www.saednews.com

کد کنترل

250

E

250E

نام:

نام خانوادگی:

محل امضا:

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

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

صبح جمعه
۱۳۹۶/۱۲/۴
دفترچهٔ شماره (۱)

آزمون ورودی دورهٔ دکتری (نیمه‌متمرکز) ـ سال ۱۳۹۷

رشتهٔ شیمی ـ شیمی‌فیزیک (کد ۲۲۱۱)

تعداد سؤال: ۴۵

مدت پاسخگویی: ۱۵۰ دقیقه

عنوان مواد امتحانی، تعداد و شمارهٔ سؤالات

ردیف	مواد امتحانی	تعداد سؤال	از شمارهٔ	تا شمارهٔ
۱	مجموعه دروس تخصصی: شیمی فیزیک ـ ترمودینامیک آماری ۱ ـ شیمی کوآنتومی	۴۵	۱	۴۵

این آزمون نمرهٔ منفی دارد.

استفاده از ماشین‌حساب مجاز نیست.

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

www.saednews.com

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

اینجانب ..... با شمارهٔ داوطلبی ..... در جلسهٔ این آزمون شرکت می‌نمایم.

امضا:

۱- در واکنش کاهش منیزیم اکسید، در صورتی‌که فشار اولیه ۳۰۰ میلی‌متر جیوه باشد، ۵۰٪ واکنش در ۲۴۲ ثانیه انجام می‌شود و در صورتی‌که فشار اولیه ۳۳۰ میلی‌متر جیوه باشد، ۲۰۰ ثانیه زمان برای انجام ۵۰٪ واکنش، لازم است. درجه واکنش، کدام است؟

۱) ۰
۲) ۱
۳) ۲
۴) ۳

۲- چنانچه محلول اشباع آب ـ 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 به‌ترتیب چگونه هستند؟

۱) محدود و نامحدود ۲) محدود و محدود ۳) نامحدود و محدود ۴) نامحدود و نامحدود

۴- هرگاه واکنش $H_2 + Br_2 \rightarrow 2HBr$ از راه مکانیسم زیر انجام شود، عبارت سرعت واکنش برای آن، کدام است؟

تعادلی سریع $Br_2 \underset{k_{-1}}{\overset{k_1}{\rightleftharpoons}} 2Br$

کند $Br + H_2 \xrightarrow{k_2} HBr + H$

سریع $H + Br_2 \xrightarrow{k_3} HBr + Br$

۱) $k_{-1}(\frac{k_2}{k_1})[H_2]^{\frac{1}{2}}[Br_2]$

۲) $k_2(\frac{k_1}{k_{-1}})[H_2]^{\frac{1}{2}}[Br_2]^{\frac{1}{2}}$

۳) $k_1(\frac{k_2}{k_{-1}})[H_2][Br_2]^{\frac{1}{2}}$

۴) $k_2(\frac{k_1}{k_{-1}})^{\frac{1}{2}}[H_2][Br_2]^{\frac{1}{2}}$

www.saednews.com

۵- ثابت سرعت واکنشی از رابطه $k = AT^{۲} \exp(-\frac{E'}{RT})$ پیروی می‌کند. رابطه انرژی فعال‌سازی آرنیوس با E' کدام است؟

۱) $E' = E_a + ۲RT$

۲) $E' = E_a - ۲RT$

۳) $E' = E_a + \frac{RT}{۲}$

۴) $E' = E_a - \frac{RT}{۲}$

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

۱) $\frac{۱}{k} = \frac{k'_a}{k_a k_b}$

۲) $\frac{۱}{k} = \frac{k_b}{k_a k'_a}$

۳) $\frac{۱}{k} = \frac{k_a}{k'_a k_b}$

۴) $\frac{۱}{k} = \frac{k_a k_b}{k'_a}$

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

۱) $\frac{V_f}{V_i} = \frac{P_i}{P_f}$

۲) $\frac{V_f}{V_i} = \frac{P_f}{P_i}$

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

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

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

۱) برای یک سیستم بسته در غیاب کار انبساطی

۲) برای هر نوع سیستم بسته

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

۴) برای هر نوع سیستم

۹- فشار بخار جزء ۱ محلول مایع دوتایی برحسب تور از رابطه $p_۱ = ۱۰۰x_۱(۱ + ۲x_۱^۳)$ به‌دست می‌آید که $x_۱$ و $x_۲$ به‌ترتیب کسرهای مولی جزء ۱ و ۲ هستند. ثابت هنری جزء ۱ برحسب تور، کدام است؟

