



290F

290

F

نام
نام خانوادگی
محل امضاء

صبح جمعه

۹۱/۱۲/۱۸

دفترچه شماره ۱

اگر دانشگاه اصلاح شود مملکت اصلاح می‌شود.

امام خمینی (ره)

آزمون ورودی
دوره‌های دکتری (نیمه متمرکز) داخل
در سال ۱۳۹۲

رشته‌ای
شیمی فیزیک (کد ۲۲۱۱)

مدت پاسخگویی: ۱۲۰ 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، کوانتوم)	۴۵	۱	۴۵

این آزمون نمره منفی دارد

اسفندماه سال ۱۳۹۱

استفاده از ماشین حساب مجاز نمی‌باشد.

حق چاپ و تکثیر سؤالات پس از برگزاری آزمون برای تمامی اشخاص حقیقی و حقوقی تنها با مجوز این سازمان مجاز می‌باشد و تا سفلیتین برابر مقررات رفتار می‌شود.

۱- در فرآیند برگشت پذیر هم دمای گاز ایده آل، گرما کدام است؟

$$Q = P_r V_r \ln \frac{V_r}{V_1} \quad (1) \quad Q = -P_r V_r \ln \frac{V_r}{V_1} \quad (2)$$

$$Q = P_r (V_r - V_1) \quad (3) \quad Q = nRT_1 \ln \frac{P_r}{P_1} \quad (4)$$

۲- اگر فقط حالت های اولیه و نهایی یک سیستم ترمودینامیکی مشخص باشد و در آن فقط امکان انجام کار انبساطی باشد، تغییرات کدام یک از کمیت های زیر را می توان تعیین کرد؟

(۱) انرژی درونی

(۲) هر سه کمیت

(۳) گرمای مبادله شده در فشار ثابت

(۴) کار مکانیکی انجام شده بروی سیستم در شرایط آدیاباتیکی

۳- شیب نمودار $\frac{\Delta G}{T}$ بر حسب دما برای یک واکنش گرمازا:

$$\leq 0 \quad (1) \quad > 0 \quad (2)$$

$$< 0 \quad (3) \quad = 0 \quad (4)$$

۴- برای انبساط یک مول گاز ایده آل تک اتمی در ۱ atm و ۳۰۰ K، در یک فرآیند آدیاباتیکی تحت فشار خارجی ثابت ۵ atm قرار می گیرد، به طوری که حجم آن دو برابر می شود. مقدار ΔH کدام است؟

(مقدار R را برابر با $8 \text{ JK}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ در نظر بگیرید.)

$$-2500 \text{ J} \quad (1) \quad -2000 \text{ J} \quad (2)$$

$$-1500 \text{ J} \quad (3) \quad -1000 \text{ J} \quad (4)$$

۵- در یک فرآیند انبساط آدیاباتیکی برگشت پذیر رابطه (مقدار ثابت $pV^\gamma = \text{ثابت}$) برقرار است. در این معادله، γ همیشه:

(۱) کوچکتر از یک است.

(۲) عددی منفی است.

(۳) بزرگتر از یک و بیشترین مقدار آن برای گاز تک اتمی است.

(۴) بزرگتر از یک و مقدار آن با افزایش تعداد اتم های مولکول گاز افزایش می یابد.

۶- اگر در واکنش تعادلی $2 \text{ NO}(g) + \text{O}_2(g) \rightleftharpoons 2 \text{ NO}_2(g)$ در دمای ثابت فشار کل پنج برابر شود K_x چند برابر می شود؟

$$10 \quad (1) \quad 1 \quad (2)$$

$$\frac{1}{5} \quad (3) \quad 5 \quad (4)$$

۷- کدام یک از عبارات زیر بیانگر معادله گیبس - دو هم است؟

$$\sum_i x_i d \ln \gamma_i = 0 \quad (1) \quad \sum_i x_i d \gamma_i = 0 \quad (2)$$

$$\sum_i x_i d \ln a_i = 0 \quad (3) \quad \sum_i x_i \ln a_i = 0 \quad (4)$$

۸- گرمای مبادله شده بوسیله سیستم در فشار ثابت برابر است با:

$$q_p = q_v + p \Delta V \quad (1) \quad q_p = q_v - p \Delta V \quad (2)$$

$$q_p = \Delta H + p \Delta V \quad (3) \quad q_p = \Delta H - p \Delta V \quad (4)$$

۹- سرعت صوت در یک گاز با جرم مولی M را می توان به صورت $C = \left(\frac{\gamma RT}{M}\right)^{\frac{1}{2}}$ نوشت. سرعت صوت به صورت تابعی از دانسیته گاز (ρ) کدام است؟ P فشار گاز می باشد.

