

کد کنترل

448

A

## آزمون ورودی دوره دکتری (نیمه‌تمکن) – سال ۱۴۰۰

دفترچه شماره (۱)

صبح جمعه

۹۹/۱۲/۱۵



جمهوری اسلامی ایران

وزارت علوم، تحقیقات و فناوری  
سازمان سنجش آموزش کشور

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

### رشته شیمی – شیمی فیزیک – (کد ۲۲۱۱)

مدت پاسخ‌گویی: ۱۵۰ دقیقه

تعداد سؤال: ۴۵

عنوان مواد امتحانی، تعداد و شماره سوالات

ردیف	مواد امتحانی	تعداد سؤال	از شماره	تا شماره
۱	مجموعه دروس تخصصی: – شیمی فیزیک – ترمودینامیک آماری ۱ – شیمی کوآنتمومی	۴۵	۱	۴۵

استفاده از ماشین حساب مجاز نیست.

این آزمون نمره منفی دارد.

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

# پی اچ دی تست؛ نخستین وب سایت تخصصی آزمون دکتری

صفحه ۲

448A

آزمون ورودی دوره دکتری (نیمه‌تممرکز) – کد (۲۲۱۱)

\* داوطلب گرامی، عدم درج مشخصات و امضا در مندرجات جدول ذیل، بهمنزله عدم حضور شما در جلسه آزمون است.

اینجانب ..... با شماره داوطلبی ..... با آگاهی کامل، یکسان بودن شماره صندلی خود را با شماره داوطلبی مندرج در بالای کارت ورود به جلسه، بالای پاسخ‌نامه و دفترچه سؤالات، نوع و کد کنترل درج شده بر روی دفترچه سؤالات و پائین پاسخ‌نامه‌ام را تأیید می‌نمایم.

امضا:

برای یک سیستم گازی انرژی درونی از رابطه زیر تعیین می‌شود:

$$U = \frac{2}{5} p V + \text{ثابت}$$

معادله آدیباتیک آن در یک نمودار  $p-V$  کدام است؟

$$V^{\gamma} p^{\delta} = \text{ثابت} \quad (1) \quad \text{ثابت} = \frac{2}{5} p V^{\frac{5}{\gamma}} \quad (2) \quad p^{\frac{5}{\gamma}} V^{\frac{5}{\gamma}} = \text{ثابت} \quad (3) \quad \text{ثابت} = \frac{2}{5} V^{\frac{5}{\gamma}}$$

-۱ سیستمی از معادله  $U = A v^{-2} e^{S/R}$  تبعیت می‌کند ( $S$  یک ثابت است).  $N$  مول از این سیستم با دمای  $T_0$  و فشار  $p_0$  به طور هم‌آنتروپی منبسط می‌شود تا فشار آن نصف شود. دمای نهایی کدام گزینه است؟

$$6/3 T_0 \quad (1) \quad 3/6 T_0 \quad (2) \quad 0/36 T_0 \quad (3)$$

-۲ معادله بنیادی سیستمی به صورت  $\frac{s}{v^{5/2}} = A$  است. معادله حالت این سیستم در نمایش آنتروپی کدام است؟

$$\frac{1}{T} = \frac{2}{5} A^{-\frac{2}{5}} \frac{u^{\frac{3}{5}}}{v^{\frac{5}{2}}} \quad (1) \quad \frac{1}{T} = \frac{2}{5} A^{-\frac{2}{5}} u^{-\frac{2}{5}} v^{\frac{5}{2}} \quad (2)$$

$$\frac{\mu}{T} = -\frac{2}{5} A^{-\frac{2}{5}} u^{\frac{1}{5}} v^{\frac{7}{5}} \quad (3) \quad \frac{\mu}{T} = -\frac{2}{5} A^{-\frac{2}{5}} u^{\frac{2}{5}} v^{\frac{3}{2}} \quad (4)$$

-۳ برای گازی با معادله حالت  $p = \frac{RT}{V_m} - \frac{B}{V_m^2} + \frac{C}{V_m^3}$  کدام گزینه درست است؟

(۱) برای این گاز ضریب تراکم‌پذیری ( $Z$ ) مساوی یک است.

(۲) این معادله به رفتار بحرانی منجر می‌شود.

(۳) این معادله به رفتار بحرانی منجر نمی‌شود.

(۴) این گاز را نمی‌توان مایع کرد.

