کد کنترل

251

F

251F

آزمون (نیمه‌متمرکز) ورود به دوره‌های دکتری ـ سال ۱۴۰۱

«اگر دانشگاه اصلاح شود مملکت اصلاح می‌شود.»
امام خمینی (ره)

دفترچهٔ شمارهٔ (۱)
صبح جمعه ۱۴۰۰/۱۲/۶

جمهوری اسلامی ایران
وزارت علوم، تحقیقات و فنّاوری
سازمان سنجش آموزش کشور

رشتهٔ شیمی ـ شیمی‌فیزیک
(کد ۲۲۱۱)

جدول مواد امتحانی، تعداد، شمارهٔ سؤال‌ها و زمان پاسخ‌گویی

مواد امتحانی	تعداد سؤال	از شمارهٔ	تا شمارهٔ	زمان پاسخ‌گویی
مجموعه دروس تخصصی: ـ شیمی فیزیک ـ ترمودینامیک آماری ۱ ـ شیمی کوآنتومی	۴۵	۱	۴۵	۱۵۰ دقیقه

این آزمون نمرهٔ منفی دارد.

استفاده از ماشین‌حساب مجاز نیست.

حق چاپ، تکثیر و انتشار سؤال‌ها به هر روش (الکترونیکی و...) پس از برگزاری آزمون، برای تمامی اشخاص حقیقی و حقوقی تنها با مجوز این سازمان مجاز می‌باشد و با متخلفان برابر مقررات رفتار می‌شود.

* متقاضی گرامی، وارد نکردن مشخصات و امضا در کادر زیر، به منزلهٔ غیبت و حضور نداشتن در جلسهٔ آزمون است.

اینجانب ..... با شمارهٔ داوطلبی ..... با آگاهی کامل، یکسان‌بودن شمارهٔ صندلی خود را با شمارهٔ داوطلبی مندرج در بالای کارت ورود به جلسه، بالای پاسخ‌نامه و دفترچهٔ سؤال‌ها، نوع و کد کنترل درج شده بر روی دفترچهٔ سؤال‌ها و پایین پاسخ‌نامه‌ام را تأیید می‌نمایم.

امضا:

۱- یک سیستم خاص ترمودینامیکی از معادلات حالت زیر تبعیت می‌کند (A یک ثابت است):

$$T(S,V,N) = 3As^2 / v$$
$$p(S,V,N) = As^3 / v^3$$

که در آن $s = \frac{S}{N}$ و $v = \frac{V}{N}$. پتانسیل شیمیایی برحسب s و v کدام است؟

۱) $+\frac{As^3}{v}$
۲) $\frac{-As^3}{v}$
۳) $+\frac{As^2}{v^2}$
۴) $\frac{-As^2}{v^2}$

۲- برای سیستمی با معادلات حالت زیر، معادله بنیادی مناسب کدام است؟ (U انرژی درونی است.)

$$p = \frac{-NU}{NV - 2AVU} \quad , \quad T = 2C\frac{\sqrt{UV}}{N - 2AU}e^{AU/N}$$

۱) $S = \frac{N^{\frac{1}{2}}U^{\frac{1}{2}}V^{\frac{1}{2}}}{C}e^{-AU/N} + NS_0$
۲) $S = \frac{NU^{-\frac{1}{2}}V^{-\frac{1}{2}}}{C}e^{AU/N} + NS_0$
۳) $S = \frac{NU^{-\frac{1}{2}}V^{-\frac{1}{2}}}{C}e^{-AU/N} + NS_0$
۴) $S = \frac{NU^{\frac{1}{2}}V^{\frac{1}{2}}}{C}e^{-AU/N} + NS_0$

۳- انرژی درونی یک مول از یک سیستم خاص از رابطه $U = Ap^2V$ به‌دست می‌آید که A یک ثابت مثبت با بعد p^{-1} است. معادله حالت آدیابات‌های این سیستم در یک نمودار pV کدام است؟ (U انرژی درونی است.)

