



مجاز است.

استفاده از:

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

ب. $f(x)$

الف. $-f(x)$

د. $af(x)$

ج. $-af(x)$

۲. اپراتور وابسته به تابع هامیلتونی کدام است؟

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

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

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

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

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

$$\pm \frac{\hbar}{\sqrt{2mE}}$$

$$\text{الف. } \pm \sqrt{2\hbar mE}$$

$$\pm \sqrt{2mE}$$

$$\text{ج. } \pm \frac{\hbar}{\sqrt{2mE}}$$

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

$$\frac{2}{L}$$

$$\text{الف. } \sqrt{\frac{L}{2}}$$

$$\sqrt{\frac{2}{L}}$$

$$\text{ج. } \sqrt{\frac{1}{L}}$$

۵. کدام رابطه‌ی زیر فرکانس سیستم نوسانگر هارمونیک را مشخص می‌کند؟

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

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

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

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

۶. انرژی نقطه‌ی صفر در حرکت ارتعاشی کدام است؟

$$\frac{\hbar}{2\pi} v$$

$$\text{الف. } \frac{h}{2\pi} v$$

$$\frac{1}{2} h v$$

$$\text{ج. } \frac{\hbar}{2\pi} v$$



مجاز است.

ماشین حساب

استفاده از:

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

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

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

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

$$(i = j) \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_i^* \psi_i dV = 1$$

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

۹. د

ج. ۱

ب. ۴

الف. ۳

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

$$\frac{1}{\sqrt{\int \psi^* \psi d\tau}}$$

$$\sqrt{\int \psi^* \psi d\tau}$$

د. N^1

ج. $\sqrt{\psi^* \psi d\tau}$

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

$$f(x) = \frac{A}{x+1}$$

$$f(x) = Ax^1$$

$$f(x) = A \sin x$$

$$f(x) = Ax(x+1)$$

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

$$\langle p \rangle \neq 0, \langle x \rangle \neq 0$$

$$\langle p \rangle \neq 0, \langle x \rangle = 0$$

$$\langle p \rangle = 0, \langle x \rangle \neq 0$$

$$\langle p \rangle = 0, \langle x \rangle = 0$$

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

$$\frac{14}{3}$$

$$\frac{11}{3}$$

$$\frac{17}{3}$$

$$4^2$$

۱۳. اگر انرژی ارتعاشی E برای مولکول HCl برابر $J^{-1} \times 10^{-2} \times 28/6$ باشد، انرژی اولین حالت بر انگیخته کدام است؟

$$8/58 \times 10^{-2}$$

$$1/43 \times 10^{-2}$$

$$4/29 \times 10^{-2}$$

$$5/74 \times 10^{-2}$$



تعداد سؤالات: تست: ۲۵ تشرییع: --

نام درس: مبانی شیمی کوانتموم

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



ماشین حساب مجاز است.

استفاده از:

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

$$|\psi|^2 dr \quad \text{ب.}$$

$$4\pi r^2 R^2 dr \quad \text{الف.}$$

$$4\pi r^2 \psi^2 dr \quad \text{د.}$$

$$\pi R^2 \psi^2 dr \quad \text{ج.}$$

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

$$H_{ii} = \alpha \quad \text{ب.}$$

$$S_{ii} = \alpha \quad \text{الف.}$$

$$S_{ij} = \beta \quad \text{د.}$$

$$H_{ij} = 1 \quad \text{ج.}$$

۱۶. مقدار قابل انتظار فاصله ای الکترون از هسته برای اوربیتال اتمی ۱S توسط کدام انترگال زیر به دست می آید؟

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

$$\langle r \rangle = \int 4\pi r^3 \psi_{1s}^* dr \quad \text{الف.}$$

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

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

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

$$\frac{1}{L} \quad \text{د.}$$

$$L \quad \text{ج.}$$

$$\frac{2}{L} \quad \text{ب.}$$

$$\frac{L}{2} \quad \text{الف.}$$

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

$$\frac{4h^2}{8ma^2} \quad \text{ب.}$$

$$\frac{3h^2}{8ma^2} \quad \text{الف.}$$

$$\frac{6h^2}{8ma^2} \quad \text{د.}$$

$$\frac{5h^2}{8ma^2} \quad \text{ج.}$$

۱۹. در حالت ذره در جعبه‌ی مکعبی چند حالت کوانتمومی هم انرژی به سومین تراز مربوط می شود؟