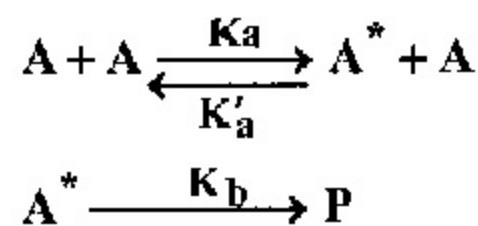
$$C = \left(\frac{\gamma P}{\rho}\right)^{\frac{1}{2}} \quad (1)$$

$$C = \left(\frac{\gamma RT}{\rho}\right)^{\frac{1}{2}} \quad (2)$$

$$C = \left(\frac{\gamma R \rho}{P}\right)^{\frac{1}{2}} \quad (3)$$

$$C = \left(\frac{\gamma RT}{P}\right)^{\frac{1}{2}} \quad (4)$$

۱۰- در مکانیزم لیندمان



ثابت سرعت مشاهده شده در فشار پایین، برابر کدام است؟

$$K = K_b \cdot [A] \quad (1)$$

$$K = K_a [A] \quad (2)$$

$$K = \frac{K_a \cdot K_b}{K'_a} \quad (3)$$

$$K = \frac{K_b \cdot K'_a [A]}{K'_a + K_b [A]} \quad (4)$$

۱۱- اگر زمان لازم برای آنکه یک واکنش مرتبه دوم به اندازه ۲۰٪ پیشرفت کند برابر با t باشد، زمان لازم برای آنکه واکنش به اندازه ۸۰٪ پیشرفت کند، چقدر است؟

$$4t \quad (1)$$

$$8t \quad (2)$$

$$16t \quad (3)$$

$$32t \quad (4)$$

۱۲- کدام یک در خصوص سیستمیک واکنش های انفجار حرارتی صحیح نیست؟

- (۱) مرحله ای که از یک رادیکال، بیش از یک رادیکال تولید می شود، مرحله توسعه زنجیر است.
- (۲) دما و فشار از یک مقدار معینی باید بیشتر باشند، تا انفجار رخ دهد.
- (۳) مرحله آغازین، مرحله تشکیل رادیکال ها است.
- (۴) دو حد انفجار وجود دارد.

۱۳- برای یک واکنش دو مولکولی با استفاده از نظریه کمپلکس فعال، ثابت سرعت متناسب با کدام است؟

$$\frac{kT}{h\nu} \quad (1)$$

$$\frac{kT}{h} \quad (2)$$

$$\frac{h}{kT} \quad (3)$$

$$\frac{kT}{h} \quad (4)$$

۱۴- در مورد فرایندهای جذب فیزیکی و شیمیایی کدام گزینه، صحیح نیست؟

- (۱) در دماهای پایین فرآیند جذب فیزیکی راحت تر از جذب شیمیایی انجام می گیرد.
- (۲) با افزایش دما، معمولاً جذب فیزیکی کم و جذب شیمیایی زیاد می گردد.
- (۳) ΔH جذب فیزیکی، کم تر از ΔH جذب شیمیایی است.
- (۴) فرایندهای جذب فیزیکی و شیمیایی بیش تر گرماگیر هستند.

۱۵- اصل حالات متناظر:

- (۱) برای گازهایی که دارای مولکول‌های غیر کروی هستند، به خوبی صادق است.
- (۲) برای گازهایی که دارای مولکول‌های کروی هستند، به خوبی صادق است.
- (۳) برای تمام گازها با مولکول‌های کروی و غیر کروی، به خوبی صادق است.
- (۴) برای هر نوع گاز در شرایط فشار کم و دمای زیاد، به خوبی صادق است.

