

## عنوان درس: شیمی فیزیک 3

استفاده از ماشین حساب ساده ، ماشین حساب مهندسی مجاز است

۱- کدام عبارت زیر دانسیته احتمال نامیده می شود؟

۱.  $|\Psi|^2 r d\tau$       ۲.  $|\Psi|^2$       ۳.  $\Psi$       ۴.  $|\Psi|^2 d\tau$

۲- پاسخ عملگر  $\hat{D}_x$  بر تابع موج  $\sin x$  کدام است؟

۱.  $\sin x$       ۲.  $\cos x$       ۳. صفر      ۴. یک

۳- ضد متقارن بودن دترمینان اسلیتر ناشی از کدام مورد است؟

۱. در دترمینان اسلیتر منظومه ی الکترونی، دو ستون نمی توانند با هم برابر باشند.  
۲. تعویض مختصات دو الکترون معادل با تعویض دو سطر دترمینان است.  
۳. در اثر جابجایی دو سطر یا دو ستون دترمیتان، علامت آن عوض می شود.  
۴. تمام موارد صحیح است.

۴- انحراف استاندارد کمیتی مانند  $x$  از کدام رابطه زیر به دست می آید؟

۱.  $(\Delta x)^2 = \langle x \rangle^2 - x$       ۲.  $(\Delta x)^2 = \langle x^2 \rangle - x$   
۳.  $(\Delta x)^2 = \langle x \rangle^2 - \langle x^2 \rangle$       ۴.  $(\Delta x)^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$

۵- اپراتور وابسته به هر کمیت فیزیکی مشاهده پذیر چه ویژگی دارد؟

۱. خطی است.  
۲. هرمیتیک است.  
۳. خطی و هرمیتیک است.  
۴. حقیقی است.

۶- شرایط آغازی چیست؟

۱. شرایط یک تابع موج قابل قبول  
۲. محاسبه ثابت های مشتق گیری  
۳. شرایطی که به ازای تمام مقادیر  $t$  برای ذره ای که حرکت آن در فضای معین محدود شده است، صدق کند.  
۴. محاسبه مشتق مرتبه اول نسبت به زمان

۷- برای چرخش در صفحه رابطه ی بین  $\hat{H}$  و  $\hat{L}^2$  کدام است؟

۱.  $\hat{L}^2 = \frac{1}{2\hat{H}}$       ۲.  $\hat{L}^2 = \frac{2\hat{H}}{I}$       ۳.  $\hat{L}^2 = \frac{\hat{H}}{2I}$       ۴.  $\hat{H} = \frac{\hat{L}^2}{2I}$

۸- مقدار قابل انتظار تکانه برای ذره آزاد به جرم  $m$  و انرژی  $E$  در راستای مثبت محور  $x$  کدام است؟

۱.  $\sqrt{2mE}$       ۲.  $-\sqrt{2mE}$       ۳.  $-\hbar$       ۴.  $k\hbar$

۹- تعداد همترازی برای تراز انرژی  $E = \frac{6h^2}{8ma^2}$  کدام است؟

۱. 3      ۲. 2      ۳. 1      ۴. 6

۱۰- کدام گزینه تابع توزیع شعاعی را به درستی نشان می دهد؟

۱.  $P(r) = 4\pi r R^2(r)$       ۲.  $P(r) = 4\pi r^2 R^2(r)$   
۳.  $P(r) = 4\pi r^2 R(r)$       ۴.  $P(r) = 4\pi r R(r)$

۱۱- کدام رابطه زیر برابر با عملگر  $\hat{L}_z$  در چرخنده صلب است؟

۱.  $-i\hbar \frac{\partial}{\partial r}$       ۲.  $-i\hbar \frac{\partial}{\partial \theta}$       ۳.  $-i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}$       ۴.  $-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$

۱۲- بر اساس روش هوکل، انرژی سیستم  $\pi$  در حالت اصلی مولکول اتیلن کدام است؟

۱.  $2(\alpha - \beta)$       ۲.  $2(\alpha + \beta)$       ۳.  $\alpha - 2\beta$       ۴.  $\alpha + 2\beta$

۱۳- کدام یک از ترکیبات زیر بوزون می باشد؟

۱. الکترون      ۲. پروتون      ۳. نوترون      ۴. فوتون

۱۴- بار موثر هسته بر روی الکترون در اوربیتال  $1s$  اتم هلیم چقدر است؟

۱. 1.69      ۲. 0.31      ۳. 2      ۴. 1.31

۱۵- مقدار انتگرالهای همپوشانی،  $S_{ij}$ ، در روش هوکل چقدر است؟ ( $i \neq j$ )

۱. 0      ۲. 1      ۳.  $2ij$       ۴.  $ij$

۱۶- کدام تقریب در مدل اربیتال مولکولی هوکل بکار میرود؟

۱. تابع توصیف کننده سیستم پای بصورت دترمینانی از اربیتالهای تک الکترونی حاصل از ترکیب خطی اربیتالهای 2s اتمهای کربن است.
۲. اربیتالهای مولکولی مناسب با روش اختلال تعیین میشوند.
۳. انتگرالهای کولنی همگی برابر یک هستند.
۴. انتگرالهای همپوشانی دواتم مجاور همگی برابر صفر هستند.

۱۷- شکل کامل تابع موج و توابع موجی بسیار دقیق در مورد کدام اتم بدست نیامده است؟

۱. هیدروژن
۲. هلیوم
۳. لیتیوم
۴. بریلیوم

۱۸- چند حالت کوانتومی هم انرژی به سومین تراز انرژی ذره در جعبه مکعبی نسبت داده میشود؟

۱. 1
۲. 3
۳. 6
۴. 4

۱۹- کدام اپراتور زیر خطی نیست؟

۱.  $\sqrt{\quad}$
۲.  $\hat{x}$
۳.  $\hat{D}_x$
۴.  $\hat{D}_x^2$

۲۰- کدام ذره زیر فرمیون نیست؟

۱. الکترون
۲. پروتون
۳. نوترون
۴. فوتون

### سوالات تشریحی

۱.۲۰ نمره

۱- تاثیر اپراتور  $p_x^2 + x^2$  روی تابع  $e^{-ax^2}$  را بنویسید.

۱.۲۰ نمره

۲- در مورد مفهوم فیزیکی جابجایی اپراتورها، با ذکر مثال، توضیح دهید.

۱.۲۰ نمره

۳- برای مولکول CO با طول پیوند 1.13 آنگستروم بر اساس تقریب چرخنده صلب سه بعدی طول موج اولین خط

$$h = 6.63 \times 10^{-34} \text{ J.s}$$

جذبی را بر حسب سانتی متر بدست آورید.

$$c = 3 \times 10^8 \text{ cm/s}$$

۱.۲۰ نمره

۴- سه عدد کوانتومی متناسب به الکترون در هر یک از حالتها  $\Psi_{2py}$ ,  $\Psi_{1s}$ ,  $\Psi_{3dz^2}$  آورید.

۱.۲۰ نمره

۵- مولکول NO در طی چرخش در صفحه دارای اولین تراز غیر صفر  $3.32 \times 10^{-23} \text{ J}$  است. در صورتی که جرم

کاسته آن  $1.24 \times 10^{-26} \text{ kg}$  باشد طول پیوند را بدست آورید.  $h = 6.626 \times 10^{-34} \text{ J.s}$

| شماره<br>سوال | پاسخ صحيح |
|---------------|-----------|
| 1             | ب         |
| 2             | ب         |
| 3             | د         |
| 4             | د         |
| 5             | ج         |
| 6             | ج         |
| 7             | د         |
| 8             | الف       |
| 9             | الف       |
| 10            | ب         |
| 11            | ج         |
| 12            | ب         |
| 13            | د         |
| 14            | الف       |
| 15            | الف       |
| 16            | د         |
| 17            | د         |
| 18            | ب         |
| 19            | الف       |
| 20            | د         |

۱- انرژی کدام سیستم پیوسته می باشد؟

۱. ذره در جعبه سه بعدی
۲. اتم تک الکترونی
۳. ذره آزاد
۴. ذره در جعبه یک بعدی

۲- کدام تابع می تواند تابع ویژه  $\hat{D}_x$  باشد؟

۱.  $e^{\alpha x}$
۲.  $\sin \alpha x$
۳.  $\cos \alpha x$
۴.  $X$

۳- تعداد حالات همترازی با انرژی  $E = \frac{12h^2}{8ma^2}$  ذره در جعبه سه بعدی کدام است؟

۱. 6
۲. 3
۳. 1
۴. 2

۴- 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.

۵- 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.  $\frac{\partial}{\partial \Phi}$

۶- کدامیک از دو اپراتور زیر به طور همزمان شناخته می شود؟

۱.  $\hat{H}, \hat{l}_z$
۲.  $\hat{l}_z, \hat{l}_y$
۳.  $\hat{D}_x, \hat{X}$
۴.  $\hat{H}^2, \hat{L}$

۷- اپراتور مجذور اندازه حرکت زاویه ای به کدام متغیر وابسته نیست؟

۱.  $r$
۲.  $\theta, \varphi$
۳.  $\theta$
۴.  $\varphi$

۸- برای چرخنده صلب در حالت اصلی کدام کمیت ها صفر می باشند؟

۱. انرژی
۲. انرژی، قدر مطلق تکانه زاویه ای و  $l_z$
۳. قدر مطلق تکانه زاویه ای و  $l_z$
۴. انرژی، قدر مطلق تکانه زاویه ای

۹-  $\alpha$  تابع ویژه اپراتور  $\hat{S}_z$  چه مقدار ویژه ای دارد؟

۱.  $1/2 \hbar$
۲.  $-1/2 \hbar$
۳.  $\hbar$
۴.  $-\hbar$

۱۰- ضریب نرمال کنندگی در قضیه تغییر پارامتر کدام است؟

$$1. \int \phi^* \phi d\tau \quad 2. \frac{1}{\int \phi^* \phi d\tau} \quad 3. \left( \frac{1}{\int \phi^* \phi d\tau} \right)^{\frac{1}{2}} \quad 4. \int \phi^* H \phi d\tau$$

۱۱- در مورد تقریب اسلیتر کدام مورد صحیح می باشد؟

۱. پتانسیل مربوط به برهمکنش ها ناچیز فرض می گردد.
۲. تابع آزمون را به صورت ترکیب خطی از توابع موج در نظر گرفته می شود.
۳. در اتم اثر الکترونها بر روی الکترون معین را همانند یک اثر محافظتی متوسط در مقابل بار هسته می توان تلقی کرد.
۴. همه موارد

۱۲- کدام یک از ذرات زیر فرمیون می باشند؟

۱. الکترون
۲. فوتون
۳. هسته هلیوم
۴. هسته بریلیم

۱۳- در روش اختلال، انرژی مرتبه اول اختلال کدام عبارت است؟

$$1. \int \Psi_i^0 * w \Psi_i^0 d\tau \quad 2. \int \Psi_1 * w \Psi_1 d\tau \quad 3. \int \Psi_0^* w \Psi_1 d\tau \quad 4. E^{(0)} + \int \Psi_1 * w \Psi_1 d\tau$$

۱۴- 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 هسته ها تغییر نمی نماید.

۱۵- بر اساس روش هوکل، انرژی سیستم  $\pi$  در حالت اصلی مولکول اتیلن کدام است؟

$$1. 2(\alpha - \beta) \quad 2. 2(\alpha + \beta) \quad 3. \alpha - 2\beta \quad 4. \alpha + 2\beta$$

۱۶- کدام یک از ترکیبات زیر بوزون می باشد؟

۱. الکترون
۲. پروتون
۳. نوترون
۴. فوتون

۱۷- در حالت اصلی مولکول بنزن کدام ترازهای بنزن براساس اوربیتال روش اوربیتال مولکولی هوکل، پر می گردد؟

$$1. k = \pm 1 \quad 2. k = 0, k = \pm 1 \quad 3. k = \pm 2 \quad 4. k = 3$$

۱۸- در حالت برانگیخته اتم هلیوم، حالات همترازی چگونه است؟

۱. یک-یک      ۲. سه-سه      ۳. یک-سه      ۴. دو-یک

۱۹- کدام اپراتورها جابجاپذیر هستند؟

۱.  $S, S_z$       ۲.  $S_2, H$       ۳.  $S_z, S_y$       ۴.  $S_x, S_y$

۲۰- شکل کامل تابع موج و توابع موجی بسیار دقیق در مورد کدام اتم بدست نیامده است؟

۱. هیدروژن      ۲. هلیوم      ۳. لیتیوم      ۴. بریلیوم

### سوالات تشریحی

۱- مقدار قابل انتظار  $p_x$  و  $p_x^2$  در سیستم نوسانگر هماهنگ با تابع موج زیر را محاسبه کنید؟

$$\Psi_0 = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{\alpha x^2}{2}}$$

۲- در تابع موج زیر مقدار A را بدست آورید. محدوده تغییرات x بین صفر تا 1 است.

$$\Psi(x) = A \sin \frac{n\pi}{L} x$$

۳- سه عدد کوانتومی متناسب به الکترون در هر یک از حالت‌های زیر را بدست آورید.  $\Psi_{2py}, \Psi_{1s}, \Psi_{3dz^2}$

۴- انرژی عدم استقرار مولکول  $3-1$  دی بوتادی آن را براساس نظریه اوربیتال مولکولی هوکل بدست آورید.