۱) $(1+AV)p =$ ثابت
۲) $(1+Ap)V =$ ثابت
۳) $(1+Ap)^2V =$ ثابت
۴) $(1+AV)^2p =$ ثابت

۴- معادله بنیادی سیستم‌های **A** و **B** از رابطه $S=\left(\frac{R^2}{\nu_0\Theta}\right)^{\frac{1}{3}}(NVU)^{\frac{1}{3}}$ تبعیت می‌کند. این دو سیستم با یک دیواره سخت، آدیاباتیک و غیرقابل نفوذ از هم جدا شده‌اند. آنتروپی کل این دو سیستم چه ارتباطی با انرژی‌های درونی آنها دارد؟ (**U** انرژی درونی است.)

۱) $\left(\frac{R^2}{\nu_0\Theta}\right)^{\frac{1}{3}}\left[(N_A\nu_AU_A)^{\frac{1}{3}}+(N_B\nu_BU_B)^{\frac{1}{3}}\right]$

۲) $\left(\frac{R^2}{\nu_0\Theta}\right)^{\frac{1}{3}}\left[(N_A\nu_AU_A)^{\frac{1}{3}}-(N_B\nu_BU_B)^{\frac{1}{3}}\right]$

۳) برای تعیین آنتروپی کل لازم است که دما و فشار را به‌صورت تابعی از U داشته باشیم.

۴) دو سیستم کاملاً جدا از هم هستند، بنابراین آنتروپی آن‌ها هیچ ربطی به هم ندارد.

۵- درصورتی‌که معادله بنیادی سیستمی در نمایش انرژی درونی به‌صورت زیر باشد، معادله حالت $\frac{\mu}{T}$ در نمایش آنتروپی برای این سیستم کدام است؟

$$u=\left(\frac{\nu_0^{\frac{1}{2}}\Theta}{R^{\frac{3}{2}}}\right)\frac{s^{\frac{5}{2}}}{\nu^{\frac{1}{2}}}$$

۱) $\frac{2}{5}\left(\frac{\nu_0^{\frac{1}{2}}\Theta}{R^{\frac{3}{2}}}\right)^{-\frac{2}{5}}\frac{\nu^{\frac{1}{5}}}{u^{\frac{3}{5}}}$

۲) $\frac{2}{5}\left(\frac{\nu_0^{\frac{1}{2}}\Theta}{R^{\frac{3}{2}}}\right)^{-\frac{2}{5}}u^{\frac{2}{5}}\nu^{\frac{1}{5}}$

۳) $-\frac{2}{5}\left(\frac{\nu_0^{\frac{1}{2}}\Theta}{R^{\frac{3}{2}}}\right)^{-\frac{2}{5}}u^{\frac{2}{5}}\nu^{\frac{1}{5}}$

۴) $-\frac{2}{5}\left(\frac{\nu_0^{\frac{1}{2}}\Theta}{R^{\frac{3}{2}}}\right)^{-\frac{2}{5}}\frac{\nu^{\frac{1}{5}}}{u^{\frac{3}{5}}}$

۶- یک ظرف $0.5\ dm^3$ شامل گاز **A** و ظرف $1\ dm^3$ شامل گاز **B** در دمای یکسان هستند. اگر دانسیته **A** دو برابر دانسیته **B** و جرم مولی **A** نصف جرم مولی **B** باشد، نسبت فشار اعمال‌شده به‌وسیله گازها $\left(\frac{p_A}{p_B}\right)$ کدام است؟

۱) 1 ۲) 2

۳) 3 ۴) 4

۷- پارامترهای واندروالس برای چند گاز در جدول زیر داده شده است. کدام گاز بالاترین دمای بحرانی را دارد؟

گاز	$a\left(atm\ lit^2/mol^2\right)$	$b\ (lit/mol)$
W	4.0	0.027
X	8.0	0.030
Y	6.0	0.032
Z	12.0	0.027

