

248

F

نام:

نام خانوادگی:

محل امضا:



248F

صبح جمعه

۱۳۹۵/۱۲/۶

دفترچه شماره (۱)



«اگر دانشگاه اصلاح شود مملکت اصلاح می‌شود.»

امام خمینی (ره)

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

## آزمون ورودی

### دوره دکتری (نیمه‌متمرکز) داخل - سال ۱۳۹۶

### رشته امتحانی شیمی - شیمی فیزیک (کد ۲۲۱۱)

مدت پاسخگویی: ۱۵۰ دقیقه

تعداد سؤال: ۴۵

عنوان مواد امتحانی، تعداد و شماره سؤالات

ردیف	مواد امتحانی	تعداد سؤال	از شماره	تا شماره
۱	مجموعه دروس تخصصی (شیمی فیزیک - ترمودینامیک آماری ۱ - شیمی کوآنتومی)	۴۵	۱	۴۵

این آزمون نمره منفی دارد.

استفاده از ماشین حساب مجاز نیست.

اسفندماه - سال ۱۳۹۵

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 متغییرین برابر مقررات رفتار می‌شود.

شیمی فیزیک:

۱- ضریب ژول - تامسون یک گاز وان‌دروالس در دمای بویل، به تقریب، کدام است؟

(۱) صفر

(۲) بی‌نهایت

(۳) ثابت  $b$  وان‌دروالس

(۴) ثابت  $a$  وان‌دروالس

۲- در محلول ایده‌آل، همه خاصیت‌های مولی جزئی با خاصیت مولی جزء خالص برابر هستند، به غیر از:

(۱)  $\bar{H}_i$

(۲)  $\bar{S}_i$

(۳)  $\bar{U}_i$

(۴)  $\bar{V}_i$

۳- یک گاز حقیقی از معادله حالت  $PV = n(RT + \frac{aP}{T})$  پیروی می‌کند ( $a$  عدد ثابتی است). برای این گاز

$\left(\frac{\partial H}{\partial P}\right)_T$  کدام است؟

(۱)  $-\frac{nRT}{V} + \frac{na}{T}$

(۲)  $\frac{nRT}{V} - \frac{na}{T}$

(۳)  $\frac{nR}{V} - \frac{na}{T^2}$

(۴)  $\frac{2na}{T}$

۴- برای یک گاز حقیقی که از معادله ویریال پیروی می‌کند، مقدار عبارت  $\lim_{P \rightarrow 0} (V_m - V_{m,id})$  کدام است؟

(۱)  $\frac{B(T)}{V_m}$

(۲)  $\frac{C(T)}{V_m^2}$

(۳)  $B(T)$

(۴)  $C(T)$

۵- برای واکنش  $A^{2+} + B^{2+} \rightarrow P$  در قدرت یونی صفر و دمای  $25^\circ\text{C}$  مقدار ثابت سرعت برابر  $k_0$  به دست آمده است. نسبت  $\log \frac{k}{k_0}$  واکنش وقتی که قدرت یونی در همان دما  $0.1$  باشد، کدام است؟

(ثابت دمای را  $0.51$  فرض کنید).

(۱)  $0.1$

(۲)  $0.3$

(۳)  $0.4$

(۴)  $0.6$

۶- در مورد به‌کارگیری تقریب حالت پایا (steady state) برای واکنش  $A \rightarrow B \rightarrow C$ ، کدام گزینه درست است؟

(۱) این تقریب را همواره نمی‌توان برای این واکنش به‌کاربرد، زیرا حد واسط ندارد.

(۲) این تقریب را همواره می‌توان برای این واکنش به‌کاربرد، زیرا حد واسط دارد.

(۳) این تقریب را همواره نمی‌توان برای این واکنش به‌کاربرد، زیرا غلظت حد واسط آن با زمان تغییر می‌کند.

(۴) این تقریب را نمی‌توان برای این واکنش به‌کاربرد، زیرا غلظت حد واسط آن مجهول است.

۷- در واکنش  $A \rightarrow P$  معادله سرعت به صورت:  $\text{rate} = k[A]^2[P]$  است، اگر  $\alpha = \frac{[A]}{[P]}$  تعریف شود به ازای کدام

مقدار  $\alpha$ ، سرعت حداکثر می‌شود؟

(۱)  $\frac{1}{2}$

(۲)  $\frac{2}{3}$

(۳)  $1$

(۴)  $2$

۸- در یک فرایند آدیاباتیک برگشت‌پذیر  $\left(\frac{\partial T}{\partial P}\right)_s$  کدام است؟ ( $\alpha$  ضریب انبساط گرمایی و  $C_p$  ظرفیت گرمایی در

فشار ثابت است).