۵- اصول موضوعی مکانیک کوانتومی را به اختصار نوشته و توضیح دهید.

| شماره<br>سوال | پاسخ صحيح |
|---------------|-----------|
| 1             | ج         |
| 2             | الف       |
| 3             | ج         |
| 4             | ب         |
| 5             | ج         |
| 6             | الف       |
| 7             | الف       |
| 8             | ب         |
| 9             | الف       |
| 10            | ج         |
| 11            | ج         |
| 12            | الف       |
| 13            | الف       |
| 14            | الف       |
| 15            | ب         |
| 16            | د         |
| 17            | ب         |
| 18            | ج         |
| 19            | ب         |
| 20            | د         |

۱- کدام عبارت نشان دهنده ی روش "تغییر پارامترها" است؟

$$\begin{array}{ll} ۱. \frac{\int \phi^* \hat{H} \phi d\tau}{\int \phi^* \phi d\tau} = 1 & ۲. \frac{\int \phi^* \hat{H} \phi d\tau}{\int \phi^* \phi d\tau} \geq 1 \\ ۳. \frac{\int \phi^* \hat{H} \phi d\tau}{\int \phi^* \phi d\tau} = E_0 & ۴. \frac{\int \phi^* \hat{H} \phi d\tau}{\int \phi^* \phi d\tau} \geq E_0 \end{array}$$

۲- مقادیر قابل قبول برای چرخنده صلب به شکل  $\Psi(\phi) = Ne^{im\phi}$  هستند. مقدار N برای تابع نرمال شده کدام است؟

$$\begin{array}{llll} ۱. \frac{\sqrt{\pi}}{2} & ۲. \frac{1}{\sqrt{2\pi}} & ۳. \frac{\sqrt{2}}{\pi} & ۴. \frac{1}{2\pi} \end{array}$$

۳- اثر اپراتور  $\hat{D}_x + \hat{x}$  بر روی تابع  $f(x) = e^{ax}$  کدام است؟

$$\begin{array}{llll} ۱. ae^{ax} & ۲. axe^{ax} & ۳. (x+a)e^{ax} & ۴. (x+a)^2 e^{ax} \end{array}$$

۴- اگر  $\Psi_1(x)$  و  $\Psi_2(x)$  تابع های ویژه اپراتور  $\hat{H}$  برای ذره در جعبه یک بعدی باشند، مقدار  $\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_1^*(x) \Psi_2(x) dx$  کدام است؟

$$\begin{array}{llll} ۱. \frac{L}{2} & ۲. \text{صفر} & ۳. 1 & ۴. \frac{\sqrt{2}}{L} \end{array}$$

۵- برای چرخش در صفحه رابطه ی بین  $\hat{H}$  و  $\hat{L}^2$  کدام است؟

$$\begin{array}{llll} ۱. \hat{L}^2 = \frac{1}{2\hat{H}} & ۲. \hat{L}^2 = \frac{2\hat{H}}{I} & ۳. \hat{L}^2 = \frac{\hat{H}}{2I} & ۴. \hat{H} = \frac{\hat{L}^2}{2I} \end{array}$$

۶- از تابع های زیر کدامیک تابع ویژه ی  $\hat{L}_z$  است؟

$$\begin{array}{llll} ۱. y = e^{im\phi} & ۲. y = \cos \phi & ۳. y = A \sin \phi & ۴. y = a\phi^2 + 1 \end{array}$$

۷- اگر تابع موج سیستم با تعویض مختصات ذره ی ۱ با مختصات ذره ی ۲ تغییر علامت ندهد، نسبت به جابجایی چگونه است؟

$$\begin{array}{llll} ۱. \text{ضد متقارن} & ۲. \text{غیر متقارن} & ۳. \text{متقارن} & ۴. \text{نا متقارن} \end{array}$$

۸- ساده ترین مدل برای تخمین انرژی های الکترونی در مولکول های زنجیری دارای پیوند پی یک در میان کدام است؟

۱. ذره در جعبه ی دوبعدی  
۲. نوسانگر هارمونیک  
۳. ذره ی مستقل  
۴. اوربیتال های مولکولی هوکل

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

۱. مستقل از زمان  
۲. با زمان تغییر می کند.  
۳. تابع خطی از  $t$  است.  
۴. تابع  $t_2$  است.

۱۰- مقدار قابل انتظار  $p_x$  در ذره در جعبه یک بعدی با طول یال  $a$  کدام است؟

۱.  $a$   
۲.  $\sqrt{2mE}$   
۳. صفر  
۴.  $\frac{a}{2}$

۱۱- کدام دو اپراتور از اپراتورهای وابسته به تکانه زاویه ای جابجاپذیرند؟

۱.  $\hat{L}_x, \hat{L}_z$   
۲.  $\hat{L}_y, \hat{L}_z$   
۳.  $\hat{L}_x, \hat{L}^2$   
۴.  $\hat{L}_y, \hat{L}_x$

۱۲- جهت گیری های ممکن تکانه زاویه ای در چهارمین تراز انرژی چرخنده صلب فضایی چند تاست؟

۱. 3  
۲. 7  
۳. 1  
۴. 5

۱۳- رابطه ی انرژی های مجاز چرخنده ی صلب در صفحه کدام است؟

۱.  $\frac{m^2 \hbar^2}{2I}$   
۲.  $\frac{n^2 \hbar^2}{2I}$   
۳.  $\frac{m^2 \hbar^2}{2Ir}$   
۴.  $\frac{m^2 \hbar^2}{2I \omega}$

۱۴- دیگر انرژی های مجاز اتم هیدروژن بر حسب انرژی حالت اصلی کدام است؟

۱.  $E_n = -\frac{\hbar}{2} \frac{E_H}{n}$   
۲.  $E_n = -\frac{\hbar}{2} \frac{E_H}{n}$   
۳.  $E_n = \frac{\hbar}{2} \frac{E_H}{n}$   
۴.  $E_n = \frac{E_H}{n^2}$

۱۵- بر پایه ی اصل پاولی کدام تابع اسپینی ضدمتقارن است؟

۱.  $\alpha(1)\beta(2) + \beta(1)\alpha(2)$   
۲.  $\alpha(1)\beta(2) - \beta(1)\alpha(2)$   
۳.  $\alpha(1)\alpha(2)$   
۴.  $\beta(1)\beta(2)$

۱۶- انرژی اتم تک الکترونی وابسته به کدام متغیر یا متغیرهای زیر است؟ ( $n$  و  $l$  و  $m$  به ترتیب اعداد کوانتومی اصلی و سمتی و مغناطیسی هستند).

۱.  $m$  و  $l$   
۲.  $n$  و  $m$   
۳.  $n$  و  $l$   
۴.  $n$

۱۷- بزرگی تکانه زاویه اسپین از کدام رابطه بدست می آید؟ (s عدد کوانتومی اسپین است)

۱.  $\sqrt{s(s+1)}\hbar$  .۱  
 ۲.  $\sqrt{2(s+1)}\hbar$  .۲  
 ۳.  $s(s+1)\hbar$  .۳  
 ۴.  $2s(s+1)\hbar$  .۴

۱۸- کدام رابطه زیر بین تکانه اوربیتالی ( $\bar{l}$ ) ، تکانه اسپین ( $\bar{s}$ ) و تکانه کل ( $\bar{J}$ ) صادق است؟

۱.  $\bar{J} = \sqrt{\bar{l} - \bar{s}}$  .۱  
 ۲.  $\bar{J} = \sqrt{\bar{l} + \bar{s}}$  .۲  
 ۳.  $\bar{J} = \bar{l} + \bar{s}$  .۳  
 ۴.  $\bar{J} = \bar{l} - \bar{s}$  .۴

۱۹- پتانسیل اختلال در هامیلتونی اتم هلیوم کدام عبارت زیر است؟

۱.  $\frac{Z}{r}$  .۱  
 ۲.  $\frac{-1}{2} \nabla^2$  .۲  
 ۳.  $\frac{-1}{2} \nabla^2 + \frac{Z}{r}$  .۳  
 ۴.  $\frac{1}{r_{1,2}}$  .۴

۲۰- در دترمینان اسلیتر برای یک منظومه N الکترونی ، ضریب نرمال شدگی چند است؟

۱.  $\frac{1}{(N!)^{1/2}}$  .۱  
 ۲.  $(N!)^{1/2}$  .۲  
 ۳.  $N!$  .۳  
 ۴.  $\frac{1}{N!}$  .۴

۲۱- کدام رابطه زیر عدم قطعیت در اندازه گیری مکان-تکانه الکترون را به درستی نشان میدهد؟

۱.  $\Delta z . \Delta P_z \leq \frac{2}{\hbar}$  .۱  
 ۲.  $\Delta z . \Delta P_z \geq \frac{\hbar^2}{2}$  .۲  
 ۳.  $\Delta z . \Delta P_z \geq \hbar$  .۳  
 ۴.  $\Delta z . \Delta P_z \leq \hbar^2$  .۴

۲۲- ..... با تامل در نظریه فوتونی نور و دوگانه بودن ماهیت آن، اصل منحصر به فرد نبودن ماهیت دوگانه فوتون را بیان نمود.

۱. دوبروی .۱  
 ۲. پلانک .۲  
 ۳. هایزنبرگ .۳  
 ۴. یانگ .۴

۲۳- کدام گزینه بیانگر تابع لاگرانژ است ؟

۱.  $L(\dot{x}_i, x_i) = T - V$  .۱  
 ۲.  $L(\dot{x}_i, x_i) = T + V$  .۲  
 ۳.  $L(\dot{x}_i, t) = T + V$  .۳  
 ۴.  $L(\dot{x}_i, t) = T - V$  .۴

۲۴- دانسیته احتمال در حالت‌های ..... سیستم در هر نقطه از فضا مستقل از زمان است.

۱. حقیقی .۱  
 ۲. ایستا .۲  
 ۳. موهومی .۳  
 ۴. منزوی .۴

۲۵- کدام اپراتور زیر خطی نیست؟

۱.  $\sqrt{\phantom{x}}$  .۱  
 ۲.  $\hat{x}$  .۲  
 ۳.  $\hat{D}_x$  .۳  
 ۴.  $\hat{D}_x^2$  .۴

## سوالات تشریحی

۱.۲۰ نمره

۱- مقدار قابل انتظار  $\frac{1}{r}$  را برای الکترون در حالت 1s حساب کنید.

$$\psi_{(1s)} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \alpha^{3/2} e^{-\alpha r}, \alpha = \frac{Z}{a_0}, a_0 = \frac{\hbar^2}{\mu e^2}$$

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

۱.۲۰ نمره

۲- مولکول NO را یک چرخنده صلب در نظر بگیرید. ممان اینرسی این مولکول  $16.5 \times 10^{-47} \text{ kg.m}^2$  است. اولین انرژی غیر صفر این مولکول چقدر است؟ ( $h = 6.625 \times 10^{-34} \text{ J.s}$ )

۱.۲۰ نمره

۳- در مورد مفهوم فیزیکی جابجایز بودن اپراتورها توضیح دهید.

۱.۲۰ نمره

۴- اصل فرانک-کوندون را به اختصار توضیح دهید.

۱.۲۰ نمره

۵- اپراتور  $\hat{P}_x^2 + x^2$  را بر روی تابع  $e^{-ax^2}$  تاثیر بدهید و نتیجه را بنویسید.

| شماره<br>سوال | پاسخ صحیح |
|---------------|-----------|
| 1             | د         |
| 2             | ب         |
| 3             | ج         |
| 4             | ج         |
| 5             | د         |
| 6             | الف       |
| 7             | ج         |
| 8             | د         |
| 9             | الف       |
| 10            | ب         |
| 11            | ج         |
| 12            | ب         |
| 13            | الف       |
| 14            | د         |
| 15            | ب         |
| 16            | د         |
| 17            | الف       |
| 18            | ج         |
| 19            | د         |
| 20            | الف       |
| 21            | ب         |
| 22            | الف       |
| 23            | الف       |
| 24            | ب         |
| 25            | الف       |

۱- کدام عبارت در مکانیک لاگرانژ صحیح است؟

۱.  $L = T + V$

۲.  $\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} = F_i$

۳.  $\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} = p_i$

۴.  $\frac{d}{dt} \left( \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} \right) = - \left( \frac{\partial V}{\partial x_i} \right)$

۲- کدام عبارت بیانگر رابطه دوبروی است؟

۱.  $\frac{h}{v} = \lambda$

۲.  $\frac{h}{p} = \lambda$

۳.  $\frac{h}{mv} = E$

۴.  $\frac{p}{\lambda} = h$

۳- کدام عبارت نادرست است؟

۱. دقت بیشتر در تعیین مختصات ذره منجر به دقت کمتر در تکانه آن ذره میشود.

۲. دقت بیشتر در تعیین انرژی یک ذره منجر به دقت کمتر در زمان اندازه گیری انرژی آن ذره خواهد شد.

۳. دقت بیشتر در تعیین تکانه ذره منجر به دقت بیشتر در تعیین مختصات آن ذره میشود.

۴. اگر تکانه الکترون کاملاً مشخص باشد، مکان آن کاملاً نامعین است.

۴- بنا بر اصل موضوع سوم کدام کمیت قابل محاسبه است؟

۱. احتمال یافتن ذره

۲. انرژی ذره

۳. خطا در محاسبه موقعیت ذره

۴. تابع موج ذره

۵- شرایط آغازی چیست؟

۱. شرایط یک تابع موج قابل قبول

۲. محاسبه ثابت های مشتق گیری

۳. شرایطی که به ازای تمام مقادیر  $t$  برای ذره ای که حرکت آن در فضای معین محدود شده است، صدق کند.

۴. محاسبه مشتق مرتبه اول نسبت به زمان

۶- **حالت‌های ایستای ذره به چه معنایی است؟**

۱. وجود پیوستگی در تابع موج وابسته به زمان

۲. وجود ناپیوستگی در تابع موج وابسته به زمان

۳. وجود تابع موج وابسته به زمان

۴. وجود تابع های موج وابسته به زمان که به هر یک انرژی معین مربوط شود.

۷- **به کمک کدام تکنیک معادله شرودینگر ذره در جعبه سه بعدی قابل حل خواهد بود؟**

۱. تفکیک متغیر

۲. تغییر متغیر

۳. تغییر مختصات

۴. تغییر مختصات و تفکیک متغیر

۸- **کدام نتیجه از الگوی ذره در جعبه سه بعدی حاصل میشود؟**

۱. در یک محدود معینی از انرژی تجمع ترازها بیشتر است.

۲. وقتی دو یا سه بعد با هم برابر باشند، پدیده چند حالتی بودن ترازها پیش می‌آید.

۳. مطالعه تقریبی منظومه های ذره ای میسر میشود.

۴. تمام موارد

۹- **کدام عبارت در مورد حالت های نوسانگر هماهنگ درست است؟**

۱. توابع موج آن همواره فرد است.

