

کد گفتول

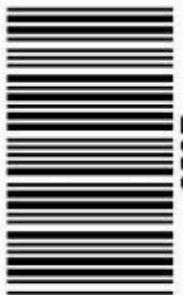
250

E

نام:

نام خانوادگی:

محل امضا:



صبح جمعه
۱۳۹۶/۱۲/۴

دفترچه شماره (۱)



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

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

آزمون ورودی دوره دکتری (نیمه‌تمکن‌گز) - سال ۱۳۹۷

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 نقره منفی دارد.

حق چاپ تکیه و انتشار سوالات به هر روش (الکترونیک و...) بس از برگزاری آزمون، برای نفعی انخساف خلیف و حقوق نهاد باعجز این سازمان مجاز می‌باشد و با مخالفین برگزاری غیر از ریالت می‌شود.

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

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

امضا:

-۱ در واکنش کاهش منیزیم اکسید، در صورتی که فشار اولیه 300 میلیمتر جیوه باشد، 50% واکنش در 242 ثانیه انجام می‌شود و در صورتی که فشار اولیه 320 میلیمتر جیوه باشد، 200 ثانیه زمان برای انجام 50% واکنش، لازم است. درجه واکنش، کدام است؟

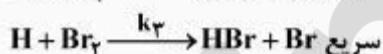
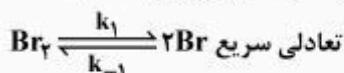
- (۱) 0°
- (۲) 12°
- (۳) 20°
- (۴) 30°

-۲ چنانچه محلول اشباع آب - نمک در تعادل ترمودینامیکی باشد، آنگاه:

- (۱) پتانسیل شیمیایی اجزاء در تمام فازها با هم برابر است.
- (۲) مجموع پتانسیل شیمیایی اجزاء در فاز جامد با مجموع آنها در فاز محلول با هم برابر است.
- (۳) پتانسیل شیمیایی آب در فازهای جامد و محلول با هم برابر بوده ولی پتانسیل شیمیایی نمک در فاز جامد بزرگتر از نمک در محلول است.
- (۴) پتانسیل شیمیایی نمک در فازهای جامد و محلول با هم برابر بوده ولی پتانسیل شیمیایی آب در فاز جامد بزرگتر از آب در محلول است.

-۳ در تبدیل فاز مرتبه اول، ΔH و ΔC_p به ترتیب چگونه هستند؟

- (۱) محدود و نامحدود
 - (۲) محدود و محدود
 - (۳) نامحدود و محدود
 - (۴) نامحدود و نامحدود
- ۴ هرگاه واکنش $H_\gamma + Br_\gamma \rightarrow 2HBr$ از راه مکانیسم زیر انجام شود، عبارت سرعت واکنش برای آن، کدام است؟



$$k_{-1} \left(\frac{k_1}{k_{-1}} \right) [H_\gamma]^{\frac{1}{2}} [Br_\gamma]^{\frac{1}{2}} \quad (1)$$

$$k_1 \left(\frac{k_1}{k_{-1}} \right) [H_\gamma]^{\frac{1}{2}} [Br_\gamma]^{\frac{1}{2}} \quad (2)$$

$$k_1 \left(\frac{k_1}{k_{-1}} \right) [H_\gamma] [Br_\gamma]^{\frac{1}{2}} \quad (3)$$

$$k_1 \left(\frac{k_1}{k_{-1}} \right)^{\frac{1}{2}} [H_\gamma] [Br_\gamma]^{\frac{1}{2}} \quad (4)$$

-۵ ثابت سرعت واکنشی از رابطه $k = AT^\gamma \exp(-\frac{E'}{RT})$ پیروی می‌کند. رابطه انرژی فعال‌سازی آرنیوس با 'E' کدام است؟

$$E' = E_a + 2RT \quad (1)$$

$$E' = E_a - 2RT \quad (2)$$

$$E' = E_a + \frac{RT}{2} \quad (3)$$

$$E' = E_a - \frac{RT}{2} \quad (4)$$

-۶ براساس مکانیسم لیندمان $A \xrightleftharpoons[k'_a]{k_a} A^* \xrightarrow{k_b} P$ ، کدامیک از روابط زیر در فشارهای بالا، صحیح است؟

$$\frac{1}{k} = \frac{k'_a}{k_a k_b} \quad (1)$$

$$\frac{1}{k} = \frac{k_b}{k_a k'_a} \quad (2)$$

$$\frac{1}{k} = \frac{k_a}{k'_a k_b} \quad (3)$$

$$\frac{1}{k} = \frac{k_a k_b}{k'_a} \quad (4)$$

-۷ اگر تراکم پذیری هم‌دما (β) را در گستره فشارهای متوسط، ثابت در نظر بگیریم، کدام رابطه درست است؟

