

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

پیام نور  
دانشجویان  
خبرگزاری  
PNUNA.COM  
PNU News Agency



نام درس: مبانی شیمی کوانتومی  
رشته تحصیلی / کد درس: شیمی (محض - کاربردی) ۴۰۲۷

مجاز است.

استفاده از:

کُد سری سؤال: یک (۱)

امام خمینی<sup>(ع)</sup>: 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.  $\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$

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

پیام نور  
دانشجویان  
خبرگزاری  
PNUNA.COM  
PNU News Agency



نام درس: مبانی شیمی کوانتومی  
رشته تحصیلی / گد درس: شیمی (محض - کاربردی) ۴۰۲۷

مجاز است.

استفاده از:

گد سری سؤال: یک (۱)

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.  $\psi(x) = 0$  ,  $\psi(x) = 0$  ,  $x \rightarrow 0$  ,  $x \rightarrow \infty$   
ب.  $\psi(x) = 0$  ,  $\psi(x) = 0$  ,  $x \rightarrow 0$  ,  $x \rightarrow L$

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

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  $\frac{\sqrt{3}h^2}{4ma^2}$  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.  $hv_0$

خبرگزاری دانشجویان پیام نور :: PNUNA.COM

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

پیام نور  
دانشجویان  
خبرگزاری  
PNUNA.COM  
PNU News Agency



نام درس: مبانی شیمی کوانتومی  
رشته تحصیلی / گد درس: شیمی (محض - کاربردی) ۴۰۲۷

مجاز است.

استفاده از:

گد سری سؤال: یک (۱)

۱۳. مقدار متوسط  $P_x$  برای هر تراز  $\nu$  نوسانگر هماهنگ کدام است؟

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

۱۴. مقدار عبارت  $(\Delta p_x)$ ،  $(\Delta x)$  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.  $4\pi r^2 R^2(r)$

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) ۴۰۲۷

مجاز است.

استفاده از:

کد سری سؤال: یک (۱)

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 اشتون - 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

پیام نور  
دانشجویان  
خبرگزاری  
PNUNA.COM  
PNU News Agency



نام درس: مبانی شیمی کوانتومی  
رشته تحصیلی / کد درس: شیمی (محض - کاربردی) ۴۰۲۷

مجاز است.

استفاده از:

کد سری سؤال: یک (۱)

سوالات تشریحی

بارم هر سوال ۱/۲۵ نمره

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

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

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