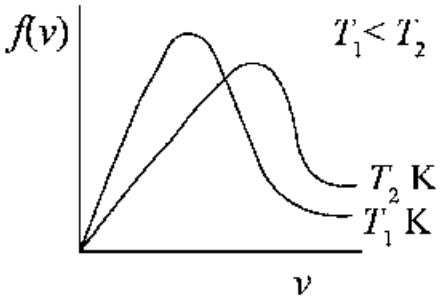
۱) W ۲) X ۳) Y ۴) Z

۸- کدام مقایسه درباره دمای بحرانی (T_c)، دمای بویل (T_B) و دمای وارونگی (T_i) یک گاز واقعی درست است؟

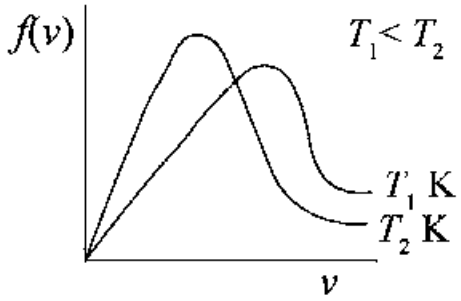
۱) $T_c < T_i < T_B$ ۲) $T_c < T_B < T_i$

۳) $T_B < T_c < T_i$ ۴) $T_B < T_i < T_c$

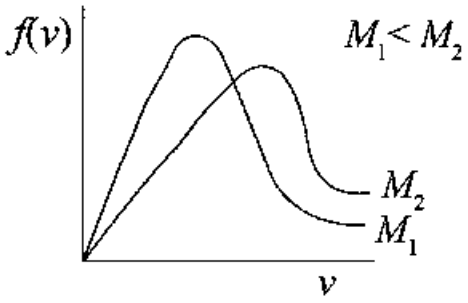
۹- برای یک گاز ایدئال، کدام دو نمودار تابع توزیع سرعت برحسب سرعت درست است؟



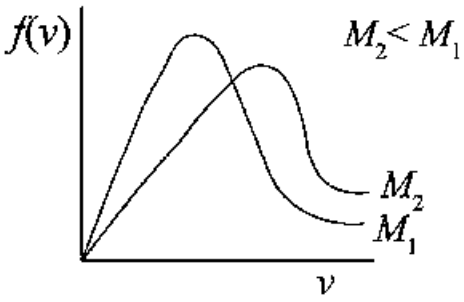
(a)



(b)



(c)



(d)

۱) d و a ۲) c و a ۳) c و b ۴) d و b

۱۰- یک مول از یک گاز ایدئال در دمای T داخل ظرفی عمودی قرار دارد که روی آن یک پیستون بی‌وزن قرار داده شده است. برای افزایش n مرتبه‌ای حجم گاز به‌صورت هم‌دما در نتیجهٔ جابه‌جا کردن پیستون چه مقدار کار باید انجام شود؟

۱) $RT\ln n$ ۲) $-RT\ln n$

۳) $RT(n-1-\ln n)$ ۴) $RT(1-n+\ln n)$

۱۱- یک گاز ایدئال با γ مثبت $(\gamma = c_p/c_V)$ در فرایندی شرکت می‌کند، به‌طوری‌که $p = p_0 - \alpha V$ (p_0 و α ثابت‌های مثبت و V حجم است.) در چه حجمی گاز بیشترین آنتروپی را خواهد داشت؟

۱) $\frac{\gamma p_0}{\alpha(\gamma-1)}$

۲) $\frac{\gamma p_0}{\alpha(\gamma+1)}$

۳) $\frac{\alpha p_0}{\gamma-1}$

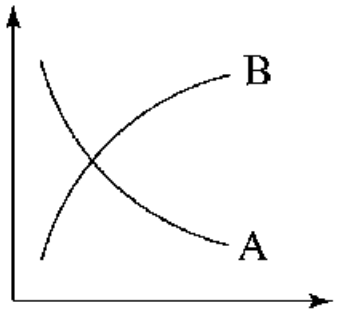
۴) $\frac{\alpha p_0}{\gamma+1}$

۱۲- از حل کزدن n مول از یک حل‌شونده غیرفرار در N مول از یک حلال محلول ایدئالی تشکیل می‌شود. درصورتی‌که فشار بخار محلول p و فشار بخار حلال خالص p^0 باشد، کدام رابطه درست است؟