$$\frac{V_f}{V_i} = \frac{P_i}{P_f} \quad (1)$$

$$\frac{V_f}{V_i} = \frac{P_f}{P_i} \quad (2)$$

$$\frac{V_f}{V_i} = e^{-\beta(P_f - P_i)} \quad (3)$$

$$\frac{V_f}{V_i} = e^{\beta(P_f - P_i)} \quad (4)$$

-۸ معادله کلایپرونون $\frac{dP}{dT} = \frac{\Delta S}{\Delta V}$ در چه شرایطی صادق است؟

(۱) برای یک سیستم بسته در غیاب کار انساطی

(۲) برای هر نوع سیستم بسته

(۳) برای یک سیستم بسته در غیاب هر نوع کار غیر انساطی

(۴) برای هر نوع سیستم

-۹ فشار بخار جزء ۱ محلول مایع دوتایی برحسب تور از رابطه $p_1 = 100x_1(1+2x_1^3)$ به دست می‌آید که x_1 و x_2 به ترتیب کسرهای مولی جزء ۱ و ۲ هستند. ثابت هنری جزء ۱ برحسب تور، کدام است؟

۱۰۰ (۱)

۳۰۰ (۲)

۴۰۰ (۳)

۵۰۰ (۴)

- ۱۰ تغییرات آنتروپی سیستم ΔS_{sys} ، محیط اطراف ΔS_{surr} و کل ΔS_t در یک فرایند انبساط آدیاباتیک غیربرگشت‌پذیر گاز ایده‌آل چقدر است؟

$$\Delta S_t = 0, \Delta S_{surr} = 0, \Delta S_{sys} = 0 \quad (1)$$

$$\Delta S_t = \Delta S_{sys}, \Delta S_{surr} = 0, \Delta S_{sys} = C_v \ln \frac{T_f}{T_i} + nR \ln \frac{V_f}{V_i} \quad (2)$$

$$\Delta S_t = 0, \Delta S_{surr} = -\Delta S_{sys}, \Delta S_{sys} = C_v \ln \frac{T_f}{T_i} + nR \ln \frac{V_f}{V_i} \quad (3)$$

$$\Delta S_t = \Delta S_{surr}, \Delta S_{surr} = C_v \ln \frac{T_f}{T_i} + nR \ln \frac{V_f}{V_i}, \Delta S_{sys} = 0 \quad (4)$$

- ۱۱ یک مول آب مایع به‌طور آدیاباتیک متراکم و فشار آن از P_i (atm) به P_f (atm) می‌رسد. کدام است؟

۱) ۲) ۳) ۴)

$$-nV_m \Delta P \quad (2)$$

$$nV_m \Delta P \quad (3)$$

$$\frac{nV_m(P_f - P_i)}{\frac{C_p}{C_v} - 1} \quad (4)$$

- ۱۲ اگر برای گازی خالص: $\bar{C}_p = a + bT^r + \frac{c}{T^r}$ باشد، $\mu = a + bT^r + \frac{c}{T^r}$ ($\frac{J}{mol}$) این گاز کدام است؟ (μ پتانسیل شیمیابی گاز است).

$$-2bT - 6cT^{-r} \quad (1)$$

$$2b + 6cT^{-r} \quad (2)$$

$$2bT + 6T^{-r} \quad (3)$$

$$2bT + 2T^{-r} \quad (4)$$

- ۱۳ یک مول گاز با معادله حالت $PV = RT + \alpha P$ از فشار 1 atm به 10 atm می‌رسد. در صورتی که فرایند هم‌دما باشد، ΔG کدام است؟