۱۶- در هنگردی (مجموعه آماری) شامل سیستم پنج ذره‌ای، توزیع‌های ممکن میان حالت‌های انرژی چند باشد تا $\frac{E_i}{kT} = 20$ ؟

$$\frac{E_i}{kT} = 0, 2, 4, 6$$

$$5 \quad (2)$$

$$20 \quad (4)$$

۱۷- تابع پارش (تقسیم) چرخشی برای مولکول D_2 با عدد اسپینی ۱ کدام گزینه است؟

$$6 \sum_{\text{زوج}} (2J+1) e^{-\theta_r \frac{J(J+1)}{T}} + 3 \sum_{\text{فرد}} (2J+1) e^{-\theta_r \frac{J(J+1)}{T}} \quad (1)$$

$$2 \sum_{\text{زوج}} (2J+1) e^{-\theta_r \frac{J(J+1)}{T}} + 6 \sum_{\text{فرد}} (2J+1) e^{-\theta_r \frac{J(J+1)}{T}} \quad (2)$$

$$2 \sum_{\text{زوج}} (2J+1) e^{-\theta_r \frac{J(J+1)}{T}} + 1 \sum_{\text{فرد}} (2J-1) e^{-\theta_r \frac{J(J+1)}{T}} \quad (3)$$

$$1 \sum_{\text{زوج}} (2J+1) e^{-\theta_r \frac{J(J+1)}{T}} + 3 \sum_{\text{فرد}} (2J+1) e^{-\theta_r \frac{J(J+1)}{T}} \quad (4)$$

۱۸- رابطه $PV - \pm kT \sum_i \ln(1 \pm \lambda e^{\beta \epsilon_i}) = \lambda$ برای مقادیر کوچک λ :

- (۱) به معادله ساگورد - نترود تبدیل می‌شود.
- (۲) به معادله حالت گاز ویریال تبدیل می‌شود.
- (۳) به معادله حالت گاز واندروالس تبدیل می‌شود.
- (۴) به معادله حالت گاز ایده آل تبدیل می‌شود.

۱۹- اصل برابری احتمالات پیشین کدام است؟

- (۱) یک حالت از $\Omega(E)$ حالت کوانتومی، در مقایسه با حالت‌های دیگر به دفعات بیشتری ارائه می‌شود.
- (۲) یک حالت از $\Omega(E)$ حالت کوانتومی، در مقایسه با حالت‌های دیگر به دفعات کمتری ارائه می‌شود.
- (۳) یک سیستم منزوی با N ، V و E ثابت با شانس یکسانی در هر یک از $\Omega(E)$ حالت کوانتومی ممکن قرار دارد.
- (۴) هر حالت و تمام $\Omega(E)$ حالت کوانتومی در هنگرد، به دفعات نامساوی ارائه می‌شود.

۲۰- همه‌ی گزینه‌ها صحیح‌اند به جز:

- (۱) طبق معادله لیوویل هر نقاط فاز مانند یک سیال تراکم ناپذیر رفتار می‌کند.
- (۲) معادله لیوویل همان قانون بقای دانسیته است.
- (۳) تعداد مسیرهایی که وارد می‌شوند بیشتر است از آن‌هایی که خارج می‌شوند.
- (۴) معادله لیوویل اساسی‌ترین معادله در مکانیک آماری کلاسیکی است.

۲۱- تابع پارش کانونی برای ذرات تمیز ناپذیر و مستقل مخلوطی از سه گاز A، B و C کدام است؟

$$Q(N_A, N_B, N_C, V, T) = \frac{[q_A(V, T)]^{N_A}}{N_A!} \cdot \frac{[q_B(V, T)]^{N_B}}{N_B!} \cdot \frac{[q_C(V, T)]^{N_C}}{N_C!} \quad (۱)$$

$$Q(N_A, N_B, N_C, V, E) = \ln \frac{[q_A(V, E)]^{N_A}}{N_A!} + \ln \frac{[q_B(V, E)]^{N_B}}{N_B!} + \ln \frac{[q_C(V, E)]^{N_C}}{N_C!} \quad (۲)$$

