

250E

کد کنترل

250

E

دفترچه شماره (۱)
صبح جمعه
۹۸/۱۲/۹



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

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

آزمون ورودی دوره دکتری (نیمه‌تمکن) - سال ۱۳۹۹

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 کوانتومی	۴۵	۱	۴۵

این آزمون نمره منفی دارد.

استفاده از ماشین حساب مجاز نیست.

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

۱۳۹۹

* 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 سوالات، نوع و کد کنترل درج شده بر روی دفترچه سوالات و پائین پاسخ‌نامه‌ام را تأیید می‌نمایم.

امضا:

-۱ معادله بنیادی ترمودینامیکی گیبس برای یک گاز ایده‌آل $U_m = V_m e^{-R/CV,m} e^{(S_m/CV,m)}$ است. کدام

موردنیتیجه‌ای از این معادله نیست؟

$$\left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_T = 0 \quad (۱) \quad pV = nRT \quad (۲) \quad \left(\frac{\partial U}{\partial p}\right)_T = 0 \quad (۳) \quad \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p = 0 \quad (۴)$$

-۲ در مورد $|w_{irrev}|$ و $|w_{rev}|$ در یک فرایند هم‌دماء، کدام یک نادرست است؟

$$|w_{rev}| = \Delta A = w_{max} \quad (۱) \quad |w_{rev}| = \Delta A \quad (۲)$$

$$|w_{irrev}| > |w_{rev}| \quad (۳) \quad |w_{rev}| \geq |w_{irrev}| \quad (۴)$$

-۳ وقتی $T \rightarrow 0^\circ$ ، چه تعداد از روابط زیر درست است؟

$$\lim_{T \rightarrow 0} C_p = 0$$

$$\lim_{T \rightarrow 0} C_V = 0$$

$$\lim_{T \rightarrow 0} \left(\frac{\partial S}{\partial p}\right)_T = 0$$

$$\lim_{T \rightarrow 0} C_p = \frac{TV\alpha^T}{\beta}$$

$$\lim_{T \rightarrow 0} \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V = 0$$

$$\lim_{T \rightarrow 0} \left(\frac{\partial \Delta G}{\partial T}\right)_p = \Delta S$$

۵ (۴)

۴ (۳)

۳ (۲)

۲ (۱)

-۴ در یک سیستم بسته که تحت یک فرایند آدیباتیک فرار گرفته باشد، کدام گزینه درباره ΔS_{univ} فرایند خودبه‌خودی درست است؟

(۱) کوچکتر از صفر

(۲) بزرگتر از صفر

برای گازی، $V\alpha T^k$ که k عددی صحیح است. در آزمایش ژول - تامسون برای چه مقادیری از k گاز سردشونده و برای چه مقادیری از آن، گرمشونده است؟

(۱) برای $k = 1$ گاز گرمشونده و برای $k < 1$ گاز سردشونده است.

(۲) برای $k > 1$ گاز سردشونده و برای $k < 1$ گاز گرمشونده است.

(۳) برای $k = 1$ گاز سردشونده و برای $k > 1$ گاز گرمشونده است.

(۴) برای $k > 1$ گاز گرمشونده و برای $k < 1$ گاز سردشونده است.

-۶ کدام گزینه صحیح است؟

$$\beta \equiv -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial P} \right)_T \quad \text{ضریب تراکم پذیری ایزنتروپیک،} \quad \kappa_S \equiv -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial P} \right)_S \quad \text{(هم دما)}$$

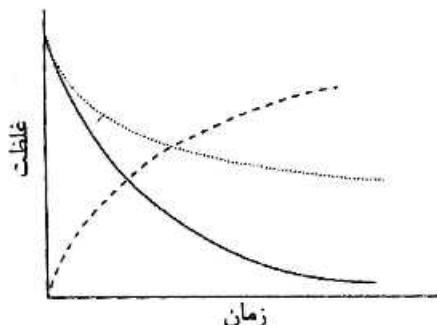
$$\frac{\kappa_S}{\beta} = \frac{C_p}{C_V} \quad (۱)$$

$$\frac{\kappa_S}{\beta} = \frac{C_V}{C_p} \quad (۲)$$

$$\frac{\kappa_S}{\beta} = \frac{1}{C_p C_V} \quad (۳)$$

$$\frac{\kappa_S}{\beta} = C_p C_V \quad (۴)$$

-۷ واکنش $O_2(g) + 2H_2(g) \rightarrow 2H_2O(g)$ را در نظر بگیرید. کدام نمودار غلظت هیدروژن را بر حسب زمان