(۱)  $\frac{T\alpha}{VC_p}$

(۲)  $\frac{V\alpha}{TC_p}$

(۳)  $\frac{V\alpha}{C_p}$

(۴)  $\frac{TV\alpha}{C_p}$

۹- در واکنش فاز گازی (ایده‌آل):  $A(g) + 2B(g) \rightarrow 2C(g) + D(g)$ ، اگر فشارهای اولیه A و B به ترتیب برابر با ۱atm و  $2 \times 10^{-6} \text{ atm}$  و  $K_p = 2 \times 10^{-6}$  باشد، بعد از تعادل، فشار گاز B (برحسب mmHg) کدام است؟

(۱) ۱۲۲۰

(۲) ۱۳۱۵

(۳) ۱۴۲۰

(۴) ۱۵۰۵

۱۰- اگر  $500 \text{ mg}$  ترکیب غیرالکترولیت Z در مقدار مشخصی از حلال A حل شود، کاهش نقطه انجماد ۲ برابر بیشتر از موقعی است که  $750 \text{ mg}$  از جسم غیرالکترولیت U با وزن مولی  $\frac{60 \text{ g}}{\text{mol}}$ ، در همان مقدار حلال A حل شود.

وزن مولی الکترولیت Z برحسب  $\frac{\text{g}}{\text{mol}}$  کدام است؟

(۱) ۱۰

(۲) ۲۰

(۳) ۳۰

(۴) ۴۰

۱۱- برای سیستم محلول اشباع شده سدیم سولفات در آب که با بخار آب در حال تعادل است، درجه آزادی سیستم در شرایط فشار ثابت چقدر است؟

(۱) ۰

(۲) ۱

(۳) ۲

(۴) ۳

۱۲- همه تساوی‌های زیر به جذب همدمای لانگمویر مربوط می‌شوند، به غیر از: (K: ثابت تعادل است)

(۱)  $\theta = 1$  در فشار بالا(۲)  $\theta = \frac{K \cdot P}{1 + K \cdot P}$ (۳)  $\theta = K$ (۴)  $\theta = K \cdot P$  در فشار پایین

۱۳- نسبت  $\frac{C_p}{C_v}$  برای کدام گاز، کمترین مقدار است؟

(۱)  $H_2O$ (۲)  $NH_3$ (۳)  $CO_2$ 

(۴) CO

۱۴- اگر برای گازی  $\mu = a + bT^2 + \frac{c}{T^2}$  باشد، در این صورت  $\bar{C}_p$  این گاز کدام است؟

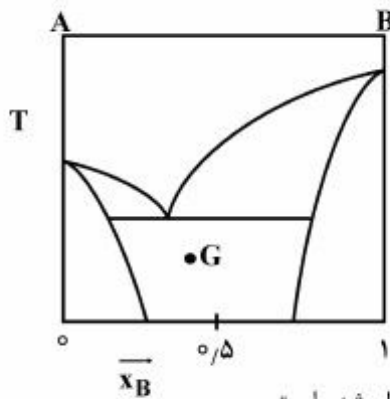
(۱)  $2bT + 6cT^{-3}$

(۲)  $-2bT - 6cT^{-3}$

(۳)  $-2bT + 3cT^{-3}$

(۴)  $2bT + 6cT^{-4}$

۱۵- در نمودار فازی زیر، برای سیستمی که در نقطه G قرار دارد، کدام جمله درست است؟



(۱) سیستم دارای دو فاز جامد، شامل B ناخالص و A ناخالص است.

(۲) سیستم دارای دو فاز جامد شامل B خالص و A خالص است.

(۳) سیستم از یک فاز جامد که شامل ۵۰٪ مولی A و ۵۰٪ مولی B است، تشکیل شده است.

(۴) سیستم دارای دو فاز جامد بوده که شامل ۵۰٪ مولی B ناخالص و ۵۰٪ مولی A ناخالص است.

