شیمی کوانتومی
رشته تحصیلی / گد درس: شیمی (محض - کاربردی) ۱۱۱۴۰۲۷

تعداد سوالات: تستی: ۲۶ تشریحی: ۶
زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۶۰ تشریحی: ۶۰

کد سری سؤال: یک (۱) استفاده از: ماشین حساب مجاز است.

۲۱. حالت‌های نامقید اتم هیدروژن دارای کدام ویژگی زیر هستند؟

- الف. انرژی آنها منفی است. ب. ترازهای انرژی آنها کوانتیزه است.
ج. انرژی آنها مثبت است. د. الکترون در میدان جاذبه هسته است.

۲۲. آزمایش اشترن - گراخ در مورد کدام خصوصیت زیر است؟

- الف. اندازه حرکت زاویه‌ای اربیتالی الکترون ب. اندازه حرکت زاویه‌ای اسپینی الکترون
ج. اندازه حرکت زاویه‌ای اربیتالی هسته‌ای د. اندازه حرکت زاویه‌ای اسپینی هسته‌ای

۲۳. $\hat{S}_z \alpha(\sigma)$ معادل کدام مورد زیر است؟

- الف. $\frac{1}{2} \hbar \alpha(\sigma)$ ب. $\frac{1}{2} \hbar \beta(\sigma)$ ج. $-\frac{1}{2} \hbar \alpha(\sigma)$ د. $-\frac{1}{2} \hbar \beta(\sigma)$

۲۴. براساس تقریب هوکل چند الکترون در اوربیتال‌های مولکولی بوتادی‌ان حضور دارند؟

- الف. ۲ ب. ۳ ج. ۴ د. صفر

۲۵. اساس طیف نمایی فوتوالکترونی چیست؟

- الف. اصل عدم قطعیت ب. قضیه کوپمان ج. اثر فوتوالکتریک د. اصل فرانک - کوندون

۲۶. کدام مورد زیر فاکتور فرانک - کوندون است؟

- الف. R_e ب. $\int \psi_{rot}^* \psi_{rot} d\tau$
ج. $\int \psi_{vib}^* \psi_{vib} d\tau$ د. $\int \psi_{trans}^* \psi_{trans} d\tau$

تعداد سوالات: تستی: ۲۶ تشریحی: ۶
زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۶۰ تشریحی: ۶۰

نام درس: مبانی شیمی کوانتومی
رشته تحصیلی / گد درس: شیمی (محض - کاربردی) ۱۱۱۴۰۲۷

مجاز است.

ماشین حساب

استفاده از:

گد سری سؤال: یک (۱)

سوالات تشریحی

بارم هر سوال ۱/۲۵ نمره

۱. مقدار جا به جاپذیری $[\hat{x}, \hat{p}_x]$ را بدست آورید.

۲. ضریب N را در تابع حالت $\psi = N \sin \frac{x\pi}{L}$ تعیین کنید.

۳. ثابت کنید $\sigma^2 = 3 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ است.

۴. مقدار قابل انتظار $\frac{1}{r}$ را برای $e^{-\alpha r}$ $\psi_{1s} = \left(\frac{\alpha^3}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}}$ محاسبه کنید.

توجه: $\int_0^{\infty} x^n e^{-bx} dx = \frac{n!}{b^{n+1}}$

۵. با فرض این که ثابت نیروی مولکول H_2 برابر $\frac{N}{m} \times 10^2 / 5$ باشد. فرکانس ارتعاش بر حسب cm^{-1} را محاسبه کنید.

$$c \cong 3 \times 10^{10} \frac{cm}{S}$$

۶. مولکول بوتادین را با استفاده از تقریب هوکل بررسی نمایید.

www.salampnu.com

سایت مرجع دانشجوی پیام نور

- ✓ نمونه سوالات پیام نور : بیش از ۱۱۰ هزار نمونه سوال همراه با پاسخنامه
- تستی و تشریحی
- ✓ کتاب ، جزوه و خلاصه دروس
- ✓ برنامه امتحانات
- ✓ منابع و لیست دروس هر ترم
- ✓ دانلود کاملاً رایگان بیش از ۱۴۰ هزار فایل مختص دانشجویان پیام نور

www.salampnu.com

www.ShimiPedia.ir

نام درس: مبانی شیمی کوانتومی
رشته تحصیلی / کد درس: شیمی (محض - کاربردی) ۱۱۱۴۰۲۷

تعداد سوالات: تستی: ۲۶ تشریحی: ۶
زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۶۰ تشریحی: ۶۰

کد سری سؤال: یک (۱) استفاده از: ماشین حساب مجاز است.

امام خمینی^(ع): این محرم و صفر است که اسلام را زنده نگه داشته است.

۱. کدام یک از گزینه‌های زیر به شرط نرمال بودن تابع حالت اشاره می‌کند؟

الف. $p = \int_0^{\infty} |\psi(x, t)|^2 dx = 1$ ب. $p = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x, t)|^2 dx = 1$

ج. $p = \int_0^{\infty} \psi(x, t) dx = 1$ د. $p = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x, t) dx = 1$

۲. اصل اول از اصول موضوع مکانیک کوانتومی در مورد کدام گزینه است؟

- الف. تعریف عملگر هرمیتی
ب. تعریف تابع حالت
ج. تعریف مقدار مشاهده‌پذیر
د. معادله شرودینگر

۳. حاصل تاثیر \hat{D}_x^n بر تابع $f(x) = \sin x$ کدام است؟

الف. اگر $\frac{n}{p}$ زوج باشد $\cos x$ است. ب. اگر $\frac{n}{p}$ زوج باشد $\sin x$ است.

ج. اگر n زوج باشد $\cos x$ است. د. اگر n زوج باشد $\sin x$ است.

۴. کدام عملگر زیر خطی نمی‌باشد؟

الف. \hat{x} ب. \hat{D}_x ج. \hat{P}_x د. $\sqrt{\quad}$

۵. رابطه عملگر تکانه خطی ذره یک بعدی و عملگر انرژی جنبشی یک بعدی کدام است؟

الف. $\hat{T}_x = \hat{P}_x$ ب. $\hat{T}_x = \frac{1}{2m} \hat{P}_x$ ج. $\hat{T}_x = \frac{1}{2m} \hat{P}_x^2$ د. $\hat{T}_x = \hat{P}_x^2$

۶. عبارت عملگر لاپلاسی کدام گزینه است؟

الف. $-\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right)$ ب. $-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right)$

ج. $P_x^2 + P_y^2 + P_z^2$ د. $\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$

نام درس: مبانی شیمی کوانتومی
رشته تحصیلی / گد درس: شیمی (محض - کاربردی) ۱۱۱۴۰۲۷

تعداد سوالات: تستی: ۲۶ تشریحی: ۶
زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۶۰ تشریحی: ۶۰

کد سری سؤال: یک (۱) استفاده از: ماشین حساب مجاز است.

۷. در یک سیستم حالت ایستا تابع حالت

- الف. حاصلضرب تابع مکان در تابع زمان است. ب. حاصلضرب انرژی در تابع مکان است.
ج. حاصل جمع تابع مکان و تابع زمان است. د. همان تابع خط حالت در سیستم وابسته به زمان می باشد.

۸. شرایط مرزی در یک سیستم ذره در جعبه یک بعدی به طول L کدام است؟

- الف. $\psi(x) = 0$, $\psi(x) = 0$ ب. $\psi(x) = 0$, $\psi(x) = 0$
 $x \rightarrow 0$ $x \rightarrow L$
ج. $\psi(x) = 0$, $\psi(x) = 0$ د. $\psi(x) = 0$, $\psi(x) = 0$
 $x \rightarrow -\infty$ $x \rightarrow +\infty$

۹. مقدار قابل انتظار انرژی در هر حالت ایستا $\langle E \rangle_n$ کدام است؟

- الف. E_n^2 ب. $e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$ ج. E_n د. $e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$

۱۰. برای ذره در جعبه مکعبی سه بعدی به طول a تعداد حالت‌هایی که دارای انرژی $\frac{\sqrt{h^2}}{4ma^2}$ هستند کدام مورد زیر است؟

- الف. ۳ ب. ۶ ج. ۴ د. ۱

۱۱. توابع ویژه اپراتور \hat{H} ارتو نرمال هستند. چرا؟

- الف. چون \hat{H} عملگر انرژی است. ب. چون تابع پتانسیل صفر است.
ج. چون توابع موج مربوطه ایستا هستند. د. چون \hat{H} هرمیتیک است.

۱۲. انرژی نقطه صفر در نوسانگر هارمونیک کدام است؟

- الف. $\frac{1}{2} h$ ب. h ج. $\frac{1}{2} hv_0$ د. hv_0

تعداد سوالات: تستی: ۲۶ تشریحی: ۶
زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۶۰ تشریحی: ۶۰

نام درس: مبانی شیمی کوانتومی
رشته تحصیلی / گد درس: شیمی (محض - کاربردی) ۱۱۱۴۰۲۷

کد سری سؤال: یک (۱) استفاده از: ماشین حساب مجاز است.

۱۳. مقدار متوسط P_x برای هر تراز ν نوسانگر هماهنگ کدام است؟

- الف. $\frac{\alpha}{2} \hbar^2$ ب. $\alpha \hbar^2$ ج. $2\alpha \hbar^2$ د. صفر

۱۴. مقدار عبارت (Δp_x) ، (Δx) برای سیستم نوسانگر هماهنگ کدام است؟

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

۱۵. مولفه x تکانه زاویه‌ای کدام گزینه است؟

- الف. $yp_z - zp_y$ ب. $zp_x - xp_z$ ج. $xp_y - yp_x$ د. $xp_x - yp_y$

۱۶. اپراتور L_z با کدام اپراتور جا به جا پذیر نمی‌باشد؟

- الف. \hat{A} ب. \hat{H} ج. L_x د. L^2

۱۷. مقدار ویژه اپراتور L^2 در سیستم چرخنده صلب کدام است؟

- الف. $m\hbar^2$ ب. $m\hbar$ ج. $J(J+1)\hbar^2$ د. $J(J+1)\hbar$

۱۸. مقدار انرژی پائین‌ترین تراز انرژی چرخشی کدام است؟

- الف. صفر ب. $\frac{h^2}{8\pi^2 I}$ ج. $\frac{h^2}{8\pi^2 I}$ د. \hbar

۱۹. در یک سیستم دو ذره‌ای مانند اتم هیدروژن اپراتور انرژی پتانسیل کدام است؟

- الف. صفر ب. $-k \frac{ze^2}{r}$ ج. kx^2 د. $\frac{ke^2}{x^2}$

۲۰. تابع توزیع شعاعی کدام گزینه است؟

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

نام درس: مبانی شیمی کوانتومی
رشته تحصیلی / گد درس: شیمی (محض - کاربردی) ۱۱۱۴۰۲۷

تعداد سوالات: تستی: ۲۶ تشریحی: ۶
زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۶۰ تشریحی: ۶۰

کد سری سؤال: یک (۱) استفاده از: ماشین حساب مجاز است.

۲۱. حالت‌های نامقید اتم هیدروژن دارای کدام ویژگی زیر هستند؟

- الف. انرژی آنها منفی است.
ب. ترازهای انرژی آنها کوانتیزه است.
ج. انرژی آنها مثبت است.
د. الکترون در میدان جاذبه هسته است.

۲۲. آزمایش اشترن - گراخ در مورد کدام خصوصیت زیر است؟

- الف. اندازه حرکت زاویه‌ای اربیتالی الکترون
ب. اندازه حرکت زاویه‌ای اسپینی الکترون
ج. اندازه حرکت زاویه‌ای اربیتالی هسته‌ای
د. اندازه حرکت زاویه‌ای اسپینی هسته‌ای

۲۳. $\hat{S}_z \alpha(\sigma)$ معادل کدام مورد زیر است؟

- الف. $\frac{1}{2} \hbar \alpha(\sigma)$ ب. $\frac{1}{2} \hbar \beta(\sigma)$ ج. $-\frac{1}{2} \hbar \alpha(\sigma)$ د. $-\frac{1}{2} \hbar \beta(\sigma)$

۲۴. براساس تقریب هوکل چند الکترون در اوربیتال‌های مولکولی بوتادی‌ان حضور دارند؟

- الف. ۲ ب. ۳ ج. ۴ د. صفر

۲۵. اساس طیف نمایی فوتوالکترونی چیست؟

- الف. اصل عدم قطعیت ب. قضیه کوپمان ج. اثر فوتوالکتریک د. اصل فرانک - کوندون

۲۶. کدام مورد زیر فاکتور فرانک - کوندون است؟

- الف. R_e ب. $\int \psi_{rot}^* \psi_{rot} d\tau$ ج. $\int \psi_{vib}^* \psi_{vib} d\tau$ د. $\int \psi_{trans}^* \psi_{trans} d\tau$

تعداد سوالات: تستی: ۲۶ تشریحی: ۶
زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۶۰ تشریحی: ۶۰

نام درس: مبانی شیمی کوانتومی
رشته تحصیلی / گد درس: شیمی (محض - کاربردی) ۱۱۱۴۰۲۷

مجاز است.

ماشین حساب

استفاده از:

گد سری سؤال: یک (۱)

سوالات تشریحی

بارم هر سوال ۱/۲۵ نمره

۱. مقدار جا به جاپذیری $[\hat{x}, \hat{p}_x]$ را بدست آورید.

۲. ضریب N را در تابع حالت $\psi = N \sin \frac{x\pi}{L}$ تعیین کنید.

۳. ثابت کنید $\sigma^2 = 3 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ است.

۴. مقدار قابل انتظار $\frac{1}{r}$ را برای $e^{-\alpha r}$ محاسبه کنید.

توجه: $\int_0^\infty x^n e^{-bx} dx = \frac{n!}{b^{n+1}}$

۵. با فرض این که ثابت نیروی مولکول H_2 برابر $\frac{N}{m} \times 10^2 / 5$ باشد. فرکانس ارتعاش بر حسب cm^{-1} را محاسبه کنید.

$$c \cong 3 \times 10^{10} \frac{cm}{S}$$

۶. مولکول بوتادین را با استفاده از تقریب هوکل بررسی نمایید.

www.salampnu.com

سایت مرجع دانشجوی پیام نور

- ✓ نمونه سوالات پیام نور : بیش از ۱۱۰ هزار نمونه سوال همراه با پاسخنامه
- تستی و تشریحی
- ✓ کتاب ، جزوه و خلاصه دروس
- ✓ برنامه امتحانات
- ✓ منابع و لیست دروس هر ترم
- ✓ دانلود کاملاً رایگان بیش از ۱۴۰ هزار فایل مختص دانشجویان پیام نور

www.salampnu.com

www.ShimiPedia.ir

تعداد سوالات: تستی: ۲۶ تشریحی: ۶
زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۶۰ تشریحی: ۵۰

نام درس: مبانی شیمی کوانتومی
رشته تحصیلی / کد درس: شیمی (محض-کاربردی-جبرانی ارشد) ۱۱۱۴۰۲۷

مجاز است.

استفاده از ماشین حساب

کد سری سؤال: یک (۱)

تنها با یاد اوست که دل‌ها آرام می‌گیرد.

۱. شرط نرمال بودن تابع موجی ψ در فضای سه بعدی کدام است؟

الف. $\int_V |\psi|^2 dV = 0$. ب. $\int_V |\psi|^2 dV = 1$

ج. $\int_V \psi^* \hat{H} \psi dV = 0$. د. $\int_V \psi^* \hat{H} \psi dV = 1$

۲. اثر اپراتور \hat{D}_x بر روی تابع e^{ax} کدام است؟

الف. $ae^{ax} dx$. ب. xe^{ax} . ج. ae^{ax} . د. $xe^{ax} dx$

۳. بنا بر اصل موضوع سوم مقدار قابل انتظار مشاهده پذیر a در حالت ψ به شرط اینکه ψ نرمال باشد کدام است؟

الف. $\langle a \rangle = \int \psi^* \psi dV$. ب. $\langle a \rangle = \int \psi^* \hat{A} \psi dV$

ج. $\langle a \rangle = \int |\psi|^2 dV$. د. $\langle a \rangle = \int \psi^* \hat{A} \psi$

۴. اپراتور لاپلاسی (∇^2) کدام است؟

الف. $\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$. ب. $\frac{\hbar^2}{i} \frac{d}{dx}$

ج. $\hat{\tau} + \hat{v}$. د. $\frac{-\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right)$

۵. در سیستم ذره در جعبه یک بعدی با تابع حالت $\psi = A \sin \frac{\pi x}{L}$ ضریب A کدام است؟

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

تعداد سوالات: تستی: ۲۶ تشریحی: ۶
زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۶۰ تشریحی: ۵۰

نام درس: مبانی شیمی کوانتومی
رشته تحصیلی / کد درس: شیمی (محض-کاربردی-جبرانی ارشد) ۱۱۱۴۰۲۷

مجاز است.

استفاده از ماشین حساب

کد سری سؤال: یک (۱)

۶. انرژی نخستین تراز اصلی در سیستم نره در جعبه مکعبی به ضلع a چیست؟

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

۷. کدام رابطه شرط متعامد بودن تابع های ویژه \hat{H} می باشد؟

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

۸. کدام یک نشان دهنده مولفه Z تکانه زاویه ای است؟

الف. $L_z = m\hbar^2$ ب. $L_z = mh$ ج. $L_z = m\hbar$ د. $L_z = mh^2$

۹. برای یک حالت ایستا در جعبه یک بعدی $\psi_n(x,t) = \psi_n(x)e^{-iE_n t/\hbar}$ خطا در انرژی چقدر است؟

الف. $\frac{\hbar}{2}$ ب. صفر ج. E_n د. $\frac{h}{2}$

۱۰. کدام یک از تابع های زیر ویژه تابع اپراتور $\hat{D}_x = \frac{\partial}{\partial x}$ است؟

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

تعداد سوالات: تستی: ۲۶ تشریحی: ۶
زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۶۰ تشریحی: ۵۰

نام درس: مبانی شیمی کوانتومی
رشته تحصیلی / کد درس: شیمی (محض-کاربردی-جبرانی ارشد) ۱۱۱۴۰۲۷

مجاز است.

استفاده از ماشین حساب

کد سری سؤال: یک (۱)

۱۱. برای دو اپراتور $\hat{A} = \hat{x}^2$ و $\hat{B} = \frac{\partial}{\partial x}$ جابه جا پذیر $\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ کدام است؟

الف. $2x$ ب. $4x$ ج. $-2x$ د. $-2x^2$

۱۲. حداقل مقدار $(\Delta x)(\Delta px)$ در سیستم نوسانگر هماهنگ چقدر است؟

الف. صفر ب. $\frac{\hbar}{2}$ ج. \hbar د. قابل محاسبه نیست

۱۳. اثر اپراتور \hat{L}^2 بر روی تابع های موجی اتم های هیدروژن مانند $\Psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi)$ کدام است؟

الف. $l(l+1)\hbar\psi$ ب. $m^2\hbar\psi$ ج. $l(l+1)\psi$ د. $m\hbar\psi$

۱۴. انرژی چرخشی مولکول منوکسید کربن در تراز $1 = J$ برابر $10^{-33} \times 7/55$ ژول است. طول موج اولین خط جذبی در چرخش این مولکول برحسب سانتی متر چقدر است؟

الف. $0/362$ ب. $0/463$ ج. $0/364$ د. $0/263$

۱۵. مقدار قابل انتظار فاصله الکترون از هسته اوربیتال اتمی $1s$ از کدام رابطه زیر به دست می آید؟

الف. $\langle r \rangle = \int \epsilon \pi r^2 \psi_{1s}^2 dr$ ب. $\int \psi_{1s}^* r \psi_{1s} dv$

ج. $\langle r \rangle = \int \psi_{1s}^2 dV$ د. $\langle r \rangle = \int \psi_{1s}^2 dr$

۱۶. ساختار ظریف خط D اتم سدیم ناشی از چیست؟

الف. جاذبه هسته و الکترون ب. دافعه الکترونی ج. اسپین الکترون د. حرکت اوربیتالی الکترون

۱۷. قدر مطلق تکانه ی زاویه ای اسپین از کدام رابطه به دست می آید؟

الف. $\frac{\hbar}{2\pi}$ ب. $\sqrt{s(s+1)}\hbar$ ج. $\frac{m_s}{\sqrt{s(s+1)}}$ د. $S(S+1)\hbar^2$

تعداد سوالات: تستی: ۲۶ تشریحی: ۶
زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۶۰ تشریحی: ۵۰

نام درس: مبانی شیمی کوانتومی
رشته تحصیلی / کد درس: شیمی (محض-کاربردی-جبرانی ارشد) ۱۱۱۴۰۲۷

مجاز است.

استفاده از ماشین حساب

کد سری سؤال: یک (۱)

۱۸. کدام اپراتور با \hat{L}_z جابجا پذیر است؟

الف. \hat{L}^x ب. \hat{L}_x ج. \hat{L}_y د. $\hat{L}_x + \hat{L}_y$

۱۹. کدام تابع نسبت به عملگر پارایته فرد است؟

الف. e^x ب. e^{-x^2} ج. $x.e^{-x^2}$ د. x^2

۲۰. بر پایه اصل طرد پاولی، تابع اسپینی مناسب برای یک سیستم دو الکترونی مانند He کدام است؟

الف. $\alpha(1)\alpha(2)$ ب. $\beta(1)\beta(2)$
ج. $\alpha(1)\beta(2) - \alpha(2)\beta(1)$ د. $\alpha(1)\beta(2) + \alpha(2)\beta(1)$

۲۱. کدام مورد زیر بنا بر نظریه اوربیتال مولکولی هوکل نادرست است؟

الف. $H_{ii} = 1$ ب. $S_{ii} = 1$
ج. $H_{ij} = 0$ جز برای دو اتم همسایه د. $H_{ij} = \beta$ برای دو اتم همسایه

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

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

۲۳. کدام رابطه زیر ممان مغناطیسی الکترون ناشی از گردش آن به دور هسته است؟

الف. $\vec{\mu} = \frac{e}{2m_e} \vec{L}$ ب. $\vec{\mu} = -\frac{e}{2m_e} L_z$ ج. $\vec{\mu} = -\frac{Ze}{2m_e} L_z$ د. $\vec{\mu} = -\frac{e}{2m_e} \vec{L}$

۲۴. کدام رابطه زیر، ماتریس 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. $\begin{vmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{vmatrix}$

۲۵. چند حالتی در ترازهای انرژی ذره در جعبه سه بعدی کدام است؟

الف. $n_x + n_y + n_z$ ب. n_x^2 ج. n_x د. $n_x^2 + n_y^2 + n_z^2$

تعداد سوالات: تستی: ۲۶ تشریحی: ۶
زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۶۰ تشریحی: ۵۰

نام درس: مبانی شیمی کوانتومی
رشته تحصیلی / گد درس: شیمی (محض-کاربردی-جبرانی ارشد) ۱۱۱۴۰۲۷

مجاز است.

استفاده از ماشین حساب

کد سری سؤال: یک (۱)

۲۶. کدام عبارت نشان دهنده قضیه واریانسیون در روش تغییر پارامترها می باشد؟

$$\text{ب. } \frac{\int \varphi^* \hat{H} \varphi d\tau}{\int \varphi^* \varphi d\tau} \geq 1$$

$$\text{الف. } \frac{\int \varphi^* \hat{H} \varphi d\tau}{\int \varphi^* \varphi d\tau} = 1$$

$$\text{د. } \int \frac{\varphi^* \hat{H} \varphi d\tau}{\varphi^* \varphi d\tau} \geq E_0$$

$$\text{ج. } \frac{\int \varphi^* \hat{H} \varphi d\tau}{\int \varphi^* \varphi d\tau} = E_0$$

سوال های تشریحی

بارم هر سوال ۱/۲۵ نمره

۱. مولکول NO را که جذب سطحی جامدی شده و مقید به چرخش در آن صفحه است، به عنوان چرخنده صلب در صفحه در نظر می گیریم. اگر جرم کاسته NO، $24 \times 10^{-26} \text{ kg}$ و ممان اینرسی آن $16/5 \times 10^{-47} \text{ kg.m}^2$ باشد، اولین انرژی غیر صفر آن را حساب کنید.

۲. مقدار قابل انتظار $\langle r \rangle$ فاصله الکترون تا هسته اتم هیدروژن را حساب کنید.

$$\text{معادله موجی الکترون اتم هیدروژن } \psi = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-\frac{r}{a_0}} \text{ و } a_0 = 52/9 \text{ pm} \text{ است.}$$

۳. برای ذره در جعبه یک بعدی، احتمال بودن ذره را در فاصله $x = 0$ و $x = \frac{a}{4}$ و $n = 1$ به دست آورید.

$$\text{تابع موج نرمال شده ذره در جعبه یک بعدی } \psi = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi x}{a} \text{ است.}$$

تعداد سوالات: تستی: ۲۶ تشریحی: ۶

نام درس: مبانی شیمی کوانتومی

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۶۰ تشریحی: ۵۰

رشته تحصیلی / گد درس: شیمی (محض-کاربردی-جبرانی ارشد) ۱۱۱۴۰۲۷

مجاز است.

استفاده از ماشین حساب

گد سری سؤال: یک (۱)

۴. ترازهای انرژی را برای کاتیون پروپنیل $CH_2 = CH - CH_2^+$ بر مبنای روش هوکل به دست آورید و انرژی رزونانس آن را حساب کنید.

۵. تابع نرمال شده ذره آزاد $\psi(x) = \sqrt{\frac{1}{L}} e^{ikx}$ و $p_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$ است. مقدار قابل انتظار p_x را برای این ذره بین $-\frac{L}{4}$ و $+\frac{L}{4}$ حساب کنید.

۶. تابع موجی $\psi = Ne^{-\frac{r}{a_0}}$ ، He^+ است. آن را نرمال سازید، ضریب نرمال سازی را به دست آورید و تابع موجی نرمال شده را بنویسید.

یادآوری: از رابطه $d\tau = r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi$ و حل انتگرال $\int_0^\infty x^n e^{-ax} dx = \frac{n!}{a^{n+1}}$ استفاده کنید.

ثابت ها و اعداد مفید و لازم

$$h = 6.625 \times 10^{-34} \text{ J.s}$$

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

$$a_0 = 5.29 \times 10^{-11} \text{ m}$$

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

$$c = 3 \times 10^8 \text{ m.s}^{-1}$$

www.salampnu.com

سایت مرجع دانشجوی پیام نور

- ✓ نمونه سوالات پیام نور : بیش از ۱۱۰ هزار نمونه سوال همراه با پاسخنامه
- تستی و تشریحی
- ✓ کتاب ، جزوه و خلاصه دروس
- ✓ برنامه امتحانات
- ✓ منابع و لیست دروس هر ترم
- ✓ دانلود کاملاً رایگان بیش از ۱۴۰ هزار فایل مختص دانشجویان پیام نور

www.salampnu.com

www.ShimiPedia.ir

تعداد سوالات : تستی: ۲۶ تشریحی: ۶

نام درس : مبانی شیمی کوانتومی

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

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۶۰ تشریحی: ۶۰

کد سری سوال: یک - ۱

استفاده از: ماشین حساب مهندسی مجاز است

آزمون: تابستان ۹۰

۱. احتمال حضور ذره در فاصله x و $x + dx$ برابر است با

الف $\psi^2(x,t)$

ب $\psi(x,t)$

ج $\psi(x,t)dx$

د $\psi^2(x,t)dx$

۲. اگر عملگری دارای دو خاصیت زیر باشد $\hat{A}(Cf(x)) = C\hat{A}f(x)$ و $\hat{A}(f(x) + g(x)) = \hat{A}f(x) + \hat{A}g(x)$

الف عملگر هرمیتی است.

ب عملگر انرژی است.

ج عملگر جابجایی است

د عملگر خطی است.

۳. $\sin ax$ تابع ویژه کدام عملگر است؟

الف \hat{p}_x

ب \hat{D}_x

ج \hat{x}

د \hat{D}_x^2

۴. مطابق اصول موضوع سوم مقدار قابل انتظار مشاهده پذیر a برابر است با

الف $\langle a \rangle = \int \psi^* \hat{a} \psi d\tau$ اگر ψ نرمال باشد.

ب $\langle a \rangle = \int \psi^* \hat{A} \psi d\tau$ اگر ψ نرمال نباشد.

ج $\langle a \rangle = \int \psi^* \hat{A} \psi d\tau$ اگر ψ نرمال باشد.

د $\langle a \rangle = \int \psi^* \psi d\tau$ اگر ψ نرمال نباشد.

۵. معادله وابسته به زمان شرودینگر در یک بعد کدام است؟

الف $\hat{H}\Psi(x,t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t}$

ب $\hat{H}\Psi(x,t) = E\Psi(x,t)$

ج $\hat{H}\Psi(x,t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial x}$

د $\hat{H} \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial x} = i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t}$

نام درس: مبانی شیمی کوانتومی

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

تعداد سوالات: تستی: ۲۶ تشریحی: ۶

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۶۰ تشریحی: ۶۰

کد سری سوال: یک - ۱

استفاده از: ماشین حساب مهندسی مجاز است

آزمون: تابستان ۹۰

۶. عبارت هامیلتونی برای ذره آزادی که تحت تاثیر هیچ نیرویی نیست، عبارت است از:

الف $\hat{H} = \frac{\hat{P}_x^2}{2m} + \frac{1}{r^2}$

ب $\hat{H} = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)$

ج $\hat{H} = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}$

د $\hat{H} = \frac{\hat{P}_x^2}{2m} + V(x)$

۷. در الگوی ذره در جعبه یک بعدی مقدار تابع $\psi(x)$ وقتی $l \rightarrow x$ کدام است؟

الف 0

ب ∞ ج $l/2$ د l

۸. در حالت‌های ایستا کدام عبارت صحیح است؟

الف $(\Delta E)_n = 0$

ب $(\Delta x)_n = 0$

ج $\langle E \rangle_n = 0$

د $(\Delta p_x)_n = 0$

۹. در یک جعبه مکعبی $(l_x = l_y = l_z = a)$ انرژی و چند حالتی در تراز دوم به ترتیب عبارتند از:

الف $\frac{6h^2}{8ma^2}$ و ۳

ب $\frac{6h^2}{8ma^2}$ و ۱

ج $\frac{3h^2}{8ma^2}$ و ۱

د $\frac{3h^2}{8ma^2}$ و ۳

تعداد سوالات : تستی: ۲۶ تشریحی: ۶

نام درس : مبانی شیمی کوانتومی

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

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۶۰ تشریحی: ۶۰

استفاده از: ماشین حساب مهندسی مجاز است

آزمون: تابستان ۹۰

کد سری سوال: یک - ۱

۱۰. اگر $i = j$, $\int_{-\infty}^{+\infty} \phi_i^* \phi_j dv = 1$ و $i \neq j$, $\int_{-\infty}^{+\infty} \phi_i^* \phi_j dv = 0$ باشد دو تابع موج نسبت به هم

الف اورتوگونال هستند

ب نرمال هستند.

ج اورتونرمال هستند

د مستقل هستند.