$$(RT + \alpha) \ln \frac{1}{10} \quad (1)$$

$$RT \ln 10 - 9\alpha \quad (2)$$

$$(RT + \alpha) \ln 10 \quad (3)$$

$$RT \ln 10 + 9\alpha \quad (4)$$

- ۱۴ کدام عبارت، بیانگر معادله اساسی در ترمودینامیک است؟

$$U = U(S, V, N) \quad (2)$$

$$U = U(S, P, N) \quad (3)$$

$$U = U(T, V, N) \quad (1)$$

$$U = U(T, P, N) \quad (4)$$

- ۱۵- در یک سیستم گازی که نیروی جاذبه بین مولکولی حاکم است، وضعیت ضریب تراکم Z و ضریب ژول - تامسون آن به ترتیب کدام است؟
- (۱) $\mu_{JT} > 0, Z < 1$
 - (۲) $\mu_{JT} < 0, Z < 1$
 - (۳) $\mu_{JT} > 0, Z > 1$
 - (۴) $\mu_{JT} < 0, Z > 1$
- ۱۶- برای واکنش $2\text{Na(g)} \rightleftharpoons \text{Na}_2\text{(g)}$ ثابت تعادل K_p به ترتیب (از راست به چپ) با دما و با توان دوم تابع پارش (تقسیم) $q_{\text{Na}}(\text{Na})$ چه رابطه‌ای دارد؟
- (۱) معکوس، معکوس
 - (۲) مستقیم، معکوس
 - (۳) معکوس، مستقیم
 - (۴) مستقیم، مستقیم
- ۱۷- برای تابع پارش پیچشی مولکول اتان، در چه صورتی از تقریب چرخنده صلب استفاده می‌شود؟ (V° ارتفاع سد انرژی است).
- (۱) وقتی چرخش داخلی آزاد باشد ($kT \geq V^\circ$).
 - (۲) وقتی مولکول در ته چاه قرار گیرد ($kT \leq V^\circ$).
 - (۳) بین دو حد بیان شده در گزینه ۱ و ۲.
 - (۴) وقتی $V^\circ = 0$ باشد.
- ۱۸- برای سیستمی از یک گاز ایده‌آل انتگرال پیکربندی Z_N ، کدام است؟
- (۱) V
 - (۲) V^N
 - (۳) $\frac{1}{V}$
 - (۴) $\frac{1}{V^N}$
- ۱۹- مطابق معادله لیوویل کدام رابطه همواره درست است؟ (۱) تابع دانسیته فضای فاز است.
- (۱) $\frac{\partial f}{\partial t} = 0$
 - (۲) $\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t}$
 - (۳) $\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} = 0$
 - (۴) $\frac{df}{dt} = 0$
- ۲۰- تابع پارش (تقسیم) ارتعاشی برای یک درجه آزادی ارتعاشی در حد دمای بالا با فرکانس آن درجه آزادی ارتعاشی،
- (۱) رابطه ندارد.
 - (۲) رابطه مستقیم دارد.
 - (۳) رابطه معکوس دارد.
 - (۴) رابطه نمایی دارد.

-۲۱- برای کدام یک از عناصر زیر سهم حالت الکترونی برانگیخته در تابع پارش الکترونی، قابل صرفنظر نیست؟

Na (۴)

Cl (۳)

Ar (۲)

H (۱)

-۲۲- در هنگرد μVT مقدار \bar{N} کدام است؟

$$\mu \left(\frac{\partial \ln \Xi}{\partial \lambda} \right)_{V,T} \quad (1)$$

$$\frac{1}{\mu} \left(\frac{\partial \ln \Xi}{\partial \lambda} \right)_{V,T} \quad (2)$$

$$\lambda \left(\frac{\partial \ln \Xi}{\partial \lambda} \right)_{V,T} \quad (3)$$

$$\frac{1}{\lambda} \left(\frac{\partial \ln \Xi}{\partial \lambda} \right)_{V,T} \quad (4)$$

-۲۳- تابع پارش (تقسیم) چرخشی مولکول HF کدام است؟

$$\frac{8\pi^2 kT}{h^3} \quad (1)$$

$$\frac{8\pi^2 kT}{4h^3} \quad (2)$$

$$\frac{8\pi^2 kT}{2h^3} \quad (3)$$

$$\frac{8\pi^2 kT}{4h^2} \quad (4)$$

-۲۴- در تابع پارش مولکول بنزن، عدد تقارن کدام است؟

۱۲ (۱)

۶ (۲)

۴ (۳)

۳ (۴)

-۲۵- در هنگرد (مجموعه آماری) کانونی بزرگ در شرایط دمای بالا $\ln \Xi$ ، کدام است؟

 $\frac{q}{\lambda} \quad (1)$ $\lambda q \quad (2)$ $\frac{\lambda}{q} \quad (3)$ $\frac{1}{\lambda q} \quad (4)$

-۲۶- برای اتم هیدروژن سهم مربوط به تراز دوم در تابع پارش الکترونی، کدام است؟

 $\frac{2/4}{2e^{-kT}} \quad (1)$ $\frac{3/4}{4e^{-kT}} \quad (2)$ $\frac{2/4}{6e^{-kT}} \quad (3)$ $\frac{2/4}{8e^{-kT}} \quad (4)$

-۲۷ برای محاسبه انرژی آزاد گیبس از کدام هنگرد (مجموعه آماری)، استفاده می‌شود؟

- (۱) کانونی (۲) کانونی کوچک (۳) همدما - هم فشار (۴) هر سه مورد

-۲۸ اصل ارجودیک در ترمودینامیک آماری به چه معنی است؟

(۱) میانگین زمانی بزرگتر از میانگین هنگردی است.