۲. در محاسبه مقادیر میانگین برای این سیستم از خاصیت پاریته توابع موج میتوان استفاده نمود

۳. پاریته این توابع همواره زوج است.

۴. هر چه عدد کوانتومی کوچکتر میشود توزیع دانسیته به حالت کلاسیک نزدیک تر میشود.

۱۰- **از کدام تکنیک برای حل معادله شرودینگر چرخنده صلب در صفحه استفاده میشود؟**

۱. تغییر متغیر

۲. تفکیک متغیر

۳. تغییر سیستم مختصات

۴. تغییر و تفکیک متغیر

۱۱- **کدام دو اپراتور تعویض پذیر هستند؟**

۱. مربع گشتاور زاویه ای و هامیلتونی

۲. هامیلتونی و انرژی جنبشی

۳. گشتاور زاویه ای و هامیلتونی

۴. مربع گشتاور زاویه ای و کلیه مؤلفه های آن

۱۲- مقدار ویژه اپراتور  $L_z$  روی توابع چرخنده صلب در صفحه کدام است؟

۱.  $m$       ۲.  $\pm m$       ۳.  $mh / 2\pi$       ۴.  $\pm h / 2\pi$

۱۳- کدام یک در رابطه با سیستم چرخنده صلب سه بعدی درست است؟

۱. به هر یک از ترازهای انرژی با شماره  $J$ ، تعداد  $2J+1$  حالت وابسته است.
۲. این حالتها بوسیله  $LZ$  از هم متمایز میشوند.
۳. جهت گیری بردار  $L$  در فضا کاملاً جهت های معینی دارد.
۴. تمام موارد

۱۴- در حل معادله شرودینگر اتم هیدروژن از کدام تکنیک استفاده میشود؟

۱. تغییر مختصات      ۲. تغییر متغیر      ۳. بسط سری توانی      ۴. تمام موارد

۱۵- انرژی یونش اتم هیدروژن بر حسب هارتری کدام است؟

۱.  $0.5$       ۲.  $13/6$       ۳.  $27/2$       ۴.  $-1$

۱۶- قضیه ویریاال کدام چیست؟

۱. انرژی جنبشی سیستم همواره نصف انرژی کل است.
۲. انرژی کل سیستم همواره با منهای انرژی جنبشی آن برابر است.
۳. انرژی پتانسیل سیستم نصف انرژی جنبشی است.
۴. انرژی کل سیستم منهای نصف انرژی پتانسیل است.

۱۷- مقادیر ویژه مولفه  $Z$  گشتاور اسپینی الکترون اتم هیدروژن کدام است؟

۱.  $\pm h / \pi$       ۲.  $\pm h / 2\pi$       ۳.  $\pm h / 4\pi$       ۴.  $\pm h / 2$

۱۸- تکانه کل الکترون اتم هیدروژن در حالت  $p$  کدام است؟

۱.  $3/2$  و  $1$       ۲.  $1/2$  و  $3/2$       ۳.  $0$  و  $1/2$       ۴.  $0$  و  $3/2$

۱۹- توابع ویژه اپراتور  $S_z$  و مقادیر ویژه آنها کدام است؟

۱.  $\alpha$  و  $\beta$  با مقدار ویژه  $\pm \frac{\hbar}{2\pi}$
۲.  $\alpha$  و  $\beta$  با مقادیر ویژه  $\pm \frac{\hbar}{2}$
۳.  $\beta$  با مقدار ویژه  $-\hbar$
۴.  $\alpha$  با مقدار ویژه  $-\hbar$

۲۰- ضریب نرمال کنندگی دترمینان اسلیتر کدام است؟

۱.  $\frac{1}{\sqrt{N}}$  ۲.  $\frac{1}{\sqrt{N!}}$  ۳.  $\frac{1}{N^2}$  ۴.  $\sqrt{N!}$

۲۱- کدام تقریب در مدل اربیتال مولکولی هوکل بکار میرود؟

۱. تابع توصیف کننده سیستم پای بصورت دترمینانی از اربیتالهای تک الکترونی حاصل از ترکیب خطی اربیتالهای  $2s$  اتمهای کربن است.  
۲. اربیتالهای مولکولی مناسب با روش اختلال تعیین میشوند.  
۳. انتگرالهای کولنی همگی برابر یک هستند.  
۴. انتگرالهای همپوشانی دواتم مجاور همگی برابر صفر هستند.

۲۲- بر اساس تقریب هوکل انرژی مولکول اتیلن کدام است؟

۱.  $\alpha + \beta$  ۲.  $2\alpha + \beta$  ۳.  $2\alpha + 2\beta$  ۴.  $2\alpha - 2\beta$

۲۳- بر اساس تقریب هوکل انرژی سیستم بوتادین کدام است؟

۱.  $2\alpha + 2\beta$  ۲.  $4\alpha + 4\beta$  ۳.  $\alpha + \beta$  ۴.  $4\alpha - 2\beta$

۲۴- بر اساس تقریب هوکل انرژی رزونانس بنزن کدام است؟

۱.  $6\alpha + 6\beta$  ۲.  $6\alpha + 8\beta$  ۳.  $8\beta$  ۴.  $4\alpha - 2\beta$

۲۵- چند حالت کوانتومی هم انرژی به سومین تراز انرژی ذره در جعبه مکعبی نسبت داده میشود؟

۱. ۱ ۲. ۳ ۳. ۶ ۴. ۴

### سوالات تشریحی

۱- دانسیته احتمال را برای یک حالت دلخواه ذره در جعبه که با تابع حالت زیر توصیف شده است را بنویسید. ۱/۲۰ نمره

$$\Psi(x, t) = C_1 \sin\left(\frac{\pi}{L}x\right)e^{-iE_1 t/\hbar} + C_2 \sin\left(\frac{2\pi}{L}x\right)e^{-iE_2 t/\hbar}$$

۲- بر اساس مدل ذره در جعبه نشان دهید وجود ذره الکترون (بتا) در هسته اتم به عنوان یکی از اجزای دائمی آن مردود است. ۱/۲۰ نمره

و قطر هسته  $10^{-14} m$  و  $h = 6.64 \times 10^{-34} J.s$

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{\mu e^2}, \alpha = \frac{Z}{a_0}, \Psi_{1s}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \alpha^{3/2} e^{-\alpha r}$$

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

۴- چهار بیان مختلف از اصل طرد پائولی را بنویسید.

۵- یک دانه بسیار کوچک به جرم ۱ میکرو گرم با سرعت ۱ سانتی متر بر ثانیه حرکت میکند. هر گاه نامعینی در

سرعت آن یک درصد باشد، نامعینی در مکان آن چقدر است؟  $h = 6.64 \times 10^{-34} \text{ J.s}$

| شماره سوال | پاسخ صحیح |
|------------|-----------|
| 1          | ج         |
| 2          | ب         |
| 3          | ج         |
| 4          | ب         |
| 5          | ج         |
| 6          | د         |
| 7          | الف       |
| 8          | د         |
| 9          | ب         |
| 10         | ج         |
| 11         | الف       |
| 12         | ج         |
| 13         | د         |
| 14         | د         |
| 15         | الف       |
| 16         | ب         |
| 17         | ج         |
| 18         | ب         |
| 19         | ب         |
| 20         | ب         |
| 21         | د         |
| 22         | ج         |
| 23         | ب         |
| 24         | ج         |
| 25         | ب         |

### سوالات تشریحی

نمره ۱/۲۰

$$P = \int_{-L}^L \psi^* \psi dx = \int_{-L}^L (c_1 \psi_1^* + c_2 \psi_2^*) (c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2) dx$$

$$\psi = c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2 = c_1^2 + c_2^2$$

نمره ۱/۲۰

۲- فصل سوم صفحه ۷۲

نمره ۱/۲۰

۳- فصل ۶ صفحه ۱۵۹ و ۱۶۰

نمره ۱/۲۰

- ۴- ۱- تابع موج یک منظومه چند الکترونی نسبت به جابجایی هر دو الکترون از الکترونها ضد متقارن است.  
 ۲- هیچ دو الکترونی نمیتواند چهار عدد کوانتومی یکسان داشته باشد.  
 ۳- وجود بیش از دو الکترون در هر اربیتال مجاز نیست.  
 ۴- الکترونها با اسپین مخالف در هر اربیتال قرار دارند.

نمره ۱/۲۰

$$\Delta x \Delta p \geq \hbar$$

$$m \Delta x \Delta v \geq \hbar$$

$$\Delta x \geq \frac{\hbar}{m \Delta v}$$

۵-  $m = 1.1 \times 10^{-4} \text{ kg}$  ,  $v = 1.7 \times 10^5 \text{ m/s}$

$$\Delta v = 1.7 \times 10^5 = \frac{1}{1.1 \times 10^{-4}} \times 1.7 \times 10^5 = 1.5 \times 10^8 \text{ m/s}$$

$$\Delta x \geq \frac{\hbar}{1.5 \times 10^8 \times 1.1 \times 10^{-4}}$$

$$\Delta x \geq \frac{6.626 \times 10^{-34}}{1.65 \times 10^{-11}} \Rightarrow \Delta x \approx 4 \times 10^{-23} \text{ m}$$

۱- کدام گزینه زیر الزاما حقیقی است و نمی تواند موهومی باشد.

۱. چگالی احتمال
۲. تابع موج
۳. عملگر مومنتم
۴. دامنه احتمال

۲- پاسخ عملگر  $\hat{D}_x$  بر تابع موج  $\sin x$  کدام است؟

۱.  $\sin x$
۲.  $\cos x$
۳. صفر
۴. یک

۳- کدام عملگر زیر خطی نیست؟

۱.  $\sqrt{\quad}$
۲.  $\hat{D}_x$
۳.  $\hat{D}_x^2$
۴.  $\hat{x}$

۴- به هر کمیت فیزیکی مشاهده پذیر یک عملگر ..... وابسته است.

۱. هرمیتی
۲. مکان
۳. مشتق
۴. هرمیتی و خطی

۵- متوسط مقدار  $x$  برای تابع موج ذره در جعبه یک بعدی کدام است؟

۱.  $L$
۲.  $L/4$
۳.  $L/2$
۴.  $2L$

۶- در چه شرایطی چگالی احتمال مستقل از زمان است؟

۱. تابع پتانسیل مستقل از مکان باشد.
۲. انرژی جنبشی مستقل از مکان باشد.
۳. انرژی جنبشی مستقل از زمان باشد.
۴. تابع پتانسیل مستقل از زمان باشد.

۷- رابطه عدد موج کدام است؟

۱.  $\sqrt{2mE}$
۲.  $\sqrt{2m\hbar}$
۳.  $\sqrt{\frac{2m\hbar}{E}}$
۴.  $\sqrt{\frac{2mE}{\hbar}}$

۸- کدام سیستم زیر دارای انرژی پیوسته می باشد؟

۱. مولکول هیدروژن
۲. اتم هیدروژن
۳. ذره آزاد
۴. ذره در جعبه

۹- کدام یک تابع موج ذره در جعبه یک بعدی است؟

$$\begin{array}{ll} \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) & .1 \\ \sqrt{\frac{2}{L}} \cos\left(\frac{n\pi x}{L}\right) & .2 \\ \sqrt{\frac{L}{2}} \cos\left(\frac{n\pi x}{L}\right) & .3 \\ \sqrt{\frac{L}{2}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) & .4 \end{array}$$

۱۰- چگالی احتمال ذره در جعبه یک بعدی به ازای  $n=2$  در کدام موقعیت صفر است؟

$$\begin{array}{llll} x=L/4 & .1 & x=L/2 & .2 \\ x=L/3 & .3 & x=L/6 & .4 \end{array}$$

۱۱- مقدار خطا در انرژی تابع موج ایستای ذره در جعبه کدام است؟

$$\begin{array}{llll} \hbar & .1 & \frac{\hbar}{2} & .2 \\ 0 & .3 & 1 & .4 \end{array}$$

۱۲- تعداد همترای برای تراز انرژی  $E = \frac{6h^2}{8ma^2}$  کدام است؟

$$\begin{array}{llll} 3 & .1 & 2 & .2 \\ 1 & .3 & 6 & .4 \end{array}$$

۱۳- اگر  $\Lambda$  تابع موج مربوط به  $n=1$  مدل ذره در جعبه و  $B$  تابع موج مربوط به  $n=2$  مدل ذره در جعبه باشد، مقدار انتگرال

$$\int_{all\ space} A^* B d\tau$$

کدام است؟

$$\begin{array}{llll} 1 & .1 & 2 & .2 \\ 0 & .3 & \text{بینهایت} & .4 \end{array}$$

۱۴- با افزایش عدد کوانتومی، فاصله ترازهای انرژی در نوسانگر هماهنگ چگونه تغییر می کند؟

$$\begin{array}{ll} 1. \text{ بصورت خطی با فرکانس زیاد می شود.} & 2. \text{ بصورت خطی با فرکانس کاهش می یابد.} \\ 3. \text{ بدون تغییر باقی می ماند.} & 4. \text{ پیوسته می شود.} \end{array}$$

۱۵- کدام مورد در مورد چرخنده صلب صحیح است؟

۱. تراز انرژی بصورت خطی با  $m$  تغییر می کند.
۲. همزمان با چرخش، نوسان نیز انجام می شود.
۳. تبهگنی (دیژنریسی) در تمام ترازها برابر با 2 است.
۴. فاصله ترازها با افزایش  $m$  زیاد می شود.