۱۱. مقدار ویژه \hat{H} در سیستم نوسانگر هماهنگ $\frac{1}{2} \hbar \omega_0$ می باشد. نوسانگر در کدام تراز انرژی قرار دارد؟

الف $v = 2$ ب $v = 1$ ج $v = 0$ د $v = 3$

۱۲. اگر ثابت نیرو در مولکول HCl برابر k باشد ثابت نیرو در مولکول DCl کدام است؟

الف $k/2$ ب k ج $\sqrt{k/\mu}$ د k/μ

۱۳. مولفه L_z اندازه حرکت با کدام یک از اپراتورهای زیر جا به جاپذیر است؟

الف L_x ب L_x^2 ج L^2 د L_y

۱۴. ضریب C_0 در تابع $\Phi(\phi) = C_0 e^{im\phi}$ کدام است؟

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

تعداد سوالات : تستی: ۲۶ تشریحی: ۶

نام درس : مبانی شیمی کوانتومی

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

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۶۰ تشریحی: ۶۰

استفاده از: ماشین حساب مهندسی مجاز است

آزمون: تابستان ۹۰

کد سری سوال: یک - ۱

۱۵. مقدار ویژه اپراتور H با تابع ویژه $Y_l^m(\theta, \phi)$ کدام است؟

الف $\frac{m\hbar}{2I}$

ب $\frac{\sqrt{l(l+1)}\hbar^2}{2I}$

ج $\frac{l(l+1)\hbar^2}{2I}$

د $\frac{m\hbar^2}{2I}$

۱۶. ψ_{210} برابر است با:

الف ψ_{1s}

ب ψ_{2s}

ج ψ_{2p_z}

د ψ_{2p_x}

۱۷. جزء حجم (dv) در مختصات قطبی کدام است؟

الف $r^2 dr d\theta d\phi$

ب $r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi$

ج $dr d\theta d\phi$

د $\sin \theta dr d\theta d\phi$

۱۸. با توجه به روابط جابجایی در ماتریس های پائولی کدام عبارت صحیح است؟

الف $\sigma_z \sigma_x = \sigma_y^2$

ب $\sigma_z \sigma_x = \sigma_x^2$

ج $\sigma_z \sigma_x = i\sigma_y$

د $\sigma_x \sigma_y = i\sigma_x$

۱۹. مقدار ویژه A در $\hat{S}_z \alpha(\sigma) = A \alpha(\sigma)$ چیست؟

الف $-\hbar$

ب $-\frac{1}{2}\hbar$

ج $\frac{1}{2}\hbar$

د \hbar

تعداد سوالات: تستی: ۲۶ تشریحی: ۶

نام درس: مبانی شیمی کوانتومی

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

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۶۰ تشریحی: ۶۰

استفاده از ماشین حساب مهندسی مجاز است

آزمون: تابستان ۹۰

کد سری سوال: یک - ۱

۲۰. در روش تغییر پارامتر: اگر $J = \frac{\int \phi^* \hat{H} \phi d\tau}{\int \phi^* \phi d\tau}$ (ϕ تابع آزمون) باشد کدام عبارت درست است؟

الف $J = E_0$

ب $J \geq E_0$

ج $J = 1$

د $J \leq E_0$

۲۱. اپراتور لاپلاسی برای تابعی به شکل $\psi(\gamma)$ کدام است؟

الف $\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r}$

ب $\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2}$

ج $\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr}$

د $\frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d}{dr}$

۲۲. هامیلتونی اتم هلیم در حالت پایه عبارت است:

الف $\hat{H} = \frac{1}{2} (\nabla_1^2 + \nabla_2^2) - \frac{2}{r_1} - \frac{2}{r_2} + \frac{1}{r_{1,2}}$

ب $\hat{H} = \frac{1}{2} (\nabla_1^2 + \nabla_2^2) - \frac{1}{r_{1,2}}$

ج $\hat{H} = \frac{1}{2} \nabla^2 - \frac{2}{r}$

د $\hat{H} = \frac{1}{2} (\nabla_1^2 + \nabla_2^2) - \frac{2}{r_1} - \frac{2}{r_2}$

۲۳. بنابر نظریه هوکل انرژی سیستم \mathcal{H} در حالت اصلی مولکول اتیلن برابر است با

الف 2β

ب $2(\alpha + \beta)$

ج $(\alpha + \beta)$

د 2α

تعداد سوالات : تستی: ۲۶ تشریحی: ۶

نام درس : مبانی شیمی کوانتومی

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

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۶۰ تشریحی: ۶۰

استفاده از: ماشین حساب مهندسی مجاز است

آزمون: تابستان ۹۰

کد سری سوال: یک - ۱

۲۴. طبق اصل تمیзнаپذیری ذرات همه ذرات با اسپین صفر یا عدد صحیح دارای

الف تابع موجی نامتقارن هستند.

ب تابع موجی ضد متقارن هستند.

ج تابع موجی متقارن هستند

د تابع موجی بدون تقارن مشخص هستند.

۲۵. فاصله بین ترازهای انرژی در کدام سیستم ثابت است؟

الف ذره در جعبه یک بعدی

ب ذره در جعبه سه بعدی

ج چرخنده صلب

د نوسانگر هماهنگ یک بعدی

۲۶. انتگرال های کولونی H_{ij} در تقریب هوکل برای اتم های غیر همسایه برابر است باالف \hat{a}

ب ۱

ج صفر

د \hat{a}

سئوالات تشریحی

بارم هر سئوال ۱/۲۵ نمره

۱. تابع حالت برای یک ذره در جعبه یک بعدی به طول L و در تراز $n=1$ عبارت است با: $\psi(x) = N \sin(\frac{\pi x}{L})$ ضریب N را تعییننمایید. طول موج این ذره در تراز پنجم بر حسب L چقدر است.۲. Δp_x را برای حالت پایه نوسانگر هماهنگ بدست آورید $\psi_0(x) = (\frac{\alpha}{\pi})^{1/4} e^{-\alpha x^2/2}$ ۳. نشان دهید: $[L_x, L_y] = L_x L_y - L_y L_x = i\hbar L_z$ ۴. ماگزیم احتمال حضور الکترون در اربیتال اتم هیدروژن را بدست آورید. $\psi_{1s} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \alpha^{3/2} e^{-\alpha r}$, $\alpha = \frac{z}{a_0}$

۵. اصل طرد پائولی ناشی از چیست؟ توابع اسپینی ممکن را با توجه به این اصل برای دو الکترون اتم هلیم بنویسید.

نام درس : مبانی شیمی کوانتومی

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

تعداد سوالات : تستی: ۲۶ تشریحی: ۶

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۶۰ تشریحی: ۶۰

کد سری سوال: یک - ۱

استفاده از: ماشین حساب مهندسی مجاز است

آزمون: تابستان ۹۰

۶. دو مورد از تقریب های نظریه هوکل را به طور خلاصه بیان نمایید و دترمینان ضرایب هوکل را برای مولکول بنزن بدست آورید.

$$\int_0^{\infty} x e^{-ax^p} dx = \frac{1}{p} \sqrt{\frac{\pi}{a^{\frac{p-1}{p}}}}$$

$$\int_0^{\infty} e^{-ax^p} dx = \frac{1}{p} \sqrt{\frac{\pi}{a}} \quad \text{می دانیم:}$$

$$\int_0^{\infty} x e^{-ax^p} dx = \frac{1}{pa}$$

www.salampnu.com

سایت مرجع دانشجوی پیام نور

- ✓ نمونه سوالات پیام نور : بیش از ۱۱۰ هزار نمونه سوال همراه با پاسخنامه
- تستی و تشریحی
- ✓ کتاب ، جزوه و خلاصه دروس
- ✓ برنامه امتحانات
- ✓ منابع و لیست دروس هر ترم
- ✓ دانلود کاملاً رایگان بیش از ۱۴۰ هزار فایل مختص دانشجویان پیام نور

www.salampnu.com

www.ShimiPedia.ir



تعداد سوالات: تستی: ۳۵ تشریحی: --

نام درس: مبانی شیمی کوانتومی

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

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۰ تشریحی: --

مجاز است.

استفاده از: ماشین حساب

۱. تاثیر اپراتور \hat{D}_x^r 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 . $\hat{H} = -\frac{\hbar}{2\pi m} \nabla^2 + \hat{V}$ ب . $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \hat{V}$

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

۳. مقدار قابل انتظار $\langle p_x \rangle$ برای ذره آزاد کدام چه قدر است؟

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 . $\frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{\hbar}{2m}}$ 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 . $\frac{\hbar}{2\pi} v$

ج . $\frac{\hbar}{2\pi} v_0$ د . $\frac{1}{2} hv_0$



تعداد سوالات: تستی: ۳۵ تشریحی: --

نام درس: مبانی شیمی کوانتومی

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

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۰ تشریحی: --

استفاده از: ماشین حساب مجاز است.

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 . ۱ 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 . N^2 .

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 مشاهده 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 بر انگیخته کدام است ؟

الف . $1/43 \times 10^{-20}$ J .
ب . $8/58 \times 10^{-20}$ J .

ج . $5/74 \times 10^{-20}$ J .
د . $4/29 \times 10^{-20}$ J .



تعداد سوالات: تستی: ۳۵ تشریحی: --

نام درس: مبانی شیمی کوانتومی

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

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۰ تشریحی: --

استفاده از: ماشین حساب مجاز است.

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

- الف. $4\pi r^2 R^2 dr$. الف
ب. $|\psi|^2 dr$. ب
ج. $\pi R^2 \psi^2 dr$. ج
د. $4\pi r^2 \psi^2 dr$. د

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

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

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

- الف. $\langle r \rangle = \int 4\pi r^2 \psi_{1s}^2 dr$. الف
ب. $\langle r \rangle = \int \psi_{1s}^* \hat{H} \psi_{1s} dr$. ب
ج. $\langle r \rangle = \int \psi_{1s}^* r \psi_{1s} dr$. ج
د. $\langle r \rangle = \int \psi_{1s}^* \psi_{1s} dr$. د

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

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

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

- الف. $\frac{3h^2}{8ma^2}$. الف
ب. $\frac{4h^2}{8ma^2}$. ب
ج. $\frac{5h^2}{8ma^2}$. ج
د. $\frac{6h^2}{8ma^2}$. د

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

- الف. ۳ . الف
ب. ۲ . ب
ج. ۵ . ج
د. ۶ . د

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

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

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

- الف. ضریب لاگرانژ . الف
ب. فاکتور لانده . ب
ج. فاکتور پاولی . ج
د. ضریب اپنهایمر . د



تعداد سوالات: تستی: ۳۵ تشریحی: --

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۰ تشریحی: --

نام درس: مبانی شیمی کوانتومی

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

استفاده از: ماشین حساب مجاز است.

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. $\frac{m_0 e^4}{\hbar^2}$

د. $\frac{m_0 e^4}{2\hbar^2}$

ج. $\frac{m_0 e^4}{\hbar^2}$

۲۴. رابطه ی اپراتور L_z برای چرخنده صلب در صفحه کدام است؟

ب. $-i\hbar \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}$

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

د. $i\hbar \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}$

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

۲۵. انرژی کل مولکول بوتادیین براساس تقریب هوکل $\beta + \frac{2}{4\sqrt{2}}\alpha$ و انرژی کل هر پیوند اتیلنی $\beta + 2\alpha$ است. انرژی رزونانس پیوند دوگانه ی نامسقر در بوتادیین کدام است؟

ب. 0.472β

الف. $1/472\beta$

د. 0.236β

ج. $1/236\beta$

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 سوالات: تستی: ۳۵ تشریحی: --

نام درس: مبانی شیمی کوانتومی

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

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۰ تشریحی: --

استفاده از: ماشین حساب مجاز است.

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 $h = 6.62 \times 10^{-34} \text{ Js}$, $r = 1/13 \text{ \AA}$, $1/14 \times 10^{-26} \text{ kg}$)

الف. 7.67×10^{-4} ب. 4.8×10^{-4} ج. 7.67×10^{-33} د. 4.8×10^{-4}

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

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

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 نرمال کنندگی کدام است؟

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

الف. $\sqrt{\frac{8}{\pi}}$ ب. $\sqrt{\frac{\pi a_0^3}{\pi}}$ ج. $\sqrt{\frac{8}{\pi a_0^3}}$ د. $\sqrt{\frac{25}{\pi a_0^4}}$

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

الف. لاگرانژ ب. لژاندر ج. لاگر د. هرمیت

۳۱. کدام رابطه بیانگر قضیه ویریا است؟

الف. $E = \frac{\langle V \rangle}{2}$ ب. $T = -\langle V \rangle$

ج. $E = -2\langle T \rangle$ د. همه موارد صحیح است

۳۲. ماتریس نمایش دهنده تابع اسپینی β کدام است؟

الف. $\begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}$ ب. $\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$

ج. $\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$ د. $\begin{bmatrix} 0 \\ -i \end{bmatrix}$

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

الف. $H_{11} = H_{33} = \beta$ ب. $S_{11} = S_{33} = 0$

ج. $H_{22} = H_{44} = \alpha$ د. $H_{22} = H_{33} = H_{13} = \beta$

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۰ تشریحی: --

تعداد سوالات: تستی: ۳۵ تشریحی: --

نام درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/ کُد 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؟

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

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

$$\frac{\partial \varphi}{\partial z} = -\frac{\sin \theta}{r} \quad \text{د.}$$

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

ثابت ها و اعداد مورد نیاز

$$h = 6.626 \times 10^{-34} \text{ Js} \quad \hbar = 1.055 \times 10^{-34} \text{ Js}$$

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

$$c = 3 \times 10^8 \text{ ms}^{-1} \quad 1 \text{ eV} = 1.602 \times 10^{-19} \text{ J}$$

www.salampnu.com

سایت مرجع دانشجوی پیام نور

- ✓ نمونه سوالات پیام نور : بیش از ۱۱۰ هزار نمونه سوال همراه با پاسخنامه
- تستی و تشریحی
- ✓ کتاب ، جزوه و خلاصه دروس
- ✓ برنامه امتحانات
- ✓ منابع و لیست دروس هر ترم
- ✓ دانلود کاملاً رایگان بیش از ۱۴۰ هزار فایل مختص دانشجویان پیام نور

www.salampnu.com

www.ShimiPedia.ir



تعداد سوالات: تستی: ۳۵ تشریحی: --

نام درس: مبانی شیمی کوانتومی

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

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۰ تشریحی: --

مجاز است.

استفاده از: ماشین حساب

۱. تاثیر اپراتور \hat{D}_x^r 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 . $\hat{H} = -\frac{\hbar}{2\pi m} \nabla^2 + \hat{V}$. ب . $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \hat{V}$

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

۳. مقدار قابل انتظار $\langle p_x \rangle$ برای ذره آزاد کدام چه قدر است؟

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 . $\frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{\hbar}{2m}}$. 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 . $\frac{\hbar}{2\pi} v$

ج . $\frac{\hbar}{2\pi} v_0$. د . $\frac{1}{2} hv_0$



تعداد سوالات: تستی: ۳۵ تشریحی: --

نام درس: مبانی شیمی کوانتومی

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

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۰ تشریحی: --

استفاده از: ماشین حساب مجاز است.

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 . ۱ د . ۹

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

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

ج . $\sqrt{\Psi^* \Psi d\tau}$.
د . N^2 .

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 مشاهده 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 . $1/43 \times 10^{-20}$ J .
ب . $8/58 \times 10^{-20}$ J .

ج . $5/74 \times 10^{-20}$ J .
د . $4/29 \times 10^{-20}$ J .



تعداد سوالات: تستی: ۳۵ تشریحی: --

نام درس: مبانی شیمی کوانتومی

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

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۰ تشریحی: --

استفاده از: ماشین حساب مجاز است.

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

- الف. $4\pi r^2 R^2 dr$. الف
ب. $|\psi|^2 dr$. ب
ج. $\pi R^2 \psi^2 dr$. ج
د. $4\pi r^2 \psi^2 dr$. د

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

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

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

- الف. $\langle r \rangle = \int 4\pi r^2 \psi_{1s}^2 dr$. الف
ب. $\langle r \rangle = \int \psi_{1s}^* \hat{H} \psi_{1s} dr$. ب
ج. $\langle r \rangle = \int \psi_{1s}^* r \psi_{1s} dr$. ج
د. $\langle r \rangle = \int \psi_{1s}^* \psi_{1s} dr$. د

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

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

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

- الف. $\frac{3h^2}{8ma^2}$. الف
ب. $\frac{4h^2}{8ma^2}$. ب
ج. $\frac{5h^2}{8ma^2}$. ج
د. $\frac{6h^2}{8ma^2}$. د

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

- الف. ۳ . الف
ب. ۲ . ب
ج. ۵ . ج
د. ۶ . د

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

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

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

- الف. ضریب لاگرانژ . الف
ب. فاکتور لانده . ب
ج. فاکتور پاولی . ج
د. ضریب اپنهایمر . د



تعداد سوالات: تستی: ۳۵ تشریحی: --

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۰ تشریحی: --

نام درس: مبانی شیمی کوانتومی

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

استفاده از: ماشین حساب مجاز است.

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. $\frac{m_0 e^4}{\hbar^2}$

د. $\frac{m_0 e^4}{2\hbar^2}$

ج. $\frac{m_0 e^4}{\hbar^2}$

۲۴. رابطه ی اپراتور L_z برای چرخنده صلب در صفحه کدام است؟

ب. $-i\hbar \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}$

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

د. $i\hbar \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}$

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

۲۵. انرژی کل مولکول بوتادیین براساس تقریب هوکل $\beta + \frac{2}{4\sqrt{2}}\alpha$ و انرژی کل هر پیوند اتیلنی $\beta + 2\alpha$ است. انرژی رزونانس پیوند دوگانه ی نامسقر در بوتادیین کدام است؟

ب. 0.472β

الف. $1/472\beta$

د. 0.236β

ج. $1/236\beta$

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 سوالات: تستی: ۳۵ تشریحی: --

نام درس: مبانی شیمی کوانتومی

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

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۰ تشریحی: --

استفاده از: ماشین حساب مجاز است.

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 $h = 6.62 \times 10^{-34} \text{ Js}$, $r = 1/13^\circ \text{ A}$, $1/14 \times 10^{-26} \text{ kg}$)

الف. 7.67 ب. 4.8×10^{-4} ج. 7.67×10^{-33} د. 4.8

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

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

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 نرمال کنندگی کدام است؟

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

الف. $\sqrt{\frac{8}{\pi}}$ ب. $\sqrt{\frac{\pi a_0^3}{\pi}}$ ج. $\sqrt{\frac{8}{\pi a_0^3}}$ د. $\sqrt{\frac{25}{\pi a_0^4}}$

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

الف. لاگرانژ ب. لژاندر ج. لاگر د. هرمیت

۳۱. کدام رابطه بیانگر قضیه ویریا است؟

الف. $E = \frac{\langle V \rangle}{2}$ ب. $T = -\langle V \rangle$

ج. $E = -2\langle T \rangle$ د. همه موارد صحیح است

۳۲. ماتریس نمایش دهنده تابع اسپینی β کدام است؟

الف. $\begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}$ ب. $\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$

ج. $\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$ د. $\begin{bmatrix} 0 \\ -i \end{bmatrix}$

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

الف. $H_{11} = H_{33} = \beta$ ب. $S_{11} = S_{33} = 0$

ج. $H_{22} = H_{44} = \alpha$ د. $H_{22} = H_{33} = H_{13} = \beta$

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۰ تشریحی: --

تعداد سوالات: تستی: ۳۵ تشریحی: --

نام درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/ کُد 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؟

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

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

$$\frac{\partial \varphi}{\partial z} = -\frac{\sin \theta}{r} \quad \text{د.}$$

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

ثابت ها و اعداد مورد نیاز

$$h = 6.626 \times 10^{-34} \text{ Js} \quad \hbar = 1.055 \times 10^{-34} \text{ Js}$$

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

$$c = 3 \times 10^8 \text{ ms}^{-1} \quad 1 \text{ eV} = 1.602 \times 10^{-19} \text{ J}$$

| وضعیت کلید | پاسخ صحیح | د | ج | ب | الف | شماره سوال | | | | | | |
|---------------|-----------|---|---|---|-----|------------|---|---|---|--|--|--|
| | | | | | | | | | | | | |
| 1 | عادي | | | | الف | X | | | | | | |
| 2 | عادي | | | | ب | X | | | | | | |
| 3 | عادي | | | | د | X | | | | | | |
| 4 | عادي | | | | ج | X | | | | | | |
| 5 | عادي | | | | ب | | X | | | | | |
| 6 | عادي | | | | د | X | | | | | | |
| 7 | عادي | | | | الف | | | X | | | | |
| 8 | عادي | | | | ج | | X | | | | | |
| 9 | عادي | | | | ب | | | X | | | | |
| 10 | عادي | | | | د | X | | | | | | |
| 11 | عادي | | | | ج | | X | | | | | |
| 12 | عادي | | | | الف | X | | | | | | |
| 13 | عادي | | | | ب | | | | X | | | |
| 14 | عادي | | | | د | | | | X | | | |
| 15 | عادي | | | | ب | | X | | | | | |
| 16 | عادي | | | | الف | | X | | | | | |
| 17 | عادي | | | | الف | X | | | | | | |
| 18 | عادي | | | | د | X | | | | | | |
| 19 | عادي | | | | الف | | | X | | | | |
| 20 | عادي | | | | ج | | X | | | | | |
| 21 | عادي | | | | ب | X | | | | | | |
| 22 | عادي | | | | ب | | | X | | | | |
| 23 | عادي | | | | الف | | | | X | | | |
| 24 | عادي | | | | ج | | | | X | | | |
| 25 | عادي | | | | ب | | | X | | | | |
| 26 | عادي | | | | د | X | | | | | | |
| 27 | عادي | | | | ب | | | | X | | | |
| 28 | عادي | | | | ب | | X | | | | | |
| 29 | عادي | | | | ج | | X | | | | | |
| 30 | عادي | | | | د | | | | X | | | |
| 31 | عادي | | | | الف | | | X | | | | |
| 32 | عادي | | | | ج | | X | | | | | |
| 33 | عادي | | | | ج | | | X | | | | |
| 34 | عادي | | | | د | X | | | | | | |
| 35 | عادي | | | | ب | | | X | | | | |

www.salampnu.com

سایت مرجع دانشجوی پیام نور

- ✓ نمونه سوالات پیام نور : بیش از ۱۱۰ هزار نمونه سوال همراه با پاسخنامه
- تستی و تشریحی
- ✓ کتاب ، جزوه و خلاصه دروس
- ✓ برنامه امتحانات
- ✓ منابع و لیست دروس هر ترم
- ✓ دانلود کاملاً رایگان بیش از ۱۴۰ هزار فایل مختص دانشجویان پیام نور

www.salampnu.com

www.ShimiPedia.ir

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۲۰ تشریحی: ۰

سری سوال: یک ۱

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/کد درس: شیمی (محض)، شیمی (کاربردی) ۱۱۱۴۰۲۷

استفاده از ماشین حساب مهندسی مجاز است

۱- ذره ای که از معادله مستقل از زمان شرودینگر تبعیت می کند باید داری:

۰۱. تابع ویژه‌های نرمال باشد
۰۲. انرژی پتانسیلی مستقل از موقعیت باشد
۰۳. طول موج دوبرویی مستقل از موقعیت باشد
۰۴. انرژی کلی مستقل از موقعیت باشد

۲- دلیل نرمال بودن تابع موج چیست؟

۰۱. تضمین نمودن آنکه مربع Ψ باید انتگرال پذیر باشد
۰۲. برای آنکه $\Psi^* \Psi$ برابر با تابع توزیع احتمال برای ذره است
۰۳. برای آنکه Ψ تابع ویژه اپراتور هامیلتونی باشد
۰۴. برای آنکه Ψ از شرایط مرزی مسئله اجابت نماید.

۳- حاصل کدام انتگرال مخالف صفر است؟

۰۱. $\int_0^{\pi} \sin \theta \cos \theta d\theta$
۰۲. $\int_{-\pi}^{\pi} \sin \theta \cos \theta d\theta$
۰۳. $\int_0^{\pi} \sin^3 \theta \cos^2 \theta d\theta$
۰۴. $\int_0^{\pi} \sin^2 \theta \cos^3 \theta d\theta$

۴- در حل ذره در جعبه به طول L با تابع $A \sin(kx) + B \cos(kx)$ شروع می کنیم. کدام جمله درست است؟

۰۱. مقدار k با شرط نرمال کردن تابع بدست می‌آید.
۰۲. لازم است این تابع در $x=0$ برابر L گردد.
۰۳. شرط مرزی در $x=0$ استفاده میشود تا نشان داده شود که $B=0$ است
۰۴. با اضافه کردن $C \exp(ikx)$ به تابع این تابع هنوز تابع ویژه اپراتور هامیلتونی است.

۵- برای ذره در جعبه به طول L و در حالت $n=3$ احتمال یافتن ذره در دامنه $0 \leq x \leq L/4$ کدام است؟

۰۱. بیشتر از $1/4$
۰۲. برابر $1/6$
۰۳. برابر $1/4$
۰۴. کمتر از $1/6$

۶- برای ذره در جعبه مکعبی به طول L داریم:

۰۱. انرژی نقطه صفر برابر $3h^2 / 8mL^2$
۰۲. دانسیته احتمال در مرکز جعبه برای حالت Ψ_{211} ماکزیمم است
۰۳. درجه همترازی حالت پایه برابر ۳ است
۰۴. Ψ_{111} دارای سه صفحه گره است.

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۲۰ تشریحی: ۰

سری سوال: ۱ یک

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/کد درس: شیمی (محض)، شیمی (کاربردی) ۱۱۱۴۰۲۷

۷- کدام جمله با نتایج مکانیک کوانتومی نوسانگر هماهنگ یک بعدی در تضاد است؟

۱. با کاهش جرم نوسانگر انرژی نقطه صفر افزایش می یابد.
۲. فرکانس آن شبیه فرکانس کلاسیکی است.
۳. با افزایش ثابت نیرو فواصل دو تراز انرژی متوالی افزایش می یابد.
۴. انرژی پتانسیل ارتعاشی ثابت حرکت است.

۸- طول موج 4.33×10^{-6} متر نوسانگر هماهنگ را از حالت پایه به اولین حالت برانگیخته تحریک میکند. اگر تنها ثابت نیرو دو برابر گردد کدام طول موج در این تحریک اتفاق می افتاد؟ (بر حسب متر)

۱. 4.33×10^{-6}
۲. 2.16×10^{-6}
۳. 3.06×10^{-6}
۴. 6.12×10^{-6}

۹- انرژی الکترونی Li^{2+} در حالت $2s$ کدام است؟

۱. شبیه اتم هیدروژن در حالت $1s$
۲. نه برابر اتم هیدروژن در حالت $1s$
۳. یک چهارم اتم هیدروژن در حالت $1s$
۴. نه چهارم اتم هیدروژن در حالت $1s$

۱۰- اوربیتال اتمی $5d_{xy}$ دارای چند گره صفحه ای و چند گره شعاعی است؟

۱. دو گره صفحه ای و یک گره شعاعی
۲. دو گره صفحه ای و سه گره شعاعی
۳. سه گره صفحه ای و یک گره شعاعی
۴. دو گره صفحه ای و دو گره شعاعی

۱۱- برای اتم هیدروژن در حالت $n=4$ ماکزیمم مولفه Z ممکن گشتاور زاویه ای اوربیتالی چیست؟

۱. $2\hbar$
۲. $3\hbar$
۳. $\sqrt{12}\hbar$
۴. $\sqrt{6}\hbar$

۱۲- یک تابع ویژه برای اتم هیدروژن بصورت زیر است:

$$[1/\sqrt{32\pi a_0^3}](r/a_0) \exp(-r/2a_0) \cos\theta$$

کدام جمله در مورد این تابع موج درست است؟

۱. ضریب نرمال کنندگی برابر $[1/\sqrt{32\pi a_0^3}](r/a_0)$
۲. این تابع در هسته صفر نمیشد
۳. برای این مورد $l=1$ و $m_l=0$ است
۴. این حالت توزیع ابر الکترونی کروی s است.

۱۳- تابع توزیع شعاعی برای حالت $1s$ مشخص می کند که :

۱. بیشترین مقدار احتمال فاصله از هسته برابر صفر است
۲. متوسط فاصله r صفر است
۳. متوسط فاصله r بزرگتر از بیشترین مقدار احتمال است
۴. متوسط فاصله r برابر با محتملترین مقدار است.

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۲۰ تشریحی: ۰

سری سوال: ۱ یک

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/کد درس: شیمی (محض)، شیمی (کاربردی) ۱۱۱۴۰۲۷

۱۴- کدام تابع موج قابل قبول برای حالت پایه اتم هلیوم است؟

۱. $[1s(1)1s(2)-1s(1)1s(2)]\alpha(1)\alpha(2)$ ۲. $1s(1)1s(2)[\alpha(1)\beta(2)+\beta(1)\alpha(2)]$

۳. $[1s(1)2s(2)+2s(1)1s(2)]\alpha(1)\alpha(2)$ ۴. $1s(1)2s(2)[\alpha(1)\beta(2)-\beta(1)\alpha(2)]$

۱۵- چند گانگی اسپین در حالت پایه با آرایش $4s^23d^7$ چیست؟

۱. ۱۹ ۲. ۱۵ ۳. ۴ ۴. ۵

۱۶- تابش تولیدی از منبع لامپ جیوه دارای انرژی $2/845$ الکترون ولت است. طول موج این تابش بر حسب نانو متر چیست؟

ثابت پلانک: $6.63 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$ بار الکترون: 1.6×10^{-19} کولن سرعت نور: $3 \times 10^8 \text{ ms}^{-1}$

۱. ۵۷۹ ۲. ۳۵۵ ۳. $404/7$ ۴. $436/9$

۱۷- طول موج دوبروی الکترون با انرژی جنبشی ۱ الکترون ولت چیست؟ ثابت پلانک برابر $6.63 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$

۱. $1/23$ میکرو متر ۲. $28/7$ پیکو متر ۳. 364 نانو متر ۴. $8/70$ آنگستروم

۱۸- انرژی نقطه صفر مکانیک کوانتومی الکترونی محبوس شده در جعبه یک بعدی به طول یک نانو متر چیست؟ (بر حسب ژول)

۱. 2.4×10^{-19} ۲. صفر ۳. 6.0×10^{-20} ۴. 5.4×10^{-19}

۱۹- ماکزیمم طول موج تحریک الکترون در سیستم مزدوج او۳-بوتادی ان بر اساس مدل ذره در جعبه یک بعدی برابر 210 نانو متر است. طول موثر زنجیر این سیستم چیست؟ (بر حسب آنگستروم)

جرم الکترون: $9.11 \times 10^{-31} \text{ kg}$ ثابت پلانک: $6.63 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$ سرعت نور: $3 \times 10^8 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$

۱. $2/5$ ۲. $4/4$ ۳. $7/6$ ۴. $10/1$

۲۰- الکترونی در حلقه دایره ای به شعاع $1/1$ آنگستروم در حال حرکت است. بر اساس مدل چرخنده صلب انرژی اولین حالت برانگیخته چرخشی آن چیست؟ (بر حسب ژول)

جرم الکترون: $9.11 \times 10^{-31} \text{ kg}$ ثابت پلانک: $6.63 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$

۱. 5.05×10^{-19} ۲. 9.50×10^{-19} ۳. 3.20×10^{-16} ۴. 8.00×10^{-17}

۲۱- ثابت نیرو در مولکول HCl برابر 516 Nm^{-1} است. انرژی پتانسیل ارتعاشی این مولکول وقتی در اثر ارتعاش پیوند آن به میزان $0/11$ آنگستروم از حالت تعادل منحرف میشود چیست؟ (بر حسب ژول)

۱. 3.10×10^{-20} ۲. 6.02×10^{-20} ۳. 1.50×10^{-20} ۴. 4.2×10^{-20}

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۲۰ تشریحی: ۰

سری سوال: ۱ یک

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/کد درس: شیمی (محض)، شیمی (کاربردی) ۱۱۱۴۰۲۷

۲۲- طول موج کمترین انرژی انتقال در سری براکت برای طیف الکترونی L_i^{+2} بر حسب نانو متر کدام مورد زیر است؟
راهنمایی: انرژی اتم هیدروژن (E_H) برابر با $-21.7 \times 10^{-19} \text{ J}$ و عدد اتمی لیتیوم برابر با ۳ است.
ثابت پلانک: $6.63 \times 10^{-34} \text{ J.s}$ سرعت نور: $6.63 \times 10^{-34} \text{ J.s}$

- ۴۵۲ .۱ ۴۰۵۰ .۲ ۹۱/۱ .۳ ۳۰/۳ .۴

۲۳- برای ذره در جعبه دو بعدی با طول $a=2b$ انرژی نقطه صفر کدام است؟

- ۵ $h^2 / 8ma^2$.۱ ۵ $h^2 / 8mb^2$.۲ h^2 / ma^2 .۳ $13h^2 / 8ma^2$.۴

۲۴- برای ذره در جعبه سه بعدی کدام تابع زیر تابع ویژه سیستم است؟

- $\Psi_{511} + \Psi_{333}$.۱ $\Psi_{221} + \Psi_{333}$.۲ $\Psi_{511} + \Psi_{421}$.۳ $\Psi_{511} + \Psi_{143}$.۴

۲۵- برای چرخنده صلب در صفحه با انرژی $9h^2 / 8\pi^2 I$ مقدار اندازه گیری شده برای گشتاور زاویه ای کدام است؟

- $3\hbar$.۱ $\sqrt{12}\hbar$.۲ $3\hbar$ یا $-3\hbar$.۳ صفر .۴

۲۶- برای چرخنده صلب در صفحه توابع موج:

۱. تابع ویژه اپراتور $d/d\phi$ هستند.
۲. همگی درجه همترازی ۲ هستند.
۳. متناظر با انرژی هستند که با مربع عدد کوانتومی افزایش می یابد.
۴. شرط تک مقدار بودن آن بر اساس شرایط مرزی است.

۲۷- برای نوسانگر هماهنگ در حالت $v=1$ با تابع موج $\left(\frac{4\alpha}{\pi}\right)^{1/4} x e^{-\frac{x^2}{2}}$ مکانهایی که در آن دانسیته احتمال ماکزیمم است عبارتند از:

- $x=1$.۱ $x=-1$.۲ $x=0$.۳ $x=\pm 1$.۴

۲۸- برای نوسانگر هماهنگ یک بعدی در حالت $n=5$ متوسط انرژی پتانسیل کدام است؟ راهنمایی: برای نوسانگر هماهنگ کلاسیکی متوسط انرژی پتانسیل با متوسط انرژی جنبشی برابر است.