(۲) میانگین زمانی کوچکتر از میانگین هنگردی است.

(۳) میانگین زمانی با میانگین هنگردی برابر است.

(۴) مجموع میانگین زمانی و هنگردی همواره صفر است.

-۲۹ با افزایش حجم یک سیستم، تعداد حالات قابل دسترس سیستم،

(۱) بسته به نوع سیستم افزایش یا کاهش می‌باید. (۲) تغییر نمی‌کند.

(۳) افزایش می‌باید. (۴) کاهش می‌باید.

-۳۰ کدام یک از محدودیت‌های روی یک هنگرد کانونی بزرگ، نیست؟

(۱) انرژی کل هنگرد همواره ثابت است.

(۲) حجم کل سیستم همواره ثابت است.

(۳) تعداد ذرات هنگرد همواره ثابت است.

(۴) تعداد کل سیستم‌های هنگرد همواره ثابت است.

-۳۱ اگر ته چاه پتانسیل نوسانگ را به مقدار ثابت b پایین بیاوریم،

(۱) فاصله بین ترازهای انرژی ارتعاشی و مقادیر چشمداشتی $\langle x \rangle$ و $\langle p_x \rangle$ تغییر نمی‌کند.

(۲) فاصله بین ترازهای انرژی ارتعاشی به اندازه b تغییر می‌کند ولی $\langle x \rangle$ و $\langle p_x \rangle$ تغییر نمی‌کند.

(۳) مقادیر $\langle x \rangle$ و $\langle p_x \rangle$ بسته به شکل جدید تابع موج تغییر می‌کنند، اما فاصله بین ترازهای انرژی تغییر نمی‌کند.

(۴) به هر تراز انرژی مقدار b افزوده شده و مقادیر چشمداشتی $\langle x \rangle$ و $\langle p_x \rangle$ نیز تغییر می‌کند.

-۳۲ با توجه به مفهوم ویژه توابع مکان، حاصل کدام انتگرال برابر با یک نیست؟

$$\int_{-1}^{+1} \delta(x) dx \quad (1)$$

$$\int_{-\infty}^{-1} \delta(x) dx \quad (2)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x-a) dx \quad (3)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x) dx \quad (4)$$

۳۳ - کدامیک از انتگرال‌های زیر، مخالف صفر است؟
 $\alpha = x, y, z, \psi_{rs} = A\left(2 - \frac{Zr}{a_0}\right)e^{\frac{-Zr}{ra_0}}, \psi_{rp_\alpha} = B\alpha e^{\frac{-Zr}{ra_0}}$
 (A) $\int \psi_{rs} dV$ هر دو ثابت هستند.

- (۱) $\langle 2p_y | x^\dagger | 2p_x \rangle$
 (۲) $\langle 2s | x^\dagger | 2p_x \rangle$
 (۳) $\langle 2p_y | x | 2p_z \rangle$
 (۴) $\langle 2s | x | 2p_x \rangle$

۳۴ - با در نظر گرفتن عملگر اسپین - اوربیت به صورت $\hat{S} = \hat{A}L$ در یک اتم چند الکترونی با جمله طیفی D ، اختلاف انرژی D_1 و D_2 بر حسب A کدام است؟

- (۱) ۱
 (۲) ۲
 (۳) ۳
 (۴) ۴

۳۵ - درباره یک سیستم فیزیکی با هامیلتونی \hat{H} و عملگر \hat{A} که در یک فضای سه بعدی با ماتریس‌های زیر می‌باشد، کدام گزینه صحیح است؟

$$H = \hbar \omega = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad A = a \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$$

(۱) \hat{H} و \hat{A} هرمیتی هستند، اما دارای ویژه بردارهای مشترک نیستند.

(۲) \hat{H} هرمیتی است و \hat{A} هرمیتی نیست و دارای ویژه بردارهای مشترک هستند.

(۳) \hat{H} و \hat{A} هرمیتی و دارای ویژه بردارهای مشترک هستند.

(۴) \hat{H} هرمیتی است اما \hat{A} هرمیتی نیست و دارای ویژه بردارهای مشترک نیستند.