۱) $\frac{p^0-p}{p}=\frac{n}{N}$ ۲) $\frac{p^0-p}{p}=\frac{N}{n}$

۳) $\frac{p^0-p}{p^0}=\frac{n}{N}$ ۴) $\frac{p^0-p}{p^0}=\frac{N}{n}$

۱۳- نمودار سرعت برای واکنش $A \rightarrow nB$ در شکل زیر نشان داده شده است. در نقطه تقاطع دو نمودار غلظت B کدام است؟



۱) $\frac{n-1}{n+1}A_0$

۲) $\frac{A_0}{n-1}$

۳) $\frac{A_0}{n}$

۴) $\frac{nA_0}{n+1}$

۱۴- واکنش پی‌درپی $A \xrightarrow{k_1} B \xrightarrow{k_2} C$ را در نظر بگیرید. درصورتی‌که $k_1 = 0.01\ min^{-1}$ و $\frac{k_1}{k_2}=\frac{1}{2}$ باشد، بعد از چند دقیقه از شروع واکنش غلظت B حداکثر می‌شود؟ $(\ln 2 = 0.7)$

۱) 35 ۲) 70 ۳) 700 ۴) 140

۱۵- برای واکنش $A + B \rightarrow C$ (که A و B و C تک‌اتمی هستند)، ثابت سرعت چه ارتباطی با ممان اینرسی دارد؟

۱) 1

۲) $\sqrt{I}$

۳) $\frac{1}{I}$

۴) $\frac{1}{\sqrt{I}}$

۱۶- در حد دمای بالا، ظرفیت گرمایی ارتعاشی مولی SiH_4 به کدام مقدار میل می‌کند؟

۱) $3R$ ۲) $5R$ ۳) $7R$ ۴) $9R$

۱۷- برای یک گاز تابع پارش (تقسیم) زیر به‌دست آمده است:

$$Q(N,V,T)=\frac{1}{N!}\left(\frac{2\pi m k_B T}{h^2}\right)^{\frac{3N}{2}}(V-Nb)^N e^{\frac{aN^2}{k_B TV}}$$

که a و b پارامترهای مثبت تجربی هستند. معادله حالت این گاز کدام است؟

۱) $p=\frac{Nk_BT}{V}$ ۲) $p=\frac{Nk_BT}{V-b}-\frac{aN^2}{T^{1/2}V^2}$

۳) $p=\frac{Nk_BT}{V-Nb}-\frac{aN^2}{V^2}$ ۴) $p=\frac{Nk_BT}{V}+\frac{Nab}{V^2}+\frac{Na^2b^2}{V^3}$

۱۸- اختلاف تابع مشخصه هنگرد (مجموعه آماری) هم‌فشار ـ هم‌دما و تابع مشخصه هنگرد کانونی کدام است؟

۱) TS ۲) pV ۳) p ۴) T

۱۹- یک سیستم N ذره‌ای را در نظر بگیرید که دارای سه تراز انرژی است که به اندازه ε از هم فاصله دارند (حالت پایه را صفر انتخاب کنید). سیستم دارای حجم V و با یک منبع حرارتی در دمای T در تعادل گرمایی است. درصورتی‌که ذرات از آمار بولتسمان تبعیت کنند، اگر $k_BT \gg \varepsilon$ باشد، احتمال اشغال تراز 2ε چقدر است؟

۱) $\frac{1}{2}$ ۲) $\frac{1}{3}$ ۳) $\frac{1}{4}$ ۴) $\frac{1}{6}$

۲۰- کدام گزینه درباره آمار فرمی ـ دیراک و آمار بوز ـ اینشتین ذرات داده شده، درست است؟

A: ^{32}S و ^{14}N از آمار بوز ـ اینشتین و ^{35}Cl و ^{17}O از آمار فرمی ـ دیراک تبعیت می‌کنند.

B: ^{32}S و ^{35}Cl از آمار بوز ـ اینشتین و ^{14}N و ^{17}O از آمار فرمی ـ دیراک تبعیت می‌کنند.