- $\frac{11}{4} hv$.۱ $\frac{11}{2} hv$.۲ $\frac{11}{8} hv$.۳ $\frac{5}{4} hv$.۴

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۲۰ تشریحی: ۰

سری سوال: ۱ یک

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/کد درس: شیمی (محض)، شیمی (کاربردی) (۱۱۱۴۰۲۷)

۲۹- برای مولکول H^{19}F جذب مادون قرمز برای انتقال $n=0$ به $n=1$ طول موج طیفی cm^{-1} ۴۱۳۹ مشاهده می شود. ثابت نیرو برای این مولکول چیست؟ (در سیستم متریک)

سرعت نور: $3 \times 10^8 \text{ m.s}^{-1}$ جرم اتم هیدروژن: $1.67 \times 10^{-27} \text{ kg}$

۱. ۵۱۲ .۰۲ ۲. ۹۶۵ .۰۳ ۳. ۴۰۸ .۰۴ ۴. ۳۱۱ .۰۴

۳۰- برای مولکول H^{81}Br هرگاه ثابت نیرو (K) برابر ۳۶۳ نیوتن بر متر باشد، عدد موج اصلی ارتعاشی بر حسب cm^{-1} کدام است؟

جرم اتم هیدروژن: $1.67 \times 10^{-27} \text{ kg}$ سرعت نور: $3 \times 10^8 \text{ m.s}^{-1}$

۱. ۲۳۰۸ .۰۲ ۲. ۲۹۹۱ .۰۳ ۳. ۲۴۹۰ .۰۴ ۴. ۴۱۳۸ .۰۴

۳۱- برای اتم هیدروژن تابع ویژه در سیستم اتمی بصورت زیر تعریف شده است:

در اینصورت حالت اتم هیدروژن چیست؟ $\Psi = N(6r - r^2) \exp(-r/3) \sin \theta \sin \phi$

۱. s .۰۲ ۲. p_x .۰۳ ۳. p_y .۰۴ ۴. p_z .۰۴

۳۲- کدام جمله درست است؟

۱. ترکیب خطی از توابع Ψ_{3s} و Ψ_{4s} تابع ویژه هامیلتونی اتم هیدروژن است

۲. ترکیب خطی از توابع Ψ_{2s} و Ψ_{2p0} تابع ویژه هامیلتونی اتم هیدروژن است

۳. ترکیب خطی از توابع Ψ_{123} و Ψ_{222} تابع ویژه هامیلتونی ذره در جعبه مکعبی است

۴. ترکیب خطی از توابع $\exp(2i\phi)$ و $\exp(-3i\phi)$ تابع ویژه هامیلتونی چرخنده صلب دو بعدی است.

۳۳- حاصل انتگرال $\int \Psi_{2px} \hat{L}_z \Psi_{2px} dv$ چیست؟

۱. صفر .۰۲ ۲. \hbar .۰۳ ۳. $-\hbar$.۰۴ ۴. $\sqrt{2}\hbar$.۰۴

۳۴- فاکتور نرمال کننده تابع $r \exp(-r) \cos \theta$ چیست؟ راهنمایی: $\int_0^\infty r^n e^{-qr} = \frac{n!}{q^{n+1}}$ و $\int \sin \theta \cos^p \theta = -\frac{1}{p} \cos^p \theta$

۱. $\frac{1}{\pi}$.۰۲ ۲. $\frac{1}{\sqrt{\pi}}$.۰۳ ۳. $\sqrt{\pi}$.۰۴ ۴. $\frac{1}{\pi^2}$.۰۴

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۲۰ تشریحی: ۰

سری سوال: ۱ یک

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/کد درس: شیمی (محض)، شیمی (کاربردی) ۱۱۱۴۰۲۷

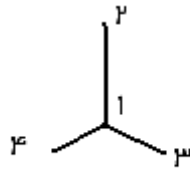
۳۵- برای حالت پایه اتم هیدروژن متوسط انرژی پتانسیل کدام است؟ (بر حسب الکترون ولت)

۱. $-۱۳/۶$ ۲. $-۲۷/۲$ ۳. $-۶/۸$ ۴. $۱۳/۶$

۳۶- هر گاه $\int_0^{\infty} x \exp(-x^2) dx = 1/2$ باشد در این صورت حاصل انتگرال $\int_{-\infty}^{\infty} x \exp(-x^2) dx$ کدام است؟

۱. ۱ ۲. $۰/۲۵$ ۳. ۰ ۴. ۲

۳۷- برای سیستم آلایل متیل مزدوج زیر بر اساس مدل هوکل دترمینان هوکل کدام است؟ $(\alpha - E)/\beta = x$



۱. $\begin{vmatrix} x & 1 & 0 & 1 \\ 1 & x & 1 & 1 \\ 1 & 0 & x & 0 \\ 1 & 0 & 0 & x \end{vmatrix}$ ۲. $\begin{vmatrix} x & 1 & 1 & 1 \\ 1 & x & 0 & 0 \\ 1 & 0 & x & 1 \\ 1 & 0 & 0 & x \end{vmatrix}$ ۳. $\begin{vmatrix} x & 1 & 1 & 1 \\ 1 & x & 0 & 0 \\ 1 & 0 & x & 1 \\ 1 & 1 & 0 & x \end{vmatrix}$ ۴. $\begin{vmatrix} x & 1 & 0 & 0 \\ 1 & x & 0 & 0 \\ 1 & 0 & x & 0 \\ 1 & 1 & 1 & x \end{vmatrix}$

۳۸- کدام جمله در مورد نوسانگر هماهنگ از دیدگاه مکانیک کوانتومی صادق است؟

- در پائین ترین حالت انرژی این ذره بیشتر اوقات خود را در نزدیک به نقاط برگشت کلاسیکی میگذراند.
- در نقاط برگشت کلاسیکی $\psi = 0$ است
- ترازهای انرژی دارای درجه تبهگنی ۱ هستند
- تمام موارد صحیح است

۳۹- برای ذره در جعبه سه بعدی با طول $a=b=c/2$ انرژی در حالت $n_x=1, n_y=2, n_z=2$ کدام است؟

۱. $3h^2 / 4mc^2$ ۲. $3h^2 / 4ma^2$ ۳. $3h^2 / 8ma^2$ ۴. $5h^2 / 8ma^2$

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۲۰ تشریحی: ۰

سری سوال: ۱ یک

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/کد درس: شیمی (محض)، شیمی (کاربردی) ۱۱۱۴۰۲۷

۴۰- برای سیستم (۱ و ۳- بوتادی ان کدام جمله درست است؟

۱. نمودار تراز انرژی مربوط به الکترونیهای پای آن بر اساس مدل هوکل دارای سه تراز است
۲. نمودار تراز انرژی مربوط به الکترونیهای پای آن بر اساس مدل هوکل هیچگونه تبهگنی ندارد.
۳. انرژی عدم استقرار آن -0.472β است.
۴. اگر الکترونیهای پای آن در دو پیوند اتیلنی توزیع شوند انرژی کل برابر $2\alpha + 4\beta$ است.

نیمسال دوم ۹۰-۹۱

| شماره سوال | الف | ب | ج | د | پاسخ صحیح | وضعیت کلید |
|------------|-----|---|---|---|-----------|------------|
| ۱ | | X | | | د | عادی |
| ۲ | | X | | | ب | عادی |
| ۳ | | X | | | ج | عادی |
| ۴ | | | | X | ج | عادی |
| ۵ | X | | | | الف | عادی |
| ۶ | | | X | | الف | عادی |
| ۷ | | | | X | د | عادی |
| ۸ | | X | | | د | عادی |
| ۹ | X | | | | د | عادی |
| ۱۰ | X | | | | د | عادی |
| ۱۱ | X | | | | ب | عادی |
| ۱۲ | X | | | | ج | عادی |
| ۱۳ | X | | | | ج | عادی |
| ۱۴ | | | X | | د | عادی |
| ۱۵ | | | | X | ج | عادی |
| ۱۶ | | X | | | د | عادی |
| ۱۷ | X | | | | الف | عادی |
| ۱۸ | | | X | | ج | عادی |
| ۱۹ | | | | X | ب | عادی |
| ۲۰ | | | X | | الف | عادی |
| ۲۱ | X | | | | الف | عادی |
| ۲۲ | | | | X | الف | عادی |
| ۲۳ | | | | X | الف | عادی |
| ۲۴ | | X | | | الف | عادی |
| ۲۵ | | X | | | ج | عادی |
| ۲۶ | | X | | | ج | عادی |
| ۲۷ | X | | | | د | عادی |
| ۲۸ | | | X | | الف | عادی |
| ۲۹ | | X | | | ب | عادی |
| ۳۰ | | | X | | ج | عادی |
| ۳۱ | | | X | | ج | عادی |
| ۳۲ | | | | X | ب | عادی |
| ۳۳ | | | | X | الف | عادی |
| ۳۴ | | X | | | ب | عادی |
| ۳۵ | | | X | | ب | عادی |
| ۳۶ | | X | | | ج | عادی |
| ۳۷ | X | | | | ب | عادی |
| ۳۸ | X | | | | ج | عادی |
| ۳۹ | | | | X | ب | عادی |
| ۴۰ | X | | | | ب | عادی |

www.salampnu.com

سایت مرجع دانشجوی پیام نور

- ✓ نمونه سوالات پیام نور : بیش از ۱۱۰ هزار نمونه سوال همراه با پاسخنامه
- تستی و تشریحی
- ✓ کتاب ، جزوه و خلاصه دروس
- ✓ برنامه امتحانات
- ✓ منابع و لیست دروس هر ترم
- ✓ دانلود کاملاً رایگان بیش از ۱۴۰ هزار فایل مختص دانشجویان پیام نور

www.salampnu.com

www.ShimiPedia.ir

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۲۰ تشریحی: ۰

سری سوال: یک ۱

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/کد درس: شیمی (محض)، شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی (کاربردی) (۱۱۱۴۰۲۷)

استفاده از ماشین حساب مهندسی مجاز است

۱- شدت نور با کدام گزینه زیر متناسب است؟

- ۰۱ طول موج ۰۲ توان دوم دامنه موج ۰۳ فرکانس ۰۴ توان دوم طول موج

۲- اصل موضوعه اول مکانیک کوانتوم عبارت است از:

- ۰۱ به هر حالت فیزیکی قابل حصول سیستم تابعی به نام تابع حالت وابسته است که شامل همه اطلاعات فیزیکی قابل دسترس در آن حالت است.
 ۰۲ به هر خاصیت فیزیکی یک عملگر وابسته است که با اثر روی توابع موج مقادیر ویژه آن کمیت را می دهد.
 ۰۳ حاصلضرب مزدوج مختلط تابع حالت در خود تابع حالت چگالی احتمال را در هر لحظه t در محدوده مکانی معین نشان می دهد.
 ۰۴ تابع موج بایستی در تمام فضا نرمال باشد.

۳- نتیجه جابجاگر $[\hat{D}_x, \hat{x}]$ روی تابع $f(x)$ کدام است؟

- ۰۱ $xf(x)$ ۰۲ $f'(x)$ ۰۳ $f(x)$ ۰۴ $xf'(x)$

۴- کدام مورد از خواص عملگرهای مکانیک کوانتوم نمی باشد؟

- ۰۱ جمع پذیر بودن ۰۲ خطی بودن ۰۳ هرمیتیک بودن ۰۴ موهومی بودن

۵- کدام یک از توابع زیر نمی تواند تابع ویژه عملگر \hat{D}_x^2 باشد؟ (α یک ثابت است)

- ۰۱ $e^{\alpha x}$ ۰۲ $e^{i\alpha x}$ ۰۳ $B \sin(\alpha x)$ ۰۴ $x \sin(\alpha x)$

۶- اگر دو عملگر \hat{A} و \hat{B} جابجاپذیر باشند، نتیجه $[\hat{A}, \hat{B}]$ کدام است؟

- ۰۱ صفر ۰۲ $\hat{A} = \hat{B}$ ۰۳ $\hat{A} = -\hat{B}$ ۰۴ یک

۷- کدام گزینه نشان دهنده عملگر انرژی جنبشی نمی باشد؟

- ۰۱ $\frac{1}{2m}(\hat{P}_x^2 + \hat{P}_y^2 + \hat{P}_z^2)$ ۰۲ $-\frac{\hbar^2}{2m}(\partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2 + \partial^2/\partial z^2)$
 ۰۳ $-\hbar^2(\hat{D}_x^2 + \hat{D}_y^2 + \hat{D}_z^2)$ ۰۴ $-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۲۰ تشریحی: ۰

سری سوال: ۱ یک

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/کد درس: شیمی (محض)، شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی (کاربردی) (۱۱۴۰۲۷)

۸- کدام مورد اصل موضوعه چهارم را نشان می دهد؟

$$\Psi(x, t) = \psi(x)\phi(t) \quad .۲$$

$$H\Psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} \quad .۱$$

$$H\Psi(x, t) = E\Psi(x, t) \quad .۴$$

$$\phi(t) = e^{-iEt/\hbar} \quad .۳$$

۹- مقدار قابل انتظار $\langle p_x \rangle$ برای ذره آزاد کدام است؟

$$\pm \sqrt{2mE} \quad .۴$$

$$\pm \frac{h}{\sqrt{2mE}} \quad .۳$$

$$\pm \frac{\hbar}{\sqrt{2mE}} \quad .۲$$

$$\pm \sqrt{2\hbar mE} \quad .۱$$

۱۰- برای ذره در جعبه یک بعدی ضریب نرمال سازی تابع کدام است؟

$$1/\sqrt{2\pi} \quad .۴$$

$$1/2\pi \quad .۳$$

$$2/L \quad .۲$$

$$\sqrt{2/L} \quad .۱$$

۱۱- کدام گزینه در مورد انرژی ذره در جعبه یک بعدی صحیح نمی باشد؟

$$\frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2} \quad .۱$$

$$\frac{n^2 \hbar^2}{8mL^2} \quad .۲$$

۳ با افزایش عدد کوانتومی سطوح انرژی به هم نزدیک می شوند

۴ یک ردیف معین و نامتناهی از انرژی حاصل می شود

۱۲- چند گره در هر تراز انرژی ذره در جعبه یک بعدی وجود دارد؟

$$n(n-1) \quad .۴$$

$$n^2 \quad .۳$$

$$n-1 \quad .۲$$

$$n \quad .۱$$

۱۳- کدام یک از گزینه های زیر در مورد حالت ایستا صحیح نیست؟

۱ عدم قطعیت در انرژی یک حالت ایستا صفر است

۲ تمام مشاهده پذیرهای سیستم دارای مقادیر قابل اندازه گیری ثابت هستند

۳ خطا در یک مقدار قابل انتظار یک کمیت فیزیکی نامعین است

۴ احتمال نسبت به مقدار قابل انتظار، خطا و نامعینی با زمان تغییر نمی کند

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۲۰ تشریحی: ۰

سری سوال: ۱ یک

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/کد درس: شیمی (محض)، شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی (کاربردی) (۱۱۴۰۲۷)

۱۴- کدام تراز انرژی در مثال ذره در جعبه یک بعدی ۱۶ برابر انرژی حالت پایه است؟

۱. ۲ ۲. ۳ ۳. ۴ ۴. ۵

۱۵- اگر فرض شود بتوان الکترون در جاذبه هسته را بصورت ذره در جعبه یک بعدی در نظر گرفت، سرعت الکترون در

جعبه ای به طول 1 \AA (10^{-8} m) در تراز اول چقدر است؟ $h = 6.626 \times 10^{-34} \text{ Js}$ و

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

۱. $36.37 \times 10^3 \text{ ms}^{-1}$ ۲. 36.37 ms^{-1}

۳. $145.42 \times 10^3 \text{ ms}^{-1}$ ۴. 145.42 ms^{-1}

۱۶- تعداد حالت‌های هم‌تراز با اعداد کوانتومی ۱ و ۲ و ۳ در مسئله ذره در جعبه مکعبی چند است؟

۱. ۱ ۲. ۳ ۳. ۶ ۴. ۴

۱۷- کدام گزینه از نتایج ذره در جعبه مکعبی نمی باشد؟

۱. در حد اعداد کوانتومی بزرگ سیستم به حالت های کلاسیکی یا آزاد انرژی می رسد

۲. ترازهای انرژی با افزایش عدد کوانتومی متراکم تر می شوند

۳. ترازهای انرژی فاقد ترتیب منظمی است و در محدوده هایی تجمع وجود دارد

۴. ترازهای انرژی چند حالتی است

۱۸- فرکانس ارتعاشی نوسانگر هماهنگ کدام مورد زیر است؟

۱. $\frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{\hbar}{m}}$ ۲. $\frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{m}}$ ۳. $\frac{h}{\pi} \sqrt{\frac{k}{m}}$ ۴. $\frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{2k}{m}}$

۱۹- فاصله بین ترازهای انرژی نوسانگر هماهنگ کدام است؟

۱. $(v + \frac{1}{2})\hbar\omega_0$ ۲. $v\hbar\omega_0$ ۳. $\hbar\omega_0$ ۴. $\frac{1}{2}\hbar\omega_0$

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۲۰ تشریحی: ۰

سری سوال: ۱ یک

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/کد درس: شیمی (محض)، شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی (کاربردی) (۱۱۱۴۰۲۷)

۲۰- کدام مورد نشان دهنده متعامد بودن توابع ویژه عملگر \hat{H} می باشد؟

۱. $\int_{-\infty}^{\infty} \psi_i^* \psi_j d\tau = 1 \quad (i \neq j)$

۲. $\int_{-\infty}^{\infty} \psi_i^* \psi_j d\tau = 1 \quad (i = j)$

۳. $\int_{-\infty}^{\infty} \psi_i^* \psi_j d\tau = 0 \quad (i = j)$

۴. $\int_{-\infty}^{\infty} \psi_i^* \psi_j d\tau = 0 \quad (i \neq j)$

۲۱- کدام یک از مشاهده پذیرهای زیر در تراز پایه مسئله ذره در جعبه یک بعدی درست است؟

۱. $\langle p_x \rangle = 0, \langle x \rangle = 0$

۲. $\langle p_x \rangle = 0, \langle x \rangle \neq 0$

۳. $\langle p_x \rangle \neq 0, \langle x \rangle = 0$

۴. $\langle p_x \rangle \neq 0, \langle x \rangle \neq 0$

۲۲- فرکانس ارتعاشی $H^{35}Cl$ cm^{-1} ۲۹۸۸ می باشد، فرکانس ارتعاشی $D^{35}Cl$ چقدر است؟

۱. ۲۱۴۲

۲. ۱۰۷۱

۳. ۲۹۸۸

۴. ۱۹۹۴

۲۳- ضریب نرمال شدن تابع موج $\psi(\phi) = N \exp(im\phi)$ برای چرخنده صلب در صفحه کدام است؟

۱. $1/\pi L$

۲. $2/L$

۳. $1/2\pi$

۴. $1/\sqrt{2\pi}$

۲۴- تابع ویژه کدام یک از عملگرهای زیر است؟ $\psi(\phi) = N \exp(im\phi)$

۱. \hat{H}

۲. \hat{L}_z, \hat{L}^2

۳. \hat{H}, \hat{L}^2

۴. $\hat{H}, \hat{L}^2, \hat{L}_z$

۲۵- کدام گزینه زیر در رابطه با عملگرهای تکانه زاویه ای در سه بعد صحیح نمی باشد؟

۱. $\hat{L}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y$

۲. $\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$

۳. $\hat{L}_x \hat{L}_y - \hat{L}_y \hat{L}_x = \hat{L}_z$

۴. $\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right)$

۲۶- تعداد حالت های همتراز در چرخنده صلب سه بعدی چند تا است؟

۱. $2J + 1$

۲. $2J$

۳. $J(J + 1)$

۴. ۲

تعداد سوالات: تستی: ۴۰: تشریحی: ۰

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۲۰: تشریحی: ۰

سری سوال: ۱ یک

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/کد درس: شیمی (محض)، شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی (کاربردی) (۱۱۴۰۲۷)

۲۷- در هر اتم تک الکترونی حالت‌های هم‌تراز در تراز n ام چند تا است؟

۱. ۱ ۲. n ۳. n^2 ۴. $n(n-1)$

۲۸- انرژی He^+ در حالت $3p$ نسبت به انرژی حالت $1s$ اتم هیدروژن کدام است؟

۱. با هم برابرند ۲. چهار برابر انرژی اتم هیدروژن

۳. $\frac{1}{9}$ ۴. $\frac{1}{4}$
۹ انرژی اتم هیدروژن ۹ انرژی اتم هیدروژن

۲۹- برای Li^{2+} بزرگترین مولفه محور z تکانه زاویه ای اوربیتالی در حالت $n=3$ کدام است؟

۱. $2\hbar$ ۲. $\sqrt{2}\hbar$ ۳. $\sqrt{12}\hbar$ ۴. $3\hbar$

۳۰- مقدار قابل انتظار $\langle r \rangle$ در حالت $\psi_{1s} = \frac{\alpha^{3/2}}{\sqrt{\pi}} \exp(-\alpha r)$ برای اتم هیدروژن کدام است؟ ($\alpha = Z/a_0$)

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

۱. a_0/Z ۲. $3a_0/2Z$

۳. $5a_0/16Z(Z+1)$ ۴. $9a_0^2/15Z^2$

۳۱- محتملترین فاصله الکترون از هسته در حالت $1s$ اتم هیدروژن کدام است؟

۱. a_0/Z ۲. $3a_0/2Z$

۳. $5a_0/16Z(Z+1)$ ۴. $9a_0^2/15Z^2$

۳۲- در حالت p اتم هیدروژن اعداد کوانتومی تکانه زاویه ای کل الکترونی کدام است؟

۱. $\frac{1}{2}$ و صفر ۲. ۱ و صفر ۳. $\frac{3}{2}$ و $\frac{1}{2}$ ۴. $\frac{5}{2}$ و $\frac{3}{2}$

۳۳- با بکار بردن یک تابع آزمون برای اتم هیدروژن $E' = 3\alpha/2 - 2(2\alpha/\pi)^{1/2}$ بدست می آید. با می نیمم

سازی این تابع مقدار انرژی چند الکترون ولت است؟ (۱ هارتری = $27/21$ الکترون ولت)

۱. $-13/56$ ۲. $-8/31$ ۳. $-21/27$ ۴. $-11/53$

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۲۰ تشریحی: ۰

سری سوال: ۱ یک

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/کد درس: شیمی (محض)، شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی (کاربردی) (۱۱۱۴۰۲۷)

۳۴- کدام جمله صحیح نیست؟

۱. تابع موج هسته اتمهای با عدد جرمی فرد بوزون هستند
۲. همه ذره های با اسپین صفر یا عدد صحیح تابع موج متقارن دارند
۳. همه ذره های با اسپین نیمه صحیح تابع موج ضد متقارن دارند
۴. تابع موج یک منظومه چند الکترونی نسبت به جابجایی هر دو الکترون ضد متقارن است

۳۵- ضریب نرمال سازی یک دترمینان اسلیتر N الکترونی کدام است؟

۱. $1/\sqrt{N}$
۲. $1/N!$
۳. $1/\sqrt{N!}$
۴. $1/N$

۳۶- انرژی کل سیستم مزدوج او ۳- بوتادی ان چقدر است؟

$$E_1 = \alpha + 1.618\beta, E_2 = \alpha - 0.618\beta, E_3 = \alpha + 0.618\beta, E_4 = \alpha - 1.618\beta$$

۱. $2\alpha + 3.336\beta$
۲. $4\alpha + 4.472\beta$
۳. صفر
۴. $2\alpha + 1.236\beta$

۳۷- کدامیک از موارد زیر از تقریبهای نظریه هوکل نمی باشد؟

۱. اوربیتالهای مولکولی تک الکترونی مناسب، با روش اختلال تعیین می شوند
۲. تابع موج مولکول به دو فاکتور، پیوندهای سیگما و پیوندهای سیستم π تقسیم می شود
۳. تابع توصیف کننده سیستم π بصورت دترمینانی از اوربیتالهای تک الکترونی تعریف می شود
۴. انتگرالهای همپوشانی S_{ij} وقتی $i \neq j$ باشد صفر و برای $i = j$ یک فرض می شود

۳۸- کدام مورد زیر درباره انرژی اتم هیدروژن مانند صحیح نیست؟

۱. $E = \langle V \rangle / 2$
۲. $T = -\langle V \rangle / 2$
۳. $T = \langle V \rangle / 2$
۴. $E = \langle T \rangle + \langle V \rangle$

۳۹- در تقریب هوکل کدام گزینه در مورد انتگرال تبادل صحیح است؟

۱. $H_{11} = H_{22} = \beta$
۲. $H_{12} = H_{23} = \alpha$
۳. $H_{11} = H_{22} = 1$
۴. $H_{12} = H_{23} = \beta$

۴۰- نمایش ماتریسی تابع اسپینی β کدام است؟

۱. $\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$
۲. $\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$
۳. $\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$
۴. $\begin{bmatrix} 0 & i \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$

www.salampnu.com

سایت مرجع دانشجوی پیام نور

- ✓ نمونه سوالات پیام نور : بیش از ۱۱۰ هزار نمونه سوال همراه با پاسخنامه
- تستی و تشریحی
- ✓ کتاب ، جزوه و خلاصه دروس
- ✓ برنامه امتحانات
- ✓ منابع و لیست دروس هر ترم
- ✓ دانلود کاملاً رایگان بیش از ۱۴۰ هزار فایل مختص دانشجویان پیام نور

www.salampnu.com

www.ShimiPedia.ir

تعداد سوالات: تستی: ۴۰: تشریحی: ۰

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۲۰: تشریحی: ۰

سری سوال: یک ۱

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/کد درس: شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی (کاربردی)، شیمی گرایش محض ۱۱۴۰۲۷

۱- کدام عبارت زیر بیانگر دامنه احتمال است؟

۱. Ψ ۲. Ψ^2 ۳. $|\Psi^2|$ ۴. $\Psi\Psi^*$

۲- اگر منظومه ای متشکل از دو ذره متحرک در فضای سه بعدی باشد تابع موج این مجموعه تابع چند متغیر است؟

۱. ۳ ۲. ۴ ۳. ۶ ۴. ۷

۳- حاصل اثر اپراتور \hat{D}_x بر تابع $\sin x$ کدام گزینه زیر است؟

۱. $x \sin x$ ۲. $\cos x$ ۳. $x \cos x$ ۴. $-\sin x$

۴- برای یک منظومه تک ذره ای اپراتور انرژی جنبشی کدام گزینه زیر است؟

۱. $\frac{1}{2} m P_x^2$ ۲. $-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2$ ۳. $\frac{1}{2} m x^2$ ۴. $\frac{1}{2} m \nabla^2$

۵- e^{ax} تابع ویژه اپراتور \hat{D}_x با مقدار ویژه است.

۱. ae^{ax} ۲. ax ۳. a ۴. x

۶- مقدار مشاهده پذیر a که اپراتور وابسته به آن \hat{A} است در حالت نرمال $\Psi(r, t)$ کدام گزینه زیر است؟

۱. $\langle a \rangle = \int \Psi^* \hat{A} \Psi dv$ ۲. $\langle a \rangle = \int \Psi^* \Psi dv$ ۳. $\langle a \rangle = \int \hat{A} \Psi dv$ ۴. $\langle a \rangle = \int \hat{A} \Psi^* dv$

۷- قسمت زمانی تابع حالت ذره در جعبه یک بعدی به کدام شکل زیر است؟

۱. $\phi(t) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin \frac{n\pi x}{l}$ ۲. $\phi(t) = \sqrt{\frac{l}{2\pi}} \sin \frac{nx}{l}$
۳. $\phi(t) = e^{-iEt/\hbar}$ ۴. $\phi(t) = \sqrt{\frac{l}{2}} \sin \frac{n\pi x}{l} e^{-iEt/\hbar}$

۸- انرژی ذره در چه حالتی پیوسته است؟

۱. ذره در جعبه سه بعدی ۲. ذره در جعبه دو بعدی
۳. ذره در جعبه یک بعدی ۴. ذره آزاد

۹- اگر انرژی یک ذره آزاد به جرم m به اندازه E باشد؛ تکانه در راستای x از کدام رابطه زیر به دست می آید؟

۱. $2mE$ ۲. $\sqrt{2mE}$ ۳. $\sqrt{\frac{\hbar^2}{2mE}}$ ۴. $\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۲۰ تشریحی: ۰

سری سوال: ۱ یک

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/کد درس: شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی (کاربردی)، شیمی گرایش محض ۱۱۱۴۰۲۷

۱۰- مقادیر مجاز انرژی ذره ای به جرم m در جعبه یک بعدی به طول L از کدام رابطه زیر به دست می آید؟

۱. $\frac{n^2 \hbar^2}{8mL^2}$ ۲. $\frac{n^2 h^2}{8mL^2}$ ۳. $\frac{n^2 \pi^2 h^2}{8mL^2}$ ۴. $\frac{8mL^2}{n^2 \pi^2 h^2}$

۱۱- در مثال ذره در جعبه یک بعدی کوچکترین مقدار برای عدد کوانتومی n کدام است؟

۱. $-\infty$ ۲. ۰ ۳. ۱ ۴. ۲

۱۲- در مثال ذره در جعبه یک بعدی در کدام حالت زیر به حد پیوستگی انرژی نزدیک می شویم؟

۱. افزایش جرم ذره و کاهش طول جعبه
۲. افزایش جرم ذره و طول جعبه
۳. کاهش جرم ذره و طول جعبه
۴. کاهش جرم ذره و افزایش طول جعبه

۱۳- چند حالت کوانتومی هم انرژی به دومین تراز انرژی ذره در جعبه سه بعدی مربوط می شود؟

۱. ۱ ۲. ۲ ۳. ۳ ۴. ۴

۱۴- کدام یک از گزینه های زیر از شرایط لازم برای توابع ویژه قابل قبول اپراتور هامیلتونی نیست؟

۱. نرمال بودن ۲. نامتعامل بودن ۳. هرمیتی بودن ۴. خطی بودن

۱۵- اختلاف انرژی بین سومین و چهارمین تراز در نوسانگر هارمونیک چقدر است؟ (V_0 فرکانس مشخصه سیستم است).

۱. $4hV_0$ ۲. $3hV_0$ ۳. $\frac{1}{2}hV_0$ ۴. hV_0

۱۶- انرژی نقطه صفر در حرکت ارتعاشی چقدر است؟ (V_0 فرکانس مشخصه سیستم است).

۱. $\frac{1}{2}hV_0$ ۲. hV_0 ۳. $\frac{1}{2}hV_0$ ۴. hV_0

۱۷- با چه شرطی یک تابع می تواند تابع ویژه دو اپراتور باشد؟

۱. دو اپراتور با هم جابجایی پذیر باشند.
۲. دو اپراتور هرمیتی باشند.
۳. تابع نرمال باشد.
۴. تابع حقیقی باشد.

۱۸- مؤلفه x تکانه زاویه ای از کدام رابطه زیر به دست می آید؟ (p تکانه خطی است).

۱. $L_x = xp_y - yp_x$ ۲. $L_x = xp_z - zp_y$ ۳. $L_x = yp_z - zp_y$ ۴. $L_x = zp_y - yp_z$

تعداد سوالات: تستی: ۴۰: تشریحی: ۰

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۲۰: تشریحی: ۰

سری سوال: ۱: یک

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/کد درس: شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی (کاربردی)، شیمی گرایش محض ۱۱۱۴۰۲۷

۱۹- کدام عبارت زیر در مورد رابطه بین مؤلفه های اپراتور تکانه زاویه صحیح است؟

$$\begin{aligned} \hat{L}_x \hat{L}_y - \hat{L}_y \hat{L}_x &= \hat{L}_z \quad .2 & \hat{L}_x \hat{L}_y - \hat{L}_y \hat{L}_x &= -\hbar^2 \hat{L}_z \quad .1 \\ \hat{L}_x \hat{L}_y - \hat{L}_y \hat{L}_x &= -i\hbar^2 \quad .4 & \hat{L}_x \hat{L}_y - \hat{L}_y \hat{L}_x &= i\hbar \hat{L}_z \quad .3 \end{aligned}$$

۲۰- کمیت‌های وابسته به کدام دو اپراتور زیر را می توان به طور همزمان اندازه گیری کرد؟

$$\hat{L}_x, \hat{L}_z \quad .4 \quad \hat{L}_x, \hat{L}_y \quad .3 \quad \hat{p}_x, \hat{x} \quad .2 \quad \hat{L}_x, \hat{H} \quad .1$$

۲۱- مؤلفه z تکانه زاویه ای با کدام عبارت زیر معادل است؟

$$\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi} \quad .4 \quad \hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \cos \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \quad .3 \quad \hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \quad .2 \quad \hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} \quad .1$$

۲۲- به هر مقدار از انرژیهای مجاز کوانتومی سیستم چرخنده صلب سه بعدی چند حالت وابسته است؟ (J شماره تراز انرژی است.)

$$J(2J+1) \quad .4 \quad J(J+1) \quad .3 \quad 2J+1 \quad .2 \quad J+1 \quad .1$$

۲۳- در مثال چرخنده صلب سه بعدی انرژی حالت پایه چرخشی چقدر است؟ (I ممان اینرسی مولکول است.)

$$\frac{I}{2\hbar^2} \quad .4 \quad \frac{\hbar^2}{2I} \quad .3 \quad \frac{\hbar^2}{2i} \quad .2 \quad 0 \quad .1$$

۲۴- انرژی الکترونی تراز nام اتم هیدروژن چه رابطه ای با شماره تراز دارد؟

$$E_n \propto \frac{1}{n} \quad .4 \quad E_n \propto n \quad .3 \quad E_n \propto \frac{1}{n^2} \quad .2 \quad E_n \propto n^2 \quad .1$$

۲۵- در مساله اتم هیدروژن به ازای هر عدد کوانتومی اصلی n چه تعداد جواب برای معادله شرودینگر خواهیم داشت؟

$$\frac{n}{2} \quad .4 \quad n^2 \quad .3 \quad n \quad .2 \quad 1 \quad .1$$

۲۶- کدام عبارت زیر تابع توزیع شعاعی اتم هیدروژن را به درستی نشان می دهد؟

$$P(r) = 4\pi r^2 R^2(r) dr \quad .2 \quad P(r) = R^2(r) dr \quad .1 \\ P(r) = 4\pi r^2 R^2(r) \quad .4 \quad P(r) = R^2(r) \quad .3$$

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۲۰ تشریحی: ۰

سری سوال: ۱ یک

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/کد درس: شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی (کاربردی)، شیمی گرایش محض ۱۱۱۴۰۲۷

۲۷- اولین خط طیفی سری بالمر مربوط به کدام جهش الکترونی است؟

۱. از تراز شماره ۳ به تراز شماره ۲
۲. از تراز شماره ۳ به تراز شماره ۱
۳. از تراز شماره ۱ به تراز شماره ۳
۴. از تراز شماره ۲ به تراز شماره ۳

۲۸- ممان مغناطیسی اتم هیدروژن از کدام رابطه زیر پیروی می کند؟

۱. $\mu = -\frac{e}{2m_e} \bar{L}$ ۲. $\mu = \frac{e\hbar}{2m_e}$ ۳. $\mu = \frac{e\hbar}{2m_e} l(l+1)$ ۴. $\mu = -\frac{e\hbar}{2m_e} l(l+1)$

۲۹- مؤلفه Z تکانه زاویه اسپین با کدام گزینه زیر تعیین می شود؟ (m_s عدد کوانتومی اسپین است.)