۱۶- کدام رابطه زیر برابر با عملگر  $\hat{L}_Z$  در چرخنده صلب است؟

۱.  $-i\hbar \frac{\partial}{\partial r}$
۲.  $-i\hbar \frac{\partial}{\partial \theta}$
۳.  $-i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}$
۴.  $-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$

۱۷- عملگر مجذور اندازه حرکت زاویه ای تابع کدام متغیر نیست؟

۱.  $r$
۲.  $\theta$
۳.  $\phi$
۴.  $\theta, \phi$

۱۸- مقدار انرژی چرخنده صلب در فضای 3 بعدی به ازای  $J=2$  کدام است؟

۱. 0
۲.  $\frac{2\hbar^2}{2I}$
۳.  $\frac{6\hbar^2}{2I}$
۴.  $\frac{12\hbar^2}{2I}$

۱۹- انرژی اتم هیدروژن به کدام عدد کوانتمی وابسته است؟

۱.  $n$
۲. 1
۳.  $m$
۴.  $l, m$

۲۰- تابع موج  $\psi_{1s}$  در اتم هیدروژن به کدام متغیر زیر وابسته است؟

۱.  $r$
۲.  $r, \theta$
۳.  $r, \phi$
۴.  $\theta, \phi$

۲۱- ویژه مقدار تابع موج اسپینی  $\alpha(\sigma)$  برای عملگر  $\hat{S}_Z$  کدام است؟

۱.  $1/2$
۲.  $-1/2$
۳.  $\frac{\hbar}{2}$
۴.  $-\frac{\hbar}{2}$

۲۲- مقدار  $dv$  در فضای قطبی کروی برابر کدام مورد زیر است؟

۱.  $r \, dr \, d\theta \, d\phi$

۲.  $r^2 \, dr \, d\theta \, d\phi$

۳.  $r^2 \sin \theta \, dr \, d\theta \, d\phi$

۴.  $r^2 \sin \phi \, dr \, d\theta \, d\phi$

۲۳- واحد اتمی طول و انرژی کدام است؟

۱. متر، ژول

۲. بوهر، ژول

۳. بوهر، هارتری

۴. متر، هارتری

۲۴- بار موثر هسته در تقریب اسلیتر کدام مورد زیر است. فرض کنید که  $b$  ضریب حایل باشد.

۱.  $Z=b \times Z$

۲.  $Z=Z-b$

۳.  $Z=Z+b$

۴.  $Z=Z/b$

۲۵- کدام ذره زیر فرمیون نیست؟

۱. الکترون

۲. پروتون

۳. نوترون

۴. فوتون

### سوالات تشریحی

۱.۲۰ نمره

۱- مقدار متوسط  $\hat{P}_x$  را برای ذره در جعبه یک بعدی محاسبه کنید.

۱.۲۰ نمره

۲- ثابت کنید که  $[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i \hbar \hat{L}_z$ .

۱.۲۰ نمره

۳- تغییرات تابع توزیع شعاعی بر حسب  $r$  برای اوربیتال  $1s$  را رسم کنید.

۱.۲۰ نمره

۴- تفاوت فرمیون و بوزون را توضیح دهید.

۱.۲۰ نمره

۵- دترمینان اسلیتر را برای  $N$  الکترون بنویسید.

| شماره سوال | پاسخ صحیح |
|------------|-----------|
| 1          | الف       |
| 2          | ب         |
| 3          | الف       |
| 4          | د         |
| 5          | ج         |
| 6          | د         |
| 7          | د         |
| 8          | ج         |
| 9          | الف       |
| 10         | ب         |
| 11         | ج         |
| 12         | الف       |
| 13         | ج         |
| 14         | ج         |
| 15         | د         |
| 16         | ج         |
| 17         | الف       |
| 18         | ج         |
| 19         | الف       |
| 20         | الف       |
| 21         | ج         |
| 22         | ج         |
| 23         | ج         |
| 24         | ب         |
| 25         | د         |

۱- کدام گزینه زیر در مورد تکانه خطی صحیح نیست؟

۱. کمیتی برداری است.
۲. همراستا با بردار سرعت است.
۳. بزرگی آن برابر حاصلضرب جرم در سرعت است.
۴. مشتق نسبت به زمان بردار موضعی ذره است.

۲- کدام گزینه زیر رابطه دوبروی در مورد ماهیت موجی - ذره ای الکترون نشان می دهد؟

$$\begin{array}{llll} ۱. \lambda = \frac{h}{mv} & ۲. E = h\nu & ۳. E = h \frac{\nu}{\lambda} & ۴. E = \frac{1}{2} h\nu \end{array}$$

۳- تابع دانسیته احتمال کدام گزینه زیر است؟

$$\begin{array}{llll} ۱. \psi & ۲. \psi^* & ۳. |\psi|^2 & ۴. \psi / \psi^* \end{array}$$

۴- شرط نرمالیزه بودن تابع موج حرکت ذره در فضای سه بعدی کدام است؟

$$\begin{array}{ll} ۱. \int_V |\psi(\vec{r}, t)|^2 dV = 1 & ۲. \int_V |\psi(\vec{r}, t)|^2 dV = 0 \\ ۳. \int_V |\psi(\vec{r}, t)| dV = 1 & ۴. \int_V |\psi(\vec{r}, t)| dV = 0 \end{array}$$

۵- اپراتور وابسته به هر کمیت فیزیکی مشاهده پذیر چه ویژگی دارد؟

۱. خطی است.
۲. هرمیتیک است.
۳. خطی و هرمیتیک است.
۴. حقیقی است.

۶- مقدار قابل انتظار مؤلفه X اندازه حرکت به ازای هر مقدار از انرژی ذره آزاد، E، چقدر است؟

$$\begin{array}{llll} ۱. \langle P_x \rangle = \sqrt{E/2m} & ۲. \langle P_x \rangle = \sqrt{2m/E} & ۳. \langle P_x \rangle = \sqrt{2mE} & ۴. \langle P_x \rangle = 2m/E \end{array}$$

۷- انرژی نخستین حالت کوانتومی ذره در جعبه یک بعدی به طول L چقدر است؟

$$\begin{array}{llll} ۱. \frac{mh^2}{8L^2} & ۲. 8mL^2 & ۳. \frac{h^2}{8mL^2} & ۴. \frac{mh^2}{L^2} \end{array}$$

۸- انرژی دومین تراز ذره در جعبه سه بعدی با ابعاد a چقدر است؟

$$\begin{array}{llll} ۱. \frac{6h^2}{8ma^2} & ۲. \frac{h^2}{8ma^2} & ۳. \frac{2h^2}{ma^2} & ۴. \frac{h^2}{4ma^2} \end{array}$$

۹- مفهوم فیزیکی جابجایپذیر بودن اپراتورها چیست؟

۱. کمیت‌های وابسته به آنها به طور همزمان قابل شناخت هستند.

۲. وابسته به انرژی هستند.

۳. وابسته به مکان هستند.

۴. مستقل از زمان هستند.

۱۰- انرژی تراز  $\lambda$ ام یک چرخنده صلب در فضای سه بعدی از چه رابطه‌ای پیروی می‌کند؟

$$E_{rot} = J^2 \frac{\hbar^2}{2I} \quad ۱. \quad E_{rot} = (J+1)^2 \frac{\hbar^2}{2I} \quad ۲.$$

$$E_{rot} = J(J+1) \frac{\hbar^2}{2I} \quad ۳. \quad E_{rot} = J(J+1)^2 \frac{\hbar^2}{2I} \quad ۴.$$

۱۱- در مثال ذره در جعبه سه بعدی، به دومین تراز انرژی چند حالت کوانتومی هم انرژی وابسته است؟

۱. ۱      ۲. ۲      ۳. ۳      ۴. ۴

۱۲- کدام گزینه تابع توزیع شعاعی را به درستی نشان می‌دهد؟

$$P(r) = 4\pi r R^2(r) \quad ۱. \quad P(r) = 4\pi r^2 R^2(r) \quad ۲.$$

$$P(r) = 4\pi r^2 R(r) \quad ۳. \quad P(r) = 4\pi r R(r) \quad ۴.$$

۱۳- هرگاه انرژی حالت اصلی اتم هیدروژن  $E_H$  باشد، انرژی مجاز تراز  $n$ ام این اتم از چه رابطه‌ای محاسبه می‌شود؟

$$E_n = \frac{E_H}{n^2} \quad ۱. \quad E_n = \frac{n^2 E_H}{h^2} \quad ۲. \quad E_n = \frac{h^2 E_H}{n^2} \quad ۳. \quad E_n = \frac{n^2 E_H}{8h^2} \quad ۴.$$

۱۴- تکانه زاویه‌ای کل ( $\vec{J}$ ) چه ارتباطی با تکانه اربیتال ( $\vec{l}$ ) و تکانه اسپین تک الکترون ( $\vec{s}$ ) دارد؟

$$\vec{J} = \sqrt{\vec{l} + \vec{s}} \quad ۱. \quad \vec{J} = \sqrt{\vec{l} - \vec{s}} \quad ۲. \quad \vec{J} = \vec{l} + \vec{s} \quad ۳. \quad \vec{J} = \vec{l} - \vec{s} \quad ۴.$$

۱۵- پتانسیل اختلال در هامیلتونی اتم هلیوم کدام جمله است؟

$$\frac{1}{r_{1,2}} \quad ۱. \quad \frac{Z}{r_1} \quad ۲. \quad \frac{Z}{r_1} + \frac{Z}{r_2} \quad ۳. \quad -\frac{1}{2}(\nabla_1^2 + \nabla_2^2) \quad ۴.$$

۱۶- ذرات دارای اسپین نیمه صحیح چه نوع تابع موجی دارند؟

۱. متقارن      ۲. ضدمتقارن      ۳. موهومی      ۴. حقیقی

۱۷- بر اساس روش تغییر پارامترها هرگاه کوچکترین مقدار ویژه هامیلتونی یک منظومه  $E_0$  و تابع ویژه مربوط  $\psi_0$  باشد، با هر تابع  $\Phi$  غیر از  $\psi_0$ ، خواهیم داشت:

$$\int \Phi^* \hat{H} \Phi d\tau \leq E_0 \quad ۱. \quad \int \Phi^* \hat{H} \Phi d\tau \geq E_0 \quad ۲.$$

$$\int \psi_0^* \hat{H} \psi_0 d\tau \geq E_0 \quad ۳. \quad \int \psi_0^* \hat{H} \psi_0 d\tau \leq E_0 \quad ۴.$$

۱۸- مطالعه حرکت‌های چرخشی، ارتعاشی و الکترونی مولکول بطور مستقل از هم در مکانیک کوانتومی بر چه پایه ای انجام می شود؟

۱. قاعده هوند      ۲. روش اسلیتر  
۳. قضیه کوپمان      ۴. تقریب بورن – اپنهایمر

۱۹- کدام گزینه زیر در مورد نظریه هوکل صحیح است؟

۱. یک روش تجربی است.  
۲. برای توصیف وضع الکترونهای  $\pi$  به کار می رود.  
۳. خواص مولکولهایی مانند بوتان را به درستی توصیف می کند.  
۴. یک روش فقط برای مولکولهای خطی قابل استفاده است.

۲۰- در تقریب هوکل اربیتالهای مولکولی تک الکترونی مناسب با چه روشی تعیین می شود؟

۱. روش تغییر پارامترها      ۲. دترمینان اسلیتر  
۳. روش اختلال      ۴. ترکیب اربیتالهای مولکولی

## سوالات تشریحی

۱.۲۰ نمره

۱- مجموع دو اپراتور  $\hat{x}$  و  $\hat{D}_x$  را بر تابع  $\sin aX$  اثر دهید.

۱.۲۰ نمره

۲- انرژی اولین تراز انرژی چرخشی مولکول NO به عنوان یک چرخنده صلب را محاسبه کنید. ممان اینرسی این مولکول  $16.5 \times 10^{-47} \text{ kgm}^2$  است.

$$h = 6.6 \times 10^{-34} \text{ Js}$$

۱.۲۰ نمره

۳- انرژی ترازهای صفرم تا سوم انرژی برای چرخنده صلب سه بعدی را با ذکر تعداد حالت‌های هم‌تراز وابسته به هر تراز مشخص کنید.

۱.۲۰ نمره

۴- دترمینان اسلیتر را برای یک منظومه دو الکترونی بنویسید.

۱.۲۰ نمره

۵- تقریب‌های منظور شده در نظریه هوکل را ذکر کنید.

| شماره<br>سوال | پاسخ صحیح |
|---------------|-----------|
| 1             | د         |
| 2             | الف       |
| 3             | ج         |
| 4             | الف       |
| 5             | ج         |
| 6             | ج         |
| 7             | ج         |
| 8             | الف       |
| 9             | الف       |
| 10            | ج         |
| 11            | ج         |
| 12            | ب         |
| 13            | الف       |
| 14            | ج         |
| 15            | الف       |
| 16            | ب         |
| 17            | ب         |
| 18            | د         |
| 19            | ب         |
| 20            | الف       |

۱- فرکانس یک سیستم نوسانگر هماهنگ توسط کدام رابطه تعیین می‌شود؟

۱.  $\frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{m}}$
۲.  $\frac{h}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{m}}$
۳.  $\frac{\hbar}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{m}}$
۴.  $\frac{\hbar}{\pi} \sqrt{\frac{k}{m}}$

۲- ضد متقارن بودن دترمینان اسلیتر ناشی از کدام مورد است؟

۱. در دترمینان اسلیتر منظومه ی الکترونی، دو ستون نمی توانند با هم برابر باشند.
۲. تعویض مختصات دو الکترون معادل با تعویض دو سطر دترمینان است.
۳. در اثر جابجایی دو سطر یا دو ستون دترمیتان، علامت آن عوض می شود.
۴. تمام موارد صحیح است.

۳- تعداد جملات در هامیلتونی اتم هلیوم چیست؟

۱. 6
۲. 5
۳. 4
۴. 7

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

۱.  $s = -\frac{e}{2m} \mu$
۲.  $\mu = -g \frac{e}{2m} s$
۳.  $\mu = -g \frac{e}{2m} s^2$
۴.  $\mu = -\frac{e}{2m} s$

۵- پیامد جابجا پذیر بودن دو اپراتور و داشتن توابع ویژه مشترک چیست؟

۱. توابع ویژه آنها یک دنباله کامل را تشکیل نمی دهند.
۲. توابع ویژه آنها متعامد هستند.
۳. اصل عدم قطعیت در مورد این دو اپراتور صادق است.
۴. مشاهده پذیر های فیزیکی آنها همزمان قابل شناخت هستند.