### ترمودینامیک آماری ۱:

۱۶- فرض کنید که سه ذره بر روی سه تراز کوانتومی توزیع شده باشند. احتمال اینکه سیستمی در تراز کوانتومی دوم باشد، چقدر است؟

(۱)  $\frac{1}{6}$

(۲)  $\frac{1}{4}$

(۳)  $\frac{1}{3}$

(۴)  $\frac{1}{2}$

۱۷- کدام عبارت، مفهوم مولکولی گرما است؟

(۱)  $E \sum_j dP_j$

(۲)  $\sum_j E_j dP_j$

(۳)  $P \sum_j dE_j$

(۴)  $\sum_j P_j dE_j$

۱۸- تابع مشخصه هنگرد کانونی بزرگ، کدام است؟

(۱) A

(۲) G

(۳) H

(۴) PV

۱۹- کدام رابطه، احتمال اشغال یک تراز را در یک هنگرد کانونی بزرگ، نشان می‌دهد؟

$$\frac{e^{-\beta E_{Nj}}}{\sum_N \sum_j e^{-\beta E_{Nj}} e^{-\gamma N}} \quad (۱)$$

$$\frac{e^{-\beta E_{Nj}} e^{-\gamma N}}{\sum_N \sum_j e^{-\beta E_{Nj}} e^{-\gamma N}} \quad (۲)$$

$$\frac{e^{-\beta E_{jN}} e^{-\gamma N}}{\sum_j \sum_N e^{-\beta E_{Nj}} e^{-\gamma N}} \quad (۳)$$

$$\frac{e^{-\beta E_{jN}}}{\sum_j \sum_N e^{-\beta E_{Nj}} e^{-\gamma N}} \quad (۴)$$

۲۰- در یک هنگرد  $NVT$ ، افت‌وخیز در انرژی به کدام مورد به‌طور مستقیم مرتبط است؟

(۱)  $C_v$

(۲)  $\beta$  (ضریب تراکم‌پذیری)

(۳)  $\alpha$  (ضریب انبساط)

(۴)  $\frac{\alpha}{\beta}$

۲۱- کدام رابطه برای میانگین تعداد ذرات ( $\bar{N}$ ) برای فرمیون‌ها و بوزون‌ها در شرط دمای بالا، صحیح است؟ (q تابع

پارش مولکولی است و  $\lambda = e^{\mu/kT}$ )

(۱)  $\frac{1}{\lambda q}$

(۲)  $\frac{q}{\lambda}$

(۳)  $\lambda q$

(۴)  $\frac{\lambda}{q}$

۲۲- مولکول اکسیژن ..... است و فقط دارای ترازهای ..... چرخشی است.

(۱) بوزون - فرد

(۲) فرمیون - زوج

(۳) بوزون - زوج

(۴) فرمیون - فرد

۲۳- در یک فضای فاز  $3N \times 3N$  بعدی، کدام یک دارای واحدی مشابه واحد  $h$  (ثابت پلانک) است؟

(۱)  $dp$

(۲)  $dq$

(۳)  $\frac{dp}{dq}$

(۴)  $dp, dq$

۲۴- برای یک سیستم  $N$  ذره‌ای در کدام شرایط انتگرال پیکربندی‌ای با  $V^N$  (حجم به توان تعداد ذرات) برابر است؟

(۱) انرژی پتانسیل کوچکتر از صفر باشد.

(۲) انرژی پتانسیل صفر باشد.

(۳) انرژی پتانسیل بزرگتر از صفر باشد.

(۴) به‌ازای هر انرژی پتانسیلی

۲۵- کدام گزینه تابع پارش (تابع تقسیم) چرخشی یک مولکول به صورت فرفره کروی را نشان می‌دهد؟

$$\frac{1}{\sigma} \int_0^{\infty} (J+1) e^{-\frac{J(J+1)\hbar^2}{2IkT}} dJ \quad (1)$$

$$\frac{1}{\sigma} \int_0^{\infty} (J+1)^2 e^{-\frac{J(J+1)\hbar^2}{2IkT}} dJ \quad (2)$$

$$\frac{1}{\sigma} \int_0^{\infty} (2J+1) e^{-\frac{J(J+1)\hbar^2}{2IkT}} dJ \quad (3)$$

$$\frac{1}{\sigma} \int_0^{\infty} (2J+1)^2 e^{-\frac{J(J+1)\hbar^2}{2IkT}} dJ \quad (4)$$

۲۶- در حرکت چرخشی یک مولکول، ترازهای که حداکثر جمعیت را دارد با دما چه رابطه‌ای دارد؟

