

کد کنترل



649

A

صبح جمعه

۹۷/۱۲/۳

دفترچه شماره (۱)



جمهوری اسلامی ایران

وزارت علوم، تحقیقات و فناوری

سازمان سنجش آموزش کشور

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

آزمون ورودی دوره دکتری (نیمه‌تمدد) – سال ۱۳۹۸

رشته شیمی – شیمی فیزیک – کد (۲۲۱۱)

مدت پاسخ‌گویی: ۱۵۰ دقیقه

تعداد سوال: ۴۵

عنوان مواد امتحانی، تعداد و شماره سوالات

ردیف	مواد امتحانی	تعداد سوال	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 جا به تکثیر و انتشار سوالات به هر روش (الکترونیکی و...) پس از بجزاری آزمون، برای تعامل اشخاص حقیقی و حقوقی تنها با مجوز این سازمان مجاز می‌باشد و با مخالفین برای مقررات رفتار منفی شود.

۱۳۹۸

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

..... با شماره داوطلبی در جلسه این آزمون شرکت می‌نمایم.
اینجانب

امضا:

-۱ آنتالپی تبخیر آب با افزایش دما، کاهش می‌یابد. در این شرایط ظرفیت گرمایی آب چگونه است؟

(۱) از بخار آن بیشتر است.

(۲) با بخار آن برابر است.

(۳) از بخار آن کمتر است.

-۲ در کدام یک تعداد درجهات آزادی، صفر نیست؟

(۴) نقطه انکتیک

(۳) نقطه سه‌گانه

(۲) نقطه جوش

(۱) نقطه بحرانی

-۳ برای واکنش مرتبه نیم $\left(n = \frac{1}{2} \right)$ نسبت به [A]، ثابت سرعت از روی شب نمودار کدام یک بر حسب زمان به

دست می‌آید؟

$$\frac{1}{[A]} \quad (1)$$

$$[A] \quad (2)$$

$$[A]^{1/2} \quad (3)$$

$$[A]^{-1/2} \quad (4)$$

-۴ برای یک واکنش $\left(\frac{\partial \ln K_c}{\partial T} \right)_P$ کدام است؟

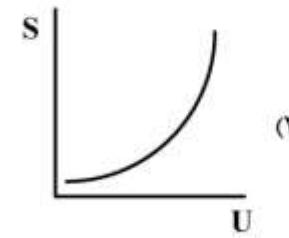
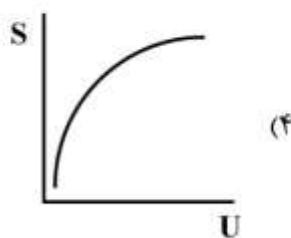
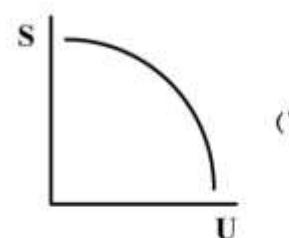
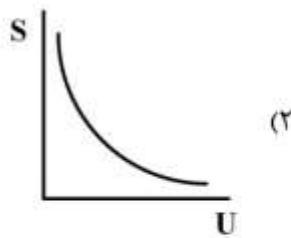
$$\frac{\Delta U^\theta}{RT^\gamma} \quad (1)$$

$$\frac{\Delta H^\theta}{RT^\gamma} \quad (2)$$

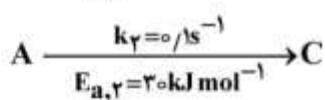
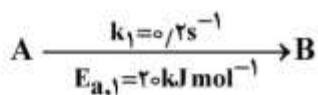
$$\frac{\Delta G^\theta}{RT^\gamma} \quad (3)$$

$$\frac{\Delta A^\theta}{RT^\gamma} \quad (4)$$

-۵ کدام شکل، رفتار آنتروپی را بر حسب انرژی درونی (در حجم ثابت) نشان می‌دهد؟



-۶ انرژی فعال سازی ($\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$) و ثابت سرعت (s^{-1}) سیستمی که در آن دو واکنش رقابتی زیر در دمای 300 K انجام می‌شود، به ترتیب (از راست به چپ) کدام است؟