$$Q(N_A, N_B, N_C, V, T) = \ln \frac{[q_A(V, T)]^{N_A}}{N_A!} + \ln \frac{[q_B(V, T)]^{N_B}}{N_B!} + \ln \frac{[q_C(V, T)]^{N_C}}{N_C!} \quad (۳)$$

$$Q(N_A, N_B, N_C, V, T) = \frac{[q_A(V, T)]^{N_A}}{N_A!} + \frac{[q_B(V, T)]^{N_B}}{N_B!} + \frac{[q_C(V, T)]^{N_C}}{N_C!} \quad (۴)$$

۲۲- در کدام شرایط می توان از آمار بولتسمان استفاده کرد؟

- (۱) تعداد حالت‌های قابل دسترس سیستم بسیار کمتر از تعداد ذرات آن باشد.
- (۲) تعداد حالت‌های قابل دسترس سیستم برابر از تعداد ذرات آن باشد.
- (۳) تعداد حالت‌های قابل دسترس سیستم بسیار بیشتر از تعداد ذرات آن باشد.
- (۴) هیچ ارتباطی بین تعداد حالات قابل دسترسی و تعداد ذرات وجود ندارد.

۲۳- اگر میانگین انرژی (\bar{E}) به صورت زیر تعریف شود، کدام جمله مفهوم گرما دارد؟ $\bar{E} = \sum_i E_i P_i$ (احتمال اشغال هر حالت است.)

$$\frac{E_i}{P_i} \quad (۱)$$

$$\sum_i E_i dP_i \quad (۲)$$

$$\frac{P_i}{E_i} \quad (۱)$$

$$\sum_i P_i dE_i \quad (۲)$$

۲۴- برای هنگرد (مجموعه آماری) NVT کدام گزینه تابع پارش (تابع تقسیم) آن را بر حسب ترازهای قابل دسترس نشان می دهد؟

$$\sum_i \frac{E_i}{kT} \quad (۱)$$

$$\sum_E \Omega(N, V) e^{-\frac{E(N, V)}{kT}} \quad (۲)$$

$$\sum_E \Omega E \quad (۱)$$

$$\sum_E e^{-\frac{E(N, V)}{kT}} \quad (۲)$$

۲۵- کدام گزینه محدودیت روی توزیع‌های ممکن یک هنگرد کانونی بزرگ نیست؟

$$\sum_N \sum_j a_{Nj} N_j = N_{\text{کل}} \quad (۱)$$

$$\sum_N \sum_j a_{Nj} E_{Nj} = E \quad (۲)$$

$$\sum_N \sum_j a_{Nj} = A \quad (۱)$$

$$\sum_N \sum_j a_{Nj} = N_{\text{کل}} \quad (۲)$$

۲۶- تحت چه شرایطی افت و خیز در چگالی یک سیستم قابل صرف نظر کردن نیست؟

(۱) نقطه بحرانی

(۲) در زیر نقطه بحرانی

(۳) وقتی $\left(\frac{\partial p}{\partial v}\right)_{N, T}$ به سمت بی نهایت کند.

(۴) در بالای نقطه بحرانی

۲۷- $\ln \Xi$ (تابع پارش هنگرد کانونی بزرگ است) برابر است با: (q) تابع پارش مولکولی و λ فعالیت مطلق است.

$$\begin{array}{ll} (1) & q^\lambda \\ (2) & \lambda q \\ (3) & \frac{q}{\lambda} \\ (4) & \frac{\lambda}{q} \end{array}$$

۲۸- کدام گزینه انتگرال پیکربندی (Z, N) است؟ (U) انرژی پتانسیل، (E) انرژی سیستم، (T) انرژی جنبشی

$$\begin{array}{ll} (1) & \int e^{-T} dr_1 \dots dr_N \\ (2) & \int e^{-U(r_1, r_2, \dots)} dr_1 \dots dr_N \\ (3) & \int e^{-E(r_1, r_2, \dots)} dr_1 \dots dr_N \\ (4) & \int dr_1 \dots dr_N \end{array}$$

۲۹- برای سیستمی از بوزون‌ها تابع موج به صورت Ψ اسپین هسته‌ای چرخشی Ψ الکترونی Ψ ارتعاشی Ψ انتقالی Ψ است.