(۱)  $\sqrt{T}$

(۲)  $\frac{1}{T}$

(۳)  $\frac{1}{\sqrt{T}}$

(۴)  $T$

۲۷- رابطه تابع پارش ارتعاشی برای یک مولکول در دمای بالا با دما کدام است؟

$$\frac{1}{\sqrt{T}} \quad (1)$$

$$T \quad (2)$$

$$\sqrt{T} \quad (3)$$

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

۲۸- ترازهای ارتعاشی برانگیخته کدام مولکول در تابع پارش ارتعاشی، سهم بیشتری دارند؟

$$(\Theta_{\text{vib}} = 463 \text{ K}) \text{Br}_2 \quad (1)$$

$$(\Theta_{\text{vib}} = 3374 \text{ K}) \text{N}_2 \quad (2)$$

$$(\Theta_{\text{vib}} = 810 \text{ K}) \text{Cl}_2 \quad (3)$$

$$(\Theta_{\text{vib}} = 3100 \text{ K}) \text{CO} \quad (4)$$

۲۹- رابطه طول موج گرمایی گاز آرگون با دمای آن کدام است؟

$$\sqrt{T} \quad (1)$$

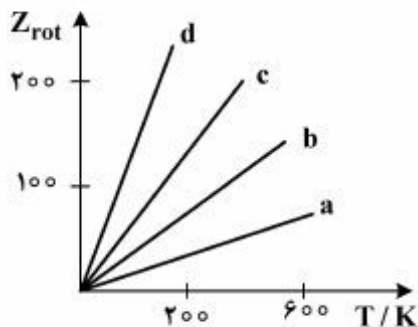
$$\frac{1}{T} \quad (2)$$

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

$$T \quad (4)$$

۳۰- تابع پارش چرخشی برای مولکول‌های  $\text{H}^{35}\text{Cl}$ ،  $\text{N}_2$ ،  $\text{O}_2$  و  $\text{Cl}_2$  برحسب دما در شکل زیر داده شده است،

کدام نمودار مربوط به  $\text{Cl}_2$  است؟



a (1)

b (2)

c (3)

d (4)

شیمی کوآنتومی:

۳۱- اگر عامل اختلالی برای یک نوسانگر برابر  $cx^3$  باشد، انرژی حالت پایه با تصحیح مرتبه اول، کدام است؟

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

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

$$\frac{1}{2}hv + \frac{rch^2}{64\pi^4 v^2 m^2} \quad (3)$$

$$\frac{3}{2}hv - \frac{rch^2}{64\pi^4 v^2 m^2} \quad (4)$$

۳۲- کدام یک از توابع موج زیر، نرمال است؟

$$\psi = (\psi_{120} + \psi_{300} + \psi_{101} + \psi_{211}) \quad (1)$$

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{120} + \psi_{300} + 2\psi_{101} + \psi_{211}) \quad (2)$$

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{6}}(2\psi_{120} + 2\psi_{300} - \psi_{101} + \psi_{211}) \quad (3)$$

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{15}}(\psi_{120} + 3\psi_{300} + 2\psi_{101} + \psi_{211}) \quad (4)$$

۳۳- در صورتی که در زمان  $t$  یک ذره، تابع حالت  $\psi = Ne^{-ar^2} Y_1^1(\theta, \phi)$  را داشته باشد ( $a, N$  ثابت هستند)،  $L^2$

کدام است؟

$$6\hbar^2 \quad (1)$$

$$3\hbar^2 \quad (2)$$

$$4\hbar^2 \quad (3)$$

$$5\hbar^2 \quad (4)$$

۳۴- اگر  $[\hat{A}, \hat{B}] = 1$  باشد، مقدار  $[\hat{A}, \hat{B}^2]$  کدام است؟

$$2\hat{A} \quad (1)$$

$$2\hat{B} \quad (2)$$

$$\hat{A} + \hat{B} \quad (3)$$

$$\hat{A} - \hat{B} \quad (4)$$

۳۵- در عبارت زیر مقدار عددی  $a$  کدام است؟

$$(\hat{s}_1 + \hat{s}_2)^z [\alpha(1)\beta(2) + \alpha(2)\beta(1)] = a \hbar^z [\alpha(1)\beta(2) + \alpha(2)\beta(1)]$$

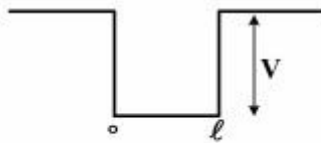
(۱) صفر

(۲)  $\frac{3}{4}$

(۳)  $\frac{3}{2}$

(۴) ۲

۳۶- ذره‌ای در چاه مربعی به طول  $\ell$  قرار گرفته است. دیواره چاه مقداری محدود به اندازه  $V$  دارد. در مکانیک کوانتومی اگر انرژی ذره  $E < V$  باشد، در این صورت، کدام گزینه صحیح است؟



(۱) احتمال یافتن ذره در بیرون چاه برابر صفر است.

(۲) اصولاً احتمال یافتن ذره در داخل و بیرون چاه تفاوت نخواهد کرد.

(۳) احتمال یافتن ذره در بیرون چاه صفر نیست.

(۴) در چنین حالتی ذره از چاه نمی‌تواند خارج شود مگر اینکه انرژی آن  $E > V$  باشد.