بهتر نشان می‌دهد؟

(۱) نمودار توپر

(۲) نمودار خط‌چین

(۳) نمودار نقطه‌چین

(۴) یا نمودار خط‌چین یا نمودار توپر

-۸ برای واکنش $U(s) + \frac{3}{2}H_2(g) \rightarrow UH_2(s)$ فشار تعادلی H_2 در محدوده دمایی $K^* = 45^\circ K$ تا $71^\circ K$ روی عبارت

$$\ln p = a - \frac{b}{T} - c \ln T \quad \text{منطبق می‌شود. آنتالپی استاندارد تشکیل } UH_2(s) \text{ کدام است؟ (a, b, c ثابت هستند.)}$$

$$\frac{3}{2}(cRT + b) \quad (۱)$$

$$\frac{3}{2}(c - bRT) \quad (۲)$$

$$\frac{3}{2}(cRT - b) \quad (۳)$$

$$\frac{3}{2}(c + bRT) \quad (۴)$$

-۹ برای یک محلول منظم کدام یک از گزینه‌های زیر درست است؟

$$S^{ex} \neq 0, H^{ex} = 0 \quad (۱)$$

$$S^{ex} = 0, H^{ex} = 0 \quad (۲)$$

$$S^{ex} = 0, H^{ex} \neq 0 \quad (۳)$$

$$S^{ex} \neq 0, H^{ex} \neq 0 \quad (۴)$$

-۱۰ در صورتی که K_p ثابت تعادل (بر حسب فشار) با فشار افزایش یابد، K_f (ثابت تعادل بر حسب فوگاسیته) چگونه تغییر می‌کند؟

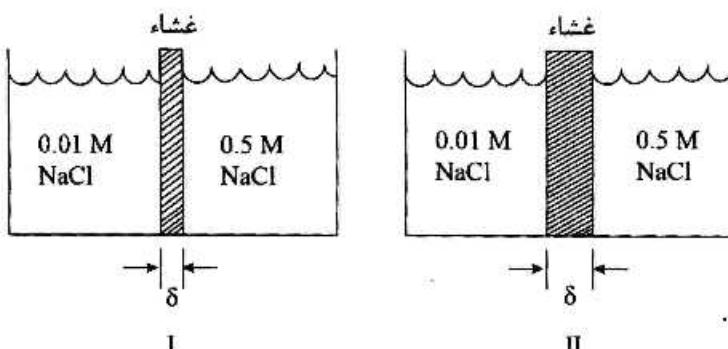
(۱) کاهش می‌یابد.

(۲) افزایش می‌یابد.

(۳) ثابت می‌ماند.

(۴) در فشارهای کم کاهش و در فشارهای بالا افزایش می‌یابد.

-۱۱ - دو محلول از NaCl به صورت زیر با یک غشاء از هم جدا شده‌اند. کدام گزینه درباره شار و ضریب نفوذ درست است؟

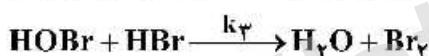
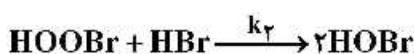
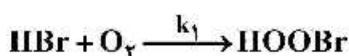


- (۱) هم شار و هم ضریب نفوذ I از II بیشتر است.
- (۲) شار I از II بیشتر و ضریب نفوذ I و II برابر است.
- (۳) هم شار و هم ضریب نفوذ I از II کمتر است.
- (۴) شار I از II کمتر و ضریب نفوذ I و II برابر است.