که چرخشی الکترونی Ψ ارتعاشی Ψ انتقالی Ψ برای آن متقارن است، بنابراین اسپین هسته‌ای Ψ :

- (۱) باید متقارن باشد.
- (۲) باید نامتقارن باشد.
- (۳) بسته به مقدار اسپین بوزون متقارن و یا نامتقارن است.
- (۴) فقط برای بوزون‌های با اسپین صفر متقارن است.

۳۰- برای حالت پایه الکترونی O_2 (\sum_g^-) چرخشی Ψ :

- (۱) با توجه به تقارن انتقالی Ψ تعیین شود.
- (۲) با توجه به عدد کوانتومی ارتعاشی زوج و فرد است.
- (۳) باید متقارن باشد.
- (۴) باید نامتقارن باشد.

۳۱- جعبه‌ای مکعبی به ابعاد ۱، ۲ و ۳ انگستروم را در نظر بگیرید. بیشترین طول موج مربوط به کدام انتقال به حالت پایه است؟

$$\begin{array}{ll} (1) & (1,1,1) \rightarrow (1,1,2) \\ (2) & (1,1,1) \rightarrow (1,2,1) \\ (3) & (1,1,1) \rightarrow (2,1,1) \\ (4) & (1,1,1) \rightarrow (1,2,2) \end{array}$$

۳۲- اگر اصل طرد پاولی (نامتقارن بودن توابع موج فرمیونی) را رعایت نکنیم، انرژی الکترونی مولکول‌ها را با روش تغییر:

- (۱) منفی‌تر به دست می‌آوریم.
 - (۲) مثبت‌تر به دست می‌آوریم.
 - (۳) بدون تغییر به دست می‌آوریم.
 - (۴) امکان دارد مثبت‌تر یا منفی‌تر به دست بیآوریم.
- ۳۳- بررسی اختلالی آرایش‌های $3s, 3p, 3d$ اتم هلیوم را در نظر بگیرید. تعداد توابع مرجع مرتبه صفر صحیح چندتا است؟

$$\begin{array}{ll} (1) & 12 \\ (2) & 16 \\ (3) & 18 \\ (4) & 24 \end{array}$$

۳۴- کدام عملگر هرمیتی است؟

$$\hat{x}\hat{p}_x \quad (1)$$

$$\hat{z}\hat{p}_z \quad (2)$$

$$\hat{x}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{x} \quad (3)$$

$$\hat{x}\hat{p}_x + \hat{p}_x\hat{x} \quad (4)$$

۳۵- تابع موج ذره در جعبه یک بعدی به طول a و پتانسیل نامتناهی به صورت زیر است:

$$\psi(x) = N \sqrt{\frac{2}{a}} \left(1 - \cos \frac{\pi x}{a}\right) \sin \frac{\pi x}{a}$$

احتمال اینکه ذره در حالت پایه جعبه یک بعدی باشد را حساب کنید؟

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

$$\frac{4}{5} \quad (2)$$

$$|N|^2 \quad (3)$$

$$1 - |N|^2 \quad (4)$$

۳۶- اگر \vec{s} و \vec{J} به ترتیب اندازه حرکت زاویه‌ای اسپینی و کل یک ذره باشد، در آن صورت مقدار $[J^2, S_z]$ برابر کدام است؟

$$2i\hbar\vec{k}(\vec{s} \cdot \vec{L}) \quad (1)$$

$$i\hbar\vec{k}(\vec{s} \times \vec{L}) \quad (2)$$

$$2i\hbar\vec{k}(\vec{s} \times \vec{L}) \quad (3)$$

$$2\hbar\vec{k}(\vec{s} \times \vec{L}) \quad (4)$$

۳۷- یک ذره تحت پتانسیل $v(x, y, z) = \frac{1}{4} m \omega^2 (x^2 + y^2 + z^2)$ قرار دارد. چند حالتی سومین تراز انرژی کدام است؟