-۴ مقدار  $\Delta H$  برای انبساط آدیباتیک یک گاز کامل از انتگرال گیری کدام گزینه به دست می‌آید؟

$$pdV \quad (1) \quad SdT \quad (2) \quad TdS \quad (3) \quad Vdp \quad (4)$$

-۵ تراکم‌پذیری هم‌دمای سرب در دمای  $293K$  برابر  $2 \times 10^{-6} atm^{-1}$  است. چه فشاری بر حسب اتمسفر باید اعمال شود تا دانسیته آن به اندازه  $8/0 \times 10^{-6}$  درصد افزایش یابد؟

$$3/6 \times 10^{-2} \quad (1) \quad 1/6 \times 10^{-2} \quad (2)$$

$$16 \times 10^{-2} \quad (3) \quad 4/0 \times 10^{-2} \quad (4)$$

# پی اچ دی تست؛ نخستین وب سایت تخصصی آزمون دکتری

صفحه ۳

448A

آزمون ورودی دوره دکتری (نیمه‌مت مرکز) – کد (۲۲۱۱)

- ۷ در چه صورتی برای یک چرخه کارنو انтگرال  $\frac{dq_{rev}}{T}$  منفی می‌شود؟
- (۱) در صورتی که انبساط برگشت‌پذیر هم‌دما حذف شود.
  - (۲) این انتگرال اساساً هیچ وقت منفی نمی‌شود.
  - (۳) اگر مرحله انبساط برگشت‌پذیر هم‌دما با یک انبساط آدیاباتیک جایگزین شود.
  - (۴) اگر مرحله انبساط برگشت‌پذیر هم‌دما با یک انبساط هم‌دما برگشت‌ناپذیر جایگزین شود.
- کدام مقایسه، درباره مقیاس دمای گاز کامل و مقیاس دمای ترمودینامیکی درست است؟
- (۱) بر مبنای قانون دوم با هم برابر هستند.
  - (۲) بر مبنای قانون دوم حداکثر با یک ثابت عددی با یکدیگر تفاوت دارند.
  - (۳) از دما‌سنج گاز کامل نمی‌توان برای کالیبره کردن دما‌سنج ترمودینامیکی استفاده کرد.
  - (۴) تحت هیچ شرایطی نمی‌توان از گازهای حقیقی در مقیاس دمای گاز کامل استفاده کرد.
- ۸ حجم یک پلیمر تازه سنتز شده به صورت نمایی  $V = V_0 e^{-p/p^*}$  به فشار بستگی دارد، که  $p$  فشار اضافی و  $p^*$  ثابت است. وابستگی انرژی آزاد گیبس پلیمر به فشار کدام است؟
- $$p^* V_0 \left(1 + e^{-p/p^*}\right) \quad (۱)$$
- $$p^* V_0 e^{-p/p^*} \quad (۲)$$
- $$-p^* V_0 e^{-p/p^*} \quad (۳)$$
- ۹ برای بررسی تبدیل فاز مرتبه دوم (مطابق تقسیم‌بندی ارنسن) از کدام معادله استفاده می‌شود؟ ( $\alpha$  و  $\beta$  به ترتیب ضریب انبساط و تراکم‌پذیری هستند)
- $$\frac{dp}{dT} = \frac{\Delta c_p}{TV_m} \quad (۱)$$
- $$\frac{dp}{dT} = \frac{\Delta c_p}{T(\alpha_2 - \alpha_1)} \quad (۲)$$
- $$\frac{dp}{dT} = \frac{\Delta S}{\Delta V} \quad (۳) \quad (\text{معادله کلابیرون})$$
- $$\frac{dp}{dT} = \frac{\alpha_2 - \alpha_1}{\beta_2 - \beta_1} \quad (۴)$$
- ۱۰ در مطالعه‌ای روی خواص محلول آبی  $\text{NO}_3^-$  با مولالیته  $0.0090 \text{ mmol/kg}$  مشخص شده که نقطه انجماد به مقدار  $K = 90.0^\circ \text{C}$  کاهش یافته است. تعداد ظاهری یون‌ها به ازای هر واحد فرمولی کدام است؟
- $$(\text{ثابت کاهش نقطه انجماد: } K_f \approx 1.8 \frac{K}{\text{mol.kg}^{-1}}) \quad (۱)$$
- ۸ (۴)                  ۶ (۳)                  ۴ (۲)                  ۳ (۱)
- ۱۱ کریستال‌های آبی رنگ  $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$  در اثر گرم شدن آب هیدراته خود را از دست می‌دهند. در ظرف داغی که فقط این کریستال‌ها وجود دارد، چند فاز و چند جزء به ترتیب از راست به چپ وجود دارد؟
- ۲ (۳) و ۱ (۱)                  ۲ (۳) و ۲ (۲)                  ۳ (۲) و ۴ (۱)