-۱۲ - مشتق $\left(\frac{\partial H}{\partial T}\right)_V$ چه رابطه‌ای با α (ضریب انبساط) و β (ضریب تراکم پذیری هم‌دمای) دارد؟

$$\beta \quad \frac{\beta}{\alpha} \quad \frac{\alpha}{\beta} \quad \alpha$$

-۱۳ - برای واکنش اکسید شدن HBr با مکانیسم زیر، مرتبه نسبت به HBr کدام است؟



$$(\text{۱}) \text{ صفر} \quad (\text{۲}) \text{ یک} \quad (\text{۳}) \text{ دو} \quad (\text{۴}) \text{ سه}$$

-۱۴ - در واکنش $A + B \rightarrow C + D$ ، مواد A و B در یک طول موج خاص مطابق قانون بیر چذب دارند. اما C و D جذب ندارند. فرض کنید $[A]_0 > [B]_0$ ، مقدار $\frac{[A]_0}{[A]}$ کدام است؟ (در چهار گزینه A نشان‌دهنده جذب است).

$$\frac{A_c - A_\infty}{A - A_\infty} \quad \frac{A_\infty - A}{A_\infty - A_0} \\ \frac{A - A_\infty}{A_c - A_\infty} \quad \frac{A_\infty - A_0}{A_\infty - A}$$

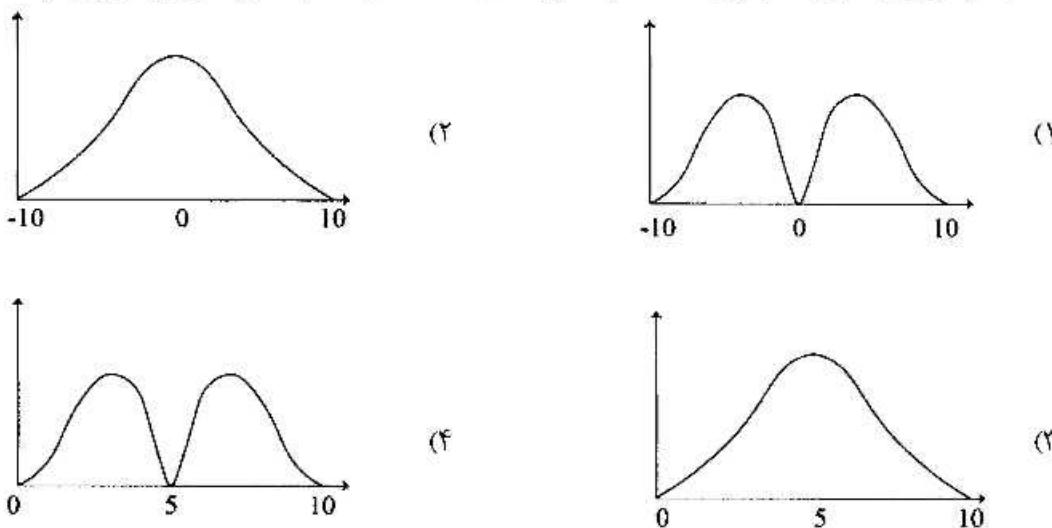
-۱۵ - فرایند ژول-تماسون چه نوع فرایندی است؟

$$(\text{۱}) \text{ آدیباتیک} \quad (\text{۲}) \text{ ایزونتروپیک} \quad (\text{۳}) \text{ دیاترمیک} \quad (\text{۴}) \text{ ایزوفالیک}$$

-۱۶ - برای یک سیستم با دو تراز، به‌طوری‌که حالت پایین‌تر در انرژی صفر و حالت بالا‌تر در انرژی ε با چند حالاتی دوگانه باشد، $e^{-\beta \epsilon}$ کدام است؟ (تابع پارش یا تابع تقسیم است).

$$\frac{q+1}{2} \quad q+2 \quad q-1 \quad \frac{q-1}{2}$$

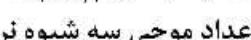
- ۱۷- کدام نمودار برای ظرفیت گرمایی (C_V / Nk) یک سیستم با توازن انرژی درست است؟



- ۱۸- مجموع ضرایب بخش نمایی تابع پارش چرخشی برای مولکول CH_4 در تراز دوم چرخشی کدام است؟

- (۱) ۵ (۲) ۶ (۳) ۸ (۴) ۹

- ۱۹- عدد تقارن در تابع پارش چرخشی کدام دو مولکول با هم برابر است؟



- ۲۰- اعداد موجی سه شیوه نرمال ارتعاشی H_2O عبارتند از:

$$\nu_1 = 3656/\gamma \text{ cm}^{-1} \quad \nu_2 = 1594/\gamma \text{ cm}^{-1} \quad \nu_3 = 3255/\gamma \text{ cm}^{-1}$$