۱. $s_z = \pm \frac{1}{2}$ ۲. $s_z = m_s \hbar$ ۳. $s_z = \sqrt{s(s+1)} \hbar$ ۴. $s_z = s(s+1) \hbar$

۳۰- تکانه زاویه ای کل (\bar{J}) چه نسبتی با تکانه اوربیتالی (\bar{L}) و تکانه اسپین (\bar{S}) دارد؟

۱. $\bar{J} = |\bar{L} + \bar{S}|$ ۲. $\bar{J} = |\bar{L} - \bar{S}|$ ۳. $\bar{J} = \bar{L} + \bar{S}$ ۴. $\bar{J} = \bar{L} - \bar{S}$

۳۱- طبق قضیه تغییر پارامترها هر گاه کوچکترین مقدار ویژه هامیلتونی یک منظومه E_0 و تابع ویژه مربوطه ψ_0 باشد، با هر

تابع نرمال Φ غیر از ψ_0 خواهیم داشت:

۱. $\int \psi^* \hat{H} \Phi d\tau \geq E_0$ ۲. $\int \Phi^* \hat{H} \psi d\tau \leq E_0$ ۳. $\int \Phi^* \hat{H} \Phi d\tau \geq E_0$ ۴. $\int \Phi^* \hat{H} \Phi d\tau \leq E_0$

۳۲- هامیلتونی اختلال در مسأله اتم هلیم مربوط به کدام گزینه زیر است؟

۱. دافعه الکترونها
۲. مجموع دافعه الکترونها و جاذبه الکترونها-هسته
۳. جاذبه الکترونها و هسته
۴. حرکت الکترونها

۳۳- بار مؤثر هسته در تقریب اسلیتر از کدام رابطه زیر به دست می آید؟ (Z بار هسته، b ضریب حایل و n شماره تراز اصلی می باشند.)

۱. $Z^* = (Z + nb)$ ۲. $Z^* = n(Z - b)$ ۳. $Z^* = Z - nb$ ۴. $Z^* = Z - b$

۳۴- چه ذراتی دارای تابع موج متقارن می باشند؟

۱. ذرات دارای اسپین صفر
۲. ذرات دارای اسپین عدد صحیح
۳. ذرات دارای اسپین نیمه صحیح
۴. ذرات دارای اسپین صفر یا عدد صحیح

سری سوال: ۱ یک

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۲۰ تشریحی: ۰

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/کد درس: شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی (کاربردی)، شیمی گرایش محض ۱۱۱۴۰۲۷

۳۵- دترمینان اسلیتر کدام شرط را برای تابع موج کلی سیستم محقق می سازد؟

۱. متقارن بودن ۲. ضد متقارن بودن ۳. هرمیتی بودن ۴. خطی بودن

۳۶- کدام گزینه زیر در مورد نظریه هوکل صحیح نیست؟

۱. یک روش تقریبی است. ۲. یک روش نیمه تجربی است.
۳. برای پیوندهای یگانه کاربرد دارد. ۴. بر پایه نظریه MO-LCAO بنا شده است.

۳۷- در تقریب هوکل برای اجرای روش تغییر پارامترها، مقدار انتگرال همپوشانی S_{ij} چند فرض می شود؟

۱. ۰
۲. ۱
۳. برای اتمهای همسایه مقدار مشخص و برای اتمهایی که با فاصله از هم قرار گرفته اند صفر است.
۴. برای اتمهای همسایه صفر و برای اتمهایی که با فاصله از هم قرار گرفته اند مقدار مشخص دارد.

۳۸- انرژی الکترونیهای π هر مولکول اتیلن 2β و انرژی سیستم π بنزن 8β است. انرژی عدم استقرار بنزن کدام است؟

۱. β ۲. 2β ۳. 4β ۴. 6β

۳۹- کدام گزینه زیر مطابق با اصل فرانک-کوندون است؟

۱. به هنگام جذب تابش انرژی پتانسیل مولکول ثابت است.
۲. به هنگام جذب تابش انرژی جنبشی مولکول به شدت تغییر می کند.
۳. به هنگام جذب تابش جهش الکترونی-ارتعاشی طوری روی می دهد که فاصله بین هسته ها تغییر چندانی نکند.
۴. به هنگام جذب تابش انرژی جنبشی و پتانسیل مولکول به شدت تغییر می کند.

۴۰- طبق قضیه کوپمان انرژیهای یونش قائم برابرند با:

۱. انرژیهای اوربیتالی که با روش هارتری-فوک تعیین می شوند.
۲. منفی انرژیهای اوربیتالی که با روش هارتری-فوک تعیین می شوند.
۳. انرژیهای بدست آمده برای اتمهای هیدروژن و هیدروژن مانند
۴. منفی انرژیهای بدست آمده برای اتمهای هیدروژن و هیدروژن مانند

| شماره سوال | الف | ب | ج | د | پاسخ صحيح | وضعت کلید |
|------------|-----|---|---|-----|-----------|-----------|
| 1 | | | X | الف | | عادي |
| 2 | | | X | د | | عادي |
| 3 | X | | | ب | | عادي |
| 4 | X | | | ب | | عادي |
| 5 | | X | | ج | | عادي |
| 6 | X | | | الف | | عادي |
| 7 | | X | | ج | | عادي |
| 8 | | | X | د | | عادي |
| 9 | X | | | ب | | عادي |
| 10 | X | | | ب | | عادي |
| 11 | | X | | ج | | عادي |
| 12 | | X | | ب | | عادي |
| 13 | | | X | ج | | عادي |
| 14 | | X | | ب | | عادي |
| 15 | | | X | د | | عادي |
| 16 | | X | | ج | | عادي |
| 17 | X | | | الف | | عادي |
| 18 | | X | | ج | | عادي |
| 19 | X | | | ج | | عادي |
| 20 | X | | | الف | | عادي |
| 21 | X | | | د | | عادي |
| 22 | X | | | ب | | عادي |
| 23 | X | | | الف | | عادي |
| 24 | X | | | ب | | عادي |
| 25 | | X | | ج | | عادي |
| 26 | | X | | د | | عادي |
| 27 | | | X | الف | | عادي |
| 28 | X | | | الف | | عادي |
| 29 | X | | | ب | | عادي |
| 30 | X | | | ج | | عادي |
| 31 | X | | | ج | | عادي |
| 32 | | | X | الف | | عادي |
| 33 | | X | | د | | عادي |
| 34 | X | | | د | | عادي |
| 35 | | | X | ب | | عادي |
| 36 | | X | | ج | | عادي |
| 37 | X | | | الف | | عادي |
| 38 | | | X | ب | | عادي |
| 39 | | X | | ج | | عادي |
| 40 | X | | | ب | | عادي |



www.ShimiPedia.ir

free download pnu pdf file from www.salampnu.com

www.salampnu.com

سایت مرجع دانشجوی پیام نور

- ✓ نمونه سوالات پیام نور : بیش از ۱۱۰ هزار نمونه سوال همراه با پاسخنامه
- تستی و تشریحی
- ✓ کتاب ، جزوه و خلاصه دروس
- ✓ برنامه امتحانات
- ✓ منابع و لیست دروس هر ترم
- ✓ دانلود کاملاً رایگان بیش از ۱۴۰ هزار فایل مختص دانشجویان پیام نور

www.salampnu.com

www.ShimiPedia.ir

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۲۰ تشریحی: ۰

سری سوال: یک ۱

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/گد درس: شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی (کاربردی)، شیمی گرایش محض ۱۱۱۴۰۲۷

استفاده از ماشین حساب مهندسی مجاز است

۱- کدام یک از گزینه های زیر از شرایط لازم برای یک تابع حالت قابل قبول کوانتومی نیست؟

۱. یک تابع پیوسته باشد.
۲. همواره محدود و معین باشد.
۳. یک تابع تک مقداری باشد.
۴. یک تابع زوج باشد.

۲- حاصل تأثیر اوپراتورهای $\hat{x} + \hat{D}_x$ بر روی تابع $x^2 + 1$ کدام است؟

۱. $2x$ ۲. $x^3 + x$ ۳. $x^3 + 3x$ ۴. $x^3 - x$

۳- کدام اپراتور زیر غیرخطی است؟

۱. $\sqrt{\quad}$ ۲. \hat{D}_x^2 ۳. \hat{D}_x ۴. \hat{x}

۴- اپراتور وابسته به هر کمیت فیزیکی مشاهده پذیر باید چه شرط یا شرایطی داشته باشد؟

۱. خطی بودن
۲. هرمیتیک بودن
۳. خطی و هرمیتیک بودن
۴. خطی و جمع پذیر بودن

۵- کدام گزینه زیر اپراتور انرژی جنبشی یک منظومه تک ذره ای را نشان می دهد؟

۱. $\frac{\hbar}{m^2} \nabla^2$ ۲. $-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2$ ۳. $\frac{1}{2} k\hat{x}^2$ ۴. $-\frac{1}{2} k\hat{x}$

۶- مقدار ویژه اپراتور \hat{D}_x^2 وقتی که بر تابع $\sin ax$ اثر می کند، چقدر است؟

۱. $-a^2$ ۲. $-a^2 \sin ax$ ۳. $\sin ax$ ۴. $a^2 \sin ax$

۷- برای حرکت ذره در جعبه یک بعدی به طول L ، مقدار قابل انتظار اندازه حرکت در راستای x (P_x) چقدر است؟

۱. $\sin^2\left(\frac{\pi x}{L}\right)$ ۲. $\sqrt{2mE}$ ۳. 0 ۴. $\frac{1}{2} \sin^2\left(\frac{\pi x}{L}\right)$

۸- کدام عبارت زیر می تواند بیانگر قسمت زمانی تابع موج باشد؟

۱. $\phi(t) = \cos\left(\frac{iEt}{\hbar}\right)$ ۲. $\phi(t) = \sin\left(\frac{iEt}{\hbar}\right)$ ۳. $\phi(t) = e^{iEt/\hbar}$ ۴. $\phi(t) = e^{-iEt/\hbar}$

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۲۰ تشریحی: ۰

سری سوال: ۱ یک

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/گد درس: شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی (کاربردی)، شیمی گرایش محض ۱۱۴۰۲۷

۹- میانگین x^2 ها از چه رابطه ای به دست می آید؟

$$\langle x^2 \rangle = \int_0^{+\infty} \Psi^*(x,t)x^2\Psi(x,t)dx \quad .2 \qquad \langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x,t)x^2\Psi(x,t)dx \quad .1$$

$$\langle x^2 \rangle = \left(\int_0^{+\infty} \Psi^*(x,t)x\Psi(x,t)dx \right)^2 \quad .4 \qquad \langle x^2 \rangle = \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x,t)x\Psi(x,t)dx \right)^2 \quad .3$$

۱۰- انرژی مربوط به اولین تراز انرژی در مثال ذره ای به جرم m در جعبه یک بعدی به طول L چقدر است؟

۰ .۱ ۱ .۲ $\frac{h^2}{8mL^2}$.۳ $\frac{\pi^2 h^2}{8mL^2}$.۴

۱۱- تابعی از x که علامت آن با تغییر x به $-x$ عوض نمی شود، از چه نوعی است؟

زوج .۱ فرد .۲ متقارن .۳ هرمیتیک .۴

۱۲- در مثال ذره در جعبه سه بعدی دومین تراز انرژی چندحالتی است؟ (از چند حالت همتراز تشکیل شده است؟)

۱ .۱ ۲ .۲ ۳ .۳ ۴ .۴

۱۳- نتایج ویژه قابل قبول اپراتور هامیلتونی بایستی متعلق به چه نوع مجموعه ای باشند؟

مجموعه ای نرمال شده .۱ مجموعه ای متعامد .۲
مجموعه ای ارتونرمال .۳ مجموعه ای ارتوگونال .۴

۱۴- فرکانس مشخصه یک نوسانگر به جرم m و ثابت فنر k کدام است؟

$\frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{m}}$.۱ $\sqrt{\frac{k}{2\pi m}}$.۲ $\sqrt{\frac{2\pi m}{k}}$.۳ $\frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{m}{k}}$.۴

۱۵- فاصله بین ترازهای انرژی در چه نوع سیستمهایی برابر است؟

نوسانگر هارمونیک .۱ نوسانگر غیرهارمونیک .۲
ذره در جعبه یک بعدی .۳ ذره در جعبه سه بعدی .۴

۱۶- سومین تراز انرژی در مدل نوسانگر هارمونیک چند حالتی است؟

یک حالتی .۱ سه حالتی .۲ شش حالتی .۳ هفت حالتی .۴

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۲۰ تشریحی: ۰

سری سوال: ۱ یک

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/گد درس: شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی (کاربردی)، شیمی گرایش محض ۱۱۴۰۲۷

۱۷- انرژی تراز m ام یک چرخنده صلب با ممان اینرسی I در فضای سه بعدی از کدام رابطه زیر به دست می آید؟

$$E_m = \frac{\hbar^2}{2I} m(m+1) \quad .4 \quad E_m = \frac{m^2 \hbar^2}{2I} \quad .3 \quad E_m = \frac{m(m+1)}{2I} \quad .2 \quad E_m = \frac{m^2(m+1)}{2I} \quad .1$$

۱۸- دو اپراتور بایستی چه خاصیتی داشته باشند تا دارای دنباله مشترکی از توابع ویژه باشند؟

۱. باید هرمیتی باشند
۲. باید با یکدیگر جابجاپذیر باشند
۳. باید اورتونرمال باشند
۴. باید ارتوگونال باشند

۱۹- کدام دو اپراتور زیر با یکدیگر جابجاپذیرند؟

$$\hat{p}_x, \hat{x} \quad .2 \quad \hat{L}^2, \hat{L}_y \quad .3 \quad \hat{L}_x, \hat{L}_y \quad .4 \quad \hat{p}_x, \hat{x}^2 \quad .1$$

۲۰- در مختصات قطبی، مختصه z اپراتور تکانه زاویه ای، تابع چه متغیر یا متغیرهایی است؟

$$r \quad .1 \quad r, \theta \quad .2 \quad \phi \quad .3 \quad r, \theta, \phi \quad .4$$

۲۱- به هر تراز انرژی با شماره m ، تعداد حالت وابسته است.

$$2m^2 + 1 \quad .1 \quad 2(m+1) \quad .2 \quad 2m \quad .3 \quad 2m+1 \quad .4$$

۲۲- جرم کاسنه مولکول CO، 1.1×10^{-26} کیلوگرم و فاصله دو اتم در حالت پایه 1.1×10^{-10} متر است. ممان اینرسی این مولکول چقدر است؟

$$1.4 \times 10^{-47} \quad .1 \quad 1.3 \times 10^{-46} \quad .2 \quad 7.55 \times 10^{-23} \quad .3 \quad 2.63 \times 10^{-1} \quad .4$$

۲۳- انرژی الکترونی تراز n ام اتم هیدروژن چه نسبتی با شماره آن تراز دارد؟

$$E_n \propto n \quad .1 \quad E_n \propto n^2 \quad .2 \quad E_n \propto \frac{1}{n} \quad .3 \quad E_n \propto \frac{1}{n^2} \quad .4$$

۲۴- در اتم تک الکترونی در هر تراز انرژی به شماره n چند حالت همتراز پیش بینی شود؟

$$n \quad .1 \quad n^2 \quad .2 \quad 2n+1 \quad .3 \quad n^2+1 \quad .4$$

۲۵- کدام عبارت زیر نشان دهنده تابع توزیع شعاعی است؟

$$4\pi r^2 R(r) \quad .1 \quad 4\pi r R^2(r) \quad .2 \quad 4\pi r^2 R^2(r) \quad .3 \quad R^2(r) \quad .4$$

۲۶- اولین خط طیفی سری بالمر از چه جهش الکترونی حاصل می شود؟

$$n=3 \text{ به } n=2 \quad .1 \quad n=4 \text{ به } n=2 \quad .2$$

$$n=3 \text{ به } n=4 \quad .3 \quad n=2 \text{ به } n=4 \quad .4$$

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۲۰ تشریحی: ۰

سری سوال: ۱ یک

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/گد درس: شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی (کاربردی)، شیمی گرایش محض ۱۱۴۰۲۷

۲۷- رابطه عمومی بین تکانه زاویه ای و ممان مغناطیسی به چه شکل است؟

$$\bar{\mu} = \frac{1}{2m_e} \bar{L} \quad .۴$$

$$\bar{\mu} = -\frac{1}{2} \bar{L} \quad .۳$$

$$\bar{\mu} = -\frac{e}{2m_e} \bar{L} \quad .۲$$

$$\bar{\mu} = -\frac{2}{m_e} \bar{L} \quad .۱$$

۲۸- مقادیر ویژه اپراتور اسپین \hat{S}_z کدامند؟

$$\alpha, \beta \quad .۴$$

$$\pm \frac{1}{2} \quad .۳$$

$$\pm \frac{\hbar}{2} \quad .۲$$

$$-\frac{1}{2}\alpha, \frac{1}{2}\beta \quad .۱$$

۲۹- بر اساس قضیه تغییر پارامترها هرگاه کوچکترین مقدار ویژه هامیلتونی یک منظومه E_0 و تابع ویژه مربوط Ψ_0 باشد، با هر

تابع Φ غیر از Ψ_0 ، خواهیم داشت:

$$\int \Phi^* \hat{H} \Psi_0 \Phi d\tau \geq E_0 \quad .۴$$

$$\int \Phi^* \hat{H} \Psi_0 d\tau \geq E_0 \quad .۳$$

$$\int \Psi_0^* \hat{H} \Phi d\tau \geq E_0 \quad .۲$$

$$\int \Phi^* \hat{H} \Phi d\tau \geq E_0 \quad .۱$$

۳۰- در هامیلتونی اتم هلیوم جمله اختلال آور کدام است؟

۰۲ انرژی جنبشی الکترونها

۰۱ انرژی جنبشی هسته

۰۴ دافعه بین دو الکترون

۰۳ جاذبه بین الکترونها و هسته

۳۱- تابع موج مربوط به فوتون و هسته هلیوم به ترتیب از چه گروه تقارنی هستند؟

۰۲ متقارن- ضد متقارن

۰۱ ضد متقارن- متقارن

۰۴ ضد متقارن- ضد متقارن

۰۳ متقارن- متقارن

۳۲- ترکیب اسپین- اوربیتالها که درمینان اسلیتر نمایشگر آن است، است.

۰۴ الزاماً ضد متقارن

۰۳ الزاماً متقارن

۰۲ متقارن یا ضد متقارن

۰۱ متقارن یا نامتقارن

۳۳- در نظریه اوربیتال مولکولی هوکل، اوربیتالهای مولکولی تک الکترونی با استفاده از کدام روش زیر حاصل می شوند؟

۰۲ اختلال

۰۱ حل دقیق معادله شرودینگر

۰۴ اختلال و تغییر پارامترها

۰۳ تغییر پارامترها

۳۴- کدام گزینه زیر در مورد انتگرالهای تبادلی، H_{ij} ، در روش هوکل صحیح است؟

۰۲ برابر با انتگرالهای کولونی است.

۰۱ مقدار آنها جز برای دو اتم همسایه صفر است.

۰۴ برابر با انتگرالهای نرمال شدگی است.

۰۳ برابر با انتگرالهای همپوشانی است.

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۲۰ تشریحی: ۰

سری سوال: ۱ یک

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/گد درس: شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی (کاربردی)، شیمی گرایش محض ۱۱۴۰۲۷

۳۵- انرژی الکترونیهای π در مولکول بنزن 8β ، و انرژی الکترونیهای π مولکول اتیلن 2β است. انرژی عدم استقرار مولکول بنزن چقدر است؟

۱. 10β ۲. 6β ۳. 2β ۴. 4β

۳۶- اگر Ψ_i تابع موجی حالت آغازی، Ψ_j تابع موجی حالت پایانی و \hat{R} اپراتور ممان دوقطبی باشد، ممان الکتريکی جهش در جهشهای الکترونی از چه رابطه ای محاسبه می شود؟

۱. $\int \Psi_j^* \hat{R} \Psi_i d\tau$ ۲. $\int \Psi_j^* \Psi_i d\tau$ ۳. $\int \Psi_i^* \hat{R}^2 \Psi_j d\tau$ ۴. $\frac{1}{4\pi} \int \Psi_j^* \hat{R}^2 \Psi_i d\tau$

۳۷- طبق قضیه کوپمان انرژیهای یونش قائم با برابرند.

۱. انرژیهای اوربیتالی که به روش هارتری- فوک تعیین می شوند
۲. منفی انرژیهای اوربیتالی که به روش هارتری- فوک تعیین می شوند
۳. دو برابر انرژیهای اوربیتالی که به روش هارتری- فوک تعیین می شوند
۴. منفی دو برابر انرژیهای اوربیتالی که به روش هارتری- فوک تعیین می شوند

۳۸- کدام گزینه زیر در مورد طیف فوتوالکترونی مولکولی که در آن الکترون از یک اوربیتال درونی کنده شده باشد، صحیح نیست؟

۱. یون و مولکول هر دو در تراز ارتعاشی پایه هستند.
۲. منحنی انرژی پتانسیل یون نسبت به منحنی انرژی پتانسیل مولکول جابجایی عرضی زیادی ندارد.
۳. پیک یونش یک پیک باریک است.
۴. نوار فوتوالکترونی مربوط به این انتقال دارای ساختار ارتعاشی است.

۳۹- کدام مولکول زیر با استفاده از روش اوربیتال مولکولی هوکل قابل بررسی نیست؟

۱. بنزن ۲. سیکلوبوتان ۳. بوتادی ان ۴. نفتالن

۴۰- جابجا کردن دو سطر از دترمینان اسلیتر معادل است با

۱. انطباق دو الکترون
۲. تعویض مختصات دو الکترون
۳. حذف دو الکترون
۴. حذف همه الکترونها

www.salampnu.com

سایت مرجع دانشجوی پیام نور

- ✓ نمونه سوالات پیام نور : بیش از ۱۱۰ هزار نمونه سوال همراه با پاسخنامه
- تستی و تشریحی
- ✓ کتاب ، جزوه و خلاصه دروس
- ✓ برنامه امتحانات
- ✓ منابع و لیست دروس هر ترم
- ✓ دانلود کاملاً رایگان بیش از ۱۴۰ هزار فایل مختص دانشجویان پیام نور

www.salampnu.com

www.ShimiPedia.ir

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۲۰ تشریحی: ۰

سری سوال: یک ۱

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/گد درس: شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی (کاربردی)، شیمی گرایش محض ۱۱۱۴۰۲۷

استفاده از ماشین حساب مهندسی مجاز است

۱- کدام یک از گزینه های زیر از شرایط لازم برای یک تابع حالت قابل قبول کوانتومی نیست؟

۱. یک تابع پیوسته باشد.
۲. همواره محدود و معین باشد.
۳. یک تابع تک مقداری باشد.
۴. یک تابع زوج باشد.

۲- حاصل تأثیر اوپراتورهای $\hat{x} + \hat{D}_x$ بر روی تابع $x^2 + 1$ کدام است؟

۱. $2x$
۲. $x^3 + x$
۳. $x^3 + 3x$
۴. $x^3 - x$

۳- کدام اپراتور زیر غیرخطی است؟

۱. $\sqrt{\quad}$
۲. \hat{D}_x^2
۳. \hat{D}_x
۴. \hat{x}

۴- اپراتور وابسته به هر کمیت فیزیکی مشاهده پذیر باید چه شرط یا شرایطی داشته باشد؟

۱. خطی بودن
۲. هرمیتیک بودن
۳. خطی و هرمیتیک بودن
۴. خطی و جمع پذیر بودن

۵- کدام گزینه زیر اپراتور انرژی جنبشی یک منظومه تک ذره ای را نشان می دهد؟

۱. $\frac{\hbar}{m^2} \nabla^2$
۲. $-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2$
۳. $\frac{1}{2} k\hat{x}^2$
۴. $-\frac{1}{2} k\hat{x}$

۶- مقدار ویژه اپراتور \hat{D}_x^2 وقتی که بر تابع $\sin ax$ اثر می کند، چقدر است؟

۱. $-a^2$
۲. $-a^2 \sin ax$
۳. $\sin ax$
۴. $a^2 \sin ax$

۷- برای حرکت ذره در جعبه یک بعدی به طول L ، مقدار قابل انتظار اندازه حرکت در راستای x (P_x) چقدر است؟

۱. $\sin^2\left(\frac{\pi x}{L}\right)$
۲. $\sqrt{2mE}$
۳. 0
۴. $\frac{1}{2} \sin^2\left(\frac{\pi x}{L}\right)$

۸- کدام عبارت زیر می تواند بیانگر قسمت زمانی تابع موج باشد؟

۱. $\phi(t) = \cos\left(\frac{iEt}{\hbar}\right)$
۲. $\phi(t) = \sin\left(\frac{iEt}{\hbar}\right)$
۳. $\phi(t) = e^{iEt/\hbar}$
۴. $\phi(t) = e^{-iEt/\hbar}$

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۲۰ تشریحی: ۰

سری سوال: ۱ یک

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/گد درس: شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی (کاربردی)، شیمی گرایش محض ۱۱۴۰۲۷

۹- میانگین x^2 ها از چه رابطه ای به دست می آید؟

$$\langle x^2 \rangle = \int_0^{+\infty} \Psi^*(x,t)x^2\Psi(x,t)dx \quad .2 \qquad \langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x,t)x^2\Psi(x,t)dx \quad .1$$

$$\langle x^2 \rangle = \left(\int_0^{+\infty} \Psi^*(x,t)x\Psi(x,t)dx \right)^2 \quad .4 \qquad \langle x^2 \rangle = \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x,t)x\Psi(x,t)dx \right)^2 \quad .3$$

۱۰- انرژی مربوط به اولین تراز انرژی در مثال ذره ای به جرم m در جعبه یک بعدی به طول L چقدر است؟

۰ .۱ ۱ .۲ $\frac{h^2}{8mL^2}$.۳ $\frac{\pi^2 h^2}{8mL^2}$.۴

۱۱- تابعی از x که علامت آن با تغییر x به $-x$ عوض نمی شود، از چه نوعی است؟

زوج .۱ فرد .۲ متقارن .۳ هرمیتیک .۴

۱۲- در مثال ذره در جعبه سه بعدی دومین تراز انرژی چندحالتی است؟ (از چند حالت همتراز تشکیل شده است؟)

۱ .۱ ۲ .۲ ۳ .۳ ۴ .۴

۱۳- نتایج ویژه قابل قبول اپراتور هامیلتونی بایستی متعلق به چه نوع مجموعه ای باشند؟

مجموعه ای نرمال شده .۱ مجموعه ای متعامد .۲
مجموعه ای ارتونرمال .۳ مجموعه ای ارتوگونال .۴

۱۴- فرکانس مشخصه یک نوسانگر به جرم m و ثابت فنر k کدام است؟

$\frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{m}}$.۱ $\sqrt{\frac{k}{2\pi m}}$.۲ $\sqrt{\frac{2\pi m}{k}}$.۳ $\frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{m}{k}}$.۴

۱۵- فاصله بین ترازهای انرژی در چه نوع سیستمهایی برابر است؟

نوسانگر هارمونیک .۱ نوسانگر غیرهارمونیک .۲
ذره در جعبه یک بعدی .۳ ذره در جعبه سه بعدی .۴

۱۶- سومین تراز انرژی در مدل نوسانگر هارمونیک چند حالتی است؟

یک حالتی .۱ سه حالتی .۲ شش حالتی .۳ هفت حالتی .۴

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۲۰ تشریحی: ۰

سری سوال: ۱ یک

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/گد درس: شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی (کاربردی)، شیمی گرایش محض ۱۱۴۰۲۷

۱۷- انرژی تراز m ام یک چرخنده صلب با ممان اینرسی I در فضای سه بعدی از کدام رابطه زیر به دست می آید؟

$$E_m = \frac{\hbar^2}{2I} m(m+1) \quad .4 \quad E_m = \frac{m^2 \hbar^2}{2I} \quad .3 \quad E_m = \frac{m(m+1)}{2I} \quad .2 \quad E_m = \frac{m^2(m+1)}{2I} \quad .1$$

۱۸- دو اپراتور بایستی چه خاصیتی داشته باشند تا دارای دنباله مشترکی از توابع ویژه باشند؟

۱. باید هرمیتی باشند
۲. باید با یکدیگر جابجاپذیر باشند
۳. باید اورتونرمال باشند
۴. باید ارتوگونال باشند

۱۹- کدام دو اپراتور زیر با یکدیگر جابجاپذیرند؟

$$\hat{p}_x, \hat{x} \quad .2 \quad \hat{L}^2, \hat{L}_y \quad .3 \quad \hat{L}_x, \hat{L}_y \quad .4 \quad \hat{p}_x, \hat{x}^2 \quad .1$$

۲۰- در مختصات قطبی، مختصه z اپراتور تکانه زاویه ای، تابع چه متغیر یا متغیرهایی است؟

$$r \quad .1 \quad r, \theta \quad .2 \quad \phi \quad .3 \quad r, \theta, \phi \quad .4$$

۲۱- به هر تراز انرژی با شماره m ، تعداد حالت وابسته است.

$$2m^2 + 1 \quad .1 \quad 2(m+1) \quad .2 \quad 2m \quad .3 \quad 2m+1 \quad .4$$

۲۲- جرم کاسنه مولکول CO، 1.1×10^{-26} کیلوگرم و فاصله دو اتم در حالت پایه 1.1×10^{-10} متر است. ممان اینرسی این مولکول چقدر است؟

$$1.4 \times 10^{-47} \quad .1 \quad 1.3 \times 10^{-46} \quad .2 \quad 7.55 \times 10^{-23} \quad .3 \quad 2.63 \times 10^{-1} \quad .4$$

۲۳- انرژی الکترونی تراز n ام اتم هیدروژن چه نسبتی با شماره آن تراز دارد؟

$$E_n \propto n \quad .1 \quad E_n \propto n^2 \quad .2 \quad E_n \propto \frac{1}{n} \quad .3 \quad E_n \propto \frac{1}{n^2} \quad .4$$

۲۴- در اتم تک الکترونی در هر تراز انرژی به شماره n چند حالت همتراز پیش بینی شود؟

$$n \quad .1 \quad n^2 \quad .2 \quad 2n+1 \quad .3 \quad n^2+1 \quad .4$$

۲۵- کدام عبارت زیر نشان دهنده تابع توزیع شعاعی است؟

$$4\pi r^2 R(r) \quad .1 \quad 4\pi r R^2(r) \quad .2 \quad 4\pi r^2 R^2(r) \quad .3 \quad R^2(r) \quad .4$$

۲۶- اولین خط طیفی سری بالمر از چه جهش الکترونی حاصل می شود؟

۱. از حالت $n=3$ به تراز $n=2$
۲. از حالت $n=4$ به تراز $n=2$
۳. از حالت $n=3$ به تراز $n=4$
۴. از حالت $n=2$ به تراز $n=4$

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۲۰ تشریحی: ۰

سری سوال: ۱ یک

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/گد درس: شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی (کاربردی)، شیمی گرایش محض ۱۱۴۰۲۷

۲۷- رابطه عمومی بین تکانه زاویه ای و ممان مغناطیسی به چه شکل است؟

$$\begin{aligned} \bar{\mu} &= -\frac{2}{m_e} \bar{L} \quad .1 \\ \bar{\mu} &= -\frac{e}{2m_e} \bar{L} \quad .2 \\ \bar{\mu} &= -\frac{1}{2} \bar{L} \quad .3 \\ \bar{\mu} &= \frac{1}{2m_e} \bar{L} \quad .4 \end{aligned}$$

۲۸- مقادیر ویژه اپراتور اسپین \hat{S}_z کدامند؟

$$\begin{aligned} -\frac{1}{2}\alpha, \frac{1}{2}\beta \quad .1 \\ \pm \frac{\hbar}{2} \quad .2 \\ \pm \frac{1}{2} \quad .3 \\ \alpha, \beta \quad .4 \end{aligned}$$

۲۹- بر اساس قضیه تغییر پارامترها هرگاه کوچکترین مقدار ویژه هامیلتونی یک منظومه E_0 و تابع ویژه مربوط Ψ_0 باشد، با هر

تابع Φ غیر از Ψ_0 ، خواهیم داشت:

$$\begin{aligned} \int \Phi^* \hat{H} \Phi d\tau \geq E_0 \quad .1 \\ \int \Phi^* \hat{H} \Psi_0 d\tau \geq E_0 \quad .3 \\ \int \Psi_0^* \hat{H} \Phi d\tau \geq E_0 \quad .2 \\ \int \Phi^* \hat{H} \Psi_0 d\tau \geq E_0 \quad .4 \end{aligned}$$

۳۰- در هامیلتونی اتم هلیوم جمله اختلال آور کدام است؟

۱. انرژی جنبشی هسته
۲. انرژی جنبشی الکترونها
۳. جاذبه بین الکترونها و هسته
۴. دافعه بین دو الکترون

۳۱- تابع موج مربوط به فوتون و هسته هلیوم به ترتیب از چه گروه تقارنی هستند؟

۱. ضد متقارن- متقارن
۲. متقارن- ضد متقارن
۳. متقارن- متقارن
۴. ضد متقارن- ضد متقارن

۳۲- ترکیب اسپین- اوربیتالها که درمینان اسلیتر نمایشگر آن است، است.

