

نام درس: نظریه گروه در شیمی

رشته تحصیلی و کد درس: شیمی محض : ۱۱۱۴۰۴۹

تعداد سؤالات: تستی: ۲۶ تشریحی: ۶

زمان آزمون: تستی: ۶۰ تشریحی: ۴۵ دقیقه

آزمون نمره منفی دارد ○ ندارد ⊗

کد سری سؤال: یک (۱)

استفاده از ماشین حساب

مجاز است.

امام علی^(ع): برتری مردم به یکدیگر، به دانش‌ها و خردهاست؛ نه به ثروت‌ها و تبارها.

۱. گروه نقطه ای مولکول فروسن در حالت پوشیده و ناپوشیده به ترتیب چگونه است؟ (از راست به چپ)

الف. D_{5h} , D_{5d} ب. D_{5d} , D_{5h}

ج. D_{5d} , C_{5v} د. C_{5v} , C_{5h}

۲. براساس جدول زیر چه رابطه ای بین B, A برقرار است؟

الف. $AA = E$ ب. $AA = B$

ج. $AB = A$ د. $AB = B$

G_3	E	A	B
E	E	A	B
A	A	B	E
B	B	E	A

۳. نقطه A به مختصات (x, y, z) پس از اعمال حاصلضرب $C_p(x), C_p(y)$ چه مختصاتی را

دارا خواهد بود؟

الف. (x, y, z) ب. $(-x, y, -z)$ ج. $(-x, -y, z)$ د. $(-x, -y, -z)$

۴. از محور دوران مرکب S_5 چند عمل تقارن از نوع S_5 تولید می شود؟

الف. ده عمل S_5 ب. چهار عمل S_5 ج. دو عمل S_5 د. پنج عمل S_5

۵. یک مولکول چهار وجهی منظم چند صفحه تقارن دارد؟

الف. ۲ ب. ۴ ج. ۶ د. ۸

۶. عبارت «در هر ردیف و هرستون از جدول ضرب گروه هریک از عناصر تنها یک بار ظاهر می شود»، مربوط به کدام گزینه است؟

الف. قضیه تعویض پذیری ب. گروههای دوری ج. گروه آبدلی د. قضیه نوآرایی

۷. کدامیک از موارد زیر بیان کننده ماهیت ماتریس مزدوج است؟

الف. $X_A = \sum_i \sum_j a_{ij}$ ب. $X_A = \sum_j a_j a_j$

ج. $X_A = \sum_i \sum_j a_{ij} a_{ij}$ د. $X_A = \sum_j l_{jj}$

۸. گروه نقطه ای C_{3v} دارای عناصر $E, 2C_3, 3\sigma_v$ می باشد این گروه چند نمایش کاهش ناپذیر دارد؟

الف. ۳ ب. ۴ ج. ۵ د. ۶

نام درس: نظریه گروه در شیمی

رشته تحصیلی و کد درس: شیمی محض : ۱۱۱۴۰۴۹

تعداد سؤالات: تستی: ۲۶ تشریحی: ۶

زمان آزمون: تستی: ۶۰ تشریحی: ۴۵ دقیقه

آزمون نمره منفی دارد ○ ندارد ⊗

کد سری سؤال: یک (۱)

استفاده از ماشین حساب

مجاز است.

۹. معکوس ماتریس $\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$ کدامیک از ماتریس های زیر می باشد؟

الف. $\begin{bmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$ ب. $\begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \end{bmatrix}$ ج. $\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ -1 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$ د. $\begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \end{bmatrix}$

۱۰. ترم طیفی حالت پایه برای آرایش الکترونی d^4 چیست؟

الف. 3F ب. 4F ج. 2D د. 3P

۱۱. در نمایش مولیکن علامت نمایش کاهش ناپذیر زیر کدام است؟

	E	2C_3	${}^3\sigma_V$
Γ_3	۲	-۱	۰

الف. A_1 ب. A_2 ج. E د. B_1

۱۲. مولکولهای CO_2 و H_2O به ترتیب از راست به چپ چند شیوه ارتعاشی متعارف دارند؟

الف. ۳ و ۳ ب. ۳ و ۲ ج. ۴ و ۳ د. ۳ و ۴

۱۳. انتگرال $H_{ij} = \int \phi_i \hat{H} \phi_j d\tau$ چیست؟

الف. انتگرال همپوشانی
ب. انتگرال ترکیب ϕ_i, ϕ_j
ج. انرژی اربیتال اتمی ϕ_j
د. انرژی برهم کنش بین اربیتالهای ϕ_i, ϕ_j

۱۴. در سیستم مختصات قطبی مختص x با کدام معادله زیر بیان می شود؟

الف. $x = r \sin^p \theta$ ب. $x = r \sin \theta \cos \phi$ ج. $x = r \sin \theta \sin \phi$ د. $x = r \cos^p \theta$

۱۵. انرژی سیستم شش الکترونی π بنزن چیست؟

الف. 8β ب. 6β ج. 2β د. β

نام درس: نظریه گروه در شیمی

رشته تحصیلی و کد درس: شیمی محض : ۱۱۱۴۰۴۹

تعداد سؤالات: تستی: ۲۶ تشریحی: ۶

زمان آزمون: تستی: ۶۰ تشریحی: ۴۵ دقیقه

آزمون نمره منفی دارد ○ ندارد ⊗

کد سری سؤال: یک (۱)

استفاده از ماشین حساب

مجاز است.