سهم کدام شیوه در تابع پارش ارتعاشی مولکول آب بیشتر است؟

- (۱) اول (۲) دوم (۳) سوم

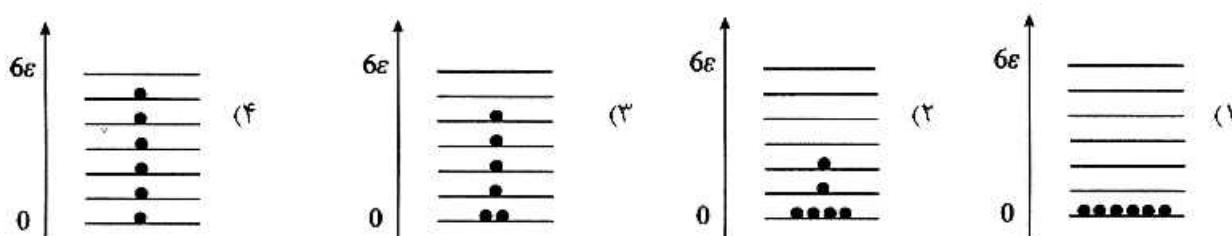
(۴) سهم هر سه شیوه برابر است.

- ۲۱- در مقایسه سهم تابع پارش الکترونی Na و He کدام جمله درست است؟

- (۱) از He کمتر است. (۲) از Na بیشتر است.

(۳) Na کمتر یا مساوی با He است. (۴) Na بزرگتر یا مساوی با He است.

- ۲۲- برای سیستمی با تعداد ذرات و انرژی مشخص، کدام توزیع به تعادل نزدیک‌تر است؟



- ۲۳- چگالی حالت‌ها برای یک ذره در یک جعبه سه‌بعدی چه ارتباطی با انرژی آن دارد؟

- (۱) $\epsilon^{-7/2}$ (۲) $\epsilon^{1/2}$ (۳) ϵ^{-1}

- ۲۴- در کدام هنگرد (مجموعه آماری) محدودیت‌های کمتری روی توزیع ذرات وجود دارد؟

- (۱) کانونی بزرگ (۲) کانونی کوچک (۳) همدما- همفشار (۴) همدما

- ۲۵- مطابق اصول مکانیک آماری تغییر در انرژی حالت‌های سیستمی که جمعیت روی آن حالت‌ها ثابت باشد، چه مفهومی دارد؟
- (۱) آنتروپی
 (۲) گرما
 (۳) کار
 (۴) انرژی درونی
- ۲۶- در هنگردد (مجموعه آماری) کانونی، با افزایش تعداد ذرات خطای نسبی در انرژی چه تغییری می‌کند؟
- (۱) کاهش می‌یابد.
 (۲) افزایش می‌یابد.
 (۳) تغییر نمی‌کند.
 (۴) به صورت نمایی تغییر می‌کند.
- ۲۷- حالت برانگیخته ارتعاشی کدام مولکول در دمای $K = 1000$ سهم بیشتری در تابع پارش ارتعاشی دارد؟
- (۱) CO
 (۲) N_2
 (۳) I_2
 (۴) H_2
- ۲۸- چه تعداد از موارد زیر باعث تغییر در ثابت تعادل واکنش $I_2(g) \rightleftharpoons 2I(g)$ می‌شود؟
- (۱) ۱ (۲)
 (۲) ۲ (۳)
 (۳) ۳ (۴)
- «میدان مغناطیسی - دما - فشار - غلظت - کاتالیزگر»
- ۲۹- در یک هنگردد NVT، ظرفیت گرمایی در حجم ثابت (C_V) متناسب با کدام واریانس است؟
- (۱) σ_E^2 (انرژی)
 (۲) σ_{II}^2 (انتالپی)
 (۳) σ_A^2 (انرژی آزاد هلمهولتز)
 (۴) σ_p^2 (فشار)
- ۳۰- از نظر ترمودینامیکی، $\lambda = e^{\mu/kT}$ مریوط به کدام وضعیت نیست؟
- (۱) $\frac{N}{V}$ برای دمای ثابت
 (۲) $T \rightarrow \infty$ برای دانسیته ثابت
 (۳) $\frac{N}{V}$ برای دمای ثابت و $\infty \rightarrow T$ برای دانسیته ثابت
 (۴) $\frac{N}{V}$ برای $\infty \rightarrow T$ و $\infty \rightarrow T$ برای دانسیته ثابت
- ۳۱- برای ذره‌ای به جرم m در بالاترین حالت انرژی خود، در یک جعبه یک‌بعدی از $x = a$ تا $x = -a$ ، کدام عبارت درست است؟
- (۱) انرژی $\frac{h^2}{32ma^2}$ است.
 (۲) انرژی $\frac{h^2}{\lambda ma^2}$ است.
 (۳) تابع موج $N \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)$ است.
 (۴) تابع موج در $x = 0$ یک گره دارد.
- ۳۲- برای یک مولکول مربع‌شونده در یک حالت ارتعاشی با عدد کوانتمی $\nu = 7$ کدام یک از خواص زیر به خوبی تعریف شده و قابل محاسبه است؟
- (۱) انرژی جنبشی
 (۲) انرژی پتانسیل
 (۳) انرژی ارتعاشی کل
 (۴) انحراف از طول بیوند تعادلی