۱. متقارن یا نامتقارن
۲. متقارن یا ضد متقارن
۳. الزاماً متقارن
۴. الزاماً ضد متقارن

۳۳- در نظریه اوربیتال مولکولی هوکل، اوربیتالهای مولکولی تک الکترونی با استفاده از کدام روش زیر حاصل می شوند؟

۱. حل دقیق معادله شرودینگر
۲. اختلال
۳. تغییر پارامترها
۴. اختلال و تغییر پارامترها

۳۴- کدام گزینه زیر در مورد انتگرالهای تبادلی، H_{ij} ، در روش هوکل صحیح است؟

۱. مقدار آنها جز برای دو اتم همسایه صفر است.
۲. برابر با انتگرالهای کولونی است.
۳. برابر با انتگرالهای همپوشانی است.
۴. برابر با انتگرالهای نرمال شدگی است.

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۲۰ تشریحی: ۰

سری سوال: ۱ یک

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/گد درس: شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی (کاربردی)، شیمی گرایش محض ۱۱۴۰۲۷

۳۵- انرژی الکترونیهای π در مولکول بنزن 8β ، و انرژی الکترونیهای π مولکول اتیلن 2β است. انرژی عدم استقرار مولکول بنزن چقدر است؟

۱. 10β ۲. 6β ۳. 2β ۴. 4β

۳۶- اگر Ψ_i تابع موجی حالت آغازی، Ψ_j تابع موجی حالت پایانی و \hat{R} اپراتور ممان دوقطبی باشد، ممان الکتريکی جهش در جهشهای الکترونی از چه رابطه ای محاسبه می شود؟

۱. $\int \Psi_j^* \hat{R} \Psi_i d\tau$ ۲. $\int \Psi_j^* \Psi_i d\tau$ ۳. $\int \Psi_i^* \hat{R}^2 \Psi_j d\tau$ ۴. $\frac{1}{4\pi} \int \Psi_j^* \hat{R}^2 \Psi_i d\tau$

۳۷- طبق قضیه کوپمان انرژیهای یونش قائم با برابرند.

۱. انرژیهای اوربیتالی که به روش هارتری- فوک تعیین می شوند
۲. منفی انرژیهای اوربیتالی که به روش هارتری- فوک تعیین می شوند
۳. دو برابر انرژیهای اوربیتالی که به روش هارتری- فوک تعیین می شوند
۴. منفی دو برابر انرژیهای اوربیتالی که به روش هارتری- فوک تعیین می شوند

۳۸- کدام گزینه زیر در مورد طیف فوتوالکترونی مولکولی که در آن الکترون از یک اوربیتال درونی کنده شده باشد، صحیح نیست؟

۱. یون و مولکول هر دو در تراز ارتعاشی پایه هستند.
۲. منحنی انرژی پتانسیل یون نسبت به منحنی انرژی پتانسیل مولکول جابجایی عرضی زیادی ندارد.
۳. پیک یونش یک پیک باریک است.
۴. نوار فوتوالکترونی مربوط به این انتقال دارای ساختار ارتعاشی است.

۳۹- کدام مولکول زیر با استفاده از روش اوربیتال مولکولی هوکل قابل بررسی نیست؟

۱. بنزن ۲. سیکلوبوتان ۳. بوتادی ان ۴. نفتالن

۴۰- جابجا کردن دو سطر از دترمینان اسلیتر معادل است با

۱. انطباق دو الکترون
۲. تعویض مختصات دو الکترون
۳. حذف دو الکترون
۴. حذف همه الکترونها

مبانی شیمی کوانتومی نیمسال دوم سال تحصیلی ۹۳-۹۲

| | | | | پاسخ صحیح | | |
|----|--|--|--|-----------|------|----|
| ۱ | | | | د | عادي | ۱ |
| ۲ | | | | ج | عادي | ۲ |
| ۳ | | | | الف | عادي | ۳ |
| ۴ | | | | ج | عادي | ۴ |
| ۵ | | | | ب | عادي | ۵ |
| ۶ | | | | الف | عادي | ۶ |
| ۷ | | | | ج | عادي | ۷ |
| ۸ | | | | د | عادي | ۸ |
| ۹ | | | | الف | عادي | ۹ |
| ۱۰ | | | | ج | عادي | ۱۰ |
| ۱۱ | | | | الف | عادي | ۱۱ |
| ۱۲ | | | | ج | عادي | ۱۲ |
| ۱۳ | | | | ج | عادي | ۱۳ |
| ۱۴ | | | | الف | عادي | ۱۴ |
| ۱۵ | | | | الف | عادي | ۱۵ |
| ۱۶ | | | | الف | عادي | ۱۶ |
| ۱۷ | | | | د | عادي | ۱۷ |
| ۱۸ | | | | ب | عادي | ۱۸ |
| ۱۹ | | | | ج | عادي | ۱۹ |
| ۲۰ | | | | ج | عادي | ۲۰ |
| ۲۱ | | | | د | عادي | ۲۱ |
| ۲۲ | | | | ب | عادي | ۲۲ |
| ۲۳ | | | | د | عادي | ۲۳ |
| ۲۴ | | | | ب | عادي | ۲۴ |
| ۲۵ | | | | ج | عادي | ۲۵ |
| ۲۶ | | | | الف | عادي | ۲۶ |
| ۲۷ | | | | ب | عادي | ۲۷ |
| ۲۸ | | | | ب | عادي | ۲۸ |
| ۲۹ | | | | الف | عادي | ۲۹ |
| ۳۰ | | | | د | عادي | ۳۰ |
| ۳۱ | | | | ج | عادي | ۳۱ |
| ۳۲ | | | | د | عادي | ۳۲ |
| ۳۳ | | | | ج | عادي | ۳۳ |
| ۳۴ | | | | الف | عادي | ۳۴ |
| ۳۵ | | | | ج | عادي | ۳۵ |
| ۳۶ | | | | الف | عادي | ۳۶ |
| ۳۷ | | | | ب | عادي | ۳۷ |
| ۳۸ | | | | د | عادي | ۳۸ |
| ۳۹ | | | | ب | عادي | ۳۹ |
| ۴۰ | | | | ب | عادي | ۴۰ |

www.salampnu.com

سایت مرجع دانشجوی پیام نور

- ✓ نمونه سوالات پیام نور : بیش از ۱۱۰ هزار نمونه سوال همراه با پاسخنامه
- تستی و تشریحی
- ✓ کتاب ، جزوه و خلاصه دروس
- ✓ برنامه امتحانات
- ✓ منابع و لیست دروس هر ترم
- ✓ دانلود کاملاً رایگان بیش از ۱۴۰ هزار فایل مختص دانشجویان پیام نور

www.salampnu.com

www.ShimiPedia.ir

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۲۰ تشریحی: ۰

سری سوال: یک ۱

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/گد درس: شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی (کاربردی)، شیمی گرایش محض ۱۱۱۴۰۲۷

استفاده از ماشین حساب مهندسی مجاز است

۱- تابع موج یک سیستم تک ذره ای، تابعی است از

- ۰.۱ مکان ذره
۰.۲ اندازه حرکت
۰.۳ مکان ذره و زمان
۰.۴ مکان و اندازه حرکت ذره

۲- کدام گزینه زیر از ویژگیهای تابع حالت قابل قبول برای یک سیستم تک ذره ای نیست؟

- ۰.۱ پیوسته بودن
۰.۲ حقیقی بودن
۰.۳ تک مقدار بودن
۰.۴ محدود و معین بودن

۳- رابطه زیر بیانگر کدام ویژگی برای تابع موج $\Psi(x, t)$ است؟

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = 1$$

- ۰.۱ نرمالیزه بودن
۰.۲ هرمیتی بودن
۰.۳ تک مقدار بودن
۰.۴ ارتوگونال بودن

۴- از تأثیر اپراتور $\hat{x}\hat{D}_x$ بر تابع x^2 کدام گزینه زیر حاصل می شود؟

- ۰.۱ x^3
۰.۲ $2x$
۰.۳ $2x^3$
۰.۴ $2x^2$

۵- کدام گزینه حاصل عبارت زیر را به درستی نشان می دهد؟

$$\hat{D}_x \hat{x} - \hat{x} \hat{D}_x$$

- ۰.۱ \hat{x}
۰.۲ \hat{x}^2
۰.۳ $2\hat{x}$
۰.۴ $\hat{1}$

۶- به هر کمیت فیزیکی مشاهده پذیر یک اپراتور وابسته است.

- ۰.۱ خطی
۰.۲ خطی و هرمیتیک
۰.۳ خطی و حقیقی
۰.۴ حقیقی و هرمیتیک

۷- اپراتور انرژی جنبشی یک منظومه تک ذره ای کدام گزینه زیر است؟

- ۰.۱ $\frac{1}{2}k \sin x$
۰.۲ $-\frac{\hbar^2}{2m} \sin x$
۰.۳ $\frac{1}{2}k\hat{x}^2$
۰.۴ $-\frac{\hbar^2}{2m} \hat{\nabla}^2$

۸- کدام تابع زیر ویژه تابع اپراتور \hat{D}_x است؟

- ۰.۱ $\cos ax$
۰.۲ $\sin ax$
۰.۳ e^{ax}
۰.۴ x^a

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۲۰ تشریحی: ۰

سری سوال: ۱ یک

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/گد درس: شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی (کاربردی)، شیمی گرایش محض ۱۱۴۰۲۷

۹- مقدار قابل انتظار هر مشاهده پذیر a در حالت $\Psi(r, t)$ برابر است با:

$$\langle a \rangle = \frac{\int \Psi^* \hat{A} \Psi dv}{\int \Psi^* \Psi dv} \quad .2 \qquad \langle a \rangle = \frac{\int \Psi^* \hat{A} \Psi dv}{\int \Psi^* \Psi dv} \quad .1$$

$$\langle a \rangle = \frac{\int \Psi \Psi dv}{\int \Psi^* \Psi dv} \quad .4 \qquad \langle a \rangle = \int \Psi^* \Psi dv \quad .3$$

۱۰- انرژی ذره در کدام حالت زیر پیوسته است؟

۱. ذره در جعبه یک بعدی
۲. ذره در جعبه سه بعدی
۳. ذره آزاد
۴. سیستم چند ذره ای

۱۱- انرژی تراز m ام ذره ای به جرم m در جعبه یک بعدی به طول L از چه رابطه ای به دست می آید؟

$$E_n = \frac{n^2 h^2}{8mL^2} \quad .4 \qquad E_n = \frac{n^2 \hbar^2}{8mL^2} \quad .3 \qquad E_n = \frac{n^2 h^2}{8\pi mL^2} \quad .2 \qquad E_n = \frac{n^2 h^2}{2\pi mL^2} \quad .1$$

۱۲- برای ذره در جعبه سه بعدی، چند حالت کوانتومی هم انرژی به دومین تراز انرژی مربوط می شود؟

۱. ۱
۲. ۶
۳. ۳
۴. ۴

۱۳- در مورد نمودار ترازهای انرژی الگوی سه بعدی، کدام گزینه زیر صحیح است؟

۱. ترازهای پایین تر فشرده ترند.
۲. ترازهای بالاتر فشرده ترند.
۳. فاصله ترازهای انرژی ثابت است.
۴. ترازهایی با چندگانگی کمتر متراکم ترند.

۱۴- توابع ویژه قابل قبول اپراتور \hat{H} مجموعه ای را تشکیل می دهند.

۱. ارتونرمال
۲. متعامد
۳. ارتوگونال
۴. نرمال

۱۵- مقدار انرژی نقطه صفر نوسانگر هارمونیک چقدر است؟

$$0 \quad .4 \qquad \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{h}{v}} \quad .3 \qquad \frac{1}{2} h v_0 \quad .2 \qquad h v_0 \quad .1$$

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۲۰ تشریحی: ۰

سری سوال: ۱ یک

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/گد درس: شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی (کاربردی)، شیمی گرایش محض ۱۱۴۰۲۷

۱۶- انرژی چرخنده صلب (E) در صفحه، چه رابطه ای با ممان اینرسی مولکول (I) و تکانه زاویه ای (L) دارد؟

۱. $E = \frac{L^2}{2I}$ ۲. $E = 2IL^2$ ۳. $E = \frac{2I^2}{L}$ ۴. $E = \frac{2I}{L}$

۱۷- کدام دو اوپراتور زیر توابع ویژه مشترک ندارند؟

۱. \hat{L}_x, \hat{L}_z ۲. \hat{H}, \hat{L}^2 ۳. \hat{L}^2, \hat{L}_z ۴. \hat{H}, \hat{L}_z

۱۸- در دستگاه مختصات قطبی کروی، مؤلفه Z تکانه زاویه ای (L_z) تابعی از است.

۱. r, θ, ϕ ۲. θ, ϕ ۳. r, θ ۴. ϕ

۱۹- در تراز انرژی J ام چرخنده صلب سه بعدی چند حالت همتراز وجود دارد؟

۱. 2 ۲. $2J$ ۳. $2J + 1$ ۴. $J + 1$

۲۰- در چرخنده صلب سه بعدی قدر مطلق تکانه زاویه ای در حالت پایه چقدر است؟

۱. 0 ۲. \hbar ۳. $2\hbar$ ۴. $\sqrt{2\hbar}$

۲۱- ممان اینرسی یک مولکول دو اتمی با جرم کاسته $1.14 \times 10^{-26} \text{ kg}$ و فاصله بین اتمی $1.13 \times 10^{-10} \text{ m}$ چقدر است؟

۱. $1.45 \times 10^{-46} \text{ kgm}^2$ ۲. $7.55 \times 10^{-23} \text{ kgm}^2$

۳. $1.45 \times 10^{-47} \text{ kgm}^2$ ۴. $7.55 \times 10^{-22} \text{ kgm}^2$

۲۲- مقدار ویژه اپراتور L^2 در سیستمهای سه بعدی مضربی است از

۱. \hbar^2 ۲. h^2 ۳. h ۴. \hbar

۲۳- عدد کوانتومی مغناطیسی (m) در یک اتم تک الکترونی، را در هر حالت معین می کند.

۱. انرژیهای مجاز سیستم ۲. قدر مطلق تکانه زاویه ای الکترونی

۳. مؤلفه Z تکانه زاویه ای الکترونی ۴. بخش شعاعی توابع موج الکترونی

۲۴- در اتم تک الکترونی، در هر تراز انرژی به شماره n1، چه تعداد حالت همتراز پیش بینی می شود؟

۱. n ۲. $2n$ ۳. n^2 ۴. $2n^2$

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۲۰ تشریحی: ۰

سری سوال: ۱ یک

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/گد درس: شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی (کاربردی)، شیمی گرایش محض ۱۱۴۰۲۷

۲۵- کدام عبارت زیر نشان دهنده تابع توزیع شعاعی است؟

۱. $4\pi r^2$ ۲. $4\pi r^2 R^2(r)$ ۳. $4\pi r^2 R^2(r) dr$ ۴. $r^2 R^2(r) dr$

۲۶- معادله $|\psi(r, \theta, \phi)|^2 = a$ ویژگی کدام گزینه زیر است؟ (a مقداری ثابت است).

۱. توابع حالت ارتوگونال ۲. توابع حالت نرمال ۳. سطوح تک پتانسیل ۴. سطوح تک دانسیته

۲۷- مقدار انرژی تراز پایه اتم هیدروژن چقدر است؟

۱. $-13.56 eV$ ۲. $-21.7 eV$ ۳. $-13.5 \times 10^6 eV$ ۴. $-21.7 \times 10^6 eV$

۲۸- اولین خط طیفی سری بالمر از جهش الکترون از حالت به تراز $n = 2$ به وجود می آید.

۱. $n = 1$ ۲. $n = 3$ ۳. $n = 4$ ۴. $n = 5$

۲۹- ممان مغناطیسی غیر صفر اتم هیدروژن ناشی از چیست؟

۱. جرم الکترون ۲. میدان مغناطیسی ۳. بار هسته ۴. وجود اسپین الکترونی

۳۰- عدد کوانتومی تکانه زاویه ای کل برای اتم تک الکترونی در اربیتال ۱s چقدر است؟

۱. 0 ۲. $\frac{1}{2}$ ۳. $\frac{3}{2}$ ۴. $\frac{1}{2}, \frac{3}{2}$

۳۱- تابع موجی کامل وابسته به الکترون تابعی از چند متغیر است؟

۱. ۳ ۲. ۴ ۳. ۵ ۴. ۶

۳۲- کدام گزینه زیر حل دقیق معادله شرودینگر را برای اتمهای چند الکترونی غیرممکن می کند؟

۱. پتانسیل برهمکنش بین ذرات ۲. انرژی جنبشی الکترونها
۳. انرژی جنبشی هسته ۴. وجود میدانهای خارجی

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۲۰ تشریحی: ۰

سری سوال: ۱ یک

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/گد درس: شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی (کاربردی)، شیمی گرایش محض ۱۱۴۰۲۷

۳۳- طبق قضیه تغییر، هرگاه کوچکترین مقدار ویژه هامیلتونی یک منظومه E_0 و تابع ویژه مربوط ψ_0 باشد، با هر تابع Φ غیر از ψ_0 خواهیم داشت:

$$\int \psi_0^* \hat{H} \Phi d\tau \geq E_0 \quad .1 \quad \int \Phi^* \hat{H} \psi_0 d\tau \geq E_0 \quad .2$$

$$\int \Phi^* \hat{H} \psi_0 d\tau \leq E_0 \quad .4 \quad \int \Phi^* \hat{H} \Phi d\tau \geq E_0 \quad .3$$

۳۴- عبارت "هیچ دو الکترونی از الکترونهاى اتم نمیتوان یافت که در یک مجموعه از مقادیر چهار عدد کوانتومی مشترک باشند" بیانگر کدام اصل است؟

۱. اصل تغییر ۲. اصل هوند ۳. اصل ماکزیمم هوند ۴. اصل طرد پائولی

۳۵- کدام جمله در هامیلتونی غیر نسبیتی اتم چند الکترونی معرف پتانسیل جاذبه بین الکترونها و هسته است؟

$$\sum_i \frac{z}{r_i} \quad .1 \quad \sum_{i,j} \frac{1}{r_{ij}} \quad .2 \quad \frac{1}{2} \sum_i \nabla_i^2 \quad .3 \quad \frac{m_0 e^4}{2\hbar^2} \quad .4$$

۳۶- جمله اختلال آور در هامیلتونی اتم هلیم کدام است؟

۱. دافعه بین دو الکترون ۲. جاذبه بین الکترونها و هسته
۳. انرژی جنبشی الکترونها ۴. انرژی جنبشی هسته

۳۷- ذراتی با اسپین نیمه صحیح چه نوع تابع موجی دارند؟

۱. متقارن ۲. ضدمتقارن ۳. زوج ۴. فرد

۳۸- ضریب نرمال شدگی دترمینان اسلیتر برای یک منظومه N الکترونی چند است؟

$$\sqrt{N!} \quad .1 \quad \frac{1}{\sqrt{N!}} \quad .2 \quad \frac{1}{\sqrt{N}} \quad .3 \quad \sqrt{N} \quad .4$$

۳۹- تقریب هوکل برای چه نوع سیستمهایی کاربرد دارد؟

۱. ترکیبات عناصر واسطه ۲. سیستمهای حلقوی
۳. زنجیره های کربنی رادیکالی ۴. سیستمهای مزدوج

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۲۰ تشریحی: ۰

سری سوال: ۱ یک

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/گد درس: شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی (کاربردی)، شیمی گرایش محض ۱۱۴۰۲۷

۴۰- انرژی الکترونهای π مولکول اتیلن 2β و انرژی الکترونهای π بنزن 8β است. انرژی عدم استقرار بنزن چقدر است؟

۴. 8β

۳. 6β

۲. 4β

۱. 2β

www.salampnu.com

سایت مرجع دانشجوی پیام نور

- ✓ نمونه سوالات پیام نور : بیش از ۱۱۰ هزار نمونه سوال همراه با پاسخنامه
- تستی و تشریحی
- ✓ کتاب ، جزوه و خلاصه دروس
- ✓ برنامه امتحانات
- ✓ منابع و لیست دروس هر ترم
- ✓ دانلود کاملاً رایگان بیش از ۱۴۰ هزار فایل مختص دانشجویان پیام نور

www.salampnu.com

www.ShimiPedia.ir

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۲۰ تشریحی: ۰

سری سوال: یک ۱

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/گد درس: شیمی گرایش محض، شیمی (کاربردی)، شیمی (شیمی فیزیک) ۱۱۱۴۰۲۷

استفاده از ماشین حساب مهندسی مجاز است

۱- حاصل $[\hat{x}, \hat{D}_x]$ کدامیک است؟

۱. ۱- ۲. ۱ ۳. صفر ۴. x

۲- کدامیک از اپراتورهای زیر خطی نیست؟

۱. $\frac{d^2}{dx^2}$ ۲. $\frac{h}{i} \frac{d}{dx}$ ۳. $i\sqrt{\quad}$ ۴. $i \frac{d}{dx}$

۳- کدام تابع می تواند ویژه اپراتور \hat{D}_x^2 باشد؟

۱. e^{ax} ۲. $\cos ax$ ۳. $4x^3$ ۴. موارد ۱ و ۲

۴- مقدار متوسط p_x برای ذره در جعبه یک بعدی با تابع موج زیر کدام است؟

$$\psi(x, t) = \left(\frac{2}{l}\right)^{1/2} e^{-iEt/h} \sin \frac{n\pi x}{l}$$

۱. $\frac{l}{2}$ ۲. صفر ۳. $\frac{2}{l}$ ۴. -1

۵- در مورد حالت های ایستای یک سیستم، کدام یک میتواند صحیح باشد؟

۱. دانسیته احتمال در هر یک از حالات و در هر نقطه از فضا مستقل از زمان نیست.
۲. تابع پتانسیل مستقل از زمان است.
۳. ویژه توابع مشخصی دارند.
۴. می تواند موارد ۲ و ۳ صحیح باشد.

۶- انرژی کدام ذره پیوسته میباشد؟

۱. نوسانگر هماهنگ ۲. ذره در جعبه یک بعدی
۳. ذره آزاد ۴. ذره در جعبه سه بعدی

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۲۰ تشریحی: ۰

سری سوال: ۱: یک

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/گد درس: شیمی گرایش محض، شیمی (کاربردی)، شیمی (شیمی فیزیک) ۱۱۴۰۲۷

۷- تعداد حالات همترازی یا حالات کوانتومی هم انرژی در ذره در جعبه سه بعدی با انرژی $E = \frac{9h^2}{8ma^2}$ کدام است؟

۱. ۲ ۲. ۳ ۳. ۱ ۴. ۶

۸- ضریب N در تابع موج نوسانگر هماهنگ حالت پایه کدام است؟

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}, \quad \Psi = Ne^{-\frac{ax^2}{2}}$$

۱. $2\left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}$ ۲. $\frac{\alpha}{\pi}$ ۳. $\left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}}$ ۴. $\left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}$

۹- برای هر تراز انرژی چرخنده صلب دو بعدی با $m=1$ چند تابع موج با انرژی یکسان می توان یافت؟

۱. ۳ ۲. ۲ ۳. ۱ ۴. صفر

۱۰- کدامیک از اپراتورها جابجا پذیر نیستند؟

۱. \hat{L}_z, \hat{H} ۲. \hat{L}^2, \hat{H} ۳. \hat{L}^2, \hat{L}_z ۴. \hat{L}_x, \hat{L}_y

۱۱- نتیجه (پیامد) جابجا پذیر بودن دو اپراتور کدام است؟

۱. مقادیر ویژه آنها به طور همزمان شناخته می شود.
۲. مقادیر انرژی یکسان دارند.
۳. توابع ویژه مشترکی دارند.
۴. هیچکدام

۱۲- چرخنده صلب سه بعدی در حالت $j = 2$ کدام مقدار l_z را نمی تواند داشته باشد؟

۱. $-2\hbar$ ۲. $-\hbar$ ۳. صفر ۴. $-3\hbar$

۱۳- حالات همترازی هر تراز انرژی چرخنده صلب کدام یک می باشد؟

۱. j ۲. $2j + 1$ ۳. $j(j + 1)$ ۴. $j + 1$

۱۴- انرژی چرخشی تراز اول مولکول CO با طول پیوند $0.113nm$ کدامیک است؟

$$M_w C = 12 \text{gr/mol} \quad M_w O = 16 \text{gr/mol} \quad h = 6.626 \times 10^{-34} \text{ j/sec}$$

۱. 7.55×10^{-5} ۲. 7.55×10^5 ۳. 7.55×10^{-23} ۴. 7.55×10^{23}

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۲۰ تشریحی: ۰

سری سوال: ۱ یک

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/گد درس: شیمی گرایش محض، شیمی (کاربردی)، شیمی (شیمی فیزیک) ۱۱۴۰۲۷

۱۵- تابع توزیع شعاعی کدام است؟

۱. $|\psi(r, \theta, \phi)|^2$ ۲. $|R(r)|^2$ ۳. $4\pi |R(r)|^2$ ۴. $4\pi r^2 |R(r)|^2$

۱۶- محتمل ترین فاصله الکترون از هسته در اوربیتال ۱s کدام است؟

۱. $\frac{\mu e^2}{\hbar^2}$ ۲. $\frac{\hbar^2}{\mu e^2}$ ۳. $\frac{z}{a_0}$ ۴. $\frac{\hbar^2}{e^2}$

۱۷- $\langle r \rangle$ برای اوربیتال ۱s اتم هیدروژن با تابع زیر کدام است؟

$$\psi_{1s} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \alpha^{\frac{3}{2}} e^{-\alpha r}$$

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

۱. $\frac{3}{2\alpha}$ ۲. $\frac{1}{\alpha}$ ۳. $-\alpha^2$ ۴. α

۱۸- ماتریس تابع اسپینی α کدام است؟

۱. $\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$ ۲. $\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$ ۳. $\begin{bmatrix} i \\ 1 \end{bmatrix}$ ۴. $\begin{bmatrix} 0 \\ -i \end{bmatrix}$

۱۹- در مورد انتگرال همپوشانی S_{ij} کدام مورد صحیح است؟

۱. $S_{11} = 0$ ۲. $S_{12} = 1$ ۳. $S_{11} = 1$ ۴. $S_{22} = 0$

۲۰- در صورتیکه با استفاده از روش تغییر پارامتر و تابع آزمایشی انرژی زیر برای اتم هیدروژن بدست آید، مقدار E چقدر خواهد بود؟

$$E = \left(\frac{2\alpha'}{\pi}\right)^{\frac{3}{4}} e^{-\alpha r^2}$$

۱. -13.6ev ۲. -11.53ev ۳. 11.53ev ۴. 13.6ev

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۲۰ تشریحی: ۰

سری سوال: ۱ یک

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/گد درس: شیمی گرایش محض، شیمی (کاربردی)، شیمی (شیمی فیزیک) ۱۱۴۰۲۷

۲۱- یک هارتری:

۱. $6.9cal$ ۲. $627.5ev$ ۳. $27.3ev$ ۴. $43.5J$

۲۲- جمله اختلال حالت اصلی اتم هلیم کدام است؟

۱. $-\frac{1}{r_{12}}$ ۲. $-\frac{1}{r_{12}}$ ۳. $-\frac{2}{r_{12}}$ ۴. $-\frac{1}{r_2} - \frac{1}{r_1}$

۲۳- ضریب نرمال شدگی تابع اسپین - اوربیتال کدام است؟

۱. $N!$ ۲. $\frac{1}{(N!)^2}$ ۳. $\frac{1}{(N!)^2}$ ۴. $\frac{1}{N!}$

۲۴- کدام یک از ذرات، اسپین صحیح یا صفر و تابع موج متقارن دارند؟

۱. الکترون ۲. پروتون ۳. نوترون ۴. هسته اتم هلیم

۲۵- کدام تابع موج بر اساس اصل پائولی برای اتم هلیم مناسب است؟

۱. $\psi_{1s}(1)\alpha(1)\psi_{1s}(2)\alpha(2)$
 ۲. $\psi_{1s}(1)\beta(1)\psi_{1s}(2)\alpha(2)$
 ۳. $\psi_{1s}(1)\alpha(1)\psi_{1s}(2)\beta(2) - \psi_{1s}(1)\beta(1)\psi_{1s}(2)\alpha(2)$
 ۴. $\psi_{1s}(1)\alpha(1)\psi_{1s}(2)\beta(2) + \psi_{1s}(1)\beta(1)\psi_{1s}(2)\alpha(2)$

۲۶- در اتم هایی که $l=0$ است، تکانه زاویه ای فقط مربوط به کدام مورد است؟

۱. اوربیتال ۲. اسپین - اوربیتال ۳. اسپین ۴. هیچکدام

۲۷- وجود اسپین، انرژی الکترونی را چگونه تغییر می دهد؟

۱. کاهش ۲. افزایش ۳. تغییری نمی نماید ۴. موارد ۱ و ۲

۲۸- برای مولکولی با زنجیر مزدوج با N اتم کربن، کدام تابع موج اوربیتال مولکولی را می توان پیشنهاد داد؟

۱. N تابع از نوع $2p\pi$ ۲. N تابع از نوع $2p\delta$
 ۳. N-1 تابع از نوع $2p\pi$ ۴. N-1 تابع از نوع $2p\delta$

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۲۰ تشریحی: ۰

سری سوال: ۱ یک

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/گد درس: شیمی گرایش محض، شیمی (کاربردی)، شیمی (شیمی فیزیک) ۱۱۴۰۲۷

۲۹- کدامیک در مورد انتگرالهای کولنی مولکول سیکلو بوتن صحیح نیست؟

۱. $H_{11} = H_{22}$ ۲. $H_{12} = H_{21}$ ۳. $H_{11} = H_{12}$ ۴. $H_{34} = H_{43}$

۳۰- انرژی سیستم π مولکول اتیلن با استفاده از قانون هوکل کدام است؟

۱. $\alpha - \beta$ ۲. $\alpha + \beta$ ۳. $2(\alpha + \beta)$ ۴. $2(\alpha - \beta)$

۳۱- در مورد مولکول او^۳ دی بوتادی ان کدامیک صحیح نیست؟

۱. $S_{13} = 0$ ۲. $S_{11} = 1$ ۳. $H_{11} = \alpha$ ۴. $H_{14} = \beta$

۳۲- میزان پایداری مولکول او^۳ دی بوتادی ان در مقایسه با دو مولکول اتیلن کدام است؟

۱. β ۲. 2β ۳. 0.472β ۴. 2.472β

۳۳- انرژی الکترونی کل حلقه بنزن کدامیک است؟

۱. $6(\alpha + \beta)$ ۲. 8β ۳. $6\alpha + 8\beta$ ۴. $8\beta + 6E_{\sigma}$

۳۴- در نوسانگر هارمونیک، حاصل عبارت $\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}$ برابر با کدام گزینه است؟

۱. $m\ddot{x}$ ۲. $m\dot{x}$ ۳. $-kx$ ۴. kx

۳۵- اگر انرژی یک ذره آزاد به جرم m به اندازه E باشد متوسط تکانه خطی در راستای x از کدام رابطه بدست می آید؟

۱. $2mE$ ۲. $\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ ۳. $\sqrt{2mE}$ ۴. $\sqrt{\frac{\hbar^2}{2mE}}$

۳۶- انرژی نقطه صفر حرکت ارتعاشی کدام است؟ (فرکانس مشخصه سیستم ν)

۱. $2h\nu$ ۲. $\frac{1}{2}h\nu$ ۳. $h\nu$ ۴. $\frac{3}{2}h\nu$

۳۷- کدام گزینه در مورد تقریب هوکل صحیح نیست؟

۱. روش تقریبی است.
۲. برای پیوندهای یگانه کاربرد دارد.
۳. روش نیمه تجربی است.
۴. بر پایه MO-LCAO بنا شده است.