$$3 \quad (1)$$

$$10 \quad (2)$$

$$9 \quad (3)$$

$$12 \quad (4)$$

۳۸- با فرض آن که از تابش قطبیده‌ی تخت که در راستای x پیش می‌رود و میدان الکتریکی آن در راستای y است، استفاده شود، احتمال جهش از حالت (۱) به حالت (۲) متناسب است با:

$$|\mu_{21}^y|^2 \quad (1)$$

$$|\mu_{21}^x|^2 \quad (2)$$

$$|\mu_{21}^y|^2 + |\mu_{21}^x|^2 + |\mu_{21}^z|^2 \quad (3)$$

$$|\mu_{21}^y|^2 + |\mu_{21}^x|^2 \quad (4)$$

۳۹- برای اتم هیدروژن پارینه ψ_{2p_x} چگونه است؟

$$(1) \text{ فرد}$$

$$(2) \text{ زوج}$$

$$(3) \text{ پارینه معین ندارد.}$$

$$(4) \text{ برای } m=0 \text{ زوج، } m=1 \text{ فرد و برای } m=-1 \text{ فرد است.}$$

۴۰- برای توصیف اوربیتال‌های اتم هیدروژن کدام توابع ریاضی مناسب‌ترند؟

$$(1) \text{ توابع نوع اسپینتری}$$

$$(2) \text{ توابع نوع گاوسی}$$

$$(3) \text{ ترکیب خطی از توابع نوع گاوسی}$$

$$(4) \text{ ترکیب خطی از توابع نوع اسپینتری}$$

۴۱- در یک اندازه‌گیری مقدار $\frac{1}{2}\hbar$ برای بزرگی اندازه حرکت زاویه‌ای اوربیتالی یک ذره حاصل می‌شود. اگر اکنون \hat{L}_x اندازه‌گیری شود، کدام یک حاصل نمی‌شود؟

$$(1) -\hbar$$

$$(2) 0$$

$$(3) \hbar$$

$$(4) 2\hbar$$

۴۲- فرمول نظریه اختلال تک حالتی $E^{(1)} = \langle \psi^{(0)} | \hat{H}' | \psi^{(0)} \rangle$:

(۱) برای هر حالی به کار می‌رود.

(۲) تنها برای حالت پایه به کار می‌رود.

(۳) برای سیستم‌های با چند حالتی برای هر حالتی به کار می‌رود.

(۴) برای سیستم‌های بدون چند حالتی به کار می‌رود.

۴۳- فرض کنید که مجموع دو اندازه حرکت زاویه‌ای $\mathbf{M} = \mathbf{M}_1 + \mathbf{M}_2$ باشد، در این صورت $[\hat{M}^2, \hat{M}_{1z}]$ برابر است با:

$$(۱) -2i\hbar(\hat{M}_{1x}\hat{M}_{2y} - \hat{M}_{1y}\hat{M}_{2x}) \quad (۲) i\hbar(\hat{M}_{1x}\hat{M}_{2y} - \hat{M}_{1y}\hat{M}_{2x})$$

$$(۳) -i\hbar(\hat{M}_{1x}\hat{M}_{2y} - \hat{M}_{1y}\hat{M}_{2x}) \quad (۴) 2i\hbar(\hat{M}_{1x}\hat{M}_{2y} - \hat{M}_{1y}\hat{M}_{2x})$$

۴۴- دترمینان اسلیتر برای حالت پایه بریلیم کدام است؟

$$(۱) |1s2s\bar{1}s2s\bar{1}s| \quad (۲) |1s1s\bar{2}s2s\bar{1}s\bar{1}s|$$

$$(۳) |1s1s2s2s1s1s| \quad (۴) |1s2s1s2s1s1s|$$

۴۵- روش هارتری - فاک قادر است:

(۱) انرژی واقعی ناسبیتی یک اتم چند الکترونی را حاصل می‌کند.

(۲) انرژی ناسبیتی یک اتم چند الکترونی را حاصل کند.

(۳) انرژی یک اتم را به صورت مجموع انرژی‌های اوربیتالی الکترون‌های آن حاصل می‌کند.

(۴) انرژی واقعی یک اتم چند الکترونی را حاصل می‌کند.

مجموع آزمون دکتری