$$2 \times 10^{-2}, 50 \quad (۱)$$

$$0.3, 7 \quad (۲)$$

$$2 \times 10^{-2}, 7 \quad (۳)$$

$$0.3, 23/3 \quad (۴)$$

-۷ معادله حالت گازی به صورت $PV = n(RT + BP)$ است که B ثابت است. اگر فشار گاز از P_1 به P_2 تغییر گند، در شرایط همدم، ΔA کدام است؟

$$-nRT \ln \frac{V_2}{V_1} \quad (۱)$$

$$-nRT \ln \frac{P_2}{P_1} \quad (۲)$$

$$nRT \ln \frac{V_2}{V_1} \quad (۳)$$

$$nR \ln \frac{P_2}{P_1} \quad (۴)$$

-۸ یک سیستم منزوى در چه شرایطی در تعادل خواهد بود؟

(۱) فشار و دمای آن ثابت باشد.

(۲) فقط فرایند شباهیستا در آن انجام شود.

(۳) تمام خواص ماکروسکوپی آن با زمان یکنواخت باشد.

(۴) در صورت جدا شدن از محیط تغییری در آن ایجاد نشود.

-۹ در یک واکنش شیمیایی $\Delta S = ۱۰۰ \text{ J/mol.K}$ و $\Delta H = ۲۵ \text{ kJ/mol}$ است. از چه دمایی، این واکنش

خود به خودی خواهد بود؟

(۱) ۲۰°C به بالا

(۲) ۲۵°C به بالا

(۳) ۲۵°C به پایین

(۴) ۵°C به پایین

-۱۰ یک گاز در کدام یک از شرایط زیر به گاز ایده‌آل نزدیک‌تر است؟

(۱) دمای ۱۷°C ، فشار ۱ atm و $\rho = ۰/۱ \text{ mol/L}$

(۲) دمای ۳۷°C ، فشار ۲ atm و $\rho = ۰/۰۳ \text{ mol/L}$

(۳) دمای ۴۷°C ، فشار ۱ atm و $\rho = ۰/۰۲ \text{ mol/L}$

(۴) دمای ۳۷°C ، فشار ۱ atm و $\rho = ۰/۰۸ \text{ mol/L}$

-۱۱ اگر معادله سرعت یک واکنش کاتالیز شده آنریمی به صورت $r = \frac{r_{\max}[S]}{K_m + [S]}$ باشد، کدام نمودار خطی است؟

(۱) r بر حسب $[S]$

(۲) $\frac{1}{[S]}$ بر حسب r

(۳) $\frac{1}{r}$ بر حسب $[S]$

(۴) K_m بر حسب $\frac{1}{r}$

-۱۲ فشار روی ۱ لیتر مایع را به صورت آدیباتیک و برگشت‌پذیر به میزان 100 bar افزایش می‌دهیم. تغییر آنتالپی آن بر حسب ژول کدام است؟ (حجم را به تقریب، ثابت در نظر بگیرید.)

(۱) $+100 \text{ J}$

(۲) $+10000 \text{ J}$

(۳) -10000 J

(۴) $+100000 \text{ J}$

- ۱۳- برای یک ماده جامد مولکولی و خالص در صفر مطلق، مولکول‌ها به چهار روش می‌توانند در بلور جهت‌گیری کنند.

آنتروپی باقیمانده این ماده جامد در صفر مطلق بر حسب $J\text{ mol}^{-1}\text{ K}^{-1}$ کدام است؟

$$(\ln \gamma = 0.7, R = 8 \text{ J mol}^{-1}\text{ K}^{-1})$$

(۱) ۵/۷۶

(۲) ۸/۳۱

(۳) ۱۰/۳۳

(۴) ۱۱/۲

- ۱۴- معادله افزایش نقطه جوش برای یک محلول $\ln(1-x_B) = -0.023\Delta T$ است. افزایش نقطه جوش ΔT برای

محلولی با $x_B = 0.01$ کدام است؟

(۱) ۳/۳

(۲) ۰/۰۰۳

(۳) ۰/۰۳۳

(۴) ۰/۳

- ۱۵- حجم محلول آبی یگنمک در ${}^{\circ}\text{C} = 25 + 16m + 2m^2$ (cm 3) به صورت $m = \text{g mol/kg}$ بر حسب mol/L/mol کدام است؟