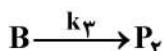
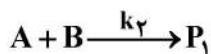
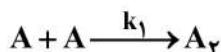
# پی اچ دی تست؛ نخستین وب سایت تخصصی آزمون دکتری

صفحه ۴

448A

آزمون ورودی دوره دکتری (نیمه‌تممرکز) – کد (۲۲۱۱)

- ۱۳ - واکنش چند مرحله‌ای زیر را در نظر بگیرید:



اگر  $[A] >> [B]$  باشد، کدام است؟

$$\frac{[A]_0}{1-2k_1t} \quad (2)$$

$$\frac{[A]_0}{1+2k_1t} \quad (1)$$

$$\frac{[A]_0}{1+2k_1[A]_0 t} \quad (4)$$

$$\frac{[A]_0}{1-2k_1[A]_0 t} \quad (3)$$

- ۱۴ - مشخص شده که در برخی از واکنش‌های غیر‌آرنیوسی، ثابت سرعت از رابطه  $k = BT^n e^{-E_a/RT}$  تبعیت می‌کند و  $n$  ثابت‌اند. ارتباط بین  $E_a$  در این رابطه و  $E_a$  در رابطه آرنیوس کدام است؟

$$E_a = E_0 + nRT \quad (2)$$

$$E_a = E_0 - nRT \quad (1)$$

$$E_a = E_0 \quad (4) \quad \text{و } E_a \text{ مستقل‌اند.}$$

$$E_a = E_0 \quad (3)$$

- ۱۵ - در تعیین ثابت سرعت واکنش  $F + H_2 \rightarrow F \cdots H \cdots H \rightarrow FH + H$  با استفاده از نظریه حالت گذار نسبت

$$\left( \frac{Q_{FHH}^{\#}}{Q_F Q_{H_2}} \right)_{\text{rot}} \quad \text{کدام است؟ (I ممان اینرسی است.)}$$

$$\sigma_{HF} \frac{I^{\#}}{I_{HF}} \quad (2)$$

$$\sigma_{H_2} \frac{I^{\#}}{I_{H_2}} \quad (1)$$

$$\frac{I^{\#}}{\sigma_{HF} I_{HF}} \quad (4)$$

$$\frac{1}{\sigma_{H_2}} \frac{I^{\#}}{I_{H_2}} \quad (3)$$

- ۱۶ - فرض کنید احتمال اشغال یک حالت انرژی از تابع توزیع  $P(\varepsilon) = Ae^{-\varepsilon/kT}$  تبعیت می‌کند. برای یک سیستم با

فقط سه حالت انرژی به صورت زیر،  $A$  کدام است؟ ( $k$  ثابت بولتسمن است و  $e^{-1} = 0,37$ )

$\varepsilon = 2kT$	۳/۶۶۵
$\varepsilon = kT$	۲/۶۶۵
$\varepsilon = 0$	۱/۶۶۵

- ۱۷ - برای یک ذره در جعبه مکعبی به ابعاد  $L$ ، فشار در حالت کوانتوسی  $J$  ام کدام است؟

$$\frac{3E_j}{2V} \quad (4) \quad \frac{2E_j}{3V} \quad (3) \quad \frac{3V}{2E_j} \quad (2) \quad \frac{2V}{3E_j} \quad (1)$$

- ۱۸ - اگر این حقیقت که مولکول  $N_2$  یک مولکول جورهسته است صرف‌نظر کنیم، محتمل‌ترین مقدار عدد کوانتوسی چرخشی  $J$  برای آن کدام است؟

$$6 \quad (4) \quad 7 \quad (3) \quad 8 \quad (2) \quad 9 \quad (1)$$

# پی اچ دی تست؛ نخستین وب سایت تخصصی آزمون دکتری

صفحه ۵

448A

آزمون ورودی دوره دکتری (نیمه‌تممرکز) – کد (۲۲۱۱)

- ۱۹- در محاسبه سهم حرکت چرخشی مولکول HD در آنتروپی در دمای  $300\text{ K}$ ، کدام گزینه با  $\frac{\partial \ln q_{rot}}{\partial T}$  برابر است؟

$$\frac{1}{T^2} \quad (4)$$

$$\frac{1}{T} \quad (3)$$

$$T^2 \quad (2)$$

$$T \quad (1)$$

- ۲۰- کدام گزینه درباره چگالی حالت‌ها برای ذره در جعبه دو بعدی درست است؟

۱) متناسب با  $E$  است.