۱) ۱۰۰

۲) ۳۰۰

۳) ۴۰۰

۴) ۵۰۰

www.saednews.com

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

۱) $\Delta S_t = 0 \ , \ \Delta S_{surr} = 0 \ , \ \Delta S_{sys} = 0$

۲) $\Delta S_t = \Delta S_{sys} \ , \ \Delta S_{surr} = 0 \ , \ \Delta S_{sys} = C_v \ln \frac{T_2}{T_1} + nR \ln \frac{V_2}{V_1}$

۳) $\Delta S_t = 0 \ , \ \Delta S_{surr} = -\Delta S_{sys} \ , \ \Delta S_{sys} = C_v \ln \frac{T_2}{T_1} + nR \ln \frac{V_2}{V_1}$

۴) $\Delta S_t = \Delta S_{surr} \ , \ \Delta S_{surr} = C_v \ln \frac{T_2}{T_1} + nR \ln \frac{V_2}{V_1} \ , \ \Delta S_{sys} = 0$

۱۱- یک مول آب مایع به‌طور آدیاباتیک متراکم و فشار آن از $P_1\,(atm)$ به $P_2\,(atm)$ می‌رسد، ΔH این فرایند، کدام است؟

۱) ۰

۲) $-nV_m \Delta P$

۳) $nV_m \Delta P$

۴) $\frac{nV_m (P_2 - P_1)}{\frac{C_p}{C_v} - 1}$

۱۲- اگر برای گازی خالص: $\mu = a + bT^2 + \frac{C}{T^2} \ (\frac{J}{mol})$ باشد، $\bar{C}_p$ این گاز کدام است؟ (μ پتانسیل شیمیایی گاز است.)

۱) $-2bT - 6cT^{-3}$

۲) $2b + 6cT^{-4}$

۳) $2bT + 6T^{-3}$

۴) $2bT + 3T^{-3}$

۱۳- یک مول گاز با معادله حالت $PV = RT + \alpha P$ از فشار ۱ atm به ۱۰ atm می‌رسد. در صورتی‌که فرایند هم‌دما باشد، ΔG کدام است؟

۱) $(RT + \alpha) \ln \frac{1}{10}$

۲) $RT \ln 10 - 9\alpha$

۳) $(RT + \alpha) \ln 10$

۴) $RT \ln 10 + 9\alpha$

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

۱) $U = U(T, V, N)$

۲) $U = U(S, V, N)$

۳) $U = U(T, P, N)$

۴) $U = U(S, P, N)$

www.saednews.com

۱۵- در یک سیستم گازی که نیروی جاذبه بین مولکولی حاکم است، وضعیت ضریب تراکم Z و ضریب ژول ـ تامسون آن به‌ترتیب 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 $2Na(g) \rightleftharpoons Na_2(g)$ ثابت تعادل K_p به‌ترتیب (از راست به چپ) با دما و با توان دوم تابع پارش (تقسیم) Na (q_{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_0 ارتفاع سد انرژی است.)

۱) وقتی چرخش داخلی آزاد باشد ($kT \geq V_0$).

۲) وقتی مولکول در ته چاه قرار گیرد ($kT \leq V_0$).

۳) بین دو حد بیان شده در گزینه ۱ و ۲.

۴) وقتی $V_0 = 0$ باشد.