۶- کدام حالت نوسانگر هماهنگ دارای پاریتی فرد است؟

۱. حالت هایی با اعداد کوانتومی زوج
۲. حالت هایی با انرژی مضرب فردی از  $\hbar\omega$
۳. حالت هایی که متوسط اندازه حرکت آنها صفر هستند.
۴. هیچکدام

۷- کدام مقدار انرژی برای ذره در جعبه سه بعدی صادق است؟ ( $\epsilon = \hbar^2/8ma^2$ )

۱.  $10\epsilon$
۲.  $4\epsilon$
۳.  $14\epsilon$
۴.  $16\epsilon$

۸- اهمیت هرمیتی بودن یک اپراتور بر اساس کدام اصل موضوعه بیان می شود؟

۱. سوم
۲. دوم
۳. اول
۴. چهارم

۹- نمایش توزیع زاویه ای احتمال برای الکترون به چه طریقی قابل ترسیم است؟

۱. ثابت گرفتن  $r$       ۲. ثابت گرفتن زاویه  $\varphi$       ۳. ثابت گرفتن زاویه  $\theta$       ۴. ثابت گرفتن  $r$  و  $\theta$

۱۰- برای حل معادله شرودینگر چرخنده صلب از چه تکنیکی استفاده می شود؟

۱. بسط سری توانی      ۲. تغییر متغیر      ۳. تفکیک متغیرها      ۴. تغییر مختصات

۱۱- کدام گزینه در مورد نظریه هوکل صحیح نیست؟

۱. انتگرالهای همپوشانی همگی برابر یک فرض می شوند.  
۲. این نظریه برای توصیف الکترونها سیستم های مزدوج صادق است.  
۳. در این نظریه برای هر اتم کربن در سیستم های مزدوج یک اربیتال  $2p$  منظور می شود.  
۴. انتگرالهای کولنی همگی برابر فرض می شوند.

۱۲- معادل ماتریسی تابع اسپینی  $\beta$  کدام است؟

۱.  $\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$       ۲.  $\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$       ۳.  $\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$       ۴.  $\begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}$

۱۳- کدام عبارت درست است؟

۱.  $[S_x, S_y] = i\hbar S_z$       ۲.  $[S_x, S_y] = \hbar S_z$       ۳.  $[S_x, S_y] = -i\hbar S_z$       ۴.  $[S_x, S_y] = -\hbar S_z$

۱۴- کدام جمله صحیح است؟

۱. تکانه زاویه ای مضرب صحیحی از  $\hbar/2\pi$  است.  
۲. مؤلفه  $Z$  تکانه زاویه ای مضربی از  $\hbar/2\pi$  است.  
۳. تکانه زاویه ای متناسب با  $\hbar$  است.  
۴. موارد ب و ج

۱۵- شرایط مرزی سیستم چرخنده صلب کدام است؟

۱. سرعت های مجاز      ۲. ثابت بودن  $r$       ۳. وجود نیروی مرکزی      ۴. هیچ کدام

۱۶- کدام دو اپراتور تعویض پذیرند؟

۱.  $D_x, p_x$       ۲.  $p_x, x$       ۳.  $p_x, x^2$       ۴.  $D_x, x$

۱۷- کدام عبارت در مورد سیستم های چند ذره ای تمییز ناپذیر صادق است؟

۱. مقدار ویژه اپراتور تعویض پذیری برابر یک باشد.
۲. تابع اسپین اربیتال آن باید تابع ویژه اپراتور تعویض پذیری باشد.
۳. تابع اسپین اربیتال آن باید نسبت به اپراتور تعویض پذیری متقارن باشد.
۴. تمام موارد صحیح است.

۱۸- رابطه  $\Delta z \Delta p_z \geq \frac{h}{4\pi}$ ، بیانگر کدام اصل است؟

۱. اصل محدودیت
۲. اصل عدم قطعیت
۳. اصل متناظر بودن
۴. اصل دوبروی

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

۱. هامیلتونی
۲. انرژی کل
۳. لاگرانژ
۴. انرژی پتانسیل

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

۱. ۲
۲. ۳
۳. ۴
۴. ۶

## سوالات تشریحی

۱.۲۰ نمره

۱- تاثیر اپراتور  $p_x^2 + x^2$  روی تابع  $e^{-\alpha x^2}$  را بنویسید.

۱.۲۰ نمره

۲- چند جمله ای های هرمیت بصورت زیر تعریف می شوند:  $H_n(\zeta) = (-1)^n e^{\zeta^2} \frac{d^n}{d\zeta^n} (e^{-\zeta^2})$  مقادیر تابع هرمیت از مرتبه های  $n=0$  تا  $n=3$  را بدست آورید.

۱.۲۰ نمره

۳- برای مولکول CO با طول پیوند 1.13 آنگستروم بر اساس تقریب چرخنده صلب سه بعدی طول موج اولین خط جذبی را بر حسب سانتی متر بدست آورید.

$$h = 6.63 \times 10^{-34} \text{ J.s}$$

$$c = 3 \times 10^8 \text{ cm/s}$$

۱.۲۰ نمره

۴- مقدار قابل انتظار فاصله الکترون اتم هیدروژن از هسته در حالت 1S بدست آورید.

$$\Psi_{1s}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} e^{-r/a_0}$$

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

۱.۲۰ نمره

۵- توابع ویژه اپراتور  $S_z$  و مقادیر ویژه هر کدام از آنها را بنویسید. ماتریس نمایش دهنده اپراتور  $S^2$  را بدست آورید.

| نمبر<br>سوال | جواب صحيح |
|--------------|-----------|
| 1            | الف       |
| 2            | د         |
| 3            | ب         |
| 4            | ب         |
| 5            | د         |
| 6            | ج         |
| 7            | ج         |
| 8            | ب         |
| 9            | الف       |
| 10           | د         |
| 11           | الف       |
| 12           | الف       |
| 13           | الف       |
| 14           | ب         |
| 15           | د         |
| 16           | الف       |
| 17           | ب         |
| 18           | ب         |
| 19           | ج         |
| 20           | ج         |

۱- کدام عبارت زیر دانسیته احتمال نامیده می شود؟

۱.  $|\Psi|^2 r d\tau$  ۲.  $|\Psi|^2$  ۳.  $\Psi$  ۴.  $|\Psi|^2 d\tau$

۲- به هر کمیت فیزیکی مشاهده پذیر یک اپراتور ..... وابسته است.

۱. خطی و هرمیتیک ۲. متعامد ۳. اورتوگنال ۴. هرمیتیک

۳-  $e^{ax}$  تابع ویژه  $\hat{D}_x$  با مقدار ویژه ..... است. ( $\hat{D}_x \equiv \frac{d}{dx}$ )

۱.  $a$  ۲.  $ax$  ۳.  $ax^2$  ۴.  $e^{ax}$

۴- انحراف استاندارد کمیتی مانند  $x$  از کدام رابطه زیر به دست می آید؟

۱.  $(\Delta x)^2 = \langle x \rangle^2 - x$  ۲.  $(\Delta x)^2 = \langle x^2 \rangle - x$   
۳.  $(\Delta x)^2 = \langle x \rangle^2 - \langle x^2 \rangle$  ۴.  $(\Delta x)^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$

۵- انرژی اولین تراز مجاز ذره ای به جرم  $m$  در جعبه یک بعدی به طول  $L$  چقدر است؟

۱. 0 ۲.  $\frac{h^2}{8mL^2}$  ۳.  $\frac{h^2}{4mL^2}$  ۴.  $\frac{h}{4mL^2}$

۶- در مثال ذره در جعبه یک بعدی نمودار تغییرات دانسیته احتمال بر حسب فاصله به ازای  $n=1$  چند گره دارد؟

۱. 0 ۲. 1 ۳. 2 ۴. 3

۷- چرخنده صلب در صفحه به ازای هریک از مقادیر کوانتومی انرژی چند حالت همتراز دارد؟

۱. 1 ۲. 2 ۳. 3 ۴. 4

۸- ممان اینرسی مولکول دو اتمی با جرم کاسته  $m'$  و طول پیوند  $r$  از کدام رابطه زیر به دست می آید؟

۱.  $I = m' / r$  ۲.  $I = m' / r^2$  ۳.  $I = m' r$  ۴.  $I = m' r^2$

۹- اپراتور تکانه زاویه ای در راستای  $z$ ، معادل کدام گزینه زیر است؟

۱.  $\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}$  ۲.  $\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi}$  ۳.  $\hat{L}_z = \frac{\hbar^2}{i} \frac{\partial^2}{\partial \phi \partial \theta}$  ۴.  $\hat{L}_z = \frac{\hbar^2}{i} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}$

۱۰- انرژی اولین تراز یک چرخنده صلب در فضای سه بعدی چقدر است؟

۱. 0      ۲.  $\frac{\hbar^2}{I}$       ۳.  $\frac{\hbar}{I}$       ۴.  $\frac{2\hbar}{I}$

۱۱- در یک چرخنده صلب در فضای سه بعدی، به هر تراز انرژی با شماره  $J$ ، چند حالت وابسته است؟

۱. 1      ۲.  $J(2J+1)$       ۳.  $2J+1$       ۴.  $J(J+1)$

۱۲- کدام عبارت زیر تابع توزیع شعاعی را به درستی نشان می دهد؟

۱.  $P(r) = 4\pi r R(r)$       ۲.  $P(r) = 4\pi r R^2(r)$   
۳.  $P(r) = 4\pi r^2$       ۴.  $P(r) = 4\pi r^2 R^2(r)$

۱۳- در اتم تک الکترونی در هر تراز انرژی به شماره  $n$ ، تعداد ..... حالت همتراز پیش بینی می شود.

۱.  $n^2$       ۲.  $2n^2$       ۳.  $2n$       ۴.  $4n$

۱۴- اولین خط طیفی سری بالمر، ناشی از چه نوع جهشی بین ترازهای اصلی اتم هیدروژن است؟

۱.  $3 \rightarrow 2$       ۲.  $3 \rightarrow 1$       ۳.  $2 \rightarrow 1$       ۴.  $4 \rightarrow 1$

۱۵- در کدام روش حل معادله شرودینگر از یک تابع آزمون استفاده می شود؟

۱. حل دقیق معادله شرودینگر برای اتم هیدروژن      ۲. حل دقیق معادله شرودینگر برای اتم هلیم  
۳. روش تغییر پارامترها      ۴. روش محاسبه اختلال

۱۶- ذراتی با اسپین نیمه صحیح تابع موجی ..... دارند.

۱. متقارن      ۲. ضدمتقارن      ۳. زوج      ۴. موهومی

۱۷- برای تعیین تابع موجی ضدمتقارن منظومه های چند الکترونی از ..... استفاده می کنیم.

۱. قضیه کوپمان      ۲. اثر زیمن      ۳. دترمینان اسلیتر      ۴. اصل آفبا

۱۸- نظریه هوکل برای بررسی کدام مولکول زیر کاربرد ندارد؟

۱. بنزن      ۲. سیکلوهگزان      ۳. اتیلن      ۴. بوتادی ان

۱۹- در روش هوکل اوربیتالهای مولکولی تک الکترونی مناسب، با چه روشی به دست می آیند؟

۱. ترکیب اوربیتالهای اتم هلیم      ۲. ترکیب اوربیتالهای اتم هیدروژن  
۳. اختلال      ۴. تغییر پارامترها

۲۰- مقدار انتگرالهای همپوشانی،  $S_{ij}$ ، در روش هوکل چقدر است؟ ( $i \neq j$ )

۴.  $ij$

۳.  $2ij$

۲. 1

۱. 0

### سوالات تشریحی

۱.۲۰ نمره

۱- اپراتور  $\hat{D}_x$  را بر روی دو تابع  $\sin x$  و  $x^2$  تأثیر دهید. ( $\hat{D}_x \equiv \frac{\partial}{\partial x}$ )

۱.۲۰ نمره

۲- سه تراز اول انرژی را برای ذره ای به جرم  $m$  در جعبه سه بعدی مکعبی با ابعاد  $a$  با ذکر تعداد حالت‌های وابسته به آنها مشخص کنید.

۱.۲۰ نمره

۳- در مورد مفهوم فیزیکی جابجایی اپراتورها، با ذکر مثال، توضیح دهید.

۱.۲۰ نمره

۴- در مورد ماهیت هریک از اعداد کوانتومی  $n, l, m$  که با استفاده از آنها اوربیتال اتمی ( $\psi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi)$ ) توصیف می‌شوند، توضیح دهید.

۱.۲۰ نمره

۵- هامیلتونی اتم هلیم را بنویسید و در مورد هریک از جملات آن به اختصار توضیح دهید.

| نمبر<br>سوال | ياسخ صحيح |
|--------------|-----------|
| 1            | ب         |
| 2            | الف       |
| 3            | الف       |
| 4            | د         |
| 5            | ب         |
| 6            | الف       |
| 7            | ب         |
| 8            | د         |
| 9            | ب         |
| 10           | الف       |
| 11           | ج         |
| 12           | د         |
| 13           | الف       |
| 14           | الف       |
| 15           | ج         |
| 16           | ب         |
| 17           | ج         |
| 18           | ب         |
| 19           | د         |
| 20           | الف       |

۱- تعداد جملات در هامیلتونی اتم هلیوم چیست؟

۱. 5      ۲. 6      ۳. 4      ۴. 7

۲- تکانه زاویه ای اسپینی الکترون کدام است؟

۱.  $\frac{\sqrt{3}}{4}\hbar^2$       ۲.  $\frac{\sqrt{3}}{2}\hbar$       ۳.  $\frac{1}{2}\hbar$       ۴.  $\frac{3}{4}\hbar^2$

۳- اهمیت هرمیتی بودن یک اپراتور بر اساس کدام اصل موضوعه بیان می شود؟

۱. اول      ۲. دوم      ۳. سوم      ۴. چهارم

۴- تأثیر اپراتور  $\hat{D}_x$  روی تابع  $e^{\alpha x}$  کدام است؟

۱.  $xe^{\alpha x}$       ۲.  $x\alpha e^{\alpha x}$       ۳.  $\alpha e^{\alpha x}$       ۴.  $x^2\alpha e^{\alpha x}$

۵- کدام عبارت بیانگر انرژی های مجاز اتم هیدروژن است ؟ (  $E_H$  انرژی حالت پایه اتم هیدروژن است )

۱.  $E_n = E_H n^2$       ۲.  $E_n = n^2 / E_H$       ۳.  $E_n = E_H / n^2$       ۴.  $E_n = -E_H / n^2$

۶- شرط تبدیل معادله شرودینگر تابع زمان به دو معادله مستقل کدام است؟

۱. نیرو پایستار باشد.      ۲. اندازه حرکت ثابت باشد.  
۳. پتانسیل ثابت باشد.      ۴. پتانسیل تابع زمان باشد.