۳۳- برای یک ذره در جعبه یک‌بعدی با تابع حالت $\Psi(x,t) = \left(\frac{2}{a}\right)^{1/2} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) e^{-iEt/\hbar}$ چند عبارت از عبارت‌های زیر درست است؟

انرژی جنبشی ذره با زمان تغییر می‌کند.

مقدار میانگین موقعیت ذره با زمان تغییر می‌کند.

مقدار میانگین اندازه حرکت با زمان تغییر می‌کند.

(۱) صفر (۲) 1×10^{-24} (۳) 2×10^{-24} (۴) 3×10^{-24}

۳۴- در یک آزمایش فوتوالکترون، سریع ترین الکترون خارج شده دارای تابعی موجی است که برهمنهشی از ویژه توابع اندازه حرکت است:

$$\Psi(x) = \frac{1}{3} N_1 e^{\frac{i p_1 x}{\hbar}} + \frac{1}{3} N_2 e^{\frac{i p_2 x}{\hbar}} + \sqrt{\frac{4}{3}} N_3 e^{\frac{i p_3 x}{\hbar}}$$

که بر حسب $p_3 = 2 \times 10^{-24}$ kg m/s و $p_2 = 3 \times 10^{-24}$ kg m/s و $p_1 = 1 \times 10^{-24}$ kg m/s همه میانگین اندازه حرکت خطی این

الکترون در حالت $\Psi(x)$ بر حسب $\frac{m}{s}$ کدام است؟

(۱) 1×10^{-24} (۲) 2×10^{-24} (۳) 3×10^{-24} (۴) 4×10^{-24}

۳۵- تابع آزمایشی نرمال $\phi = \left[\frac{\gamma \beta}{4\pi \epsilon_0} \right]^{1/2} \gamma^2 e^{-\beta r}$ برای تعیین انرژی حالت پایه اتم هیدروژن استفاده شده است

(β یک پارامتر تنظیم‌بازیر است). مشخص شده که $\int \phi \hat{H} \phi d\tau = \frac{\beta^2}{10} - \frac{\beta}{3}$. بهترین مقدار انرژی این تابع آزمایشی کدام است؟

$$-\frac{10}{18}$$

$$-\frac{5}{18}$$

$$-\frac{18}{10}$$

$$-\frac{18}{5}$$

۳۶- یک ذره در یک جعبه یک‌بعدی با تابع موج $\psi_n^{(0)} = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$ قرار می‌گیرد.