C: ^{12}C و ^{16}O از آمار بوز ـ اینشتین و ^{19}F و ^{13}C از آمار فرمی ـ دیراک تبعیت می‌کنند.

D: ^{12}C و ^{19}F از آمار بوز ـ اینشتین و ^{16}O و ^{13}C از آمار فرمی ـ دیراک تبعیت می‌کنند.

۱) D و A ۲) D و B ۳) C و B ۴) C و A

۲۱- در هنگرد NVT فرض کنید $f = \ln Q$ باشد که Q تابع پارش است. $(\frac{\partial f}{\partial \beta})_{E_j}$ برابر کدام گزینه است؟

($\beta = \frac{1}{k_BT}$، E انرژی و p فشار است.)

۱) $-\bar{E}$ ۲) $-\bar{p}$ ۳) $\bar{E}$ ۴) $\bar{p}$

۲۲- با قبول قانون سوم ترمودینامیک، اختلاف آنتروپی در هنگرد NVT و NpT در کدام گزینه آمده است؟

۱) $\frac{T}{pV}$ ۲) $-\frac{T}{pV}$ ۳) $\frac{p\bar{V}}{T}$ ۴) $\frac{-p\bar{V}}{T}$

۲۳- درصورتی‌که محدودیت‌های روی سیستمی برداشته شود، به‌طوری‌که $\Omega_2 > \Omega_1$، کدام نتیجه درست است؟

(Ω تعداد راه‌های قابل دسترس و A انرژی آزاد هلمهولتز است.)

۱) $\Delta A = 0$ ۲) $\Delta A \le 0$ ۳) $\Delta A > 0$ ۴) $\Delta A < 0$

۲۴- هنگرد μVT دارای A سیستم است. با در نظر گرفتن a به‌عنوان عدد اشغال ترازها، تعداد حالت‌ها برای هر توزیع از اعداد اشغال از کدام رابطه تعیین می‌شود؟

۱) $\frac{A!}{\prod_N \prod_j a_{Nj}!}$ ۲) $\frac{A!}{\prod_j \prod_N a_{jN}!}$

۳) $\frac{A!}{\prod_N a_{Nj}!}$ ۴) $\frac{A!}{\prod_j a_{Nj}!}$

۲۵- کدام گزینه درباره مقایسه هنگرد کانونی بزرگ (μVT) و کانونی کوچک (NVE) درست است؟

۱) هر هنگرد کانونی کوچک را می‌توان به‌عنوان یکی از سیستم‌های یک هنگرد کانونی بزرگ در نظر گرفت.

۲) هر هنگرد کانونی بزرگ را می‌توان به‌عنوان یکی از سیستم‌های یک هنگرد کانونی کوچک در نظر گرفت.

۳) اساساً این دو هنگرد مستقل از هم بوده و معادل نیستند.

۴) هر دو هنگرد تابع مشخصه یکسانی دارند.

۲۶- دو مولکول A و B با ترازهای انرژی خاص خود را در نظر بگیرید. کدام گزینه درباره احتمال نسبی اشغال دو حالت روی این دو مولکول درست است؟ (q تابع پارش مولکولی و p_m احتمال اشغال تراز m ام است.)

۱) $\frac{p_m^A}{p_m^B} = q_A q_B$ ۲) $\frac{p_m^A}{p_m^B} = \frac{1}{q_A q_B}$ ۳) $\frac{p_m^A}{p_m^B} = \frac{q^B}{q^A}$ ۴) $\frac{p_m^A}{p_m^B} = \frac{q^A}{q^B}$

۲۷- برای مولکول Br_2 در دمای $310K$ کدام تراز ارتعاشی سهم بیشتری در تابع پارش ارتعاشی دارد؟

۱) اول ۲) دوم ۳) سوم ۴) پایه

۲۸- حالت پایه الکترونی مولکول O_2 عبارت است از $^3\sum_g^-$. کدام ترازهای چرخشی در خواص ترمودینامیکی آن سهم بیشتری دارند؟