$$6 \quad \text{د.}$$

$$5 \quad \text{ج.}$$

$$2 \quad \text{ب.}$$

$$3 \quad \text{الف.}$$

۲۰. کدام رابطه انرژی‌های مجاز چرخنده‌ی صلب در صفحه را نشان می دهد؟

$$\frac{n^2 h^2}{2I} \quad \text{ب.}$$

$$\frac{m^2 h^2}{2I} \quad \text{الف.}$$

$$\frac{m^2 h^2}{2I\omega} \quad \text{د.}$$

$$\frac{m^2 h^2}{2I} \quad \text{ج.}$$

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

ب. فاکتور لاند

الف. ضریب لاگرانژ

د. ضریب اپنهایمر

ج. فاکتور پاولی

مجاز است.

ماشین حساب

استفاده از:

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

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

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

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

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

۲۳. کدام رابطه زیر مقیاس واحد انرژی هارتی است؟

$$\frac{\hbar}{\mu e^2}$$

$$\frac{m_o e^2}{\hbar^2}$$

$$\frac{m_o e^2}{2\hbar^2}$$

$$\frac{m_o e^2}{h^2}$$

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

$$-ih \frac{\partial}{\partial \phi}$$

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

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

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

۲۵. انرژی کل مولکول بوتا دی یعنی براساس تقریب هوکل $\beta + 2\alpha + 2\gamma$ و انرژی کل هر پیوند اتیلنی $\beta + 2\alpha + 2\gamma$ است. انرژی رزونانس پیوند دوگانه ای نامسق در بوتادی یعنی کدام است؟

$$\text{ب. } 0/472 \beta$$

$$\text{الف. } 1/472 \beta$$

$$\text{د. } 0/236 \beta$$

$$\text{ج. } 1/236 \beta$$

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: تست: ۲۵ تشرییع: --

نام درس: مبانی شیمی کوانتومی

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

استفاده از: مجاز است.

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

$$(h = 6.62 \times 10^{-34} \text{ Js}, r = 1.13 \text{ Å}, 1/14 \times 10^{-36} \text{ kg})$$

۴.۸. د

۷.۶۷ $\times 10^{-۳۳}$

ج. 4.8×10^{-4}

۶.۰۲ $\times 10^{-۳۰}$

الف. ۷.۶۷

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

$$(9.31 \times 10^{-31} \text{ kg})$$

۵. 18.06×10^{-30}

ج. 24.08×10^{-30}

ب. 6.02×10^{-30}

الف. 6.02×10^{-30}

-۲۲

۲۹. برایتابع موج $\Psi = Ne^{-\frac{ax}{a}}$ ضریب نرمال کنندگی کدام است؟

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

$$\sqrt{\frac{25}{\pi a^4}}.$$

$$\sqrt{\frac{8}{\pi a^3}}.$$

$$\sqrt{\frac{\pi a^3}{\pi}}.$$

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

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

د. هرمیت

ج. لاگر

ب. لژاندر

الف. لاگرانژ

۳۱. کدام رابطه بیانگر قضیه ویریال است؟

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

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

د. همه موارد صحیح است

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

۳۲. ماتریس نمایش دهنده تابع اسپینی β کدام است؟

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

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

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

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

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

$$S_{11} = S_{22} = 0.$$

$$H_{11} = H_{22} = \beta.$$

$$H_{12} = H_{21} = H_{13} = \beta.$$

$$H_{12} = H_{21} = \alpha.$$



تعداد سؤالات: تست: ۲۵ تشرییع: --

نام درس: مبانی شیمی کوانتومی

رشته تحصیلی / نُد 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

ج. ۱۰

ب. ۲۰

الف. ۳۰

۳۵. کدام رابطه صحیح است؟

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

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

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

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

ثابت ها و اعداد مورد نیاز

$$h = ۶/۶۲۵ \times 10^{-۳۴} Js \quad \hbar = ۱/۰۵۵ \times 10^{-۳۴} Js$$

$$a_0 = ۵۲/۹ \times 10^{-۱۰} m \quad m_e = ۹/۱۱ \times 10^{-۳۱} kg$$

$$c = ۳ \times 10^8 ms^{-1} \quad eV = ۱/۶۰۲ \times 10^{-۱۹} J$$