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۲۰ تشریحی: ۰

سری سوال: ۱ یک

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/گد درس: شیمی گرایش محض، شیمی (کاربردی)، شیمی (شیمی فیزیک) ۱۱۴۰۲۷

۳۸- بر اساس قضیه کوپمان، انرژی های یونش قائم برابر است با:

۱. منفی انرژی های اوربیتالی به روش SCF
 ۲. انرژی های اوربیتالی به روش SCF
 ۳. مجموع انرژی های اتم های هیدروژن مانند
 ۴. تفاضل انرژی های اتم های هیدروژن مانند

۳۹- در اتم تک الکترونی در هر تراز انرژی (E_n) چند حالت همترازی وجود دارد؟

۱. n
 ۲. $\frac{1}{n^2}$
 ۳. n^2
 ۴. $\frac{1}{n}$

۴۰- بر اساس اصل فرانک-کوندون، به هنگام جذب فوتون، انرژی پتانسیل مولکول و انرژی جنبشی چه تغییری می نماید تا

فاصله بین هسته ها تغییر ننماید؟

۱. انرژی پتانسیل افزایش و انرژی جنبشی افزایش
 ۲. انرژی پتانسیل کاهش و انرژی جنبشی کاهش
 ۳. انرژی پتانسیل افزایش و انرژی جنبشی کاهش
 ۴. انرژی پتانسیل کاهش و انرژی جنبشی افزایش

| وضعیت کلید | پاسخ صحیح | د | ج | ب | الف | شماره سوال |
|------------|-----------|---|---|---|-----|------------|
| | عادی | | | | X | ۱ |
| | عادی | | | X | | ۲ |
| | عادی | | | | X | ۳ |
| | عادی | | | X | | ۴ |
| | عادی | | | | X | ۵ |
| | عادی | | | X | | ۶ |
| | عادی | | X | | | ۷ |
| | عادی | | | | X | ۸ |
| | عادی | | X | | | ۹ |
| | عادی | | | | X | ۱۰ |
| | عادی | X | | | | ۱۱ |
| | عادی | | | X | | ۱۲ |
| | عادی | | X | | | ۱۳ |
| | عادی | | | X | | ۱۴ |
| | عادی | | | | X | ۱۵ |
| | عادی | | | X | | ۱۶ |
| | عادی | X | | | | ۱۷ |
| | عادی | | X | | | ۱۸ |
| | عادی | | | X | | ۱۹ |
| | عادی | | | | X | ۲۰ |
| | عادی | | | | X | ۲۱ |
| | عادی | | | X | | ۲۲ |
| | عادی | | X | | | ۲۳ |
| | عادی | | | | X | ۲۴ |
| | عادی | | | | X | ۲۵ |
| | عادی | | X | | | ۲۶ |
| | عادی | | | | X | ۲۷ |
| | عادی | X | | | | ۲۸ |
| | عادی | | | X | | ۲۹ |
| | عادی | | X | | | ۳۰ |
| | عادی | | | | X | ۳۱ |
| | عادی | X | | | | ۳۲ |
| | عادی | | X | | | ۳۳ |
| | عادی | X | | | | ۳۴ |
| | عادی | | | X | | ۳۵ |
| | عادی | | X | | | ۳۶ |
| | عادی | | X | | | ۳۷ |

در این قسمت از سایت بازارچه تحقیقاتی جدیدترین نمونه سوالات پیام نور را از ما بخواهید

bazarPh.ir/category/pnu

www.ShimiPedia.ir

free download pnu pdf file from www.salampnu.com

| | | | | | | | |
|----|---|--|---|--|-----|------|--|
| ۳۸ | X | | | | الف | عادي | |
| ۳۹ | | | X | | ج | عادي | |
| ۴۰ | | | X | | ح | عادي | |

در این قسمت از سایت بازارچه تحقیقاتی جدیدترین نمونه سوالات پیام نور را از ما بخواهید

www.ShimiPedia.ir
bazarPh.ir/category/pnu

free download pnu pdf file from www.salampnu.com

www.salampnu.com

سایت مرجع دانشجوی پیام نور

- ✓ نمونه سوالات پیام نور : بیش از ۱۱۰ هزار نمونه سوال همراه با پاسخنامه
- تستی و تشریحی
- ✓ کتاب ، جزوه و خلاصه دروس
- ✓ برنامه امتحانات
- ✓ منابع و لیست دروس هر ترم
- ✓ دانلود کاملاً رایگان بیش از ۱۴۰ هزار فایل مختص دانشجویان پیام نور

www.salampnu.com

www.ShimiPedia.ir

سری سوال : یک ۱

زمان آزمون (دقیقه) : تستی : ۱۲۰ : تشریحی : ۰

تعداد سوالات : تستی : ۴۰ : تشریحی : ۰

عنوان درس : مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/گد درس : شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی (کاربردی)، شیمی گرایش محض ۱۱۱۴۰۲۷

استفاده از ماشین حساب مهندسی مجاز است

- ۱- شرط $\psi(\varphi) = \psi(\varphi + 2\pi)$ نشان دهنده کدامیک از خصوصیات ψ است؟
- ۰.۱ حقیقی بودن ψ ۰.۲ معین بودن ψ ۰.۳ پیوسته بودن ψ ۰.۴ تک مقداری بودن ψ

۲- چنانچه بخواهیم تعبیر درستی از نمودار تداخل ارائه کنیم باید بپذیریم که :

- ۰.۱ شدت های دو باریکه با هم جمع می شوند
 ۰.۲ دامنه های دو باریکه با هم جمع می شوند
 ۰.۳ دامنه هر نقطه متناسب است با احتمال رسیدن ذرات به آن نقطه
 ۰.۴ احتمال رسیدن ذره به هر نقطه را می توان با تابع موج احتمال، φ نشان داد
- ۳- کدامیک از گزینه های زیر شرط نرمال بودن تابع موج را نشان می دهد؟
- ۰.۱ $\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^2(x,t) dx = 1$ ۰.۲ $\int_0^{+\infty} \psi(x,t) dx = 0$ ۰.۳ $\int_V \psi^2(r,t) dv = 0$ ۰.۴ $\int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x,t) dx = 1$

۴- اصل موضوع دوم مکانیک کوانتومی چیست؟

- ۰.۱ برای هر کمیت قابل اندازه گیری، اپراتور وابسته به آن وجود دارد.
 ۰.۲ شناخت کامل از مکان و تکانه ذره را در هر لحظه در اختیار ما قرار می دهد.
 ۰.۳ مقدار قابل انتظار هر مشاهده پذیر را مشخص می کند.
 ۰.۴ احتمال حضور هر ذره را در کل فضا مشخص می کند.

۵- نتیجه تاثیر اپراتور \hat{D}_x^2 روی تابع $a \cos \alpha x$ کدام گزینه است؟

- ۰.۱ $-a\alpha^2 \cos \alpha x$ ۰.۲ $-a\alpha^2 \sin \alpha x$ ۰.۳ $-a^2 \alpha \cos \alpha x$ ۰.۴ $-a^2 \alpha \sin \alpha x$

۶- اپراتور هامیلتونی \hat{H} تابع چه کمیتی است؟

- ۰.۱ \hat{x}_i, \hat{p}_{x_i} ۰.۲ ∇^2, V ۰.۳ T, V ۰.۴ $\hat{p}_{x_i}, \frac{\partial^2}{\partial x^2}$

۷- یکی از نتایج تقارن سیستم ذره در جعبه نسبت به مرکز مسیر حرکت در طول خط کدام گزینه است؟

- ۰.۱ صفر شدن مقدار قابل انتظار مکان
 ۰.۲ صفر شدن مقدار قابل انتظار اندازه حرکت
 ۰.۳ صفر شدن مقدار قابل انتظار مکان و اندازه حرکت
 ۰.۴ صفر شدن تابع موج احتمال

سری سوال : ۱ یک

زمان آزمون (دقیقه) : تستی : ۱۲۰ : تشریحی : ۰

تعداد سوالات : تستی : ۴۰ : تشریحی : ۰

عنوان درس : مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/گد درس : شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی (کاربردی)، شیمی گرایش محض ۱۱۴۰۲۷

۸- منظور از واژه کنسرواتیو (پابستار) چیست؟

۱. پتانسیل های مستقل از زمان
۲. پتانسیل های وابسته به زمان
۳. پتانسیل ها و نیروهای مستقل از زمان
۴. توابع مستقل از زمان

۹- کدامیک از گزینه های زیر، اصل عدم قطعیت هایزنبرگ را بدرستی بیان می کند؟

$$\Delta x \Delta P_x \geq \frac{\hbar}{2} \quad \Delta y \Delta P_x \geq \frac{\hbar}{2} \quad \Delta x \Delta E \geq \frac{\hbar}{2} \quad \Delta t \Delta E \geq \hbar \quad \Delta x \Delta P_x \geq \hbar$$

۱۰- مقدار عددی فاکتور زمانی در تابع موج ذره در جعبه یک بعدی برابر است با :

۱. ۱
۲. صفر
۳. $\sqrt{\frac{2}{l}}$
۴. می بایست محاسبه گردد

۱۱- اصل همخوانی Correspondance Principle بیان می کند که :

۱. با افزایش طول جعبه، مقادیر انرژی گسسته می شود .
۲. با افزایش طول جعبه، مقادیر انرژی پیوسته می شود .
۳. با افزایش عدد کوانتومی، مقادیر انرژی گسسته می شود .
۴. با افزایش عدد کوانتومی، مقادیر انرژی پیوسته می شود .

۱۲- کدامیک از گزینه های زیر در مورد ذره در جعبه سه بعدی صحیح است؟

$$E = E_x + E_y + E_z \quad \psi^2 = \psi_x^2 + \psi_y^2 + \psi_z^2 \quad E = E_x \times E_y \times E_z \quad \psi = \psi_x + \psi_y + \psi_z$$

۱۳- در کدام مورد تجمع ترازها در یک محدوده معینی از انرژی، بیشتر است ؟

۱. ذره در جعبه یک بعدی
۲. ذره در جعبه دوبعدی
۳. ذره در جعبه سه بعدی
۴. در هر سه یکسان است

۱۴- حاصل عبارت $\frac{\partial L}{\partial x}$ برابر با کدام گزینه است؟

$$m\dot{x} \quad -kx \quad mx \quad kx$$

۱۵- انرژی نقطه صفر در نوسانگر هارمونیک :

۱. صفر بوده چرا که مستقل از دماست.
۲. انرژی آغازی نوسانگر است و مقدار آن صفر نیست.
۳. مقدار آن $\frac{1}{2} h\nu_0$ و مستقل از دماست.
۴. گزینه های ۲ و ۳ صحیح است

سری سوال : ۱ یک

زمان آزمون (دقیقه) : تستی : ۱۲۰ تشریحی : ۰

تعداد سوالات : تستی : ۴۰ تشریحی : ۰

عنوان درس : مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/کد درس : شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی (کاربردی)، شیمی گرایش محض ۱۱۱۴۰۲۷

۱۶- منظور از چرخنده صلب چیست ؟

۱. چرخنده ای که در اثر چرخش، عمل نوسان را نیز انجام دهد.
۲. چرخنده ای که در اثر چرخش، فاصله بین دو اتم (طول پیوند) تغییر نکند.
۳. چرخنده ای که حرکت آن منحصر به جابجایی در فضا باشد.
۴. چرخنده ای که حول مرکز جرم خود دارای دوران آزاد باشد.

۱۷- ضریب ثابت m^2 در معادله شرودینگر در مدل چرخنده صلب، بیانگر کدام از گزینه های زیر است؟

۱. $\frac{\hbar^2}{2mr^2E}$ ۲. $\frac{2mr^2E}{\hbar^2}$ ۳. $\frac{2m_0r^2E}{\hbar^2}$ ۴. $\frac{\hbar^2}{2m_0r^2E}$

۱۸- مقدار \dot{x} در رابطه $x = r \cos \varphi$ برای چرخنده صلب مطابق با کدام گزینه است؟

۱. $r \cos \varphi \times \dot{\varphi}$ ۲. $-r \sin \varphi \times \dot{\varphi}$ ۳. $r \sin \varphi \times \dot{\varphi}$ ۴. $-r \cos \varphi \times \dot{\varphi}$

۱۹- مقدار \hat{L}_y برابر با کدام گزینه است ؟

۱. $yP_z - zP_y$ ۲. $zP_y - yP_z$ ۳. $xP_z - zP_x$ ۴. $zP_x - xP_z$

۲۰- در تراز دوم انرژی چرخشی، مقدار انرژی و L برابر است با :

۱. $0, \frac{\hbar^2}{I}$ ۲. $\sqrt{2}\hbar, 2\frac{\hbar^2}{I}$ ۳. $\sqrt{2}\hbar, \frac{\hbar^2}{I}$ ۴. $-\hbar, 0, \hbar, \frac{\hbar^2}{I}$

۲۱- بیشترین تعداد مشاهده پذیرهای فیزیکی در چرخنده صلب، به کدامیک از گزینه های زیر محدود نمی شود؟

۱. انرژی
۲. قدرمطلق تکانه زاویه ای
۳. مولفه L_z تکانه زاویه ای
۴. دانسیته ی احتمال

۲۲- وابستگی انرژی اتم هیدروژن به جرم کاهش یافته چگونه است ؟

۱. μ ۲. μ^2 ۳. μ^{-1} ۴. $\frac{1}{\mu^2}$

۲۳- در هر اتم تک الکترونی، انرژی وابسته به کدام کمیت است؟

۱. n ۲. n^2 ۳. l ۴. l^2

سری سوال : ۱ یک

زمان آزمون (دقیقه) : تستی : ۱۲۰ : تشریحی : ۰

تعداد سوالات : تستی : ۴۰ : تشریحی : ۰

عنوان درس : مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/کد درس : شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی (کاربردی)، شیمی گرایش محض ۱۱۱۴۰۲۷

۲۴- کدامیک از توابع زیر متعامدند؟

۱. ψ_{2p_z} و ψ_{1s} ۲. ψ_{2p_y} و ψ_{1s} ۳. ψ_{2p_x} و ψ_{1s} ۴. تمام موارد

۲۵- تابع توزیع شعاعی تابع چه کمیتی است؟

۱. r ۲. θ ۳. θ و z ۴. θ و z و r

۲۶- مقدار قابل انتظار فاصله الکترون از هسته در حالت $1s$ برابر با کدام است؟ $\Psi_{1s} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \alpha^{3/2} e^{-\alpha r}$ و $\alpha = z/a_0$

۱. $\frac{3}{2} a_0 z$ ۲. $\frac{3}{2} a_0$ ۳. a_0 ۴. $\frac{3}{2} \frac{a_0}{z}$

۲۷- توزیع بار حاصل از سه اوربیتال $2p$ چه نوع توزیعی است؟

۱. یک توزیع با تقارن دمبلی ۲. توزیع با تقارن استوانه ای
۳. توزیع با تقارن کروی ۴. توزیع با تقارن محوری

۲۸- مقدار عددی ممان مغناطیسی در راستای محور Z برابر با کدام گزینه است؟

۱. $\mu_z = \frac{-e\hbar}{2m_e} m_l$ ۲. $\mu_z = \frac{e\hbar}{2m_e} m_l$ ۳. $\mu_z = \frac{2m_e}{e\hbar} m_l$ ۴. $\mu_z = \frac{-2m_e}{e\hbar} m_l$

۲۹- اندازه تکانه زاویه ای اسپین الکترون برابر با کدام گزینه است؟

۱. $\pm \frac{\sqrt{3}}{2} \hbar$ ۲. $\frac{\sqrt{3}}{2} \hbar$ ۳. $\pm \frac{1}{2} \hbar$ ۴. $\frac{1}{2} \hbar$

۳۰- کدامیک از خصوصیات روش تقریبی نمی باشد؟

۱. در این روش ها، پتانسیل مربوط به برهم کنش ها در هامیلتونی وارد می شود.
۲. هنگامی از این روش ها استفاده می گردد که معادله شرودینگر غیر قابل حل می شود.
۳. انرژی های به دست آمده از این روش، مقادیر مطلق هستند. (تقریبی نیستند)
۴. در این روش می توان تابع آزمونی را به صورت ترکیب خطی از توابع موجی بیان کرد.

۳۱- در مدل ذره مستقل، از کدام جمله عبارت هامیلتون صرف نظر می شود؟

۱. $-\sum \frac{\hbar^2}{r_i^2}$ ۲. $+\sum \frac{\hbar^2}{r_i^2}$ ۳. $+\sum \frac{1}{r_{ij}}$ ۴. $-\sum \frac{1}{r_{ij}}$

سری سوال : ۱ یک

زمان آزمون (دقیقه) : تستی : ۱۲۰ : تشریحی : ۰

تعداد سوالات : تستی : ۴۰ : تشریحی : ۰

عنوان درس : مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/کد درس : شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی (کاربردی)، شیمی گرایش محض ۱۱۱۴۰۲۷

۳۲- کدامیک از عبارات زیر در مورد بوزون ها صحیح نمی باشد؟

۱. اسپین آنها صفر و یا صحیح است
۲. عدد جرمی آنها زوج است
۳. تابع موج نسبت به جابجایی دو ذره متقارن است
۴. فوتون ها و نوترون ها در دسته بوزون ها قرار دارند

۳۳- پروتون ها ذراتی هستند که :

۱. دارای اسپین صحیح هستند
۲. هسته آنها دارای عدد جرمی زوج است
۳. جزء فرمیون ها هستند
۴. گزینه های ۲ و ۳ صحیح است

۳۴- تراز یکتایی اتم هلیوم :

۱. قسمت فضایی متقارن و قسمت اسپینی ضد متقارن است
۲. هر دو قسمت فضایی و اسپینی ضد متقارن است
۳. قسمت فضایی ضد متقارن و قسمت اسپینی متقارن است
۴. هر دو قسمت فضایی و اسپینی متقارن است

۳۵- کدامیک از خصوصیات نظریه هوکل نمی باشد؟

۱. روش نیمه تجربی و تقریبی است
۲. مشتق شده از نظریه MO-LCAO است
۳. در مولکولهایی مانند بنزن کاربرد دارد
۴. در مولکولهایی مانند هگزادی ان کاربرد دارد

۳۶- انرژی سیستم π در حالت اصلی مولکول اتیلن مطابق با روش هوکل کدام گزینه است؟

۱. $\alpha + \beta$
۲. $\alpha - \beta$
۳. $2(\alpha + \beta)$
۴. $2(\alpha - \beta)$

۳۷- بر اساس قضیه کوپمان، چه موقع پیک یونش به صورت یک پیک پهن در می آید؟

۱. هنگامی که الکترون کنده شده از یک اوربیتال ناپیوندی باشد
۲. هنگامی که الکترون کنده شده از یک اوربیتال پیوندی باشد
۳. هنگامی که الکترون کنده شده از یک اوربیتال ضد پیوندی باشد
۴. هنگامی که الکترون کنده شده از یک اوربیتال اتمی باشد

۳۸- محاسبه تقریبی ساختمان الکترونی توسط نظریه هوکل برای کدام سیستم صادق است؟

۱. هیدرو کربن های اشباع نشده
۲. هیدروکربن با پیوند دوگانه مزدوج
۳. هیدروکربن های اشباع نشده دارای پیوند دوگانه
۴. تمام هیدروکربن های آلی

سری سوال : ۱ یک

زمان آزمون (دقیقه) : تستی : ۱۲۰ تشریحی : ۰

تعداد سوالات : تستی : ۴۰ تشریحی : ۰

عنوان درس : مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/کد درس : شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی (کاربردی)، شیمی گرایش محض ۱۱۱۴۰۲۷

۳۹- کدام گزینه در مورد الکترون و نوترون صحیح است؟

۱. الکترون ذره بوزون و فوتون ذره فرمیون است
۲. هر دو از ذرات بوزون می باشند
۳. الکترون ذره فرمیون و فوتون ذره بوزون است
۴. هر دو از ذرات فرمیون می باشند

۴۰- کدام مورد زیر بنا بر نظریه اوربیتالی هوکل نادرست است؟

۱. $H_{ij} = 1$
۲. $S_{ij} = 1$
۳. $H_{ij} = 0$ جز برای دو اتم همسایه
۴. $H_{ij} = \beta$ برای دو اتم همسایه

| شماره سوال | پاسخ صحیح | وضعیت کلید |
|------------|-----------|------------|
| ۱ | د | عادی |
| ۲ | ب | عادی |
| ۳ | الف | عادی |
| ۴ | الف | عادی |
| ۵ | الف | عادی |
| ۶ | الف | عادی |
| ۷ | ب | عادی |
| ۸ | ج | عادی |
| ۹ | ج | عادی |
| ۱۰ | الف | عادی |
| ۱۱ | ب | عادی |
| ۱۲ | د | عادی |
| ۱۳ | ج | عادی |
| ۱۴ | ج | عادی |
| ۱۵ | د | عادی |
| ۱۶ | ب | عادی |
| ۱۷ | ج | عادی |
| ۱۸ | ب | عادی |
| ۱۹ | د | عادی |
| ۲۰ | ج | عادی |
| ۲۱ | د | عادی |
| ۲۲ | الف | عادی |
| ۲۳ | ب | عادی |
| ۲۴ | د | عادی |
| ۲۵ | الف | عادی |
| ۲۶ | د | عادی |
| ۲۷ | ج | عادی |
| ۲۸ | الف | عادی |
| ۲۹ | ب | عادی |
| ۳۰ | ج | عادی |
| ۳۱ | ج | عادی |
| ۳۲ | د | عادی |
| ۳۳ | ج | عادی |
| ۳۴ | الف | عادی |
| ۳۵ | د | عادی |
| ۳۶ | ج | عادی |
| ۳۷ | ب | عادی |
| ۳۸ | ب | عادی |
| ۳۹ | ج | عادی |
| ۴۰ | الف | عادی |

93-94-2

www.salampnu.com

سایت مرجع دانشجوی پیام نور

- ✓ نمونه سوالات پیام نور : بیش از ۱۱۰ هزار نمونه سوال همراه با پاسخنامه
- تستی و تشریحی
- ✓ کتاب ، جزوه و خلاصه دروس
- ✓ برنامه امتحانات
- ✓ منابع و لیست دروس هر ترم
- ✓ دانلود کاملاً رایگان بیش از ۱۴۰ هزار فایل مختص دانشجویان پیام نور

www.salampnu.com

www.ShimiPedia.ir

سری سوال : یک ۱

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۲۰ تشریحی: ۰

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/گد درس: شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی (کاربردی)، شیمی گرایش محض ۱۱۱۴۰۲۷

استفاده از ماشین حساب مهندسی مجاز است

۱- کدامیک از گزینه های زیر در مورد تابع موج صحیح نمی باشد؟

- ۰.۱ توان دوم آن بیانگر چگالی احتمال است.
 ۰.۲ در مقادیر بی نهایت X هم محدود و هم معین است.
 ۰.۳ همواره حقیقی است.
 ۰.۴ در هر نقطه از فضا همواره تک مقداری است.

۲- نتیجه تاثیر اپراتور $\hat{D}_x \cdot \hat{x}$ روی تابع $\sin x$ کدام است؟

- ۰.۱ $x \cos x$ ۰.۲ $\sin x + x \cos x$ ۰.۳ $\cos x + x \sin x$ ۰.۴ $x \sin x$

۳- تعداد حالت همتراز انرژی به شماره n در اتم تک الکترونی کدام است؟

- ۰.۱ $2n$ ۰.۲ $2n^2$ ۰.۳ n^2 ۰.۴ n

۴- کدامیک از گزینه های زیر صحیح نمی باشد؟

- ۰.۱ به هر کمیت فیزیکی یک اپراتور خطی وابسته است
 ۰.۲ اپراتورها هیچ گاه موهومی نبوده و همواره حقیقی اند
 ۰.۳ به هر کمیت فیزیکی یک اپراتور هرمیتیک وابسته است
 ۰.۴ اپراتورهای مربوط به مختصات دکارتی ذره، مکانی هستند

۵- کدام گزینه در مورد مقدار قابل انتظار صحیح نمی باشد؟

- ۰.۱ میانگین مجموعه ای از اندازه گیری هاست.
 ۰.۲ نشان دهنده معین بودن یک کمیت است.
 ۰.۳ در یک اندازه گیری بخصوص در یک حالت بدست نمی آید.
 ۰.۴ از اصول موضوعه مکانیک کوانتومی است.

۶- کدامیک از شرایط زیر برای تابع موجی ψ صحیح نیست؟

- ۰.۱ ψ بایستی محدود باشد
 ۰.۲ ψ می بایست در هر نقطه معین، تک مقدار باشد
 ۰.۳ ψ باید مثبت باشد
 ۰.۴ ψ می بایست یک تابع پیوسته از مختصاتش باشد

۷- کدام یک از گزینه های زیر جزء خصوصیات منظومه کوانتومی شده نمی باشد؟

- ۰.۱ یک منظومه ذره ای است.
 ۰.۲ انرژی های مربوط به آن ردیف پیوسته ای را تشکیل می دهد.
 ۰.۳ مقادیر انرژی آن جدا از هم است.
 ۰.۴ دارای ردیف نامتناهی با مقادیر انرژی گسسته است.

سری سوال: ۱ یک

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۲۰ تشریحی: ۰

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/گد درس: شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی (کاربردی)، شیمی گرایش محض ۱۱۴۰۲۷

۸- در نمودار تغییرات چگالی احتمال موضعی برای یک بسته موج، در کدام نقطه چگالی احتمال بیشترین مقدار را دارد؟

۱. $\frac{x}{2\pi} = 1$ ۲. $\frac{x}{2\pi} = 0$ ۳. $x = 1$ ۴. $x \neq 0$

۹- در مدل ذره در جعبه یک بعدی، در کدام ناحیه انرژی پتانسیل صفر است؟

۱. $-\infty < x < 0$ ۲. $L < x < +\infty$ ۳. $-\infty < x < L$ ۴. $0 < x < L$

۱۰- در مدل ذره در جعبه یک بعدی، تعداد گره ها در تراز سوم نمودار دانسیته احتمال چند است؟

۱. صفر ۲. یک
۳. چهار ۴. سه

۱۱- کدامیک از ویژگی های مدل ذره در جعبه یک بعدی نمی باشد؟

۱. تابع پتانسیل متقارن است
۲. تابع موجی همواره زوج است
۳. شرایط مرزی حاکم است
۴. تراز های انرژی گسسته است

۱۲- مقدار قابل انتظار مجذور انرژی در مدل ذره در جعبه یک بعدی برابر با کدام گزینه است؟

۱. صفر ۲. E_n^2 ۳. E_n ۴. $\sqrt{\langle E_n^2 \rangle - \langle E_n \rangle^2}$

۱۳- طبق نظریه امواج، طول جعبه در مدل ذره در جعبه، L برابر با کدام گزینه است؟

۱. $\frac{\lambda}{2}$ ۲. 0 تا L ۳. $-\frac{L}{2}$ تا $+\frac{L}{2}$ ۴. $\frac{n\lambda}{2}$

۱۴- مقدار تابع موج ψ در محدوده $y > L_2$ در مدل ذره در جعبه سه بعدی برابر است با:

۱. ∞ ۲. صفر
۳. قابل اندازه گیری نیست ۴. یک

سری سوال: ۱ یک

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۲۰ تشریحی: ۰

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/گد درس: شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی (کاربردی)، شیمی گرایش محض ۱۱۱۴۰۲۷

۱۵- تابع موج ذره در جعبه یک بعدی به صورت $\psi = A \sin \frac{n\pi}{L} x$ می باشد. چنانچه ثابت A را دو برابر کنیم در این صورت مقدار انرژی ذره:

۱. دو برابر می شود
۲. چهار برابری شود
۳. تغییر نمی کند
۴. $\sqrt{2}$ برابری شود

۱۶- منظور از چند حالتی چیست؟

۱. تعداد حالت‌های مختلف که دارای انرژی یکسان باشند.
۲. تعداد حالت‌های مختلف که دارای انرژی متفاوت باشند.
۳. تعداد حالت‌های مختلف که دارای تابع موج یکسان باشند.
۴. تعداد حالت‌های مختلف که دارای انرژی متفاوت باشند.

۱۷- کدامیک از گزینه های زیر نشان دهند خاصیت ارتوگونال بودن توابع موجی است؟

۱. $\int_0^L \psi_i^* \psi_j dx = 0$ ۲. $\int_0^L \psi_i^* \psi_j dx = 1$ ۳. $\int_0^L \psi_i^* \psi_i dx = 1$ ۴. $\int_0^L \psi_i^* \psi_i dx = 0$

۱۸- متغیرهای تابع لاگرانژ عبارتند از:

۱. مکان و سرعت
۲. سرعت و زمان
۳. مکان و اندازه حرکت
۴. اندازه حرکت و زمان

۱۹- حاصل عبارت $\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}$ برای نوسانگر هارمونیک برابر با کدام گزینه است؟

۱. $m\ddot{x}$ ۲. $m\dot{x}$ ۳. $-kx$ ۴. kx

۲۰- انرژی در نوسانگر هارمونیک از دیدگاه کوانتومی (ذره ای):

۱. تابعی پیوسته و مقدار آن به دامنه نوسان بستگی دارد.
۲. تابعی گسسته و اختلاف بین انرژی ترازاها مقداری ثابت است.
۳. تابعی پیوسته با فواصل $h\nu_0$ است.
۴. تابعی پیوسته با فواصل $\hbar\nu_0$ است.