(۱) ۱/۶

(۲) ۱۶/۴

(۳) ۱۰۰/۴

(۴) ۱۰۰۴/۶

- ۱۶- تابع پارش (تابع تقسیم) یک گاز چگال از معادله زیر تعیین می‌شود. a و b ثابت هستند. فشار گاز کدام است؟

$$Q(N, V, T) = \frac{1}{N!} \left(\frac{4\pi m k T}{h^3} \right)^{\frac{3N}{2}} (V - Nb)^N e^{\frac{aN^2}{V k T}}$$

$$\frac{NkT}{V - Nb} - \frac{aN^2}{V^2} \quad (1)$$

$$-\frac{NkT}{V - Nb} + \frac{aN^2}{V^2} \quad (2)$$

$$\frac{NkT}{V - Nb} + \frac{aN^2}{V^2} \quad (3)$$

$$\frac{NkT}{V - Nb} - \frac{aN^2}{V^2} \quad (4)$$

-۱۷- انتگرال پیکربندی برای یک گاز ایده‌آل، کدام است؟

V (۱)

$\frac{1}{V}$ (۲)

$\frac{1}{V^N}$ (۳)

V^N (۴)

-۱۸- برای مولکول اکسیژن (با اسپین صفر و \sum_g^{-3}) نسبت ترازهای اورتو به پارا، کدام است؟

صفر (۱)

∞ (۲)

$\frac{1}{3}$ (۳)

۴ (۴)

-۱۹- در شرایط یکسان دما و حجم، تابع پارش گازهای هلیم، نئون، آرگون و کریپتون چه نسبتی با هم دارند؟
(از حرکت الکترون‌ها صرف نظر کنید).

$q(\text{He}) > q(\text{Ne}) > q(\text{Ar}) > q(\text{Kr})$ (۱)

$q(\text{He}) < q(\text{Ne}) > q(\text{Ar}) > q(\text{Kr})$ (۲)

$q(\text{He}) < q(\text{Ne}) < q(\text{Ar}) < q(\text{Kr})$ (۳)

$q(\text{He}) > q(\text{Ne}) < q(\text{Ar}) < q(\text{Kr})$ (۴)

-۲۰- در هنگردد (مجموعه آماری) کانونی کوچک، چندحالته (Ω) متناسب با کدام است؟

$U^{3N/2} V^N$ (۱)

$U^{-3N/2} V^N$ (۲)

$U^{-3N/2} V^{-N}$ (۳)

$U^{3N/2} V^{-N}$ (۴)

-۲۱- میانگین تعداد ذرات در حالت کوانتمی k ام برابر با $\bar{n}_k = \frac{\lambda e^{-\beta \varepsilon_k}}{1 + \lambda e^{-\beta \varepsilon_k}}$ است. در این صورت λ برای ذرات