۷- در مدل هوکل انرژی عدم استقرار چگونه تعریف می شود؟

۱. اختلاف بین انرژی سیستم  $p$  هیدروکربن  $N$  اتمی با انرژی الکترونها  $p$  مربوط به  $2N$  مولکول اتیلن  
۲. اختلاف بین انرژی سیستم  $p$  هیدروکربن  $N$  اتمی با انرژی الکترونها  $p$  مربوط به  $N/2$  مولکول اتیلن  
۳. اختلاف بین انرژی سیستم  $p$  هیدروکربن  $N$  اتمی با انرژی الکترونها  $p$  مربوط به  $N$  مولکول اتیلن  
۴. اختلاف بین انرژی سیستم  $p$  هیدروکربن  $N$  اتمی با انرژی الکترونها  $p$  مربوط به مولکول اتیلن

۸- پیامد جابجا پذیر بودن دو اپراتور و داشتن توابع ویژه مشترک چیست؟

۱. توابع ویژه آنها متعامد هستند.

۲. مشاهده پذیر های فیزیکی آنها همزمان قابل شناخت هستند.

۳. توابع ویژه آنها یک دنباله کامل را تشکیل نمی دهند.

۴. اصل عدم قطعیت در مورد این دو اپراتور صادق است.

۹- کدام مقدار انرژی برای ذره در جعبه سه بعدی صادق است؟ ( $e = h^2 / 8ma^2$ )

۱.  $4e$       ۲.  $10e$       ۳.  $14e$       ۴.  $16e$

۱۰- درجه همترازی چرخنده صلب در صفحه کدام است؟

۱. همواره 3 است.      ۲.  $2j + 1$       ۳. همواره 2 است.      ۴. 2 یا 1 است.

۱۱- حل معادله شرودینگر نوسانگر هماهنگ منجر به کدام معادله می شود؟

۱. لژاندر      ۲. هرمیت      ۳. لاگرانژ      ۴. لاگر

۱۲- هر گاه برای مولکول  $F_2$  با جرم مولکولی 38 ثابت نیرو 0.0045 نیوتن بر متر باشد، انرژی نقطه صفر کدام است؟ (بر حسب الکترون ولت)

۱. 0/055      ۲. 0/110      ۳. 0/116      ۴. 0/232

۱۳- ماتریس های پائولی معرف چیست؟

۱. معرف مقادیر ویژه اپراتور گشتاور زاویه ای اسپینی

۲. بیانگر مقادیر ویژه مؤلفه های اپراتور گشتاور زاویه ای اسپینی

۳. بیانگر مؤلفه های گشتاور زاویه ای اسپینی

۴. بیانگر حالت های اسپینی

۱۴- برای حل معادله شرودینگر چرخنده صلب از چه تکنیکی استفاده می شود؟

۱. تفکیک متغیرها      ۲. بسط سری توانی      ۳. تغییر مختصات      ۴. تغییر متغیر

۱۵- برای چرخنده صلب سه بعدی کدام عبارت صحیح است؟

۱.  $H = L^2 / 2I$       ۲.  $E = j\hbar^2 / 2I$       ۳.  $E = j^2 \hbar^2 / 2I$       ۴.  $L^2 = \sqrt{j(j+1)} \hbar^2$

۱۶- کدام عبارت بیانگر قضیه تغییر است؟

۱. انرژی واقعی سیستم همواره از انرژی محاسبه ای کوچکتر است.
۲. انرژی محاسبه ای همواره کوچکتر از انرژی واقعی سیستم است.
۳. انرژی تنها به نوع هامیلتونی وابسته بوده و مقدار آن همواره از مقدار تئوری کوچکتر است.
۴. هامیلتونی تنها وابسته به مختصان مکانی ذره بوده و انرژی همواره کوچکتر از مقدار محاسبه ای است.

۱۷- در سیستم چرخنده صلب کدام مورد موجب ایجاد عدد کوانتومی می شود؟

۱. تک مقدار بودن تابع موج
۲. پیوسته بودن تابع موج
۳. متعامد بودن توابع موج
۴. نرمال بودن تابع موج

۱۸- مقدار قابل انتظار انرژی پتانسیل در اتم هیدروژن کدام است؟ (بر حسب الکترون ولت)

۱. 13.6
۲. -13.6
۳. 27.2
۴. -27.2

۱۹- توابع ویژه اپراتور  $S_z^2$  کدامند؟

۱. توابع ویژه اپراتور  $S_z$
۲. توابع پاولینگ
۳.  $\beta, \alpha$
۴. الف و ج

۲۰- نمایش توزیع زاویه ای احتمال برای الکترون به چه طریقی قابل ترسیم است؟

۱. ثابت گرفتن زاویه  $\theta$
۲. ثابت گرفتن  $r$
۳. ثابت گرفتن  $r$  و  $\theta$
۴. ثابت گرفتن زاویه  $\varphi$

## سوالات تشریحی

۱- برای مولکول بوتادین بر اساس تقریب هوکل مقادیر انرژی الکترونیهای  $p$  را بدست آورده انرژی عدم استقرار را محاسبه کنید.

۲- ثابت کنید؟  $S^2 = -\frac{3}{4}\hbar \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$

۳- مقدار  $\Delta P_x$  را برای حالت  $v=0$  نوسانگر هماهنگ بدست آورید.  $\psi_0 = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/2} e^{-\alpha x^2/2}$

می دانیم:  $\int_0^\infty e^{-\alpha x^2} dx = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$  و  $\int_0^\infty x e^{-\alpha x^2} dx = \frac{1}{2\alpha}$  و  $\int_0^\infty x^2 e^{-\alpha x^2} dx = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha^3}}$

۴- نشان دهید:  $L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}$

۵- ضریب نرمال کنندگی توابع موج چرخنده صلب دو بعدی را بدست آورید.

| معموره<br>نمبر | تاريخ تسجيل |
|----------------|-------------|
| 1              | 1           |
| 2              | 2           |
| 3              | 2           |
| 4              | 2           |
| 5              | 3           |
| 6              | 1           |
| 7              | 2           |
| 8              | 2           |
| 9              | 3           |
| 10             | 4           |
| 11             | 2           |
| 12             | 1           |
| 13             | 4           |
| 14             | 3           |
| 15             | 1           |
| 16             | 1           |
| 17             | 1           |
| 18             | 4           |
| 19             | 4           |
| 20             | 2           |

۱- کدام گزینه زیر بیان کننده اصل موضوعه سوم مکانیک کوانتوم است؟

$$\langle a \rangle = \frac{\int \Psi^* \hat{A} \Psi dV}{\int \Psi^* \Psi dV} \quad ۱. \quad \langle \Delta x \rangle^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 \quad ۲. \quad \hat{H} \psi = E \psi \quad ۳. \quad dP = |\psi|^2 dV \quad ۴.$$

۲- کدام گزینه در مورد تابع موج سیستم صحیح نیست؟

۱. شامل همه معلومات فیزیکی قابل دسترس در آن حالت است.
۲. تابعی از مختصات مکانی و زمان است.
۳. چگالی احتمال بودن ذره در حجم کوچک  $dV$  بصورت  $dP = |\psi|^2 dV$  محاسبه می شود.
۴. در تمام فضا پیوسته و حقیقی است

۳- کدام مورد از خواص اپراتور کمیت‌های فیزیکی مشاهده پذیر می باشد؟

۱. غیر خطی
۲. حقیقی
۳. موهومی
۴. خطی و هرمیتی

۴- کدام گزینه درست نیست؟

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \quad ۱. \quad \hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \quad ۲. \quad \hat{p}_x^2 = -\frac{\hbar^2}{i^2} \hat{D}_x^2 \quad ۳. \quad \hat{H} \Psi = E \Psi \quad ۴.$$

۵- تاثیر اپراتور  $\hat{D}_x \hat{x}$  بر روی تابع  $e^{\alpha x}$  کدام است؟

$$\alpha e^{\alpha x} \quad ۱. \quad (1 + \alpha x) e^{\alpha x} \quad ۲. \quad e^{\alpha x} \quad ۳. \quad x e^{\alpha x} \quad ۴.$$

۶- قسمت زمانی تابع حالت،  $\varphi(t)$ ، کدام است؟

$$e^{-iEt/\hbar} \quad ۱. \quad e^{iEt/\hbar} \quad ۲. \quad e^{-iht/E} \quad ۳. \quad e^{iht/E} \quad ۴.$$

۷- مقدار قابل انتظار تکانه برای ذره آزاد به جرم  $m$  و انرژی  $E$  در راستای مثبت محور  $x$  کدام است؟

$$\sqrt{2mE} \quad ۱. \quad -\sqrt{2mE} \quad ۲. \quad -\hbar \quad ۳. \quad k\hbar \quad ۴.$$

۸- توابع ویژه قابل قبول اپراتور  $\hat{H}$  مجموعه‌ای ..... را تشکیل می‌دهند.

۱. متعامد
۲. نرمال
۳. متعامد و نرمال
۴. هارمونیک

۹- کدام گزینه جابجاپذیری اپراتورها را بدرستی نشان می‌دهد؟

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = 0 \quad ۱. \quad [\hat{L}^2, \hat{L}_y] = 0 \quad ۲. \quad [\hat{L}^2, \hat{L}_y] \neq 0 \quad ۳. \quad [\hat{L}^2, \hat{H}] \neq 0 \quad ۴.$$

۱۰- هم ترازى چرخنده صلب سه بعدى به ازاي هر مقدار کوانتومى انرژى چگونه است؟

۱. بدون هم ترازى      ۲.  $2J$       ۳.  $J+1$       ۴.  $J-1$

۱۱- پتانسیل حاکم بر منظومه های تک الکترونی کدام است؟

۱.  $-K \frac{Ze^2}{r}$       ۲.  $K \frac{Ze^2}{r}$       ۳.  $\frac{1}{2} kx^2$       ۴.  $-\frac{1}{2} kx^2$

۱۲- کدام گزینه درست نمی باشد؟

۱. انرژى منظومه تک الکترونی فقط به عدد کوانتومى  $n$  وابسته است.  
۲. عدد کوانتومى  $l$  تعیین کننده قدر مطلق تکانه زاویه ای الکترونی است.  
۳. عدد کوانتومى  $m$  تعیین کننده مولفه تکانه زاویه ای نسبت به محور  $OZ$  است.  
۴. در منظومه تک الکترونی  $2n^2$  حالت هم تراز پیش بینی می شود.

۱۳- حل معادله شرودینگر برای کدامیک از منظومه های زیر بطور دقیق امکان پذیر نمی باشد؟

۱.  $H$       ۲.  $He^+$       ۳.  $Li^{2+}$       ۴.  $C^{2+}$

۱۴- انرژى حالت پایه اتم هیدروژن  $E = -13/56 \text{ eV}$  است. کدام گزینه انرژى تراز سوم را نشان می دهد؟

۱.  $-1/51 \text{ eV}$       ۲.  $-4/52 \text{ eV}$       ۳.  $-3/39 \text{ eV}$       ۴.  $-6/78 \text{ eV}$

۱۵- کدامیک از گزینه های زیر درست است؟

۱.  $\hat{S}_- \beta(\sigma) = \frac{\hbar}{2} \beta(\sigma)$       ۲.  $\hat{S}_- \beta(\sigma) = -\frac{\hbar}{2} \beta(\sigma)$       ۳.  $\hat{S}_- \alpha(\sigma) = \frac{\hbar}{2} \beta(\sigma)$       ۴.  $\hat{S}_- \alpha(\sigma) = -\frac{\hbar}{2} \beta(\sigma)$

۱۶- کدام مورد از روشهای تقریبی برای حل منظومه های چند الکترونی نمی باشد؟

۱. تغییر پارامترها      ۲. محاسبه اختلال      ۳. تقریب اسلیتر      ۴. اصل پاولی

۱۷- تابع موج یک منظومه چند الکترونی نسبت به جابجایی هر دو الکترون از الکترونها ..... است.

۱. متقارن      ۲. جابجایپذیر      ۳. ضد متقارن      ۴. جابجاناپذیر

۱۸- کدام گزینه در مورد نظریه هوکل درست نمی باشد؟

۱. یک روش تقریبی است.  
۲. مشتق از نظریه MO-LCAO است.  
۳. برای توصیف الکترونهای  $p$  در پیوندهای دوگانه بکار می رود.  
۴. روشی کاملاً نظری است.

۱۹- بر اساس اصل فرانک-کوندون کدام گزینه محتملترین جهش را نشان می‌دهد؟

۱. فاصله بین هسته‌ها تغییر جزئی داشته باشد.  
۲. انرژی جنبشی مولکولها تغییر زیادی داشته باشد.  
۳. فاصله بین هسته‌ها تغییر زیادی داشته باشد.  
۴. انرژی پتانسیل تغییر جزئی داشته باشد.

۲۰- بار موثر هسته بر روی الکترون در اوربیتال  $1s$  اتم هلیوم چقدر است؟

۱. ۱.۶۹      ۲. ۰.۳۱      ۳. ۲      ۴. ۱.۳۱

### سوالات تشریحی

۱.۲۰ نمره

۱- تابع موج ذره در جعبه یک بعدی بصورت زیر است. آن را نرمال کنید.

$$\psi_n(x) = A \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$

۱.۲۰ نمره

۲-  $\Delta p_x$  و  $\Delta x$  را برای حالت پایه نوسانگر هارمونیک بدست آورده و اصل عدم قطعیت هایزنبرگ را تحقیق کنید.

$$\psi_0 = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} e^{-\alpha x^2/2}$$

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

$$\int_0^\infty x e^{-\alpha x^2} dx = \frac{1}{2\alpha}$$

$$\int_0^\infty x^2 e^{-\alpha x^2} dx = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha^3}}$$

۱.۲۰ نمره

۳- یک منظومه الکترونی دارای عدد کوانتومی اسپینی  $S = \frac{3}{2}$  است. اندازه تکانه زاویه‌های اسپینی را بدست آورید.