۲۱- انرژی کل ارتعاشی یک نوسانگر دو ذره ای برابر با کدام گزینه است؟

۱. $\frac{1}{2}mq^2 + V(q)$ ۲. $\frac{1}{2}m'q^2 + V(q)$ ۳. $\frac{1}{2}m'\dot{q}^2 + V(q)$ ۴. $\frac{1}{2}m^2\dot{q}^2 + V(q)$

سری سوال: ۱ یک

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۲۰ تشریحی: ۰

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/گد درس: شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی (کاربردی)، شیمی گرایش محض ۱۱۴۰۲۷

۲۲- رابطه بین تکانه زاویه ای و ممان اینرسی در چرخنده صلب عبارت است از:

$$L = \frac{I}{2\dot{\phi}^2} \quad .4 \quad L = I\dot{\phi}^2 \quad .3 \quad L = I\dot{\phi} \quad .2 \quad L = \frac{1}{2}I\dot{\phi}^2 \quad .1$$

۲۳- حاصل $[L_x, L_z]$ کدام است؟

$$-i\hbar\hat{L}_y \quad .4 \quad \hbar\hat{L}_y \quad .3 \quad -\hbar\hat{L}_y \quad .2 \quad i\hbar\hat{L}_y \quad .1$$

۲۴- اگر حرکت در صفحه ثابت انجام بگیرد، کدام گزینه برابر با صفر است؟

$$[L_x, L_y] \quad .4 \quad \hat{L}_x, \hat{L}_z \quad .3 \quad \hat{L}_x, \hat{L}_y \quad .2 \quad \hat{L}_z \quad .1$$

۲۵- درجه انحطاط تراز سوم انرژی در چرخنده صلب سه بعدی برابر با چند است؟

$$7 \quad .4 \quad 5 \quad .3 \quad 3 \quad .2 \quad 1 \quad .1$$

۲۶- در یک سیستم دو ذره ای (دو سیستم تک ذره مستقل) کدامیک از گزینه های زیر صحیح نمی باشد؟

$$\hat{E} = \hat{E}_I + \hat{E}_{II} \quad .4 \quad \psi = \psi_I + \psi_{II} \quad .3 \quad \psi = \psi_I \times \psi_{II} \quad .2 \quad \hat{H} = \hat{H}_I + \hat{H}_{II} \quad .1$$

۲۷- پارامتر λ در اتم های تک الکترونی معرف کدام است؟

۱. عدد کوانتومی مغناطیسی
۲. عدد کوانتومی اصلی
۳. عدد کوانتومی اسپین
۴. عدد کوانتومی اربیتال

۲۸- منظور از مرتبه انحطاط در اتم های چند الکترونی چیست؟

۱. تعداد l های متفاوت با n یکسان
۲. تعداد m_l متفاوت با l یکسان
۳. تعداد جهت گیری های متفاوت تکانه زاویه ای در فضا
۴. موارد ۲ و ۳ صحیح است

۲۹- تابع توزیع شعاعی به صورت کدام گزینه بیان می شود؟

$$4\pi r^2 R^2 \quad .1 \quad 4\pi r^2 R^2 dr \quad .2 \quad 4\pi(r+dr)^2 dr \quad .3 \quad 4\pi(r+dr)^2 R^2 dr \quad .4$$

۳۰- رابطه نهایی بین تکانه زاویه ای با ممان مغناطیسی در الکترون کدام است؟

$$\vec{\mu} = \frac{-e}{2m_e} \vec{L} \quad .1 \quad \mu_z = \pm \frac{e\hbar}{2m} \quad .2 \quad \mu_z = \frac{e\hbar}{2m} \quad .3 \quad \vec{\mu} = \pm \frac{e}{2m_e} \vec{L} \quad .4$$

۳۱- اپراتور هامیلتون در روش اختلال به چه صورتی بیان می شود؟

$$\hat{H}_0 = \hat{H} + \varepsilon w \quad .4 \quad \hat{H} = \hat{H}_0 + \varepsilon w \quad .3 \quad \hat{H}^{(1)} = \hat{H} + \varepsilon w \quad .2 \quad \hat{H} = \hat{H}^{(1)} + \varepsilon w \quad .1$$

سری سوال: ۱ یک

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۲۰ تشریحی: ۰

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/گد درس: شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی (کاربردی)، شیمی گرایش محض ۱۱۱۴۰۲۷

۳۲- انرژی اتم هلیوم مطابق مدل ذره مستقل چه مقدار بدست می آید؟

۱. $-8E_H$ ۲. $-4E_H$ ۳. $-2E_H$ ۴. $-\frac{1}{2}E_H$

۳۳- تراز سه تایی در اتم هلیوم:

۱. قسمت اسپینی آنها متقارن است
۲. قسمت فضایی آنها متقارن است
۳. قسمت اسپینی آنها ضد متقارن است
۴. قسمت فضایی آنها ضد متقارن است

۳۴- ضریب نرمالیزاسیون در دترمینان اسلیتر برای اتم بریلیم برابر با کدام گزینه است؟

۱. $(4!)^{-1/2}$ ۲. $\sqrt{4!}$ ۳. $\frac{1}{4!}$ ۴. $\frac{1}{\sqrt{4}}$

۳۵- انرژی سیستم π در اولین حالت برانگیخته مولکول اتیلن مطابق با روش هوکل کدام گزینه است؟

۱. $\alpha + \beta$ ۲. $\alpha - \beta$ ۳. $2(\alpha - \beta)$ ۴. 2α

۳۶- کدامیک از گزینه های زیر بیان درستی از اصل فرانک- کوندون نمی باشد؟

۱. جهش الکترونی با برانگیختگی ارتعاشی همراه است
۲. به هنگام جذب تابش، تغییرات انرژی جنبشی از تغییرات انرژی پتانسیل مولکول بیشتر است
۳. در هنگام جهش الکترونی - ارتعاشی فاصله بین هسته ها تغییر نمی کند
۴. جهش های صورت گرفته از نوع جهش های قائم است

۳۷- مطابق اصل فرانک- کوندون، رابطه بین شدت جهش با فاکتور فرانک- کوندون از توان چند برخوردار است؟

۱. یک ۲. صفر ۳. دو ۴. سه

۳۸- بر پایه اصل طرد پاولی، تابع اسپینی مناسب برای یک سیستم دو الکترونی مانند He کدام است؟

۱. $\alpha(1)\alpha(2)$ ۲. $\beta(1)\beta(2)$
۳. $\alpha(1)\beta(2) - \beta(1)\alpha(2)$ ۴. $\alpha(1)\beta(2) + \beta(1)\alpha(2)$

۳۹- مقدار قابل انتظار فاصله الکترون از هسته در اوربیتال اتمی $1s$ از کدام رابطه زیر بدست می آید؟

۱. $\langle r \rangle = \int 4\pi r^2 \psi_{1s}^2 dr$ ۲. $\langle r \rangle = \int \psi_{1s}^* r \psi_{1s} dV$ ۳. $\langle r \rangle = \int \psi_{1s}^2 dr$ ۴. $\langle r \rangle = \int \psi_{1s}^2 dV$

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۲۰ تشریحی: ۰

سری سوال: ۱ یک

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/گد درس: شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی (کاربردی)، شیمی گرایش محض ۱۱۴۰۲۷

۴۰- حاصل مطالعات گودسمیت و اولنیک منجر به شناسایی کدامیک از خصوصیات زیر گردید؟

۱. اندازه حرکت زاویه ای اوربیتالی الکترون
۲. اندازه حرکت زاویه ای اسپینی الکترون
۳. اندازه حرکت زاویه ای اوربیتالی هسته ای
۴. اندازه حرکت زاویه ای اسپینی هسته ای

| شماره سوال | پاسخ صحیح | وضعیت کلید |
|------------|-----------|-------------------|
| 1 | ج | عادي |
| 2 | ب | عادي |
| 3 | ج | عادي |
| 4 | ب | عادي |
| 5 | ب | عادي |
| 6 | ج | عادي |
| 7 | ب | عادي |
| 8 | ب | عادي |
| 9 | د | عادي |
| 10 | ج | عادي |
| 11 | ب | عادي |
| 12 | ب | عادي |
| 13 | د | عادي |
| 14 | ب | عادي |
| 15 | ج | عادي |
| 16 | الف | عادي |
| 17 | الف | عادي |
| 18 | الف | حذف با تاثير مثبت |
| 19 | ب | عادي |
| 20 | ب | عادي |
| 21 | ج | عادي |
| 22 | ب | عادي |
| 23 | د | عادي |
| 24 | د | حذف با تاثير مثبت |
| 25 | ج | عادي |
| 26 | ج | عادي |
| 27 | د | عادي |
| 28 | د | عادي |
| 29 | الف | عادي |
| 30 | ب | عادي |
| 31 | ج | عادي |
| 32 | الف | عادي |
| 33 | الف | عادي |
| 34 | الف | عادي |
| 35 | ج | عادي |
| 36 | ب | عادي |
| 37 | ج | عادي |
| 38 | ج | عادي |
| 39 | ب | عادي |
| 40 | ب | عادي |

www.salampnu.com

سایت مرجع دانشجوی پیام نور

- ✓ نمونه سوالات پیام نور : بیش از ۱۱۰ هزار نمونه سوال همراه با پاسخنامه
- تستی و تشریحی
- ✓ کتاب ، جزوه و خلاصه دروس
- ✓ برنامه امتحانات
- ✓ منابع و لیست دروس هر ترم
- ✓ دانلود کاملاً رایگان بیش از ۱۴۰ هزار فایل مختص دانشجویان پیام نور

www.salampnu.com

www.ShimiPedia.ir

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۲۰ تشریحی: ۰

سری سوال: یک ۱

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/گد درس: شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی (کاربردی)، شیمی گرایش محض ۱۱۱۴۰۲۷

استفاده از ماشین حساب مهندسی مجاز است

۱- کدامیک از گزینه های زیر در مورد تابع موج صحیح نمی باشد؟

- ۰.۱ توان دوم آن بیانگر چگالی احتمال است.
 ۰.۲ در مقادیر بی نهایت X هم محدود و هم معین است.
 ۰.۳ همواره حقیقی است.
 ۰.۴ در هر نقطه از فضا همواره تک مقداری است.

۲- نتیجه تاثیر اپراتور $\hat{D}_x \cdot \hat{x}$ روی تابع $\sin x$ کدام است؟

- ۰.۱ $x \cos x$ ۰.۲ $\sin x + x \cos x$ ۰.۳ $\cos x + x \sin x$ ۰.۴ $x \sin x$

۳- تعداد حالت همتراز انرژی به شماره n در اتم تک الکترونی کدام است؟

- ۰.۱ $2n$ ۰.۲ $2n^2$ ۰.۳ n^2 ۰.۴ n

۴- کدامیک از گزینه های زیر صحیح نمی باشد؟

- ۰.۱ به هر کمیت فیزیکی یک اپراتور خطی وابسته است
 ۰.۲ اپراتورها هیچ گاه موهومی نبوده و همواره حقیقی اند
 ۰.۳ به هر کمیت فیزیکی یک اپراتور هرمیتیک وابسته است
 ۰.۴ اپراتورهای مربوط به مختصات دکارتی ذره، مکانی هستند

۵- کدام گزینه در مورد مقدار قابل انتظار صحیح نمی باشد؟

- ۰.۱ میانگین مجموعه ای از اندازه گیری هاست.
 ۰.۲ نشان دهنده معین بودن یک کمیت است.
 ۰.۳ در یک اندازه گیری بخصوص در یک حالت بدست نمی آید.
 ۰.۴ از اصول موضوعه مکانیک کوانتومی است.

۶- کدامیک از شرایط زیر برای تابع موجی ψ صحیح نیست؟

- ۰.۱ ψ بایستی محدود باشد
 ۰.۲ ψ می بایست در هر نقطه معین، تک مقدار باشد
 ۰.۳ ψ باید مثبت باشد
 ۰.۴ ψ می بایست یک تابع پیوسته از مختصاتش باشد

۷- کدام یک از گزینه های زیر جزء خصوصیات منظومه کوانتومی شده نمی باشد؟

- ۰.۱ یک منظومه ذره ای است.
 ۰.۲ انرژی های مربوط به آن ردیف پیوسته ای را تشکیل می دهد.
 ۰.۳ مقادیر انرژی آن جدا از هم است.
 ۰.۴ دارای ردیف نامتناهی با مقادیر انرژی گسسته است.

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۲۰ تشریحی: ۰

سری سوال: ۱ یک

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/گد درس: شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی (کاربردی)، شیمی گرایش محض ۱۱۴۰۲۷

۸- در نمودار تغییرات چگالی احتمال موضعی برای یک بسته موج، در کدام نقطه چگالی احتمال بیشترین مقدار را دارد؟

۱. $\frac{x}{2\pi} = 1$ ۲. $\frac{x}{2\pi} = 0$ ۳. $x = 1$ ۴. $x \neq 0$

۹- در مدل ذره در جعبه یک بعدی، در کدام ناحیه انرژی پتانسیل صفر است؟

۱. $-\infty < x < 0$ ۲. $L < x < +\infty$ ۳. $-\infty < x < L$ ۴. $0 < x < L$

۱۰- در مدل ذره در جعبه یک بعدی، تعداد گره ها در تراز سوم نمودار دانسیته احتمال چند است؟

۱. صفر ۲. یک
۳. چهار ۴. سه

۱۱- کدامیک از ویژگی های مدل ذره در جعبه یک بعدی نمی باشد؟

۱. تابع پتانسیل متقارن است
۲. تابع موجی همواره زوج است
۳. شرایط مرزی حاکم است
۴. تراز های انرژی گسسته است

۱۲- مقدار قابل انتظار مجذور انرژی در مدل ذره در جعبه یک بعدی برابر با کدام گزینه است؟

۱. صفر ۲. E_n^2 ۳. E_n ۴. $\sqrt{\langle E_n^2 \rangle - \langle E_n \rangle^2}$

۱۳- طبق نظریه امواج، طول جعبه در مدل ذره در جعبه، L برابر با کدام گزینه است؟

۱. $\frac{\lambda}{2}$ ۲. 0 تا L ۳. $-\frac{L}{2}$ تا $+\frac{L}{2}$ ۴. $\frac{n\lambda}{2}$

۱۴- مقدار تابع موج ψ در محدوده $y > L_2$ در مدل ذره در جعبه سه بعدی برابر است با:

۱. ∞ ۲. صفر
۳. قابل اندازه گیری نیست ۴. یک

سری سوال: ۱ یک

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۲۰ تشریحی: ۰

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/گد درس: شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی (کاربردی)، شیمی گرایش محض ۱۱۱۴۰۲۷

۱۵- تابع موج ذره در جعبه یک بعدی به صورت $\psi = A \sin \frac{n\pi}{L} x$ می باشد. چنانچه ثابت A را دو برابر کنیم در این صورت مقدار انرژی ذره:

۱. دو برابر می شود
۲. چهار برابر می شود
۳. تغییر نمی کند
۴. $\sqrt{2}$ برابر می شود

۱۶- منظور از چند حالتی چیست؟

۱. تعداد حالت‌های مختلف که دارای انرژی یکسان باشند.
۲. تعداد حالت‌های مختلف که دارای انرژی متفاوت باشند.
۳. تعداد حالت‌های مختلف که دارای تابع موج یکسان باشند.
۴. تعداد حالت‌های مختلف که دارای انرژی متفاوت باشند.

۱۷- کدامیک از گزینه های زیر نشان دهند خاصیت ارتوگونال بودن توابع موجی است؟

۱. $\int_0^L \psi_i^* \psi_j dx = 0$ ۲. $\int_0^L \psi_i^* \psi_j dx = 1$ ۳. $\int_0^L \psi_i^* \psi_i dx = 1$ ۴. $\int_0^L \psi_i^* \psi_i dx = 0$

۱۸- متغیرهای تابع لاگرانژ عبارتند از:

۱. مکان و سرعت
۲. سرعت و زمان
۳. مکان و اندازه حرکت
۴. اندازه حرکت و زمان

۱۹- حاصل عبارت $\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}$ برای نوسانگر هارمونیک برابر با کدام گزینه است؟

۱. $m\ddot{x}$ ۲. $m\dot{x}$ ۳. $-kx$ ۴. kx

۲۰- انرژی در نوسانگر هارمونیک از دیدگاه کوانتومی (ذره ای):

۱. تابعی پیوسته و مقدار آن به دامنه نوسان بستگی دارد.
۲. تابعی گسسته و اختلاف بین انرژی ترازاها مقداری ثابت است.
۳. تابعی پیوسته با فواصل $h\nu_0$ است.
۴. تابعی پیوسته با فواصل $\hbar\nu_0$ است.

۲۱- انرژی کل ارتعاشی یک نوسانگر دو ذره ای برابر با کدام گزینه است؟

۱. $\frac{1}{2}mq^2 + V(q)$ ۲. $\frac{1}{2}m'q^2 + V(q)$ ۳. $\frac{1}{2}m'\dot{q}^2 + V(q)$ ۴. $\frac{1}{2}m^2\dot{q}^2 + V(q)$

سری سوال: ۱ یک

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۲۰ تشریحی: ۰

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/گد درس: شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی (کاربردی)، شیمی گرایش محض ۱۱۴۰۲۷

۲۲- رابطه بین تکانه زاویه ای و ممان اینرسی در چرخنده صلب عبارت است از:

$$L = \frac{I}{2\dot{\phi}^2} \quad .4 \quad L = I\dot{\phi}^2 \quad .3 \quad L = I\dot{\phi} \quad .2 \quad L = \frac{1}{2}I\dot{\phi}^2 \quad .1$$

۲۳- حاصل $[L_x, L_z]$ کدام است؟

$$-i\hbar\hat{L}_y \quad .4 \quad \hbar\hat{L}_y \quad .3 \quad -\hbar\hat{L}_y \quad .2 \quad i\hbar\hat{L}_y \quad .1$$

۲۴- اگر حرکت در صفحه ثابت انجام بگیرد، کدام گزینه برابر با صفر است؟

$$[L_x, L_y] \quad .4 \quad \hat{L}_x, \hat{L}_z \quad .3 \quad \hat{L}_x, \hat{L}_y \quad .2 \quad \hat{L}_z \quad .1$$

۲۵- درجه انحطاط تراز سوم انرژی در چرخنده صلب سه بعدی برابر با چند است؟

$$7 \quad .4 \quad 5 \quad .3 \quad 3 \quad .2 \quad 1 \quad .1$$

۲۶- در یک سیستم دو ذره ای (دو سیستم تک ذره مستقل) کدامیک از گزینه های زیر صحیح نمی باشد؟

$$\hat{E} = \hat{E}_I + \hat{E}_{II} \quad .4 \quad \psi = \psi_I + \psi_{II} \quad .3 \quad \psi = \psi_I \times \psi_{II} \quad .2 \quad \hat{H} = \hat{H}_I + \hat{H}_{II} \quad .1$$

۲۷- پارامتر λ در اتم های تک الکترونی معرف کدام است؟

۱. عدد کوانتومی مغناطیسی
۲. عدد کوانتومی اصلی
۳. عدد کوانتومی اسپین
۴. عدد کوانتومی اربیتال

۲۸- منظور از مرتبه انحطاط در اتم های چند الکترونی چیست؟

۱. تعداد l های متفاوت با n یکسان
۲. تعداد m_l متفاوت با l یکسان
۳. تعداد جهت گیری های متفاوت تکانه زاویه ای در فضا
۴. موارد ۲ و ۳ صحیح است

۲۹- تابع توزیع شعاعی به صورت کدام گزینه بیان می شود؟

$$4\pi r^2 R^2 \quad .1 \quad 4\pi r^2 R^2 dr \quad .2 \quad 4\pi(r+dr)^2 dr \quad .3 \quad 4\pi(r+dr)^2 R^2 dr \quad .4$$

۳۰- رابطه نهایی بین تکانه زاویه ای با ممان مغناطیسی در الکترون کدام است؟

$$\vec{\mu} = \frac{-e}{2m_e} \vec{L} \quad .1 \quad \mu_z = \pm \frac{e\hbar}{2m} \quad .2 \quad \mu_z = \frac{e\hbar}{2m} \quad .3 \quad \vec{\mu} = \pm \frac{e}{2m_e} \vec{L} \quad .4$$

۳۱- اپراتور هامیلتون در روش اختلال به چه صورتی بیان می شود؟

$$\hat{H}_0 = \hat{H} + \varepsilon w \quad .4 \quad \hat{H} = \hat{H}_0 + \varepsilon w \quad .3 \quad \hat{H}^{(1)} = \hat{H} + \varepsilon w \quad .2 \quad \hat{H} = \hat{H}^{(1)} + \varepsilon w \quad .1$$

سری سوال: ۱ یک

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۲۰ تشریحی: ۰

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/گد درس: شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی (کاربردی)، شیمی گرایش محض ۱۱۱۴۰۲۷

۳۲- انرژی اتم هلیوم مطابق مدل ذره مستقل چه مقدار بدست می آید؟

۱. $-8E_H$ ۲. $-4E_H$ ۳. $-2E_H$ ۴. $-\frac{1}{2}E_H$

۳۳- تراز سه تایی در اتم هلیوم:

۱. قسمت اسپینی آنها متقارن است
۲. قسمت فضایی آنها متقارن است
۳. قسمت اسپینی آنها ضد متقارن است
۴. قسمت فضایی آنها ضد متقارن است

۳۴- ضریب نرمالیزاسیون در دترمینان اسلیتر برای اتم بریلیم برابر با کدام گزینه است؟

۱. $(4!)^{-1/2}$ ۲. $\sqrt{4!}$ ۳. $\frac{1}{4!}$ ۴. $\frac{1}{\sqrt{4}}$

۳۵- انرژی سیستم π در اولین حالت برانگیخته مولکول اتیلن مطابق با روش هوکل کدام گزینه است؟

۱. $\alpha + \beta$ ۲. $\alpha - \beta$ ۳. $2(\alpha - \beta)$ ۴. 2α

۳۶- کدامیک از گزینه های زیر بیان درستی از اصل فرانک- کوندون نمی باشد؟

۱. جهش الکترونی با برانگیختگی ارتعاشی همراه است
۲. به هنگام جذب تابش، تغییرات انرژی جنبشی از تغییرات انرژی پتانسیل مولکول بیشتر است
۳. در هنگام جهش الکترونی - ارتعاشی فاصله بین هسته ها تغییر نمی کند
۴. جهش های صورت گرفته از نوع جهش های قائم است

۳۷- مطابق اصل فرانک- کوندون، رابطه بین شدت جهش با فاکتور فرانک- کوندون از توان چند برخوردار است؟

۱. یک ۲. صفر ۳. دو ۴. سه

۳۸- بر پایه اصل طرد پاولی، تابع اسپینی مناسب برای یک سیستم دو الکترونی مانند He کدام است؟

۱. $\alpha(1)\alpha(2)$ ۲. $\beta(1)\beta(2)$
۳. $\alpha(1)\beta(2) - \beta(1)\alpha(2)$ ۴. $\alpha(1)\beta(2) + \beta(1)\alpha(2)$

۳۹- مقدار قابل انتظار فاصله الکترون از هسته در اوربیتال اتمی $1s$ از کدام رابطه زیر بدست می آید؟

۱. $\langle r \rangle = \int 4\pi r^2 \psi_{1s}^2 dr$ ۲. $\langle r \rangle = \int \psi_{1s}^* r \psi_{1s} dV$ ۳. $\langle r \rangle = \int \psi_{1s}^2 dr$ ۴. $\langle r \rangle = \int \psi_{1s}^2 dV$

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۲۰ تشریحی: ۰

سری سوال: ۱ یک

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/گد درس: شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی (کاربردی)، شیمی گرایش محض ۱۱۴۰۲۷

۴۰- حاصل مطالعات گودسمیت و اولنیک منجر به شناسایی کدامیک از خصوصیات زیر گردید؟

۱. اندازه حرکت زاویه ای اوربیتالی الکترون
۲. اندازه حرکت زاویه ای اسپینی الکترون
۳. اندازه حرکت زاویه ای اوربیتالی هسته ای
۴. اندازه حرکت زاویه ای اسپینی هسته ای

| شماره سوال | پاسخ صحیح | وضعیت کلید |
|------------|-----------|-------------------|
| 1 | ج | عادي |
| 2 | ب | عادي |
| 3 | ج | عادي |
| 4 | ب | عادي |
| 5 | ب | عادي |
| 6 | ج | عادي |
| 7 | ب | عادي |
| 8 | ب | عادي |
| 9 | د | عادي |
| 10 | ج | عادي |
| 11 | ب | عادي |
| 12 | ب | عادي |
| 13 | د | عادي |
| 14 | ب | عادي |
| 15 | ج | عادي |
| 16 | الف | عادي |
| 17 | الف | عادي |
| 18 | الف | حذف با تاثير مثبت |
| 19 | ب | عادي |
| 20 | ب | عادي |
| 21 | ج | عادي |
| 22 | ب | عادي |
| 23 | د | عادي |
| 24 | د | حذف با تاثير مثبت |
| 25 | ج | عادي |
| 26 | ج | عادي |
| 27 | د | عادي |
| 28 | د | عادي |
| 29 | الف | عادي |
| 30 | ب | عادي |
| 31 | ج | عادي |
| 32 | الف | عادي |
| 33 | الف | عادي |
| 34 | الف | عادي |
| 35 | ج | عادي |
| 36 | ب | عادي |
| 37 | ج | عادي |
| 38 | ج | عادي |
| 39 | ب | عادي |
| 40 | ب | عادي |

www.salampnu.com

سایت مرجع دانشجوی پیام نور

- ✓ نمونه سوالات پیام نور : بیش از ۱۱۰ هزار نمونه سوال همراه با پاسخنامه
- تستی و تشریحی
- ✓ کتاب ، جزوه و خلاصه دروس
- ✓ برنامه امتحانات
- ✓ منابع و لیست دروس هر ترم
- ✓ دانلود کاملاً رایگان بیش از ۱۴۰ هزار فایل مختص دانشجویان پیام نور

www.salampnu.com

www.ShimiPedia.ir

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۲۰ تشریحی: ۰

سری سوال: یک ۱

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/گد درس: شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی (کاربردی)، شیمی گرایش محض ۱۱۱۴۰۲۷

استفاده از ماشین حساب مهندسی مجاز است

۱- حاصل اثر دادن اپراتور $[\hat{x}^2 + \hat{D}_x]$ روی تابع $f(x) = e^{2ax}$ کدام است؟

۰.۱ $e^{2ax}(x+2a)$ ۰.۲ $e^{2ax}(x^2+2a)$ ۰.۳ $e^{ax}(x+2a)$ ۰.۴ $e^{ax}(x+a)$

۲- اپراتور انرژی جنبشی مطابق با کدام گزینه است؟

۰.۱ $-\frac{\hbar^2}{2m}(\hat{P}_x^2 + \hat{P}_y^2 + \hat{P}_z^2)$ ۰.۲ $-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$
 ۰.۳ $-\frac{\hbar^2}{2m}(\hat{P}_x + \hat{P}_y + \hat{P}_z)$ ۰.۴ $-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$

۳- اپراتور مربوط به انرژی پتانسیل:

- ۰.۱ فقط تابع مختصات است
 ۰.۲ فقط تابع تکانه خطی است
 ۰.۳ تابع مختصات و تکانه خطی است
 ۰.۴ تابع مختصات و زمان است

۴- کدام از گزینه های زیر معرف خطای اندازه گیری است؟

۰.۱ $\langle \Delta x \rangle = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$ ۰.۲ $\langle \Delta x \rangle = (\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2)^{\frac{1}{2}}$
 ۰.۳ $\langle \Delta x \rangle = \langle x \rangle^2 - \langle x^2 \rangle$ ۰.۴ $\langle \Delta x \rangle = (\langle x \rangle^2 - \langle x^2 \rangle)^{\frac{1}{2}}$

۵- کدامیک از توابع زیر نمیتواند موهومی باشد؟

۰.۱ ψ ۰.۲ ψ^* ۰.۳ $\psi^*\psi$ ۰.۴ $a\psi$ (a: ثابت)

۶- بخش زمانی تابع موج ذره در جعبه یک بعدی کدام است؟

۰.۱ $e^{i\omega t}$ ۰.۲ $e^{-i\omega t}$ ۰.۳ $e^{\frac{iEt}{\hbar}}$ ۰.۴ $e^{\frac{iEt}{h}}$

۷- کدامیک از اپراتور های زیر جابجا شدنی هستند؟

۰.۱ $\hat{D}_x \cdot \hat{x}$ ۰.۲ $\hat{x} \cdot \hat{D}_x$ ۰.۳ $-\hat{P}_x^2 \cdot \hat{x}^2$ ۰.۴ $\hat{x} \cdot \sin ax$

سری سوال: ۱ یک

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۲۰ تشریحی: ۰

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/گد درس: شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی (کاربردی)، شیمی گرایش محض ۱۱۴۰۲۷

۸- بسته موج عبارت است از:

۱. مجموعه ای که ردیف پیوسته ای از k یا P داشته باشد.
۲. مجموعه ای که ردیف پیوسته ای از k یا E داشته باشد.
۳. انرژی بسته موج را میتوان به صورت انتگرال فوریه بیان کرد
۴. گزینه ۱ و ۳

۹- مقدار قابل انتظار انرژی در هر زمان در مدل ذره در جعبه یک بعدی از کدام رابطه بدست می آید؟

$$\langle E \rangle = \int_0^L \psi^*(x,t) \hat{H} \psi(x,t) dx \quad .2$$

$$\langle E \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x,t) \hat{H} \psi(x,t) dx \quad .1$$

$$\langle E \rangle = \int_0^L \psi^*(x) \hat{H} \psi(x) dx \quad .4$$

$$\langle E \rangle = \int_{-L/2}^{+L/2} \psi^*(x) \hat{H} \psi(x) dx \quad .3$$

۱۰- هنگامیکه حجم فضای سه بعدی ذره در جعبه بسیار بزرگ شود، انرژی:

۱. همواره کمیتی است گسسته
۲. پیوسته می شود
۳. هرمقداری را می پذیرد
۴. برابر با صفر می گردد

۱۱- در صورتیکه انرژی تراز اول درمورد ذره در جعبه سه بعدی مکعبی معادل $2.42 \times 10^4 \text{ e.V}$ باشد. انرژی تراز چهارم آن چند است؟

۱. $7.26 \times 10^4 \text{ e.V}$
۲. $8.87 \times 10^4 \text{ e.V}$
۳. $3.22 \times 10^4 \text{ e.V}$
۴. $5.11 \times 10^4 \text{ e.V}$

۱۲- نتیجه ای که از پدیده چند حالتی حاصل می شود کدام گزینه است؟

۱. در یک گستره از انرژی، تعداد حالتها از تعداد ترازها بیشتر است.
۲. در یک گستره از انرژی، تعداد توابع موجی از تعداد حالتها بیشتر است.
۳. در یک گستره از انرژی، تعداد ترازها از تعداد حالتها بیشتر است.
۴. در یک گستره از انرژی، تعداد توابع موجی از تعداد حالتها کمتر است.

۱۳- در مدل نوسانگر هارمونیک، مقدار ω برابر است با:

۱. $2\pi\nu$
۲. $4\pi^2\nu^2$
۳. $\frac{k}{m}$
۴. گزینه ۱ و ۳

سری سوال: ۱ یک

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۲۰ تشریحی: ۰

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/گد درس: شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی (کاربردی)، شیمی گرایش محض ۱۱۴۰۲۷

۱۴- مقدار فرکانس مشخصه سیستم در مدل نوسانگر هارمونیک برابر کدام گزینه است؟

۱. $\frac{k}{m}$ ۲. $2\pi v$ ۳. $4\pi^2 v^2$ ۴. $\frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{m}}$

۱۵- کدام عبارت درست است؟

۱. انرژی نقطه صفر به دما وابسته است.
۲. اختلاف دو بدوی انرژی حالت‌های نوسانگر هماهنگ مقدار ثابتی است.
۳. عبارت کلاسیک انرژی پتانسیل نوسانگر هماهنگ یک کمیت ناپیوسته است.
۴. برای انرژی نوسانگر محدودیت انرژی وجود دارد.

۱۶- کدامیک از سیستم‌های زیر دارای انرژی نقطه صفر است؟

۱. ذره درجه یک بعدی
۲. ذره آزاد
۳. نوسانگر هارمونیک
۴. چرخنده صلب

۱۷- مقدار اپراتور \hat{L}^2 در مدل چرخنده صلب برابر با کدام گزینه است؟

۱. $-\frac{\hbar^2}{2I} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$ ۲. $-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$ ۳. $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}$ ۴. $-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}$

۱۸- حاصل $[\hat{L}^2, \hat{L}_x]$ کدام است؟

۱. $i\hbar \hat{L}_y$ ۲. صفر ۳. $-i\hbar \hat{L}_y$ ۴. $i\hbar$

۱۹- اپراتور \hat{L}^2 مستقل از کدامیک از کمیات زیر است؟

۱. r ۲. θ ۳. φ ۴. \hbar

۲۰- مقدار E_{rot} در چرخنده صلب سه بعدی برابر با کدام گزینه است؟

۱. $\frac{L^2}{2\hbar}$ ۲. $\frac{J(J+1)\hbar^2}{2I}$ ۳. $m\hbar$ ۴. گزینه ۱ و ۲

۲۱- تعداد حالات L_z در تراز سوم انرژی چرخشی برابر با چند است؟

۱. ۱ ۲. ۳ ۳. ۵ ۴. ۷

سری سوال: ۱ یک

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۲۰ تشریحی: ۰

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/گد درس: شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی (کاربردی)، شیمی گرایش محض ۱۱۴۰۲۷

۲۲- مقادیر ویژه توان دوم تکانه زاویه ای در سیستم دو ذره ای اتم هیدروژن برابر با کدام است؟

۱. $\sqrt{l(l+1)}\hbar$ ۲. $l(l+1)\hbar^2$ ۳. $J(J+1)\hbar^2$ ۴. $\sqrt{J(J+1)}\hbar$

۲۳- مطابق مدل بور، رابطه بین انرژی با بارالکترون چگونه است؟

۱. $-e$ ۲. $-e^2$ ۳. $-e^4$ ۴. $-e^{-1}$

۲۴- مقدار عدد کوانتومی مغناطیسی m_l در کدام توابع موجی برابر با صفر است؟

۱. ψ_{2s} و ψ_{2p_x} ۲. ψ_{2s} و $\Psi_{3d_{x^2-y^2}}$
۳. ψ_{2s} و ψ_{2p_y} ۴. ψ_{2s} و ψ_{2p_z}

۲۵- سطوح تک دانسیته برای چه اوربیتال هایی به صورت کره هایی هم مرکز است؟

۱. اربیتال s ۲. اربیتال p
۳. اربیتال d ۴. بستگی به نوع ابر الکترونی دارد

۲۶- طیف مربوط به سری اول بالمر مربوط به چه جهشی می باشد؟

۱. جهش الکترون از $n=2$ به $n=3$ ۲. جهش الکترون از $n=3$ به $n=2$
۳. جهش الکترون از $n=1$ به $n=2$ ۴. جهش الکترون از $n=2$ به $n=1$

۲۷- مقدار عددی m_s برابر است با:

۱. $+\frac{1}{2}$ ۲. $-\frac{1}{2}$ ۳. $\pm\frac{1}{2}$ ۴. $\pm\frac{1}{2}\hbar$

۲۸- اپراتور $\hat{\sigma}_y$ برابر با کدام گزینه است؟

۱. $\frac{\hbar}{2}\hat{S}_y$ ۲. $\frac{2}{\hbar}\hat{S}_y$ ۳. $\frac{\hbar}{i}\hat{S}_y$ ۴. $i\hbar\hat{S}_y$

۲۹- مقدار $\hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_x$ برابر است با:

۱. $i\hat{\sigma}_y$ ۲. $-i\hat{\sigma}_y$ ۳. $-\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y$ ۴. صفر

سری سوال: ۱ یک

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۲۰ تشریحی: ۰

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/گد درس: شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی (کاربردی)، شیمی گرایش محض ۱۱۴۰۲۷

۳۰- کدامیک از گزینه های زیر مشخص کننده حالت ذره نمی باشد؟

۱. انرژی
۲. مولفه Z تکانه زاویه ای اوربیتالی
۳. مولفه Z اسپین
۴. اسپین

۳۱- روش اختلال:

۱. فقط در مواردی کاربرد دارد که عامل اختلال کوچک باشد.
۲. فقط برای اتم هیدروژن کاربرد دارد.
۳. فقط در مواردی کاربرد دارد که تابع قابل حدس زدن باشد.
۴. در تمام موارد فوق قابل استفاده است.