کوانتمی کدام است؟

(۱) برای بوزون‌ها $0 \leq \lambda < 1$

(۲) برای فرمیون‌ها $0 < \lambda \leq 1$

(۳) برای بوزون‌ها $1 \leq \lambda < \infty$

(۴) برای فرمیون‌ها $1 \leq \lambda < \infty$

-۲۲- تابع پارش چرخشی برای یک مولکول غیرخطی با دما چه رابطه‌ای دارد؟

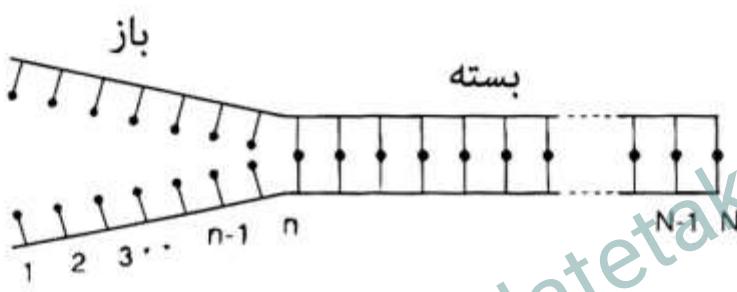
$$T^{\frac{1}{4}} \quad (1)$$

$$T^{\frac{3}{4}} \quad (2)$$

$$T^{-\frac{1}{4}} \quad (3)$$

$$T^{-\frac{3}{4}} \quad (4)$$

-۲۳- یک رشته DNA را می‌توان مانند یک زیپ درنظر گرفت که N جفت باز را بهم متصل می‌کند. هر یک ارتباطی بین جفت بازها در حالت بسته، انرژی صفر و در حالت باز، انرژی E دارد. فرض کنید که این زیپ فقط از یک طرف باز می‌شود؛ بنابراین، پل n ام موقعی باز می‌شود که پل‌های ۱ تا n-۱ باز شده باشند. درصورتی که تعداد زیادی جفت باز در دمای T موجود باشد، تابع پارش یک رشته DNA کدام است؟



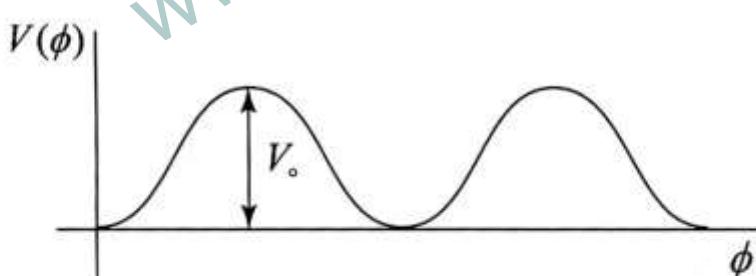
$$\sum_{n=0}^{\infty} e^{\frac{nE}{kT}} \quad (1)$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} e^{\frac{nE}{kT}} \quad (2)$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{nE}{kT}} \quad (3)$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{nE}{kT}} \quad (4)$$

-۲۴- برای مولکول اتان درصورتی که $V_0 \gg kT$ باشد، مولکول چه رفتاری خواهد داشت؟



(۱) در ته چاه به دام می‌افتد و مانند یک نوسانگر هماهنگ بررسی می‌شود.

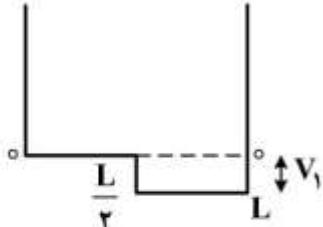
(۲) در ته چاه به دام نمی‌افتد و مانند یک نوسانگر هماهنگ بررسی می‌شود.

(۳) چرخش درونی آن آزاد است و مانند یک چرخنده صلب بررسی می‌شود.

(۴) چرخش درونی آن آزاد نیست و مانند یک چرخنده صلب بررسی می‌شود.

- ۲۵ ثابت تعادل واکنش $2\text{Na}_2\rightleftharpoons\text{Na}_2$ در فاز گازی چه ارتباطی با ممان اینرسی (I) ذرات شرکت‌کننده در واکنش دارد؟
- I⁻¹ (۱)
I⁻² (۲)
I⁻³ (۳)
I⁻⁴ (۴)
- ۲۶ در کدام مولکول سهم ترازهای ارتعاشی برانگیخته درتابع پارش ارتعاشی، بیشتر است؟
- N₂ (۱)
Cl₂ (۲)
CO (۳)
- ۲۷ در یک هنگرد کانونی بزرگ در دمای بالا PV، برابر کدام است؟
- λkTq (۱)
 λkT (۲)
 λTq (۳)
kTq (۴)
- ۲۸ بافت و خیز در کدام خاصیت متناسب است؟
- (۱) فشار
(۲) تعداد ذرات
(۳) انرژی درونی
(۴) آنتالپی
- ۲۹ کدام هنگرد برای مطالعه تبدیل فازها، مناسب‌تر است؟
- (۱) کانونی
(۲) کانونی بزرگ
(۳) کانونی کوچک
(۴) همدما - همفشار
- ۳۰ در هنگرد کانونی بزرگ، PV با کدام گزینه، متناسب است؟
- $\frac{1}{\ln \Xi}$ (۱)
 $\ln \Xi$ (۲)
 $\frac{1}{\Xi}$ (۳)
 Ξ (۴)
- ۳۱ چندگانگی (یا چندحالته) برای ذره در یک جعبه مکعبی با انرژی E = $27\frac{h^2}{\lambda m a^3}$ کدام است؟
- ۲ (۱)
۴ (۲)
۶ (۳)
۸ (۴)
- ۳۲ مقدار چشم‌داشتی (مورد انتظار) برای موقعیت در یک نوسانگر هماهنگ یک‌بعدی به ازای عدد کوانتمومی n کدام است؟
- (۱) برای n زوج صفر و برای n فرد صفر است.
(۲) برای n زوج غیرصفر و برای n فرد صفر است.
(۳) برای n زوج صفر و برای n فرد غیرصفر است.
(۴) برای n زوج غیرصفر و برای n فرد غیرصفر است.