۲) مستقل از انرژی است.

۳) متناسب با  $\frac{1}{2}E$  است.

- ۲۱- در ترمودینامیک آماری برای محاسبه خواص ترمودینامیکی کدام مورد ضرورتی ندارد؟

۱) حالت‌های قابل دسترس سیستم

۲) ساختار مولکول‌ها

۳) انرژی جنبشی

۴) ایندکس پتانسیل

- ۲۲- برای کدامیک از اطلاعات کوانتمی زیر در صورت لحاظ نشدن در ترمودینامیک آماری مشکلی ایجاد نمی‌شود؟

الف) عدم قطعیت در انرژی

ب) چندحالته‌ها و ترکیب خطی توابع موج

ج) انرژی هر تراز کوانتمی

د) فاصله بین ترازهای کوانتمی

(۱) (الف) و (ب)      (۲) (الف) و (ج)      (۳) (الف) و (د)      (۴) (ب) و (ج)

- ۲۳- سه ذره تمیزپذیر روی سه تراز با انرژی‌های  $4, 6, 10$  و  $24$  توزیع شده‌اند. میانگین تعداد ذرات در تراز دوم کدام است؟

$$2 \quad (4)$$

$$1 \quad (3)$$

$$\frac{1}{2} \quad (2)$$

$$\frac{1}{3} \quad (1)$$

- ۲۴- در هنگرد (مجموعه آماری) کانونی، کدام کمیت است؟  $P = \left( \frac{\partial \ln Q}{\partial \beta} \right)_{E_j}$  (در گزینه‌ها تابع احتمال است).

$$-\beta P_j \quad (4)$$

$$\beta P_j \quad (3)$$

$$-\bar{E} \quad (2)$$

$$\bar{E} \quad (1)$$

- ۲۵- در هنگرد کانونی بزرگ با تابع پارش  $E = \sum_N \sum_j e^{-\beta E_{Nj}} e^{-\gamma N}$  کدام خاصیت است؟

$$\bar{H} \quad (4)$$

$$\bar{E} \quad (3)$$

$$G \quad (2)$$

$$-\mu \quad (1)$$

- ۲۶- در هنگرد کانونی بزرگ، متغیرهای طبیعی  $pV$  در کدام گزینه آمده است؟

$$T, S, \mu \quad (2)$$

$$V, S, \mu \quad (1)$$

$$T, p, \mu \quad (4)$$

$$T, V, \mu \quad (3)$$

- ۲۷- در تعیین تابع توزیع انرژی (گاووسی) در هنگرد کانونی در نقطه حداقل تابع توزیع، کدام گزینه است؟  $\Omega = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(E-E_0)^2}{2}}$

$$\beta \quad (4)$$

$$T \quad (3)$$

$$\frac{1}{\beta} \quad (2)$$

$$\frac{1}{T} \quad (1)$$

# پی اچ دی تست؛ نخستین وب سایت تخصصی آزمون دکتری

صفحه ۶

448A

آزمون ورودی دوره دکتری (نیمه‌تممرکز) – کد (۲۲۱۱)

- ۲۸ - در تعیین واریانس تعداد ذرات در هنگرد کانونی بزرگ، رابطه  $\sigma_N^2 = kT \left( \frac{\partial \bar{N}}{\partial \mu} \right)_{T,V}$  به دست می‌آید. مشتق

$$\left( \frac{\partial \bar{N}}{\partial \mu} \right)_{T,V}$$

$$V \left( \frac{\partial p}{\partial N} \right)_{T,V} \quad (۴) \quad \frac{1}{V} \left( \frac{\partial p}{\partial N} \right)_{T,V} \quad (۳) \quad \frac{N}{V} \left( \frac{\partial p}{\partial N} \right)_{T,V} \quad (۲) \quad \frac{V}{N} \left( \frac{\partial p}{\partial N} \right)_{T,V} \quad (۱)$$