۱) $J = 1,2,3,...$ ۲) $J = 1,3,5,...$

۳) $J = 0,2,4,...$ ۴) $J = 0,1,2,3,...$

۲۹- کدام گزینه از نتایج قضیه لیوویل در مکانیک آماری است؟

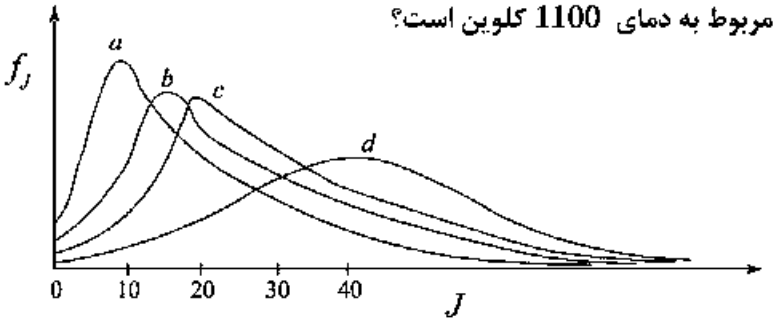
۱) برای هم‌خوانی با قضیه ارگودیک فضای فاز می‌تواند تراکم‌پذیر یا تراکم‌ناپذیر باشد.

۲) دانسیته فضای فاز طوری است که در هر جای آن قابل متراکم شدن است.

۳) دانسیته فضای فاز مانند یک سیال تراکم‌ناپذیر رفتار می‌کند.

۴) در فضای فاز پایستگی انبساط وجود ندارد.

۳۰- کسری از مولکول‌های NO در حالت‌های مختلف چرخشی در دماهای 300، 500، 1000، 1100 کلوین به‌طور تقریبی نشان داده شده است. کدام نمودار مربوط به دمای 1100 کلوین است؟



۱) d

۲) c

۳) b

۴) a

۳۱- فرض کنید دو عملگر $\hat{A}$ و $\hat{B}$ جابه‌جایی‌پذیرند. $e^{\hat{A}}e^{\hat{B}}$ معادل کدام گزینه است؟

۱) $e^{\hat{A}+\hat{B}}e^{[\hat{A},\hat{B}]}$

۲) $e^{\hat{A}+\hat{B}}e^{-[\hat{A},\hat{B}]}$

۳) $e^{\hat{A}+\hat{B}}e^{\frac{1}{2}[\hat{A},\hat{B}]}$

۴) $e^{\hat{A}+\hat{B}}e^{-\frac{1}{2}[\hat{A},\hat{B}]}$

۳۲- برای آرایش الکترونی p^3 ماتریس $\hat{L}^2$ برای $M_L = 0$ و $M_S = \frac{1}{2}$ کدام گزینه است؟

۱) $\hbar^2\begin{pmatrix} 2 & -2 & 0 \\ 0 & -4 & -2 \\ 2 & -2 & 0 \end{pmatrix}$

۲) $\hbar^2\begin{pmatrix} 2 & -2 & 0 \\ -2 & -4 & 0 \\ 0 & -2 & 2 \end{pmatrix}$

۳) $\hbar^2\begin{pmatrix} 2 & 0 & -2 \\ -2 & -4 & 0 \\ 2 & -2 & 0 \end{pmatrix}$

۴) $\hbar^2\begin{pmatrix} 2 & 0 & -2 \\ -4 & -2 & 0 \\ 0 & -2 & 2 \end{pmatrix}$

۳۳- برای آرایش الکترونی sp^2 چندحالتی (degeneracy) کل کدام گزینه است؟

۱) 30 ۲) 32 ۳) 40 ۴) 42

۳۴- برای الکترون در حالت $2p_0$ اتم هیدروژن محتمل‌ترین مقدار r در واحدهای اتمی کدام است؟

$$\psi_{210} = \frac{1}{2\sqrt{6}} r e^{-\frac{r}{2}} Y_1^0$$

۱) 1 ۲) 2

۳) 3 ۴) 4

۳۵- فرض کنید تابع آزمایشی $\phi = Ae^{-\alpha r} + Be^{-\beta r^2}$ برای محاسبه انرژی حالت پایه اتم هیدروژن به روش تغییری پیشنهاد شده است. کدام مقادیر برای A و B و α بهترند؟ (از راست به چپ)