۱۸- برای سیستمی از یک گاز ایده‌ال 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؟ (f 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.

www.saednews.com

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

۱) H ۲) Ar ۳) Cl ۴) Na

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

۱) $\lambda\left(\frac{\partial \ln \Xi}{\partial \lambda}\right)_{V,T}$ ۲) $\mu\left(\frac{\partial \ln \Xi}{\partial \lambda}\right)_{V,T}$

۳) $\frac{1}{\lambda}\left(\frac{\partial \ln \Xi}{\partial \lambda}\right)_{V,T}$ ۴) $\frac{1}{\mu}\left(\frac{\partial \ln \Xi}{\partial \lambda}\right)_{V,T}$

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

۱) $\frac{8\pi^2 IkT}{h^2}$

۲) $\frac{8\pi^2 IkT}{2h^2}$

۳) $\frac{8\pi^2 IkT}{3h^2}$

۴) $\frac{8\pi^2 IkT}{4h^2}$

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

۱) ۱۲

۲) ۶

۳) ۴

۴) ۳

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

۱) $\frac{q}{\lambda}$

۲) λq

۳) $\frac{\lambda}{q}$

۴) $\frac{1}{\lambda q}$

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

۱) $2e^{-\frac{3/4}{kT}}$

۲) $4e^{-\frac{3/4}{kT}}$

۳) $6e^{-\frac{3/4}{kT}}$

۴) $8e^{-\frac{3/4}{kT}}$

www.saednews.com

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

۱) کانونی ۲) کانونی کوچک ۳) هم‌دما ـ هم‌فشار ۴) هر سه مورد

۲۸- **اصل ارگودیک 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 می‌یابد. ۲) تغییر نمی‌کند.

۳) افزایش می‌یابد. ۴) کاهش می‌یابد.

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 نوسانگر هماهنگ را به مقدار ثابت b پایین بیاوریم، .....**

۱) فاصله بین ترازهای انرژی ارتعاشی و مقادیر چشمداشتی $< x >$ و $< p_x >$ تغییر نمی‌کند.

۲) فاصله بین ترازهای انرژی ارتعاشی به اندازهٔ b تغییر می‌کند ولی $< x >$ و $< p_x >$ تغییر نمی‌کند.

۳) مقادیر $< x >$ و $< p_x >$ 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 $< x >$ و $< p_x >$ نیز تغییر می‌کند.

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

۱) $\int_{-1}^{+1} \delta(x)dx$

۲) $\int_{-\infty}^{-1} \delta(x)dx$

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

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

www.saednews.com

۳۳- کدام‌یک از انتگرال‌های زیر، مخالف صفر است؟ ($\psi_{۲p_\alpha} = B\alpha e^{\frac{Zr}{۲a_۰}}$ ، $\psi_{۲s} = A(۲-\frac{Zr}{a_۰})e^{\frac{Zr}{۲a_۰}}$ ، $\alpha = x, y, z$ ،
A و B هر دو ثابت هستند.)

۱) $< ۲p_y | x^۲ | ۲p_x >$

۲) $< ۲s | x^۲ | ۲p_x >$

۳) $< ۲p_y | x | ۲p_z >$

۴) $< ۲s | x | ۲p_x >$

۳۴- با در نظر گرفتن عملگر اسپین ـ اوربیت به‌صورت $A\hat{L}\cdot\hat{S}$ در یک اتم چند الکترونی با جمله طیفی ^۳D، اختلاف انرژی $^۳D_۱$ و $^۳D_۲$ برحسب A کدام است؟

۱) ۱

۲) ۲

۳) ۳

۴) $\frac{۳}{۲}$

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

$$H = \hbar\omega = \begin{pmatrix} ۱ & ۰ & ۰ \\ ۰ & -۱ & ۰ \\ ۰ & ۰ & -۱ \end{pmatrix} \quad A = a\begin{pmatrix} ۱ & ۰ & ۰ \\ ۰ & ۰ & ۱ \\ ۰ & -۱ & ۰ \end{pmatrix}$$

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 $\begin{pmatrix} ۳ & ۲i \\ -۲i & ۰ \end{pmatrix}$ کدام دسته از مقادیر زیر است؟