- ۲۹ - در کدام اتم در فاز گازی سهم ترازهای الکترونی بالاتر، در تابع پارش (تابع تقسیم) الکترونی قابل صرفنظر نیست؟

$$Li \quad (۲) \quad F \quad (۱)$$

$$He \quad (۴) \quad Na \quad (۳)$$

- ۳۰ - وابستگی افت و خیز نسبی انرژی در هنگرد کانونی به تعداد ذرات چگونه است؟

$$\sqrt{N} \quad (۲) \quad N \quad (۱)$$

$$\frac{1}{\sqrt{N}} \quad (۴) \quad \frac{1}{N} \quad (۳)$$

- ۳۱ - چند مورد از عبارت‌های زیر، درباره عملگرهای اندازه حرکت زاویه‌ای، ویژه مقادیر و ویژه توابع آن‌ها نادرست است؟

$$L_+ = (L_-)^* -$$

$$m_l = l \cdot \langle L_z^2 \rangle = \langle L_z \rangle^2 -$$

- برای هر  $l$ ، تعداد  $l+1$  مقدار برای  $m_l$  وجود دارد.

$$L_+ Y_{l,m} = 0 -$$

$$L_- Y_{l,m} = 0 -$$

$$(۱) یک \quad (۲) دو \quad (۳) سه \quad (۴) چهار$$

- ۳۲ - در صورتی که ویژه مقدار  $\hat{L}_z^2$  برای  $\Psi$  برابر با  $12\hbar^2$  و ویژه مقدار  $\hat{L}_x^2$  برای  $\Psi$  برابر با  $2\hbar^2$  باشد، ویژه مقدار

$$\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2$$

$$(۱) صفر \quad (۲) ۴\hbar^2 \quad (۳) ۸\hbar^2 \quad (۴) ۱۰\hbar^2$$

- ۳۳ - برای یک مولکول دو اتمی ثابت چرخشی  $B$  کدام است؟

$$(۱) ویژه مقادیر  $\hat{L}_z$  \quad (۲) ویژه مقادیر  $\hat{L}^2$$$

$$\frac{\hbar^2}{2\mu R^2} \quad (۴) \quad \frac{\hbar^2}{I} \quad (۳)$$

- ۳۴ - کدامیک، پتانسیل یونش حالت پایه برای یک اتم تک الکترونی با عدد اتمی  $Z$  نیست؟

$$Z^2(a.u.) \quad (۱)$$

$$\frac{1}{2} Z^2(a.u.) \quad (۲)$$

(۳) منفی انرژی الکترون در اوربیتال ۱S

(۴) انرژی مورد نیاز برای جدا کردن الکترون از جاذبه هسته

# پی اچ دی تست؛ نخستین وب سایت تخصصی آزمون دکتری

صفحه ۷

448A

آزمون ورودی دوره دکتری (نیمه‌تممرکز) – کد (۲۲۱۱)

- ۳۵- چند عبارت از عبارت‌های زیر درست است؟

- برای لحاظ کردن نسبیت در معادله شرودینگر اسپین ضروری است.
- اشترون و گرلاخ اسپین را با مطالعه ممان مغناطیسی اتم‌های  $\text{Ag}$  مطالعه کردند.
- جفت شدن اسپین-اوربیتال مناسب با توان چهارم عدد اتمی است.
- اسپین با اندازه حرکت زاویه‌ای اوربیتال مطابق  $J = L + S$  جفت می‌شود.

(۴) چهار

(۳) سه

(۲) دو

(۱) یک

- ۳۶- فاکتور  $g$  (فاکتور لانده) به صورت  $\frac{j(j+1)+s(s+1)-l(l+1)}{2j(j+1)}$  است. برای یک الکترون با اسپین  $\alpha$  در یک اوربیتال  $3p$  کدام مقدار برای  $g$  ممکن است؟

(۱) ۴

(۲) ۳

(۳) ۵

(۴)  $\frac{2}{3}$

- ۳۷-تابع موج یکی از ترازهای انرژی نوسانگر هماهنگ به صورت زیر است:

$$\Psi(x) = \left( \frac{\sqrt{k\mu}}{147456\hbar\pi} \right)^{1/4} \left[ 16 \left( \frac{\sqrt{k\mu}}{\hbar} \right)^2 x^4 - 48 \left( \frac{\sqrt{k\mu}}{\hbar} \right) x^2 + 12 \right] e^{-\sqrt{k\mu}x^2/2}$$

این تابع موج چند گره دارد؟

(۴) یک

(۳) دو

(۲) سه

(۱) چهار

- ۳۸- کدام یک از توابع موج زیر بیشترین چندحالتی را دارد؟ ( $l$  و  $n$  اعداد کوانتومی هستند).