۱) صفر، ثابت نرمال کردن، a_0 ۲) صفر، ثابت نرمال کردن، $\frac{1}{a_0}$

۳) ثابت نرمال کردن، صفر، a_0 ۴) ثابت نرمال کردن، صفر، $\frac{1}{a_0}$

۳۶- یک ذره در یک جعبه را در نظر بگیرید، به طوری‌که پتانسیل در $x = L$ بیشتر از پتانسیل در $x = 0$ باشد. یک تابع آزمایشی مناسب برای چنین سیستمی به‌صورت زیر پیشنهاد شده است:

$$\phi = \sqrt{0.9}\psi_1 + \sqrt{0.1}\psi_2$$

که ψ_1 و ψ_2 ویژه‌توابع اول و دوم ذره در جعبه با پتانسیل یکنواخت است. مقدار انرژی جنبشی میانگین این ذره کدام است؟

۱) $\frac{h^2}{8mL^2}$ ۲) $\frac{1.3h^2}{8mL^2}$

۳) $\frac{1.5h^2}{8mL^2}$ ۴) $\frac{2h^2}{8mL^2}$

۳۷- اوربیتال مولکولی برای یک مولکول دو اتمی جورهسته به‌صورت $\phi = 2p_{z,a} + 2p_{z,b}$ داده شده است. کدام‌یک از جملات زیر درباره ϕ درست است؟

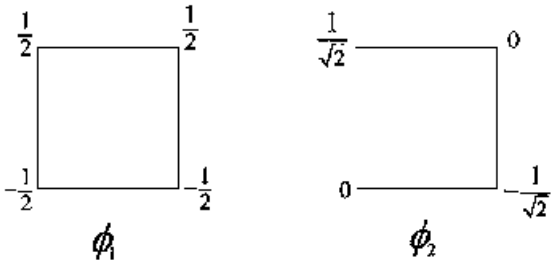
۱) ϕ یک MO ضدپیوندی است که با π_g نشان داده می‌شود.

۲) ϕ یک MO پیوندی است که با σ_g نشان داده می‌شود.

۳) ϕ یک MO ضدپیوندی است که با σ_u نشان داده می‌شود.

۴) ϕ یک MO پیوندی است که با π_u نشان داده می‌شود.

۳۸- دو MO هم‌انرژی (degenerate) برای سیکلوبوتادی‌ان (که آن را مسطح فرض می‌کنیم) به‌صورت زیر داده شده است. کدام‌یک از اوربیتال‌های مولکولی نرمال شده زیر دارای انرژی برابر با ϕ_2 اما بر ϕ_1 متعامد است؟ (از روش Schmidt به‌دست آمده است.)



۱) $\sqrt{2}\left(\phi_2 - \frac{\phi_1}{\sqrt{2}}\right)$

۲) $\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\phi_2 - \frac{\phi_1}{\sqrt{2}}\right)$

۳) $\sqrt{2}\left(\frac{\phi_2}{\sqrt{2}} - \phi_1\right)$

۴) $\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{\phi_2}{\sqrt{2}} - \phi_1\right)$

۳۹- در روش محاسباتی اوربیتال مولکولی هوکل توسعه‌یافته (EHMO) برای بوتادی‌ان چه تعداد اوربیتال مولکولی به‌دست می‌آید؟

۱) 18 ۲) 19 ۳) 22 ۴) 23

۴۰- یک محاسبه SCF روی حالت پایه H_2 در $R = 1.40$ a.u. با استفاده از مجموعه پایه حداقلی، انرژی اوربیتال‌های مولکولی σ_g و σ_u را به‌صورت زیر به‌دست می‌آورد:

$\varepsilon(\sigma_g) = -0.619$ a.u. $\varepsilon(\sigma_u) = +0.401$ a.u.