۱.۲۰ نمره

۴- ترازهای انرژی الکترونیهای  $\pi$  در مولکول بوتادیان بصورت زیر است. ضمن رسم ترازهای انرژی و آرایش الکترونی، انرژی کل و انرژی رزونانس را بدست آورید.

$$\alpha + 1.618\beta$$

$$\alpha - 1.618\beta$$

$$\alpha + 0.618\beta$$

$$\alpha - 0.618\beta$$

۱.۲۰ نمره

۵- مولکول NO در طی چرخش در صفحه دارای اولین تراز غیر صفر  $3.32 \times 10^{-23} J$  است. در صورتی که جرم کاسته آن  $1.24 \times 10^{-26} kg$  باشد طول پیوند را بدست آورید.

$$h = 6.626 \times 10^{-34} Js$$

سؤال  
سواء

باسم صحيح

- |    |     |
|----|-----|
| 1  | الف |
| 2  | د   |
| 3  | د   |
| 4  | ج   |
| 5  | ب   |
| 6  | الف |
| 7  | الف |
| 8  | ج   |
| 9  | ب   |
| 10 | ج   |
| 11 | الف |
| 12 | د   |
| 13 | د   |
| 14 | الف |
| 15 | ب   |
| 16 | د   |
| 17 | ج   |
| 18 | د   |
| 19 | الف |
| 20 | الف |

۱- اهمیت هرمیتی بودن یک اپراتور بر اساس کدام اصل موضوعه بیان می شود؟

۱. اول      ۲. دوم      ۳. سوم      ۴. چهارم

۲- شرط تبدیل معادله شرودینگر تابع زمان به دو معادله مستقل کدام است؟

۱. نیرو پایستار باشد.  
۲. اندازه حرکت ثابت باشد.  
۳. پتانسیل ثابت باشد.  
۴. پتانسیل تابع زمان باشد.

۳- کدام مقدار انرژی برای ذره در جعبه سه بعدی صادق است؟ ( $e = h^2 / 8ma^2$ )

۱.  $4e$       ۲.  $10e$       ۳.  $14e$       ۴.  $16e$

۴- حل معادله شرودینگر نوسانگر هماهنگ منجر به کدام معادله می شود؟

۱. لژاندر      ۲. هرمیت      ۳. لاگرانژ      ۴. لاگر

۵- هر گاه برای مولکول  $F_2$  با جرم مولکولی 38 ثابت نیرو 0.0045 نیوتن بر متر باشد، انرژی نقطه صفر کدام است؟ (بر حسب الکترون ولت)

۱. 0/055      ۲. 0/110      ۳. 0/116      ۴. 0/232

۶- برای حل معادله شرودینگر چرخنده صلب از چه تکنیکی استفاده می شود؟

۱. تفکیک متغیرها      ۲. بسط سری توانی      ۳. تغییر مختصات      ۴. تغییر متغیر

۷- پیامد جابجا پذیر بودن دو اپراتور و داشتن توابع ویژه مشترک چیست؟

۱. توابع ویژه آنها متعامد هستند.  
۲. مشاهده پذیر های فیزیکی آنها همزمان قابل شناخت هستند.  
۳. توابع ویژه آنها یک دنباله کامل را تشکیل نمی دهند.  
۴. اصل عدم قطعیت در مورد این دو اپراتور صادق است.

۸- برای چرخنده صلب سه بعدی کدام عبارت صحیح است؟

۱.  $H = L^2 / 2I$       ۲.  $E = jh^2 / 2I$       ۳.  $E = j^2 h^2 / 2I$       ۴.  $L^2 = \sqrt{j(j+1)} h^2$

۹- کدام عبارت بیانگر انرژی های مجاز اتم هیدروژن است ؟ (  $E_H$  انرژی حالت پایه اتم هیدروژن است )

۱.  $E_n = E_H n^2$       ۲.  $E_n = n^2 / E_H$       ۳.  $E_n = E_H / n^2$       ۴.  $E_n = -E_H / n^2$

۱۰- مقدار قابل انتظار انرژی پتانسیل در اتم هیدروژن کدام است؟ (بر حسب الکترون ولت)

۱. 13.6      ۲. -13.6      ۳. 27.2      ۴. -27.2

۱۱- تکانه زاویه ای اسپینی الکترون کدام است؟

۱.  $\frac{\sqrt{3}}{4}\hbar^2$       ۲.  $\frac{\sqrt{3}}{2}\hbar$       ۳.  $\frac{1}{2}\hbar$       ۴.  $\frac{3}{4}\hbar^2$

۱۲- توابع ویژه اپراتور  $S^2$  کدامند؟

۱. توابع ویژه اپراتور  $S_z$       ۲. توابع پاولینگ      ۳.  $\beta, \alpha$       ۴. الف و ج

۱۳- در سیستم چرخنده صلب کدام مورد موجب ایجاد عدد کوانتومی می شود؟

۱. تک مقدار بودن تابع موج      ۲. پیوسته بودن تابع موج  
۳. متعامد بودن توابع موج      ۴. نرمال بودن تابع موج

۱۴- نمایش توزیع زاویه ای احتمال برای الکترون به چه طریقی قابل ترسیم است؟

۱. ثابت گرفتن زاویه  $\theta$       ۲. ثابت گرفتن  $r$       ۳. ثابت گرفتن  $r$  و  $\theta$       ۴. ثابت گرفتن زاویه  $\varphi$

۱۵- کدام عبارت بیانگر قضیه تغییر است؟

۱. انرژی واقعی سیستم همواره از انرژی محاسبه ای کوچکتر است.  
۲. انرژی محاسبه ای همواره کوچکتر از انرژی واقعی سیستم است  
۳. انرژی تنها به نوع هامیلتونی وابسته بوده و مقدار آن همواره از مقدار تئوری کوچکتر است  
۴. هامیلتونی تنها وابسته به مختصان مکانی ذره بوده و انرژی همواره کوچکتر از مقدار محاسبه ای است.

۱۶- در مدل هوکل انرژی عدم استقرار چگونه تعریف می شود؟

۱. اختلاف بین انرژی سیستم  $p$  هیدروکربن  $N$  اتمی با انرژی الکترونها  $p$  مربوط به  $2N$  مولکول اتیلن  
۲. اختلاف بین انرژی سیستم  $p$  هیدروکربن  $N$  اتمی با انرژی الکترونها  $p$  مربوط به  $N/2$  مولکول اتیلن  
۳. اختلاف بین انرژی سیستم  $p$  هیدروکربن  $N$  اتمی با انرژی الکترونها  $p$  مربوط به  $N$  مولکول اتیلن  
۴. اختلاف بین انرژی سیستم  $p$  هیدروکربن  $N$  اتمی با انرژی الکترونها  $p$  مربوط به مولکول اتیلن

## ۱۷- ماتریس های پائولی معرف چیست؟

۱. معرف مقادیر ویژه اپراتور گشتاور زاویه ای اسپینی
۲. بیانگر مقادیر ویژه مولفه های اپراتور گشتاور زاویه ای اسپینی
۳. بیانگر مؤلفه های گشتاور زاویه ای اسپینی
۴. بیانگر حالت های اسپینی

## ۱۸- تأثیر اپراتور $\hat{D}_x$ روی تابع $e^{\alpha x}$ کدام است؟

۱.  $x e^{\alpha x}$
۲.  $x \alpha e^{\alpha x}$
۳.  $\alpha e^{\alpha x}$
۴.  $x^2 \alpha e^{\alpha x}$

## ۱۹- تعداد جملات در هامیلتونی اتم هلیوم چیست؟

۱. 5
۲. 6
۳. 4
۴. 7

## ۲۰- درجه همترازی چرخنده صلب در صفحه کدام است؟

۱. همواره 3 است.
۲.  $2j + 1$
۳. همواره 2 است.
۴. 2 یا 1 است.

## سوالات تشریحی

۱.۲۰ نمره

۱- مقدار  $\Delta P_x$  را برای حالت  $v=0$  نوسانگر هماهنگ بدست آورید.

$$\psi_0 = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/2} e^{-\alpha x^2 / 2}$$

$$\int_0^\infty x^2 e^{-\alpha x^2} dx = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha^3}} \quad \text{و} \quad \int_0^\infty x e^{-\alpha x^2} dx = \frac{1}{2\alpha} \quad \text{و} \quad \int_0^\infty e^{-\alpha x^2} dx = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$$

۱.۲۰ نمره

$$S^2 = -\frac{3}{4} \hbar \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad \text{ثابت کنید؟}$$

۱.۲۰ نمره

۳- ضریب نرمال کنندگی توابع موج چرخنده صلب دو بعدی را بدست آورید.

۱.۲۰ نمره

۴- برای مولکول بوتادین بر اساس تقریب هوکل مقادیر انرژی الکترونیهای p را بدست آورده انرژی عدم استقرار را محاسبه کنید.

۱.۲۰ نمره

$$L_z = -i \hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \quad \text{نشان دهید:}$$

باسمہ صحیح

شماره  
سوال

|    |     |
|----|-----|
| 1  | ب   |
| 2  | الف |
| 3  | ج   |
| 4  | ب   |
| 5  | الف |
| 6  | ج   |
| 7  | ب   |
| 8  | الف |
| 9  | ج   |
| 10 | د   |
| 11 | ب   |
| 12 | د   |
| 13 | الف |
| 14 | ب   |
| 15 | الف |
| 16 | ب   |
| 17 | د   |
| 18 | ب   |
| 19 | الف |
| 20 | د   |

۱- کدام عبارت در مورد اصل فرانک-کوندون درست است؟

۱. جهش های ارتعاشی همراه با برانگیختگی الکترونی است.
۲. به هنگام جذب تابش جهش الکترونی-ارتعاشی طوری روی می دهد که فاصله بین هسته ها تغییری نکند.
۳. محتمل ترین جهشها آنهایی هستند که با تغییر زیاد در فاصله بین هسته ها همراه باشد.
۴. همواره انتقالات از نوع جهش های موازی خواهند بود.

۲- سهم الکترونهاي  $\pi$  در انرژی پیوند سیستم آروماتیک بنزن کدام است؟

۱.  $8\beta$
۲. معادل با انرژی رزونانس است.
۳.  $6\alpha$
۴. الف و ب درست است.

۳- تاثیر عملگر واورنگی  $I$  روی اربیتال چگونه است؟

۱. متقارن
۲. ضد متقارن
۳. نامعین
۴. الف و ب درست است.

۴- کدام یک از تقریب تئوری اربیتال مولکولی هوکل محسوب می شود؟

۱. تابع موج کل سیستم متشکل از دو تابع موج مستقل است.
۲. انتگرالهای کولنی همگی برابر یک هستند.
۳. از روش اختلال استفاده می کند.
۴. انتگرالهای همپوشانی  $S_{ij}$  برابر صفر و  $S_{ii}$  برابر یکدیگر هستند.

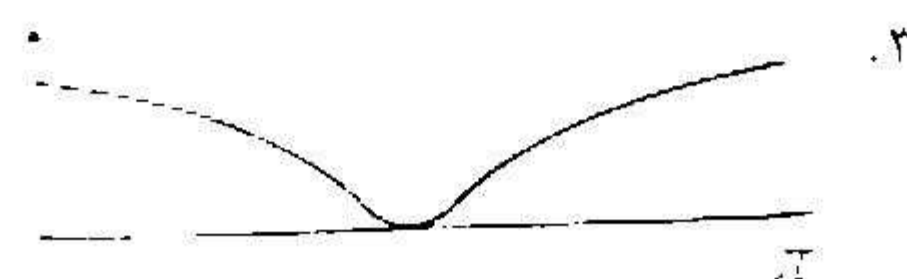
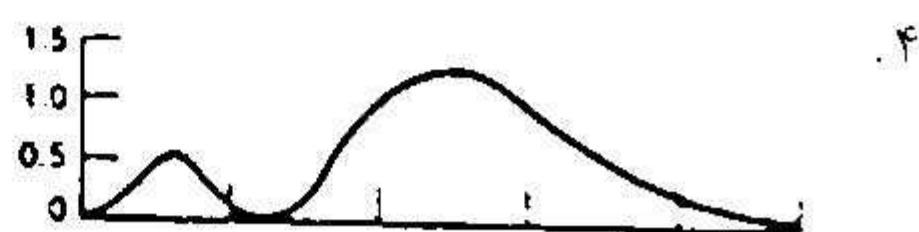
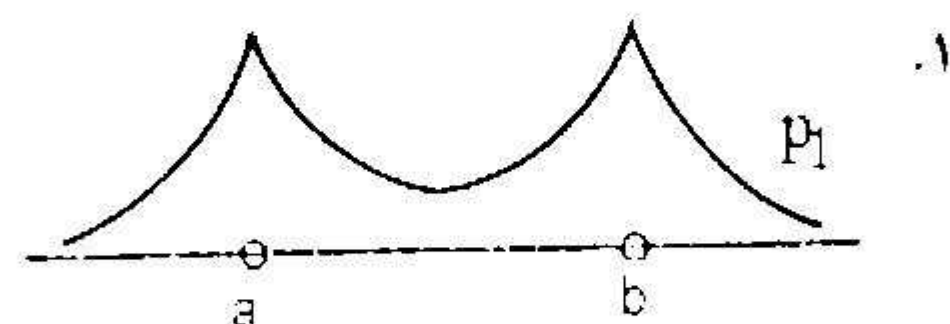
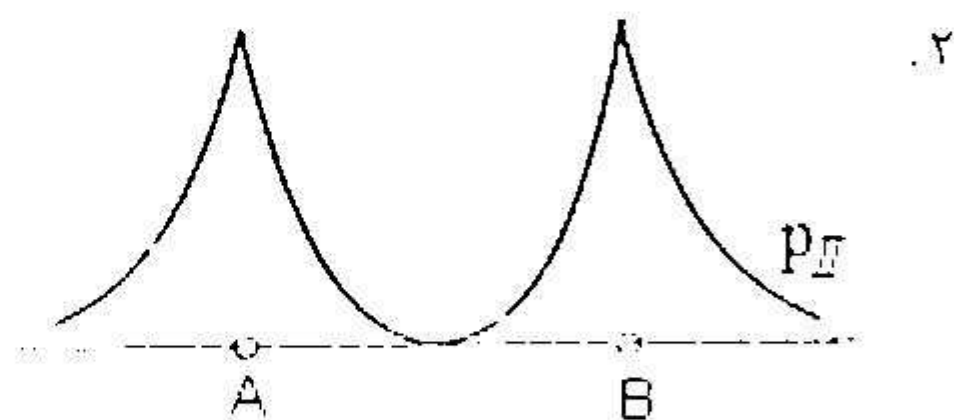
۵- کدام عملگر فقط تابع مختصه  $\phi$  است؟

