



ملاحظة: عدد الأسئلة (ستة) والأجوبة على (خمس).

س1/ (أ) ماهي المعادلة الرياضية لديبرولي الخاصة بربط الصفة الجسيمية (الإلكترون) بالصفة الموجية (الفوتون) مع تعريف رموزها.

(ب) جد عدد الإلكترونات الكلية وعدد الأوربتالات الذرية والجزيئية للجزيئات الآتية:

(10 درجات) $\{ (\text{CN}_2\text{O}_2\text{H}_3)^{+1}, (\text{C}_{10}\text{H}_8)^{-1} \}$

س2/ (أ) احسب عدد ترددات الاهتزاز النظرية للجزيئات والذرات الآتية:-

(10 درجات) (NeCl_2 , C_4H_4 , NaOH , H_2 , He , H_2O)

(ب) ماهو عدد الذرات في الجزيئة التي تمتلك (16) تردد اهتزاز نظري؟ (10 درجات)

س3/ ما أوجه التشابه والاختلاف بين أيعاز (Energy) وأيعاز (Minimize energy) ؟ (20 درجة)

س4/ (أ) ارسم الصيغة البنائية المستقرة مع ترقيم الذرات للجزيئة التي تمتلك مصفوفة (Z) الآتية:-

Z- matrix

Charge = +1 Multi. = 1

H				B1 = 1.0		
C	1 B1			B2 = 1.4	A1 = 120	
N	2 B2	1 A1		B3 = 1.5	A2 = 120	D1 = 180
C	3 B3	2 A2	1 D1	B4 = 1.3	A3 = 180	D2 = 0.0, 180
O	4 B4	3 A3	2 D2	B5 = 1.0	A4 = 120	D3 = 180
H	2 B5	3 A4	4 D3			

(10 درجات)

(ب) ارسـم الصـيغـة البنائية المستقرة مع ترقيم الذرات للجزيئة التي تمتلك مصفوفة (Z) الآتية:-

Charge = 0 Multi. = 1

H					B1 = 1.0			
C	1 B1				B2 = 1.4	A1 = 150		
C	2 B2	1 A1			B3 = 1.3	A2 = 150	D1 = 0.0	
C	3 B3	2 A2	1 D1		B4 = 1.0	A3 = 120	D2 = 0.0	
H	4 B4	3 A3	2 D2		B5 = 1.0	A4 = 120	D3 = 180	
H	4 B5	3 A4	2 D3		B6 = 1.3	A5 = 150	D4 = 0.0, 180	
C	2 B6	1 A5	3 D4		B7 = 1.0	A6 = 150	D5 = 0.0	
H	7 B7	2 A6	1 D5					