۳۷- همه گزینه‌ها زیر صحیح است به غیر از: ( $\hat{\Pi}$ : عملگر پارتیه)

(۱)  $(\hat{H}, \hat{\Pi}) = (\hat{T}, \hat{\Pi})$

(۲)  $(\hat{H}, \hat{\Pi}) = (\hat{V}, \hat{\Pi})$

(۳)  $(\hat{T}, \hat{\Pi}) = 0$

(۴)  $(\hat{V}^2, \hat{\Pi}) = 0$

۳۸- حالت‌های ایستاده (Stationary states) ذره در جعبه سه بعدی، ویژه توابع کدام عملگر است؟

(۱)  $\hat{P}_x$

(۲)  $\hat{x}$

(۳)  $\hat{P}_z^2$

(۴)  $\hat{x}^2$

۳۹- تابع حالت ایستاده یک ذره در جعبه مستطیلی سه بعدی به ابعاد  $a$  و  $b$  و  $c$ .

چه مقداری قابل پیش‌بینی است؟  $\psi_{111} = \left(\frac{1}{abc}\right)^{1/2} \sin \frac{\pi x}{a} \sin \frac{\pi y}{b} \sin \frac{\pi z}{c}$  است. هنگامی که اندازه حرکت خطی در راستای  $x$  اندازه‌گیری شود،

(۱)  $+\frac{h}{2a}$

(۲)  $-\frac{h}{2a}$

(۳)  $\pm \frac{h}{2a}$

(۴) با قطعیت نمی‌توان پیش‌بینی کرد.

۴۰- در روش تغییری (واربایسون)، برای ذره در جعبه یک بعدی به طول  $\ell$  با دیواره‌های پتانسیل بی‌نهایت، توابع زیر پیشنهاد شده است. همه توابع مناسب‌اند، به جز:

$$x(\ell - x)^2 \quad (1)$$

$$x^2(\ell - x) \quad (2)$$

$$x(\ell + x) \quad (3)$$

$$\cos \pi \left( \frac{1}{2} - x^2 / \ell^2 \right) \quad (4)$$

۴۱- اگر عملگر هامیلتونی یک سیستم به صورت  $H = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ -1 & 3 & -2 \\ 0 & -2 & 5 \end{pmatrix}$  باشد، مقدار مورد انتظار انرژی برای تابع

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}$$

$$\frac{7}{6} \quad (1)$$

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

$$2 \quad (3)$$

$$\text{صفر} \quad (4)$$

۴۲- ماتریس متناظر  $\hat{s}_x$  (مؤلفه  $\alpha$  عملگر اسپین) کدام است؟

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

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

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

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

۴۳- با در نظر گرفتن تابع آزمایشی  $\phi = \exp(-c_1 r - c_2 r^2)$  برای حالت پایه اتم هیدروژن غیرنسبیتی، درصد خطا در انرژی محاسبه شده از روش تغییر، چقدر است؟

$$(1) \text{ صفر}$$

$$(2) \text{ ۱ تا ۲ درصد}$$

$$(3) \text{ ۲ تا ۵ درصد}$$

$$(4) \text{ بیشتر از ۵ درصد}$$

۴۴- در روش اختلال، تصحیح انرژی مرتبه اول برای حالت پایه یک ذره در جعبه یک بعدی با شرایط زیر کدام است؟

$$\left\{ \begin{array}{l} V = \infty \quad x \leq 0, x \geq \ell \\ V = \frac{bx}{\ell} \quad 0 < x < \ell \end{array} \right\}$$

(۱) صفر

(۲)  $b$ (۳)  $\frac{b}{2}$ (۴)  $\frac{2b}{2}$ 

۴۵- فرض کنید ذره‌ای در یک جعبه با طول  $\ell$  در یک حالت نایستاده  $\psi = 0$  برای  $x < 0$  و  $x > \ell$  و

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-\frac{ih^2 t}{4m\ell^2\hbar}} \left(\frac{2}{\ell}\right)^{\frac{1}{2}} \sin\left(\frac{\pi x}{\ell}\right) + \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{3} e^{i\pi} e^{\frac{-ih^2 t}{4m\ell^2\hbar}} \left(\frac{2}{\ell}\right)^{\frac{1}{2}} \sin\left(\frac{2\pi x}{\ell}\right)$$

بدست آوردن  $\frac{2^2 h^2}{4m\ell^2}$  برای انرژی چقدر است؟

(۱)  $\frac{3}{4}$ (۲)  $\frac{1}{4}$ (۳)  $\frac{1}{2}$ (۴)  $\frac{1}{3}$