۱۶. کدامیک از ارتعاشات با تقارنهای A_1, B_1, B_2 در گروه نقطه‌ای C_{2v} فعال در IR هستند؟

الف. B_1, B_2 ب. A_1 ج. جواب الف و ب د. A_1, B_1

۱۷. نمایش کاهش ناپذیر شکافتگی سطوح d با تک الکترون در یک میدان هشت وجهی کدامیک از گزینه‌های زیر می‌باشد؟

الف. $A_{1g} + T_{1u}$ ب. $E_g + T_{2g}$

ج. $A_{2u} + T_{1u}$ د. $E_g + 2T_{1u}$

۱۸. حالت تقارنی ارییتال d_{z^2} در گروه نقطه‌ای C_{2v} کدام است؟

الف. B_1 ب. B_2 ج. A_2 د. A_1

۱۹. برای دو اولفین که دارای m_p, m_1 الکترون π هستند یک اولفین حلقوی با $\frac{m_1 + m_p - 4}{2}$ پیوند π می‌دهند، واکنش گرمایی در کدام حالت مجاز است؟

الف. $m_1 + m_p = 4n - 3$ ب. $m_1 + m_p = 4n$

ج. $m_1 + m_p = 4n + 2$ د. $m_1 + m_p = 4n + 1$

۲۰. کدامیک از مولکولهای زیر به گروه C_{3v} تعلق دارد؟

الف. H_2O ب. PH_3 ج. H_2O_2 د. ۱ و ۳ و ۷ و ۵ و ۶ تترامیتیل سیلکواکتانتراان

۲۱. اگر مولکولی دارای یک محور چرخشی متعارف C_n و یک محور چرخشی مرتبه ۲ عمود بر آن باشد.

الف. الزاماً دارای σ_n است. ب. الزاماً دارای i است

ج. جزء گروه نقطه‌ای C_{3v} است د. الزاماً دارای n محور C_p عمود بر C_n است.

۲۲. ماتریس‌های B, A به ترتیب از راست به چپ بیانگر کدام اعمال تقارن هستند؟

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, B = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$$

الف. C_n, σ ب. E, i ج. σ, E د. i, E

تعداد سؤالات: تستی: ۲۶ تشریحی: ۶
زمان آزمون: تستی: ۶۰ تشریحی: ۴۵ دقیقه
آزمون نمره منفی دارد ○ ندارد ⊗

نام درس: نظریه گروه در شیمی
رشته تحصیلی و کد درس: شیمی محض: ۱۱۱۴۰۴۹

کد سری سؤال: یک (۱) استفاده از ماشین حساب مجاز است.

۲۳. در مورد محورهای تقارن مولکول PF_5 هرم مثلث القاعدة کدام گزینه صحیح است؟
الف. مولکول یک محور C_3 و سه محور C_2 عمود بر آن و یک صفحه تقارن σ_h دارد.
ب. مولکول دارای محور C_3 , σ_h و C_2 می باشد.
ج. مولکول دو محور C_3 و یک محور C_2 و یک صفحه تقارن σ_h دارد.
د. مولکول فاقد هر گونه محور S_n مرتبه زوج σ_h می باشد.
۲۴. حاصل عبارت $C_3 + i$ چیست؟
الف. D_{3h} ب. C_{3h} ج. S_6 د. C_{3v}
۲۵. در مولکول BF_3 گروه اربیتالهای تشکیل دهنده پیوند σ دارای کدام نمایش زیر هستند؟
الف. A'_1, E' ب. $A'_1 + A'_2$ ج. A'_1, E'' د. $A'_1 + E'$
۲۶. نقطه A به مختصات (x, y, z) پس از اعمال حاصل ضرب $C_2(Z) \cdot i$ چه مختصاتی را دارا خواهد بود؟
الف. (x, y, z) ب. $(-x, -y, -z)$ ج. $(-x, -y, z)$ د. $(x, y, -z)$

سؤالات تشریحی

بارم هر سؤال ۱/۲۵ نمره می باشد.

۱. قضیه مهم تعامد را بطور خلاصه بیان نمائید؟

۲. در صورتی که جدول مشخصات گروه C_{2h} بصورت زیر باشد نمایشات کاهش پذیر $\Gamma_a, \Gamma_b, \Gamma_c$ را به اجزای

کاهش ناپذیر تجزیه کنید؟

C_{2h}	E	C_2	i	σ_h
A_g	۱	۱	۱	۱
B_g	۱	-۱	۱	-۱
A_u	۱	۱	-۱	-۱
B_u	۱	-۱	-۱	۱

C_{2h}	E	C_2	i	σ_h
Γ_a	۳	-۱	۱	-۳
Γ_b	۲	۰	-۲	۰
Γ_c	۵	۱	۱	۱

تعداد سؤالات: تستی: ۲۶ تشریحی: ۶
زمان آزمون: تستی: ۶۰ تشریحی: ۴۵ دقیقه
آزمون نمره منفی دارد ○ ندارد ⊗

نام درس: نظریه گروه در شیمی
رشته تحصیلی و کد درس: شیمی محض : ۱۱۱۴۰۴۹

مجاز است.

استفاده از ماشین حساب

کد سری سؤال: یک (۱)

۳. ماتریس $\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$ نشان دهنده کدامیک از اعمال تقارن است؟

۴. اربیتالهای مولکولی π را در رادیکال آلیل با استفاده از توابع $SALC$ بدست آورید؟

۵. چگونگی توزیع الکترونها در اربیتالهای d را در یک کمپلکس هشت وجهی با مقایسه P, Δ_0 برای آرایشهای d^v, d^6, d^5, d^4

بنویسید؟

۶. اعمال تولید شده حاصل از محور S_p را بنویسید.