۳۳- ذره‌ای در چاه پتانسیل مربعی و یک بعدی به صورت زیر مختل شده است. انرژی اختلال مرتبه اول برای این ذره در حالت پایه، کدام است؟



- (۱) $-\frac{V_1}{2}$
- (۲) $2V_1$
- (۳) $\frac{V_1}{2}$
- (۴) $-2V_1$

۳۴- کدام یک در مورد روش تغییر، درست است؟

- (۱) فقط برای آتم هیدروژن کاربرد دارد.
- (۲) فقط در مواردی به کار برد می‌شود که بتوانتابع موج را به صورت پارامتری حدس زد و برای آتم هیدروژن هم کاربرد دارد.
- (۳) فقط در مواردی به کار برد می‌شود که هامیلتونی (عملگر انرژی) سیستم کاملاً مشخص باشد.
- (۴) فقط در مواردی کاربرد دارد که بتوانتابع موج را به صورت پارامتری حدس زد و هامیلتونی سیستم کاملاً مشخص باشد.

۳۵- فرض کنید یک محاسبه RHF (هارتی) - فاک محدودشده) با مجموعه بایه STO-3G روی مولکول آب انجام شده است. در صورتی که معادله روتاتان در نمایش ماتریسی به صورت $FC = SC$ باشد، تمام ماتریس‌های استفاده شده در معادله روتاتان برای آب دارای کدام بعد است؟

- (۱) ۵
- (۲) ۶
- (۳) ۷
- (۴) ۸

۳۶- در صورتی که \hat{S}_x و \hat{S}_y مؤلفه‌های x و y عملگر اندازه حرکت زاویه‌ای اسپینی الکترون باشند، $\hbar^2 \alpha$ معادل کدام یک است؟ (تابع موج اسپینی است.)

- (۱) $\hbar^2 \alpha$
- (۲) $\frac{1}{2} \hbar^2 \alpha$
- (۳) $\frac{1}{2} \hbar^2 \alpha - \frac{i}{2} \hbar^2 \alpha$
- (۴) $\frac{1}{2} \hbar^2 \alpha + \frac{i}{2} \hbar^2 \alpha$

- ۳۷- اگر دو اتم Li به جای الکترون با اسپین $\frac{1}{2}$ ، ذراتی با اسپین ۱ داشته باشند، در این صورت آرایش الکترونی حالت

پایه Li کدام است؟

۱) $1s^3$

۲) $1s^2 2p^1$

۳) $1s^3 2s^1$

۴) $1s^1 2s^1 2p^1$

- ۳۸- طبق قواعد کاندون-اسلیتر انرژی Be کدام است؟

$$E_{1s} + E_{2s} + J_{1s1s} + J_{2s2s} + 4J_{1s2s} - 2K_{1s2s} \quad (1)$$

$$2E_{1s} + 2E_{2s} + J_{1s1s} + J_{2s2s} + 2J_{1s2s} - K_{1s2s} \quad (2)$$

$$2E_{1s} + 2E_{2s} + J_{1s1s} + J_{2s2s} + 4J_{1s2s} - 2K_{1s2s} \quad (3)$$

$$2E_{1s} + 2E_{2s} + 2J_{1s1s} + 2J_{2s2s} + 4J_{1s2s} - 2K_{1s2s} \quad (4)$$

- ۳۹- اگر دو ذره در یک سیستم کوانتومی تعویض شوند، تابع ψ_1 به ψ_2 تغییر می‌کند. در این صورت کدام مورد

نادرست است؟

۱) اگر $\psi_1 = \psi_2$ باشد آنگاه ψ_1 تابع موج قابل قبول برای سیستم چندذرای بوزونی است.