۳۶ - ویژه مقادیر ماتریس هرمیتی $\begin{pmatrix} 3 & 2i \\ -2i & 0 \end{pmatrix}$ کدام دسته از مقادیر زیر است؟

- (۱) ۳ + ۰i
 (۲) ۴ + -1i
 (۳) ۲ + -2i
 (۴) ۳ + 2i

۳۷ - حاصل جابه‌جاگر $[\hat{p}_x, \hat{p}_y]$ کدام است؟

- (۱) صفر
 (۲) ۱
 (۳) $i\hbar \hat{p}_z$
 (۴) $-i\hbar \hat{p}_z$

- ۳۸ کدام یک از ترکیب‌های خطی زیر، ویژه تابع عملگر هامیلتونی ذره در جعبه مکعبی نیست?
 (اندیس‌ها در تابع اعداد کوانتمی n_x , n_y و n_z هستند).

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{128} - \psi_{281}) \quad (1)$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{128} + \psi_{281}) \quad (2)$$

$$\frac{1}{2}\psi_{151} - \frac{1}{2}\psi_{222} + \frac{1}{\sqrt{2}}\psi_{511} \quad (3)$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{212} + \psi_{121}) \quad (4)$$

- ۳۹ کدام تابع داده شده به عنوان یک تابع آزمایشی (وردشی) قابل قبول نیست?
 $\phi = x(L-x)$ با $0 \leq x \leq L$ برای ذره در جعبه یک بعدی

$$H \phi = e^{-cr} \quad (2)$$

$$\phi = \left(\frac{x}{L}\right)^{\frac{1}{3}} x \quad (3)$$

$$H \phi = e^{\frac{-cr}{a}} \quad (4)$$

- ۴۰ ماتریس مربوط به عملگر \hat{S}_+ برای اسیین مساوی یک، کدام است؟

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

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

$$\sqrt{2}h \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (3)$$

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

- ۴۱- تابع موج مرتبه صفر (ψ^0) برای اتم هلیوم در حالت پایه، کدام است؟

$$\frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_1(1) \psi_1(2)] \alpha(1) \alpha(2) \quad (1)$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_1(1) \psi_1(2)] \beta(1) \beta(2) \quad (2)$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_1(1) \psi_1(2)] [\alpha(1)\beta(2) - \alpha(2)\beta(1)] \quad (3)$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_1(1) \psi_1(2)] [\alpha(1)\beta(2) + \alpha(2)\beta(1)] \quad (4)$$

- ۴۲- اگر با استفاده از تابش الکترومغناطیسی، مولکولی از حالت ψ_2 به ψ_1 منتقل شود، کدام کمیت باید مخالف صفر باشد؟ (در گزینه‌های زیر، $\hat{\mu}$ و \hat{H} به ترتیب عملگر گشتاور دو قطبی و هامیلتونی مولکول هستند).

$$\int \psi_1^* \hat{\mu} \psi_1 dr \quad (1)$$

$$\int \psi_1^* \psi_1 dr \quad (2)$$

$$\int \psi_1^* \hat{H} \psi_1 dr \quad (3)$$

$$[\hat{H}, \hat{\mu}] \quad (4)$$

- ۴۳- هماهنگ‌های کروی (Y_l^m) با کدام ویژه مقدار، ویژه توابع عملگر $(\hat{L}_x - \hat{L}_y)^2 + 2\hat{L}_x\hat{L}_y$ هستند؟

$$(l^2 + 1 - m^2)\hbar^2 \quad (1)$$

$$(l^2 + 1 - 2m^2)\hbar^2 \quad (2)$$

$$(l^2 + 1 - m^2 + 2im)\hbar^2 \quad (3)$$

$$(l^2 + 1 - m^2 + im)\hbar^2 \quad (4)$$

- ۴۴- اتم هیدورژن در لحظه $t = 0$ دارای تابع موجی زیر است که در آن B ضریب نرمال گندگی تابع است. احتمال آن که L^2 اندازه‌گیری و مقدار آن $\frac{1}{2}\hbar^2$ باشد، چقدر است؟

$$\psi(r, \phi) = B(\psi_{1s}(r) + 2\psi_{1d_0}(r, \theta, \phi))$$

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

$$\frac{1}{5} \quad (2)$$

$$\frac{4}{5} \quad (3)$$

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

۴۵- حالت مقید حالتی است که برای آن باشد.

$$\Psi \rightarrow 0, X \rightarrow 0 \quad (1)$$

$$\Psi \rightarrow 0, X \rightarrow \pm\infty \quad (2)$$

$$\Psi \rightarrow \pm\infty, X \rightarrow \pm\infty \quad (3)$$

$$\Psi \rightarrow \pm\infty, X \rightarrow 0 \quad (4)$$

سپاهان