(۱) نوسانگر هماهنگ با  $n = 25$

(۲) ذره در جعبه با  $n = 8$

(۳) چرخنده صلب با  $l = 5$

(۴) تابع موج اتم هیدروژن (بدون توجه به اسپین) با  $n = 3$

- ۳۹- برای کدام یک از گزینه‌ها  $\langle H \rangle = \langle T \rangle$  نیست؟ ( $H$  هامیلتونی و  $T$  انرژی جنبشی است)

(۲) ذره در جعبه

(۱) ذره آزاد

(۴) اتم تک الکترونی

(۳) چرخنده صلب

- ۴۰- کدام عبارت درباره روش‌های مکانیک کوانتومی برای حل معادله شرودینگر درست نیست؟

(۱) MCSCF اوربیتال‌ها را برای بیش از یک دترمینان اسلیتری بهینه می‌کند.

(۲) CISD نسبت به اندازه مجموعه پایه بهتر از MP2 تنظیم می‌شود.

(۳) CISD روشی تغییری (variational) است.

(۴) MP4 اندازه سازگار است.

- ۴۱- کدام عبارت درباره دترمینان اسلیتری درست نیست؟

(۱) هر عنصر دترمینان اسلیتری شامل یک انتگرال رزونانسی، یک انتگرال همپوشانی و یک انرژی اوربیتال مولکولی است.

(۲) یک دترمینان  $N \times N$  است که  $N$  تعداد توابع پایه است.

(۳) در هر عنصر  $S_{ij} > H_{ij}$  است.

(۴) در هر عنصر  $S_{ij} \leq 1^\circ$  است.

# پی اچ دی تست؛ نخستین وب سایت تخصصی آزمون دکتری

- ۴۲- دوتابع گاوسی  $g_1$  و  $g_2$  روی یک هسته، به صورت زیر تعریف می‌شوند:

$$g_1 = \left( \frac{2\alpha_1}{\pi} \right)^{3/4} e^{-\alpha_1 r^2} \quad g_2 = \left( \frac{2\alpha_2}{\pi} \right)^{3/4} e^{-\alpha_2 r^2}$$

$$(\alpha_1 > \alpha_2)$$

کدام رابطه برای چنین هسته‌ای درست است؟

$$S_{12} = |\langle g_1 | g_2 \rangle|^2 \quad (1)$$

$$|g_1|^2 + |g_2|^2 \neq 1 \quad (2)$$

$$\left\langle g_1 \left| -\frac{1}{r} \right| g_1 \right\rangle > \left\langle g_2 \left| -\frac{1}{r} \right| g_2 \right\rangle \quad (3)$$

$$\langle g_1 | \hat{T} | g_1 \rangle > \langle g_2 | \hat{T} | g_2 \rangle \quad (4)$$

- ۴۳- کدام گزینه، انتگرال کولنی  $J_{ab}$  بین یک الکترون در اوربیتال  $a$  و یک الکترون در اوربیتال  $b$  نیست؟

$$\iint a^*(1) b^*(2) \frac{1}{r_{12}} a(1) b(2) dr_1 dr_2 \quad (1)$$

$$\iint a^*(1) b^*(1) \frac{1}{r_{12}} a(2) b(2) dr_1 dr_2 \quad (2)$$

$$\iiint |a(1)|^2 \frac{1}{r_{12}} |b(2)|^2 dr_1 dr_2 \quad (3)$$

$$(aa | bb) \quad (4)$$

- ۴۴- کدام دو مورد زیر، روش هارتی فاک (HF) را از روش هارتی متمایز می‌کند؟

I) توابع موج HF نامتقارن هستند، اما توابع موج هارتی نامتقارن نیستند.

II) فقط در روش HF انتگرال‌های تعویضی لازم‌اند.

III) فقط در روش HF اوربیتال‌های مولکولی به صورت ترکیبی خطی از اوربیتال‌های اتمی هستند.

IV) فقط در روش HF از توابع پایه استفاده می‌شود.

V) فقط در روش HF همبستگی بین حرکت الکترون‌ها در نظر گرفته می‌شود.

III و IV  $\quad (4)$

IV و I  $\quad (3)$

II و V  $\quad (2)$

I و III  $\quad (1)$

- ۴۵- سطحی که به صورت  $c = |\Psi|^2$  (ثابت) تعریف می‌شود، چه نام دارد؟

2) سطح همانزی

1) سطح همدانسیته

4) سطح با چندحالاتی

3) سطح همپتانسیل