۲) اگر $\psi_1 = \psi_2$ باشد آنگاه ψ_1 تابع موج قابل قبول برای سیستم چندذرای الکترونی است.

۳) اگر $-\psi_1 = \psi_2$ باشد آنگاه ψ_1 تابع موج قابل قبول برای سیستم چندذرای فرمیونی است.

۴) اگر $-\psi_1 = \psi_2$ باشد آنگاه ψ_1 تابع موج قابل قبول برای سیستم چندذرای الکترونی است.

- ۴۰- در صورتی که عدد کوانتومی ارتعاشی دو واحد تغییر کند، چه نواری در طیف ارتعاشی مشاهده می‌شود؟

- ۱) داغ ۲) اصلی ۳) ترکیبی ۴) اورتون

- ۴۱- رابطه $\langle f_m | \hat{A} | f_n \rangle = \langle f_n | \hat{A} | f_m \rangle^*$ در کدام شرایط صادق است؟

۱) برای هر عملگر و هر تابعی صادق است.

۲) هر میتی و f_m و f_n ویژه‌تابع‌های آن باشند.

۳) هر میتی و f_m و f_n دو تابع خوش‌رفتار باشند.

۴) برای هر عملگری که f_n و f_m ویژه‌تابع آن باشند، صادق است.

- ۴۲- فرض کنید که λ در قضیه هلمن- فاینمن همان ثابت نیرو (k) نوسانگر هماهنگ یک بعدی باشد. برای چنین

$$\text{نوسانگری مطابق با قضیه هلمن- فاینمن عبارت: } \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^* \psi_n dx \text{ با کدام مورد, برابر است؟}$$

$n \frac{hv}{k}$ (۱)

$\left(n + \frac{1}{2}\right) \frac{hv}{k}$ (۲)

$\frac{1}{2} \frac{hv}{k}$ (۳)

$\left(n + \frac{1}{2}\right) hv$ (۴)

- ۴۳- ذره‌ای درون یک جعبه یک بعدی به طول l قرار دارد و انرژی آن $\frac{2h^2}{ml^2}$ است. اگر این ذره درون جعبه‌ای به طول

۲/ قرار گیرد و انرژی آن تغییر نکند، تابع موج آن کدام است؟

$\left(\frac{1}{l}\right)^{1/2} \sin\left(\frac{4\pi x}{l}\right)$ (۱)

$\left(\frac{1}{l}\right)^{1/2} \sin\left(\frac{\pi x}{2l}\right)$ (۲)

$\left(\frac{2}{l}\right)^{1/2} \sin\left(\frac{4\pi x}{l}\right)$ (۳)

$\left(\frac{1}{l}\right)^{1/2} \sin\left(\frac{\pi x}{2l}\right)$ (۴)

- ۴۴- آرایش الکترونی $\sigma\pi$ دارای کدام جملات طیفی است؟

${}^1\Pi, {}^3\Sigma$ (۱)

${}^3\Pi, {}^1\Sigma$ (۲)

${}^3\Sigma, {}^1\Sigma$ (۳)

${}^3\Pi, {}^1\Pi$ (۴)

۴۵- برای حالت پایه He_2 دترمینان اسلیتیر کدام است؟

$$|\ \overline{\text{s}_a} \quad \overline{\text{s}_a} \quad \overline{\text{s}_b} \quad \overline{\text{s}_b} | \ (\text{۱})$$

$$|\ \overline{\text{s}_a} \quad \text{s}_a \quad \text{s}_b \quad \overline{\text{s}_b} | \ (\text{۲})$$

$$|\ \text{s}_a \quad \overline{\text{s}_a} \quad \text{s}_b \quad \overline{\text{s}_b} | \ (\text{۳})$$

$$|\ \overline{\text{s}_a} \quad \text{s}_a \quad \overline{\text{s}_b} \quad \text{s}_b | \ (\text{۴})$$