۱) ۰ ، ۳

۲) ۱- ، ۴

۳) ۲- ، ۲

۴) $۲i$ ، ۳

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

۱) صفر

۲) ۱

۳) $i\hbar\hat{p}_z$

۴) $-i\hbar\hat{p}_z$

www.saednews.com

۳۸- کدام‌یک از ترکیب‌های خطی زیر، ویژه تابع عملگر هامیلتونی ذره در جعبه مکعبی نیست؟
(اندیس‌ها در تابع اعداد کوانتومی n_x، n_y و n_z هستند.)

۱) $\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{138} - \psi_{381})$

۲) $\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{138} + \psi_{381})$

۳) $\frac{1}{2}\psi_{151} - \frac{1}{2}\psi_{333} + \frac{1}{\sqrt{2}}\psi_{511}$

۴) $\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{212} + \psi_{131})$

۳۹- کدام تابع داده شده به‌عنوان یک تابع آزمایشی (وردشی) قابل قبول نیست؟

۱) $\phi = x(L-x)$ با $0 \le x \le l$ برای ذره در جعبه یک بعدی

۲) $\phi = e^{-cr}$ برای اتم H

۳) $\phi = (\frac{3}{l^3})^{\frac{1}{2}} x$ برای $0 \le x \le l$ برای ذره در جعبه یک بعدی

۴) $\phi = e^{\frac{-cr^2}{a_0}}$ برای اتم H

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

۱) $\sqrt{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$

۲) $\sqrt{2}\hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$

۳) $\sqrt{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$

۴) $\sqrt{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}$

www.saednews.com

۴۱- تابع موج مرتبه صفر $\psi^{(0)}$ برای اتم هلیوم در حالت پایه، کدام است؟

۱) $\frac{1}{\sqrt{2}}[1s(1)\ 1s(2)]\ \alpha(1)\alpha(2)$

۲) $\frac{1}{\sqrt{2}}[1s(1)\ 1s(2)]\ \beta(1)\ \beta(2)$

۳) $\frac{1}{\sqrt{2}}[1s(1)\ 1s(2)]\ [\alpha(1)\beta(2)-\alpha(2)\beta(1)]$

۴) $\frac{1}{\sqrt{2}}[1s(1)\ 1s(2)]\ [\alpha(1)\beta(2)+\alpha(2)\beta(1)]$

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

۱) $\int \psi_1^* \hat{\mu} \psi_2\, dr$

۲) $\int \psi_1^* \psi_2\, dr$

۳) $\int \psi_1^* \hat{H} \psi_2\, dr$

۴) $[\hat{H}, \hat{\mu}]$

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؟

۱) $(l^2+1-m^2)\hbar^2$

۲) $(l^2+1-2m^2)\hbar^2$

۳) $(l^2+1-m^2+2im)\hbar^2$

۴) $(l^2+1-m^2+im)\hbar^2$

۴۴- اتم هیدورژن در لحظهٔ $t=0$ دارای تابع موجی زیر است که در آن B ضریب نرمال‌کنندگی تابع است. احتمال آن که L^2 اندازه‌گیری و مقدار آن $12\hbar^2$ باشد، چقدر است؟

$$\psi(r, 0) = B(\psi_{1s}(r) + 2\psi_{3d_0}(r, \theta, \varphi))$$

۱) $\frac{1}{3}$

۲) $\frac{1}{5}$

۳) $\frac{4}{5}$

۴) $\frac{2}{3}$

www.saednews.com

۴۵- حالت مقید حالتی است که برای آن ..... باشد.

۱) $\psi \to 0 \, , \, x \to 0$

۲) $\psi \to 0 \, , \, x \to \pm\infty$

۳) $\psi \to \pm\infty \, , \, x \to \pm\infty$

۴) $\psi \to \pm\infty \, , \, x \to 0$

www.saednews.com

سامانه اخبار و اطلاع رسانی دانشگاهی
سعد نیوز