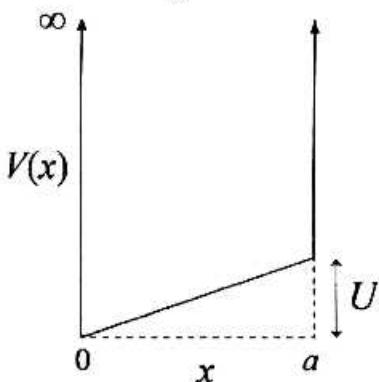
تصحیح مرتبه اول انرژی آن کدام است؟

$$\frac{2}{U}$$

$$\frac{a}{U}$$

$$\frac{U}{2}$$

$$\frac{U}{a}$$



- ۳۷ - برای حالت ایستاده $n=2$ یک ذره در یک جعبه یک‌بعدی، کدام جمله درست است؟

۱) احتمال پیدا شدن در همه جای جعبه یکسان است.

۲) احتمال پیدا شدن ذره در ربع سمت چپ جعبه با احتمال پیدا شدن در ربع سمت راست جعبه برابر است.

۳) احتمال پیدا شدن ذره در ربع سمت چپ جعبه از احتمال پیدا شدن در ربع سمت راست جعبه کمتر است.

۴) احتمال پیدا شدن ذره در ربع سمت چپ جعبه از احتمال پیدا شدن در ربع سمت راست جعبه بیشتر است.

- ۳۸ - برای سیستمی با $l=2$ ، کدام زاویه (بر حسب $\cos\theta$) بین محور z و بردار اندازه حرکت زاویه‌ای تشکیل می‌شود؟

$$\cos\theta = \frac{1}{2} \quad (2)$$

$$\cos\theta = \frac{\sqrt{2}}{2} \quad (4)$$

$$\cos\theta = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad (1)$$

$$\cos\theta = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{2}} \quad (3)$$

- ۳۹ - در انتگرال محاسبه $\langle r \rangle$ برای یک اتم هیدروژن مانند در حالت ایستاده‌ای با اعداد کوانتومی m_l و m_s چه توانی از وارد می‌شود؟

۱) ۴

۲) ۳

۳) ۲

۴) ۱

- ۴۰ - اتم هلیوم در حالت پایه چند تابع موج اسپینی متقارن و نامتقارن دارد؟

۱) یک متقارن، دو نامتقارن

۲) دو متقارن، سه نامتقارن

۳) سه متقارن، یک نامتقارن

۴) چهار متقارن، صفر نامتقارن

- ۴۱ - کدام یک ماتریس عملگر اسپین \hat{S}_x است؟

$$\frac{1}{2}h \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad (2)$$

$$\frac{1}{2}\hbar \begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix} \quad (4)$$

$$\frac{1}{2}h \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (1)$$

$$\frac{1}{2}\hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (3)$$

- ۴۲ - انرژی تجربی حالت پایه سیستم از کدام رابطه محاسبه می‌شود؟ E انرژی لازم برای خارج شدن الکترون از اوربیتال مربوطه است).

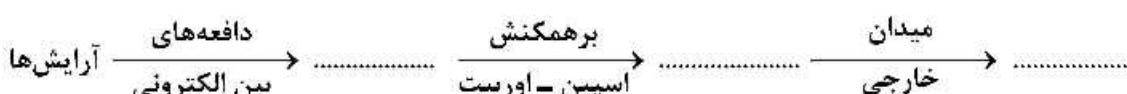
$$2E_{1s} - E_{2s} \quad (2)$$

۴) هیچ کدام

$$E_{2s} + 2E_{1s} \quad (1)$$

$$E_{2s} - 2E_{1s} \quad (3)$$

- ۴۳ - کدام گزینه نمودار را کامل می‌کند؟



۲) جمله‌های طیفی، ترازها، حالتها

۱) حالتها، ترازها، جمله‌های طیفی

۴) جمله‌های طیفی، حالتها، ترازها

۳) ترازها، حالتها، جمله‌های طیفی

- ۴۴ - برای چه حالتی از نوسانگر هماهنگ یک‌بعدی، $\langle V \rangle = \langle T \rangle$ است؟

۴) پایه

۳) سوم

۲) دوم

۱) اول

- ۴۵ - آرایش الکترونی حالت برانگیخته اتمی به صورت $1s^2 2s^2 2p^1 3p^1$ است. با لحاظ کردن تقریب ذره مستقل، انرژی این حالت بر حسب واحدهای اتمی کدام است؟

۴) -۴۹/۵

۳) -۵۰/۵

۲) -۵۱/۵

۱) -۵۲