۱. گشتاور زاویه ای
۲. مؤلفه  $X$  گشتاور زاویه ای
۳. مؤلفه  $Z$  گشتاور زاویه ای
۴. اندازه حرکت خطی

۶- توابع ویژه عملگر مربع گشتاور زاویه ای وابسته به کدام متغیرها می باشند؟

۱.  $\theta, r$
۲.  $\phi, \theta, r$
۳.  $\phi, r$
۴.  $\phi, \theta$

۷- کدام نمودار تغییرات چگالی توزیع بار بر حسب فاصله دو هسته را برای اربیتال  $\Psi + \Psi$  نشان می دهد؟



۸- کدام نمودار تغییرات تابع توزیع شعاعی اربیتال  $2p$  را نشان می دهد؟



۹- بار مؤثر هسته برای الکترون  $2s$  اتم لیتیم بر اساس ضرایب حائل کدام است؟

۱. ۲      ۲. ۰/۸۵      ۳. ۱/۷۰      ۴. ۱/۳۰

۱۰- تابع موج برای ذراتی با اسپین صحیح چگونه است؟

۱. نسبت به ایراتور جابجایی متقارن است.  
 ۲. نسبت به اصل طری پائولی متقارن است.  
 ۳. نسبت به تمییر ناپذیری ذرات ، متقارن است.  
 ۴. نسبت به عملگر وارونگی ضد متقارن است.

۱۱- انرژی الکترون یون  $He^+$  بر حسب هارتری چیست؟

۱. -۱      ۲. -۲      ۳. -۱/۵      ۴. -۰/۵

۱۲- انرژی یونش اتم هیدروژن بر حسب الکترون ولت کدام است؟

۱. -1      ۲. 1      ۳. -13/6      ۴. 13/6

۱۳- هر یک الکترون ولت چند کیلوکالری برمول است؟

۱. 627      ۲. 23      ۳. 0/036      ۴. 27/2

۱۴- کدام عبارت در مورد ماتریس های پائولی درست است؟

۱.  $\sigma_y \sigma_x - \sigma_x \sigma_y = 2i \sigma_z$       ۲.  $\sigma_y = \frac{2}{\hbar} \hat{S}_y$   
۳.  $\sigma_z \sigma_x = \sigma_y$       ۴.  $\sigma_x \sigma_y = \sigma_y \sigma_x$

۱۵- کدامیک از دو تابع نسبت به یکدیگر متعامد هستند؟

۱.  $\Psi_{2px}, \Psi_{1s}$       ۲.  $\Psi_{2px}, \Psi_{2s}$   
۳.  $\Psi_{2px}, \Psi_{2py}$       ۴. تمام موارد درست است.

۱۶- تعداد جملات دافعه الکترونی در هامیلتونی اتم هیدروژن چیست؟

۱. 1      ۲. 2      ۳. 3      ۴. 0

۱۷- درجه چندگانگی (تبهگنی) برای چرخنده صلب سه بعدی چیست؟

۱. 2      ۲. 2J      ۳. 2J-1      ۴. 2J+1

۱۸- تعداد جهت گیری های بردار گشتاور زاویه ای الکترون در حالت  $\Psi_{3d}$  کدام است؟

۱. 3      ۲. 4      ۳. 5      ۴. 6

۱۹- مقادیر ویژه مربع گشتاور زاویه ای در حالت  $\Psi_{4p}$  کدام است؟

۱.  $20\hbar^2$       ۲.  $2\hbar^2$       ۳.  $12\hbar$       ۴.  $12\hbar^2$

۲۰- انرژی چرخنده صلب دو بعدی کدام است؟

۱.  $E = 2m / I$       ۲.  $E = \frac{m\hbar^2}{2I}$       ۳.  $E = \frac{m^2\hbar^2}{2I}$       ۴.  $E = \frac{m^2}{2I\hbar}$

## سوالات تشریحی

- ۱- برای سیستم بوتادین بر اساس مدل هوکل انرژی سیستم را بدست آورده و نمودار تراز انرژی الکترونیهای  $\pi$  را رسم کنید. ۱.۲۰ نمره
- ۲- ماتریس نمایش دهنده عملگر  $S^2$  را بدست آورید؟ ۱.۲۰ نمره
- ۳- از معادله قسمت زمانی معادله شرودینگر یعنی  $\frac{d\varphi}{dt} = \frac{E}{i\hbar} dt$  شروع کرده قسمت زمانی تابع حالت را بصورت نرمال شده بدست آورید؟ فرم کلی تابع حالت (حالت های ایستا) را بنویسید. ۱.۲۰ نمره
- ۴- اپراتور هرمیتی را تعریف کنید. نشان دهید مؤلفه  $Z$  اندازه حرکت خطی ( $\hat{p}_z$ ) یک اپراتور هرمیتی است. ۱.۲۰ نمره
- ۵- فرکانس اولین خط سری بالمر در ناحیه مرئی مربوط به طیف اتم هیدروژن را بدست آورید؟ ۱.۲۰ نمره

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

$$e = 1.6 \times 10^{-19} \text{ C}$$

$$\epsilon_0 = 8.85 \times 10^{-12} \text{ C}^2 \text{ N}^{-1} \text{ m}^{-2}$$

$$m_e = 9.1 \times 10^{-31} \text{ kg}$$

$$R = 1.097 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$$

| نمبر رد<br>سوال | پاسخ صحيح |
|-----------------|-----------|
| 1               | ب         |
| 2               | د         |
| 3               | د         |
| 4               | الف       |
| 5               | ج         |
| 6               | د         |
| 7               | الف       |
| 8               | ج         |
| 9               | د         |
| 10              | الف       |
| 11              | ب         |
| 12              | د         |
| 13              | الف       |
| 14              | ب         |
| 15              | د         |
| 16              | الف       |
| 17              | د         |
| 18              | ج         |
| 19              | ب         |
| 20              | ج         |

۱- معلومات فیزیکی یک سیستم از ..... قابل حصول است.

۱. تابع موجی      ۲. تابع احتمال      ۳. تابع توزیع شعاعی      ۴. تابع توزیع زاویه ای

۲- کدام گزینه زیر شرط نرمالیزه بودن تابع  $\Psi(\vec{r}, t)$  را نشان می دهد؟

۱.  $\int_V |\Psi(\vec{r}, t)| dV = -\infty$       ۲.  $\int_V |\Psi(\vec{r}, t)| dV = +\infty$       ۳.  $\int_V |\Psi(\vec{r}, t)|^2 dV = +\infty$       ۴.  $\int_V |\Psi(\vec{r}, t)|^2 dV = 1$

۳- کدام اپراتور زیر خطی نیست؟  $(\hat{D}_x = \frac{\partial}{\partial x})$

۱.  $\hat{x}$       ۲.  $\sqrt{\quad}$       ۳.  $\hat{D}_x$       ۴.  $\hat{D}_x^2$

۴- مقدار قابل انتظار  $P_x$  (مؤلفه x تکانه خطی) در مثال ذره در جعبه یک بعدی چقدر است؟

۱.  $-i\hbar$       ۲.  $i\hbar$       ۳.  $\hbar$       ۴. 0

۵- مقدار ویژه اپراتور  $\hat{D}_x^2$  وقتی بر تابع  $\sin ax$  اثر می کند، کدام است؟  $(\hat{D}_x = \frac{\partial}{\partial x})$

۱.  $ax$       ۲.  $-a^2$       ۳.  $-ax$       ۴.  $-a^2x$

۶- مقادیر مجاز انرژی ذره ای به جرم m در جعبه یک بعدی به طول L از کدام رابطه زیر پیروی می کند؟

۱.  $E_n = \frac{n^2 h^2}{8mL^2}$       ۲.  $E_n = \frac{n\pi^2 h^2}{8mL^2}$       ۳.  $E_n = \frac{h^2}{8mn^2 L^2}$       ۴.  $E_n = \frac{h^2 L^2}{8mn^2}$

۷- در مثال ذره در جعبه یک بعدی نمودار تغییرات  $\psi^2(x)$  بر حسب x در حالت  $n=1$  چند گره دارد؟

۱. 0      ۲. 1      ۳. 2      ۴. 3

۸- در یک نوسانگر هماهنگ با فرکانس مشخصه  $\nu_0$ ، انرژی نقطه صفر در حرکت ارتعاشی چه مقدار است؟

۱. 0      ۲.  $h\nu_0$       ۳.  $\frac{h\nu_0}{2}$       ۴.  $\frac{\nu_0}{2h}$

۹- تکانه زاویه ای  $(\vec{L})$  چه رابطه ای با بردار موضعی  $(\vec{r})$  و تکانه خطی  $(\vec{p})$  دارد؟

۱.  $\vec{L} = \frac{\vec{p}^2}{2hr}$       ۲.  $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$       ۳.  $\vec{L} = \frac{\vec{r}^2}{\vec{p}}$       ۴.  $\vec{L} = \frac{\vec{p}^2}{\vec{r}}$

۱۰- انرژی مربوط به اولین تراز چرخشی در یک چرخنده صلب در فضای سه بعدی چقدر است؟ (I ممان اینرسی مولکول است).

۱. 0
۲.  $\frac{\hbar^2}{2I}$
۳.  $\frac{\hbar^2}{I}$
۴.  $3\frac{\hbar^2}{I}$

۱۱- به هر تراز انرژی چرخشی با شماره J، تعداد ..... حالت وابسته است.

۱. 2
۲. J
۳. J+1
۴. 2J+1

۱۲- در هر اتم تک الکترونی در هر تراز انرژی به شماره n تعداد ..... حالت همتراز پیش بینی می شود.

۱.  $\frac{n}{2}$
۲. 2n
۳.  $n^2$
۴.  $2n^2$

۱۳- کدام گزینه زیر تابع توزیع شعاعی را نشان می دهد؟

۱.  $P(r) = 4\pi R^2(r)$
۲.  $P(r) = 4\pi r^2 R^2(r)$
۳.  $P(r) = 4\pi r^2$
۴.  $P(r) = r^2 R^2(r)$

۱۴- ..... تابع ویژه اپراتور  $\hat{S}_z$  است، با مقدار ویژه .....

۱.  $+1, \beta$
۲.  $-1, \alpha$
۳.  $+\frac{1}{2}, \alpha$
۴.  $-1, \beta$

۱۵- پتانسیل اختلال در هامیلتونی اتم هلیم ناشی از چیست؟

۱. حرکت الکترونها
۲. حرکت هسته
۳. جاذبه بین الکترونها و هسته
۴. دافعه بین الکترونها

۱۶- برای به دست آوردن انرژی اتم هلیم از چه روشی می توان استفاده کرد؟

۱. تغییر متغیر
۲. اختلال
۳. تقریب هوکل
۴. تغییر متغیر و اختلال

۱۷- همه ذره های با اسپین نیمه صحیح، تابع موجی ..... دارند.

۱. زوج
۲. فرد
۳. متقارن
۴. ضدمتقارن

۱۸- در تقریب هوکل اربیتالهای مولکولی تک الکترونی با روش ..... تعیین می شود.

۱. اختلال
۲. تغییر پارامترها
۳. تجربی
۴. LCAO

۱۹- از تقریب هوکل در بررسی کدام سیستم مولکولی زیر می توان استفاده کرد؟

۱. متان
۲. اتان
۳. بوتادی ان
۴. سیکلوهگزان

۲۰- کدام یک از روشهای زیر نیمه تجربی است؟

۱. تقریب هوکل

۲. روش تغییر پارامتر

۳. روش اختلال

۴. روش LCAO

### سوالات تشریحی

۱.۲۰ نمره

۱- اپراتور  $\hat{x}\hat{D}_x$  را بر روی تابع  $x^2$  تأثیر دهید. ( $\hat{D}_x = \frac{\partial}{\partial x}$ )

۱.۲۰ نمره

۲- عبارت انرژی و چندگانگی تراز سوم انرژی ذره ای به جرم  $m$  در جعبه سه بعدی مکعبی با ابعاد  $a$  را معین کنید.

۱.۲۰ نمره

۳- عبارت کلاسیکی معادل انرژی جنبشی یک منظومه تک ذره ای به صورت زیر است:

$$T = \frac{1}{2m} (\hat{P}_x^2 + \hat{P}_y^2 + \hat{P}_z^2)$$

با استفاده از این رابطه، اپراتور انرژی جنبشی را به دست آورید.

۱.۲۰ نمره

۴- دترمینان اسلیتر را برای اتم دو الکترونی هلیوم بنویسید.

۱.۲۰ نمره

۵- با استفاده از روش هوکل انرژی سیستم  $\pi$  در حالت اصلی مولکول اتیلن را بر حسب نمادهای  $\alpha$  و  $\beta$  (انتگرالهای کوئنی و تبادلی) به دست آورید.

باسمہ صحیح

شماره  
سواب

|    |     |
|----|-----|
| 1  | الف |
| 2  | د   |
| 3  | ب   |
| 4  | د   |
| 5  | ب   |
| 6  | الف |
| 7  | الف |
| 8  | ج   |
| 9  | ب   |
| 10 | الف |
| 11 | د   |
| 12 | ج   |
| 13 | ب   |
| 14 | ج   |
| 15 | د   |
| 16 | د   |
| 17 | د   |
| 18 | ب   |
| 19 | ج   |
| 20 | الف |