انتگرال‌های دوالکترونی غیرصفر روی این اوربیتال‌های مولکولی عبارتند از:

$$\iint \sigma_g(1)\sigma_g(2)\left(\frac{1}{r_{12}}\right)\sigma_g(1)\sigma_g(2)\,dv(1)dv(2) = 0.566 \text{ a.u.}$$

$$\iint \sigma_g(1)\sigma_u(2)\left(\frac{1}{r_{12}}\right)\sigma_g(1)\sigma_u(2)\,dv(1)dv(2) = 0.558 \text{ a.u.}$$

$$\iint \sigma_g(1)\sigma_u(2)\left(\frac{1}{r_{12}}\right)\sigma_g(2)\sigma_u(1)\,dv(1)dv(2) = 0.140 \text{ a.u.}$$

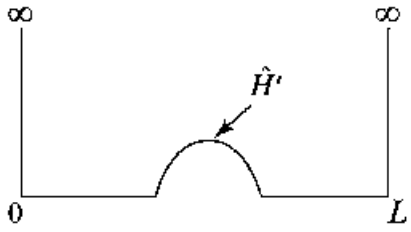
$$\iint \sigma_u(1)\sigma_u(2)\left(\frac{1}{r_{12}}\right)\sigma_u(1)\sigma_u(2)\,dv(1)dv(2) = 0.582 \text{ a.u.}$$

انرژی الکترونی SCF برای H_2 در $R = 1.40$ a.u. به کدام عدد نزدیک‌تر است؟ (در واحد a.u.)

۱) -1.936 ۲) -1.804

۳) -2.105 ۴) -2.717

۴۱- یک ذره در یک جعبه یک‌بعدی به‌صورت زیر مختل می‌شود. با در نظر گرفتن سه تابع موج اول ψ_1، ψ_2 و ψ_3 سیستم مختل‌نشده، کدام گزینه ترتیب تغییر انرژی این حالات را بهتر نشان می‌دهد؟



۱) $E_3^{(1)} > E_1^{(1)} > E_2^{(1)}$

۲) $E_2^{(1)} > E_3^{(1)} > E_1^{(1)}$

۳) $E_1^{(1)} > E_2^{(1)} > E_3^{(1)}$

۴) $E_1^{(1)} > E_3^{(1)} > E_2^{(1)}$

۴۲- اتم هیدروژن در حالت پایه در یک میدان الکتریکی یکنواخت در جهت z قرار داده می‌شود. کدام گزینه برای چنین حالتی درست است؟

۱) تصحیح مرتبه اول در انرژی صفر است.

۲) تصحیح مرتبه دوم در انرژی مثبت است.

۳) توابع موج مرتبه صفرم مناسب $\frac{1}{\sqrt{2}}(1s \pm 2p_z)$ است.

۴) تصحیح مرتبه اول در تابع موج شامل مقداری اوربیتال اتمی $2s$ است.

۴۳- کدام گزینه درباره انتقال $3d_{xy} \rightarrow 2p_x$ در اتم هیدروژن درست است؟

۱) از نظر دوقطبی مجاز و x-قطبیده است.

۲) از نظر دوقطبی مجاز و y-قطبیده است.

۳) از نظر دوقطبی مجاز و z-قطبیده است.

۴) از نظر دوقطبی مجاز و xy-قطبیده است.

۴۴- فرض کنید برای مولکول ازون انتقال $\pi_u \leftarrow \pi_g$ انجام شده است (π_u و π_g مربوط به اوربیتال‌های مولکولی در مولکول خطی است.) چنین انتقالی چه تغییری در زاویه O–O–O به‌وجود می‌آورد؟

۱) درصورتی‌که این انتقال مربوط به حالت پیوندی باشد، مولکول را خطی نگه می‌دارد.

۲) درصورتی‌که این انتقال مربوط به حالت ضدپیوندی باشد، مولکول را خمیده می‌کند.

۳) مولکول را خمیده‌تر می‌کند.

۴) مولکول را خطی نگه می‌دارد.

۴۵- برای محاسبه انرژی شکستن پیوند مولکول H_2 کدام روش مناسب‌تر است؟

۱) RB3LYP ۲) OHF ۳) RHF ۴) UHF