۳۲- عبارت ψ_i^1 در روش اختلال مطابق با کدام گزینه است؟

۱. $\psi_i^0 + \sum \frac{\epsilon W_{ji}}{E_i^0 - E_j^0} \psi_j^0$
۲. $\psi_i^0 + \sum \frac{\epsilon W_{ij}}{E_i^0 - E_j^0} \psi_j^0$
۳. $\psi_i^0 + \sum \frac{\epsilon W_{ji}}{E_j^0 - E_i^0} \psi_j^0$
۴. $\psi_i^0 + \sum \frac{\epsilon W_{ij}}{E_j^0 - E_i^0} \psi_j^0$

۳۳- انرژی اتم هلیوم با استفاده از روش اختلال مطابق با کدام گزینه بدست می آید؟

۱. $Z^2 + \frac{5}{8}Z$
۲. $Z + \frac{5}{8}Z$
۳. $Z - \frac{5}{8}Z$
۴. $-Z^2 + \frac{5}{8}Z$

۳۴- در روش هوکل، منظور از انتگرالهای نرمال شدگی و تبادلی به ترتیب کدام است؟

۱. Hii و Sij
۲. Hij و Sij
۳. Hij و Sii
۴. Hii و Sii

۳۵- مقدار کمیت β در مولکول بوتادین طبق مدل هوکل برابر با کدام گزینه است؟

۱. $-\frac{1}{2}(E_{c=c} - E_{c-c})$
۲. $\frac{1}{2}(E_{c=c} - E_{c-c})$
۳. $(E_{c=c} - E_{c-c})$
۴. $(E_{c-c} - E_{c=c})$

۳۶- انرژی مولکول بنزن مطابق با روش هوکل برابر با کدام گزینه است؟

۱. $6\alpha + 6\beta$
۲. $6\alpha + 8\beta$
۳. $6\alpha - 6\beta$
۴. $6\alpha - 8\beta$

سری سوال: ۱ یک

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۲۰ تشریحی: ۰

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/گد درس: شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی (کاربردی)، شیمی گرایش محض ۱۱۴۰۲۷

۳۷- انرژی یک فوتون با طول موج $0.01A^0$ بر حسب eV چقدر است؟ و $h = 6.63 \times 10^{-34} J.s$ و $ev = 1.6 \times 10^{-19} J$

۱. 1.2×10^6 ۲. 1.2×10^4 ۳. 1.2×10^8 ۴. 1.2×10^2

۳۸- حاصل عبارت $[\hat{A}, \hat{A}^3]$ کدام است؟

۱. A ۲. صفر ۳. A^2 ۴. ۱

۳۹- فرکانس مشخصه ارتعاش در بررسی کلاسیک مولکول، با فرکانس جذبی در کدام ناحیه برابر است؟

۱. ریز موج ۲. قرمز ۳. فرابنفش ۴. زیر قرمز

۴۰- کدام مورد زیر درباره تقریب هوکل صحیح نیست؟

۱. برای توصیف وضع الکترونهای π است
۲. برای ترکیباتی که پیوند π مزدوج دارند قابل استفاده است
۳. مشتق از نظریه LCAO - MO است
۴. انرژی پیوند σ را به صورت تقریبی محاسبه می کند

| وضعیت کلید | پاسخ صحیح | د | ج | ب | الف | شماره سوال |
|------------|-----------|---|---|---|-----|------------|
| عادی | | | | | ب | ۱ |
| عادی | | | | | د | ۲ |
| عادی | | | | | الف | ۳ |
| عادی | | | | | ب | ۴ |
| عادی | | | | | ج | ۵ |
| عادی | | | | | ب | ۶ |
| عادی | | | | | د | ۷ |
| عادی | | | | | الف | ۸ |
| عادی | | | | | الف | ۹ |
| عادی | | | | | ب | ۱۰ |
| عادی | | | | | ب | ۱۱ |
| عادی | | | | | الف | ۱۲ |
| عادی | | | | | الف | ۱۳ |
| عادی | | | | | د | ۱۴ |
| عادی | | | | | ب | ۱۵ |
| عادی | | | | | ج | ۱۶ |
| عادی | | | | | ب | ۱۷ |
| عادی | | | | | ب | ۱۸ |
| عادی | | | | | الف | ۱۹ |
| عادی | | | | | ب | ۲۰ |
| عادی | | | | | ج | ۲۱ |
| عادی | | | | | ب | ۲۲ |
| عادی | | | | | ج | ۲۳ |
| عادی | | | | | د | ۲۴ |
| عادی | | | | | الف | ۲۵ |
| عادی | | | | | ب | ۲۶ |
| عادی | | | | | ج | ۲۷ |
| عادی | | | | | ب | ۲۸ |
| عادی | | | | | الف | ۲۹ |
| عادی | | | | | د | ۳۰ |
| عادی | | | | | الف | ۳۱ |
| عادی | | | | | الف | ۳۲ |
| عادی | | | | | د | ۳۳ |
| عادی | | | | | ج | ۳۴ |
| عادی | | | | | الف | ۳۵ |
| عادی | | | | | ب | ۳۶ |
| عادی | | | | | الف | ۳۷ |
| عادی | | | | | ب | ۳۸ |
| عادی | | | | | د | ۳۹ |
| عادی | | | | | د | ۴۰ |

www.salampnu.com

سایت مرجع دانشجوی پیام نور

- ✓ نمونه سوالات پیام نور : بیش از ۱۱۰ هزار نمونه سوال همراه با پاسخنامه
- تستی و تشریحی
- ✓ کتاب ، جزوه و خلاصه دروس
- ✓ برنامه امتحانات
- ✓ منابع و لیست دروس هر ترم
- ✓ دانلود کاملاً رایگان بیش از ۱۴۰ هزار فایل مختص دانشجویان پیام نور

www.salampnu.com

www.ShimiPedia.ir

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۲۰ تشریحی: ۰

سری سوال: یک ۱

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/گد درس: شیمی گرایش محض، شیمی (کاربردی)، شیمی (شیمی فیزیک) ۱۱۱۴۰۲۷

۱- کدام مورد از اصول موضوعه مکانیک کوانتومی نمی باشد؟

۱. به هر کمیت فیزیکی مشاهده پذیر یک اپراتور خطی و هرمیتی وابسته می باشد.
۲. تابع حالت تابعی از مکان و زمان است و دارای شرایط مرزی و نرمال می باشد
۳. به هر کمیت فیزیکی مشاهده پذیر یک اپراتور خطی غیر هرمیتی وابسته می باشد.
۴. توابع حالت قابل قبول از جواب های معادله شرودینگرند، از آن دسته جواب هایی که واجد شرایط تحمیل شده بر تابع حالت نیز باشند.

۲- حاصل کدامیک اپراتور واحد می شود؟

۱. $[\hat{D}_x, \hat{x}]$ ۲. $[\hat{x}, \hat{D}_x^2]$ ۳. $[\hat{x}^2, \hat{D}_x^2]$ ۴. $[\hat{x}^2, \hat{D}_x]$

۳- حاصل اثر اپراتور \hat{D}_x بر تابع $\sin x$ کدام گزینه زیر است؟

۱. $x \sin x$ ۲. $\cos x$ ۳. $x \cos x$ ۴. $-\sin x$

۴- انرژی کدام سیستم پیوسته می باشد؟

۱. ذره در جعبه یک بعدی
۲. ذره در جعبه سه بعدی
۳. ذره آزاد
۴. اتم تک الکترونی

۵- بخش زمانی تابع موج وابسته به زمان سیستم ذره در جعبه یک بعدی کدام است؟

۱. $\frac{-Et}{e^h}$ ۲. $\frac{Et}{e^h}$ ۳. $\frac{-iEt}{e^h}$ ۴. $\frac{+iEt}{e^h}$

۶- کدام تابع می تواند تابع ویژه \bar{D}_x باشد؟

۱. $e^{\alpha x}$ ۲. $\sin \alpha x$ ۳. $\cos \alpha x$ ۴. x

۷- حالت ایستای سیستم دارای چه شرایطی می باشد؟

۱. توابع وابسته به مکان و زمان
۲. تابع پتانسیل مستقل از زمان
۳. پتانسیل وابسته به مکان و زمان
۴. توابع وابسته به زمان

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۲۰ تشریحی: ۰

سری سوال: ۱ یک

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/گد درس: شیمی گرایش محض، شیمی (کاربردی)، شیمی (شیمی فیزیک) ۱۱۱۴۰۲۷

۸- در تابع موج زیر مقدار A کدام یک می تواند باشد؟

$$\Psi(x) = A \sin \frac{n\pi x}{L}$$

۱. $\frac{2}{L}$ ۲. $\left(\frac{2}{L}\right)^{\frac{1}{2}}$ ۳. $\left(\frac{L}{2}\right)^{\frac{1}{2}}$ ۴. $\left(\frac{L}{2}\right)^{\frac{1}{2}}$

۹- اگر ابعاد جعبه سه بعدی خیلی بزرگ باشد، مقدار انرژی ذره در جعبه سه بعدی چگونه می باشد؟

۱. صفر ۲. پیوسته ۳. ناپیوسته ۴. هیچکدام

۱۰- مقادیر مجاز انرژی ذره ای به جرم m در جعبه یک بعدی به طول L از کدام رابطه زیر به دست می آید؟

۱. $\frac{n^2 \hbar^2}{8mL^2}$ ۲. $\frac{n^2 \hbar^2}{8mL^2}$ ۳. $\frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{8mL^2}$ ۴. $\frac{8mL^2}{n^2 \pi^2 \hbar^2}$

۱۱- تعداد حالات همترازی با انرژی $E = \frac{12\hbar^2}{8ma^2}$ ذره در جعبه سه بعدی کدام است؟

۱. ۶ ۲. ۱ ۳. ۳ ۴. ۲

۱۲- در مورد انرژی نقطه صفر نوسانگر هماهنگ کدام یک صحیح نیست؟

۱. مستقل از دما است. ۲. صفر است.
۳. مستقل از دما است و غیر صفر است. ۴. در دمای صفر مطلق هم حفظ می شود.

۱۳- اپراتور اندازه حرکت زاویه ای در بعد Z در چرخنده صلب دوبعدی کدام است؟

۱. $m\hbar$ ۲. \hbar ۳. $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \Phi}$ ۴. $\frac{\partial}{\partial \Phi}$

۱۴- چرخنده صلب در صفحه به ازای هریک از مقادیر کوانتومی انرژی چند حالت همترازی دارد؟

۱. ۲ ۲. ۱ ۳. ۰ ۴. ۳

۱۵- کدامیک از دو اپراتور زیر به طور همزمان شناخته می شود؟

۱. \hat{L}_z, \hat{L}_y ۲. \hat{D}_x, \hat{x} ۳. \hat{H}^2, \hat{L} ۴. \hat{H}, \hat{L}_z

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۲۰ تشریحی: ۰

سری سوال: ۱: یک

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/گد درس: شیمی گرایش محض، شیمی (کاربردی)، شیمی (شیمی فیزیک) ۱۱۱۴۰۲۷

۱۶- اپراتور مجذور اندازه حرکت زاویه ای به کدام متغیر وابسته نیست؟

۱. r ۲. φ ۳. θ ۴. φ, θ

۱۷- مقدار انرژی در تراز اول انرژی چرخشی کدام است؟

۱. $\frac{2h^2}{I}$ ۲. 0 ۳. $\frac{h^2}{I}$ ۴. $\frac{3h^2}{2I}$

۱۸- مقدار \hat{L}_z بر حسب مختصات دکارتی کدام است؟

۱. $\hat{z}p_x - \hat{x}p_z$ ۲. $\hat{x}p_y - \hat{y}p_x$ ۳. $\hat{y}p_z - \hat{z}p_y$ ۴. هیچکدام

۱۹- برای چرخنده صلب در حالت اصلی کدام کمیت ها صفر می باشند؟

۱. انرژی و قدر مطلق تکانه زاویه ای
۲. انرژی، قدر مطلق تکانه زاویه ای و L_z
۳. فقط انرژی
۴. انرژی و L_z

۲۰- انرژی الکترونی اتم هیدروژن وابسته به کدام کمیت ها می باشد؟

۱. n^2 ۲. n^2, z ۳. n^2, μ, z^2 ۴. μ

۲۱- مقدار عدد کوانتومی مغناطیسی کدام اوربیتال صفر است؟

۱. $\Psi_{3dz^2}, \Psi_{1s}, \Psi_{2pz}$ ۲. $\Psi_{3dz^2}, \Psi_{1s}, \Psi_{2py}$
۳. $\Psi_{3dz^2}, \Psi_{2s}, \Psi_{2px}$ ۴. $\Psi_{3dz^2}, \Psi_{2px}, \Psi_{2pz}$

۲۲- مقدار dv در مختصات قطبی کدام می باشد؟

۱. $4\pi r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi$ ۲. $dr d\theta d\phi$
۳. $r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi$ ۴. $r^2 dr d\theta d\phi$

۲۳- یک مگنتون بوهر همان مغناطیسی برابر با کدام کمیت می باشد؟

۱. $\frac{e\hbar}{2m_e}$ ۲. $\frac{\hbar}{2m_e}$ ۳. $\frac{e\hbar}{m_e}$ ۴. $\frac{\hbar}{2}$

تعداد سوالات: تستی: ۴۰ تشریحی: ۰

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۲۰ تشریحی: ۰

سری سوال: ۱ یک

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/گد درس: شیمی گرایش محض، شیمی (کاربردی)، شیمی (شیمی فیزیک) ۱۱۱۴۰۲۷

۲۴- α تابع ویژه اپراتور \hat{S}_Z چه مقدار ویژه ای دارد؟

۱. $\frac{\hbar}{2}$ ۲. $\frac{1}{2}$ ۳. \hbar ۴. $-\frac{1}{2}$

۲۵- کدام اپراتورها جابجاپذیر هستند؟

۱. S, S_Z ۲. S^2, S_z ۳. S_Z, S_y ۴. S_z, S_x

۲۶- ضریب نرمال کنندگی در قضیه واریاسیون کدام است؟

۱. $\int \phi^* \phi d\tau$ ۲. $\frac{1}{\int \phi^* \phi d\tau}$ ۳. $\left(\frac{1}{\int \phi^* \phi d\tau}\right)^2$ ۴. $\int \phi^* H \phi d\tau$

۲۷- یک بوهر چند آنگستروم است؟

۱. 0.627 ۲. 0.5292 ۳. 0.2700 ۴. 1

۲۸- در مورد تقریب اسلیتر کدام مورد صحیح می باشد؟

۱. پتانسیل مربوط به برهمکنش ها ناچیز فرض می گردد.
۲. در اتم اثر الکترونها بر روی الکترون معین را همانند یک اثر محافظتی متوسط در مقابل بار هسته می توان تلقی کرد.
۳. تابع آزمون را به صورت ترکیب خطی از توابع موج در نظر گرفته می شود
۴. همه موارد

۲۹- کدام یک از ذرات زیر فرمیون می باشند؟

۱. الکترون ۲. فوتون ۳. هسته هلیوم ۴. موارد یک و سه

۳۰- در حالت برانگیخته اتم هلیوم، حالات همترازی چگونه است؟

۱. سه-سه ۲. یک-سه ۳. یک-یک ۴. دو-یک

۳۱- در روش اختلال، انرژی مرتبه اول اختلال کدام عبارت است؟

۱. $E^{(0)} + \int \Psi_1^* w \Psi_1 d\tau$ ۲. $\int \Psi_0^* w \Psi_1 d\tau$ ۳. $\int \Psi_1^* w \Psi_1 d\tau$ ۴. $\int \Psi_1^* w \Psi_1^0 d\tau$

تعداد سوالات: تستی: ۴۰: تشریحی: ۰

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۱۲۰: تشریحی: ۰

سری سوال: ۱: یک

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/گد درس: شیمی گرایش محض، شیمی (کاربردی)، شیمی (شیمی فیزیک) (۱۱۱۴۰۲۷)

۳۲- بر اساس روش هوکل، انرژی سیستم π در حالت اصلی مولکول اتیلن کدام است؟

۱. $2(\alpha - \beta)$ ۲. $\alpha - 2\beta$ ۳. $2(\alpha + \beta)$ ۴. $\alpha + 2\beta$

۳۳- انرژی عدم استقرار مولکول ۱-۳ دی بوتادی ان کدام یک است؟

۱. 2β ۲. -0.472β ۳. β ۴. 0.472β

۳۴- کدامیک در مورد اصل فرانک کوندون صحیح نیست؟

۱. به هنگام جذب فوتون انرژی پتانسیل کاهش می یابد.

۲. به هنگام جذب فوتون، انرژی پتانسیل افزایش می یابد.

۳. به هنگام جذب فوتون، انرژی جنبشی بسیار کم تغییر می نماید.

۴. به هنگام جذب فوتون، فاصله بین هسته ها تغییر نمی نماید.

۳۵- انرژی سیستم π در حالت اصلی مولکول بنزن با استفاده از روش هوکل کدام است؟

۱. $2\alpha + 2\beta$ ۲. $2\alpha + 4\beta$ ۳. $6\alpha + 8\beta$ ۴. $4\alpha + 6\beta$

۳۶- در مولکول آلیل، بر اساس روش هوکل کدام گزینه صحیح نمی باشد؟

۱. $H_{13} = 0$ ۲. $H_{11} = \alpha$ ۳. $S_{22} = 1$ ۴. $H_{13} = \beta$

۳۷- در حالت اصلی مولکول بنزن کدام ترازهای بنزن براساس اوربیتال روش اوربیتال مولکولی هوکل، پر می گردد؟

۱. $k=3$ ۲. $k=\pm 2$ ۳. $k=0, K=\pm 1$ ۴. $K=\pm 1$

۳۸- کدام یک از ترکیبات زیر بوزون می باشد؟

۱. الکترون ۲. پروتون ۳. نوترون ۴. فوتون

۳۹- چه تفاوتی میان انرژی اتم هلیوم با استفاده از روش اختلال و بدون تقریب وجود دارد؟

۱. $-Z^2$ ۲. $\frac{5}{8}Z$ ۳. $\frac{5}{8}Z-Z$ ۴. ۰

۴۰- شرط تک مقدار بودن تابع موج کدام است؟

۱. $\Psi(\phi) = \Psi(\phi + \pi)$ ۲. $\Psi(\phi) = \Psi(\phi - \pi)$

۳. $\Psi(\phi) = \Psi(-\phi)$ ۴. $\Psi(\phi) = \Psi(\phi + 2\pi)$

| شماره سوال | پاسخ صحيح | وضعيت كليد |
|------------|-----------|------------|
| 1 | ج | عادي |
| 2 | الف | عادي |
| 3 | ب | عادي |
| 4 | ج | عادي |
| 5 | ج | عادي |
| 6 | الف | عادي |
| 7 | ب | عادي |
| 8 | ب | عادي |
| 9 | ب | عادي |
| 10 | ب | عادي |
| 11 | ب | عادي |
| 12 | ب | عادي |
| 13 | ج | عادي |
| 14 | الف | عادي |
| 15 | د | عادي |
| 16 | الف | عادي |
| 17 | ج | عادي |
| 18 | ب | عادي |
| 19 | ب | عادي |
| 20 | ج | عادي |
| 21 | الف | عادي |
| 22 | ج | عادي |
| 23 | الف | عادي |
| 24 | ب | عادي |
| 25 | ب | عادي |
| 26 | ج | عادي |
| 27 | ب | عادي |
| 28 | ب | عادي |
| 29 | الف | عادي |
| 30 | ب | عادي |
| 31 | د | عادي |
| 32 | ج | عادي |
| 33 | د | عادي |
| 34 | الف | عادي |
| 35 | ج | عادي |
| 36 | د | عادي |
| 37 | ج | عادي |
| 38 | د | عادي |
| 39 | ب | عادي |
| 40 | د | عادي |

www.salampnu.com

سایت مرجع دانشجوی پیام نور

- ✓ نمونه سوالات پیام نور : بیش از ۱۱۰ هزار نمونه سوال همراه با پاسخنامه
- تستی و تشریحی
- ✓ کتاب ، جزوه و خلاصه دروس
- ✓ برنامه امتحانات
- ✓ منابع و لیست دروس هر ترم
- ✓ دانلود کاملاً رایگان بیش از ۱۴۰ هزار فایل مختص دانشجویان پیام نور

www.salampnu.com

www.ShimiPedia.ir

تعداد سوالات: نستی: ۲۰ تشریحی: ۵

زمان آزمون (دقیقه): نستی: ۶۰ تشریحی: ۵۰

سری سوال: یک ۱

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/گد درس: شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی (کاربردی)، شیمی گرایش محض ۱۱۴۰۲۷

استفاده از ماشین حساب ساده مجاز است

۱- دامنه احتمال با کدام تابع زیر معین می شود؟

۱. Ψ ۲. $|\Psi|^2$ ۳. $\frac{\partial \Psi}{\partial x}$ ۴. $\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}$

۲- اپراتور انرژی جنبشی کدام است؟

۱. $T = -\frac{\hbar^2}{2im} \nabla^2$ ۲. $T = \frac{\hbar}{2m^2} \nabla^2$
 ۳. $T = -\frac{\hbar}{2m^2} \nabla^2$ ۴. $T = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2$

۳- فرم عمومی فاکتور زمانی برای حالت‌های ایستا کدام است؟

۱. $\phi(t) = \frac{e^{-iEt}}{\hbar}$ ۲. $\phi(t) = \frac{-iEt}{\hbar}$ ۳. $\phi(t) = e^{-iEt/\hbar}$ ۴. $\phi(t) = \frac{iEt}{\hbar}$

۴- مقدار قابل انتظار تکانه خطی در راستای x (P_x) کدام است؟

۱. $\langle p_x \rangle = 0$ ۲. $\langle p_x \rangle = \sqrt{2mE}$
 ۳. $\langle p_x \rangle = \hbar$ ۴. $\langle p_x \rangle = \hbar/2$

۵- در مثال ذره در جعبه سه بعدی مکعبی چند حالت کوانتومی هم انرژی (همتراز) به دومین تراز انرژی مربوط می شود؟

۱. یک ۲. دو ۳. سه ۴. چهار

تعداد سوالات: تستی: ۲۰ تشریحی: ۵

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۶۰ تشریحی: ۵۰

سری سوال: ۱ یک

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/گد درس: شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی (کاربردی)، شیمی گرایش محض ۱۱۴۰۲۷

۶- توابعی که از شرایط زیر پیروی کنند چه نامیده می شوند؟

$$i = j \Rightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_i^* \psi_j dv = 1$$

$$i \neq j \Rightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_i^* \psi_j dv = 0$$

۴. متعامد

۳. نرمال

۲. ارتونرمال

۱. ارتوگونال

۷- چرخنده صلب در صفحه به ازای هریک از مقادیر کوانتومی انرژی چند حالت همتراز دارد؟

۴. چهار

۳. سه

۲. دو

۱. یک

۸- اپراتور \hat{L}_z (مولفه تکانه زاویه ای در راستای z) در کدام گزینه به درستی نشان داده شده است؟

$$\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi} \quad .4$$

$$\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} \quad .3$$

$$\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} \quad .2$$

$$\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial^2}{\partial y \partial x} \quad .1$$

۹- بین تکانه زاویه ای کل (L^2) و انرژی چرخشی (E_{rot}) یک مولکول خطی (به فرض اینکه چرخنده صلب باشد) چه رابطه ای وجود دارد؟ (I همان اینرسی مولکول است.)

$$E_{rot} = \frac{\hbar^2}{2I} L^2 \quad .4$$

$$E_{rot} = \frac{2I}{L^2} \quad .3$$

$$E_{rot} = \frac{L^2}{2I} \quad .2$$

$$E_{rot} = 2IL^2 \quad .1$$

۱۰- برای چرخنده های صلب در فضای سه بعدی در تراز انرژی لام چند حالت همتراز وجود دارد؟

$$2J(J+1) \quad .4$$

$$J(J+1) \quad .3$$

$$2J \quad .2$$

$$2J+1 \quad .1$$

۱۱- انرژیهای مجاز الکترونی در اتمهای تک الکترونی وابسته به کدام عدد کوانتومی است؟

۲. عدد کوانتومی سمتی

۱. عدد کوانتومی اصلی

۴. عدد کوانتومی اسپین

۳. عدد کوانتومی مغناطیسی

تعداد سوالات: نستی: ۲۰ تشریحی: ۵

زمان آزمون (دقیقه): نستی: ۶۰ تشریحی: ۵۰

سری سوال: ۱ یک

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/گد درس: شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی (کاربردی)، شیمی گرایش محض ۱۱۴۰۲۷

۱۲- توابع ویژه اپراتور هامیلتونی ($\psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi)$) مجموعه ای تشکیل می دهند.

۱. ارتونرمال ۲. نرمال ۳. متعامد و نرمال ۴. ارتوگونال

۱۳- کدام عبارت زیر تابع توزیع شعاعی نامیده می شود؟

۱. $P(r) = R^2(r)$ ۲. $P(r) = \frac{1}{4\pi r^2} R^2(r)$

۳. $P(r) = 4\pi r^2 R^2(r)$ ۴. $P(r) = \frac{4}{3} \pi r^3 R^2(r)$

۱۴- رابطه عمومی بین تکانه زاویه ای (\vec{L}) و ممان مغناطیسی ($\vec{\mu}$) کدام است؟ (m_e جرم الکترون و e بار آن است).

۱. $\vec{\mu} = -\frac{e}{2m_e} \vec{L}$ ۲. $\vec{\mu} = -\frac{e\hbar}{m_e} \vec{L}$

۳. $\vec{\mu} = -\frac{e\hbar}{2m_e} \vec{L}$ ۴. $\vec{\mu} = -\frac{1}{2em_e} \vec{L}$

۱۵- قضیه بیان می کند که هرگاه کوچکترین مقدار ویژه هامیلتونی یک منظومه E_0 و تابع ویژه مربوط ψ_0 باشد، با

هر تابع Φ غیر از ψ_0 خواهیم داشت: $\int \Phi^* \hat{H} \Phi d\tau \geq E_0$

۱. اختلال ۲. تغییر پارامترها ۳. کوپمان ۴. زیمن

۱۶- عدد اتمی مؤثر در تقریب اسلیتر (Z^*) چه رابطه ای با عدد اتمی معمول (Z) دارد؟

۱. $Z^* = Z - 2b$ ۲. $Z^* = 2Z - b$ ۳. $Z^* = Z - \frac{b}{2}$ ۴. $Z^* = Z - b$

۱۷- همه ذره های با اسپین صفر یا عدد صحیح، تابع موج دارند.

۱. متقارن ۲. ضدمتقارن ۳. نامتقارن ۴. پادمتقارن

تعداد سوالات: نسی: ۲۰ تشریحی: ۵

زمان آزمون (دقیقه): نسی: ۶۰ تشریحی: ۵۰

سری سوال: ۱ یک

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/گد درس: شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی (کاربردی)، شیمی گرایش محض ۱۱۴۰۲۷

۱۸- نظریه هوکل روش تقریبی نیمه تجربی برای توصیف است.

۱. الکترونیهای سیستمهای اشباع

۲. الکترونیهای سیستمهایی که دارای یک یا تعداد بیشتری موضع رادیکالی باشند.

۳. الکترونیهای π در مولکولهایی که شامل پیوندهای یک در میان ساده و دوگانه باشند.

۴. الکترونیهای سیستمهایی که اتمهای شرکت کنند در آنها فلزی یا نافلزی باشند.

۱۹- مقدار انتگرالهای تبادلی برای اتمهایی که همسایه نیستند، در نظریه هوکل چقدر است؟

$$1. (\Phi_1 + \Phi_2) \quad 2. \frac{1}{\sqrt{2}} (\Phi_1 - \Phi_2)$$

۴. صفر

$$3. \frac{1}{\sqrt{2}} (\Phi_1 + \Phi_2)$$

۲۰- انرژی رزونانس در بوتادین معادل تفاوت انرژی کل بوتادین و است.

۱. دو پیوند اتیلنی

۲. چهار پیوند اتیلنی

۳. چهار پیوند کربن-کربن یگانه

۴. سه پیوند کربن-کربن یگانه

سوالات تشریحی

۱.۴۰ نمره

۱- نشان دهید که تابع $\sin ax$ تابع ویژه اپراتور \hat{D}_x^2 است. همچنین مقدار ویژه آن را به دست آورید. (

$$a \text{ عددی ثابت است.}) \hat{D}_x \equiv \frac{d}{dx}$$

۱.۴۰ نمره

۲- با استفاده از الگوی ذره در جعبه، انرژی ذره بتای اتمی را که شعاع هسته آن $5 \times 10^{-15} m$ و جرم آن

$$m = 9.1 \times 10^{-31} kg$$

است محاسبه کنید.

$$h = 6.63 \times 10^{-34} m^2 kg/s$$

تعداد سوالات: تستی: ۲۰ تشریحی: ۵

زمان آزمون (دقیقه): تستی: ۶۰ تشریحی: ۵۰

سری سوال: ۱ یک

عنوان درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی/گد درس: شیمی (شیمی فیزیک)، شیمی (کاربردی)، شیمی گرایش محض ۱۱۱۴۰۲۷

۱.۴۰ نمره

۳- فرکانس مربوط به اولین خط طیفی سری بالمر یک اتم هیدروژن مانند چقدر است؟

$$E_H = -21.7 \times 10^{-19} J$$

$$h = 6.63 \times 10^{-34} J.s$$

۱.۴۰ نمره

۴- عبارتی برای هامیلتونی اتم هلیم بنویسید و پتانسیل اختلال آور را معین کنید.

۱.۴۰ نمره

۵- با استفاده از روش هوکل انرژی تراز های انرژی و تابع موج مربوط به الکترونهای π مولکول اتیلن را بدست آورید.

کد درس

۱۱۱۴۰۲۷

نام درس

مبانی شیمی کوانتومی

| توضیحات | کلید سوال | شماره | توضیحات | کلید سوال | شماره | توضیحات | کلید سوال | شماره |
|---------|-----------|-------|---------|-----------|-------|---------|-----------|-------|
| | | ۴۱ | | | ۲۱ | | الف | ۱ |
| | | ۴۲ | | | ۲۲ | | د | ۲ |
| | | ۴۳ | | | ۲۳ | | ج | ۳ |
| | | ۴۴ | | | ۲۴ | | ب.ب | ۴ |
| | | ۴۵ | | | ۲۵ | | ج | ۵ |
| | | ۴۶ | | | ۲۶ | | ج | ۶ |
| | | ۴۷ | | | ۲۷ | | ب.ب | ۷ |
| | | ۴۸ | | | ۲۸ | | د | ۸ |
| | | ۴۹ | | | ۲۹ | | ب.ب | ۹ |
| | | ۵۰ | | | ۳۰ | | الف | ۱۰ |
| | | ۵۱ | | | ۳۱ | | الف | ۱۱ |
| | | ۵۲ | | | ۳۲ | | د | ۱۲ |
| | | ۵۳ | | | ۳۳ | | ج | ۱۳ |
| | | ۵۴ | | | ۳۴ | | الف | ۱۴ |
| | | ۵۵ | | | ۳۵ | | ب.ب | ۱۵ |
| | | ۵۶ | | | ۳۶ | | د | ۱۶ |
| | | ۵۷ | | | ۳۷ | | الف | ۱۷ |
| | | ۵۸ | | | ۳۸ | | ج | ۱۸ |
| | | ۵۹ | | | ۳۹ | | د | ۱۹ |
| | | ۶۰ | | | ۴۰ | | الف | ۲۰ |

www.ShimiPedia.ir

www.salampnu.com

سایت مرجع دانشجوی پیام نور

- ✓ نمونه سوالات پیام نور : بیش از ۱۱۰ هزار نمونه سوال همراه با پاسخنامه
- تستی و تشریحی
- ✓ کتاب ، جزوه و خلاصه دروس
- ✓ برنامه امتحانات
- ✓ منابع و لیست دروس هر ترم
- ✓ دانلود کاملاً رایگان بیش از ۱۴۰ هزار فایل مختص دانشجویان پیام نور

www.salampnu.com

www.ShimiPedia.ir