



308

F

نام:

نام خانوادگی:

محل امضا:

صبح جمعه

۹۳/۱۲/۱۵

دفترچه شماره ۱ از ۲



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

اگر دانشگاه اصلاح شود مملکت اصلاح می‌شود.

امام خمینی (ره)

آزمون ورودی
دوره‌های دکتری (نیمه متمرکز) داخل - سال ۱۳۹۴

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 + کوانتوم) | ۴۵ | ۱ | ۴۵ |

این آزمون نمره منفی دارد.

استفاده از ماشین حساب مجاز نیست.

اسفند ماه - سال ۱۳۹۳

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 یا منخلین برابر مقررات رفتار می‌نماید.

۱- معادله حالت زیر را برای یک گاز در نظر بگیرید. مقدار $(\frac{\partial S}{\partial V})_T$ کدام است؟

$$P = \left(\frac{RT}{V-b} \right) e^{-\frac{a}{VRT}}$$

$$\left(\frac{P}{VRT^2} \right) \quad (1)$$

$$\frac{P}{T} \left(1 + \frac{a}{VRT} \right) \quad (2)$$

$$P \left(1 + \frac{a}{VRT^2} \right) \quad (3)$$

$$\frac{P}{T^2} \left(1 + \frac{a}{VRT^2} \right) \quad (4)$$

۲- برای واکنشی با قانون سرعت $r = k[A]^n$ از رسم $\log t_{\frac{1}{2}}$ بر حسب $\log [A]_0$ خط راستی با شیب $-1/95$ بدست آمده است. مرتبه واکنش n برابر کدام است؟

$$-2 \quad (1)$$

$$-1 \quad (2)$$

$$2 \quad (3)$$

$$3 \quad (4)$$

۳- انرژی آزاد هلمهولتز مولی (A) برای یک گاز واندروالس در دمای ثابت برابر کدام است؟

$$-\frac{a}{v} - RT \ln \frac{1}{V_m - b} + cte \quad (1)$$

$$-\frac{a^2}{v_m^2} - RT \ln \frac{1}{V_m - b} + cte \quad (2)$$

$$-\frac{a}{v_m} - RT \ln (V_m - b) + cte \quad (3)$$

$$-\frac{a^2}{v_m^2} - RT \ln (V_m - b) + cte \quad (4)$$

۴- ضریب تراکم گاز واندروالس برابر کدام است؟

$$Z = \frac{1}{1 - \frac{b}{V_m}} - \frac{a}{RTV_m} \quad (1)$$

$$Z = \frac{1}{1 - \ln v_m} - \frac{a}{nTV_m} \quad (2)$$

$$Z = \frac{a}{RTV_m} - \frac{1}{bV_m} \quad (3)$$

$$Z = -\frac{a}{RTV_m} + \frac{V_m}{1-b} \quad (4)$$

۵- با افزایش دمای یک گاز ایده آل سرعت میانگین آن (\bar{u}) دو برابر شده است، در همین شرایط محتملترین سرعت آن (α) چند برابر می شود؟

(۱) ۱

(۲) $\frac{3}{2}$

(۳) ۲

(۴) $\frac{8}{\pi}$

۶- علت اینکه فاز مایع کربن دی اکسید در شرایط اطاق (دمای 25°C و فشار یک بار) مشاهده نمی شود، کدام است؟

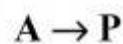
(۱) نقطه سه گانه کربن دی اکسید بالاتر از فشار یک بار است

(۲) دیاگرام فازی کربن دی اکسید نقطه سه گانه ندارد

(۳) فشار بحرانی کربن دی اکسید برابر یک بار دست

(۴) نقطه جوش نرمال کربن دی اکسید پایین تر از نقطه ذوب آن است

۷- واکنش خود کاتالیزوری زیر داده شده است،



$$U = -\frac{d[A]}{dt} = K[A][P]$$

مقدار فراورده پس از گذشت زمان t از شروع واکنش کدام است؟ ($[P_0]$ و $[A_0]$ مقدار اولیه اند) و

$$a = k([A_0] + [P_0]) \text{ و } b = \frac{[P_0]}{[A_0]} \text{ است.}$$

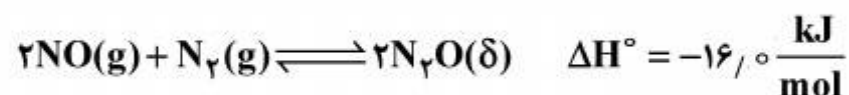
$$[P_0] \left(1 + \frac{e^{at} - 1}{1 + b e^{at}} \right) \quad (1)$$

$$[P_0] \cdot \frac{e^{at} - 1}{1 + b e^{at}} \quad (2)$$

$$\frac{[P_0] e^{at}}{1 + b e^{at}} \quad (3)$$

$$[P_0] \left(1 - \frac{e^{at} - 1}{1 + b e^{at}} \right) \quad (4)$$

۸- کدام عبارت، برای واکنش زیر صحیح است؟



(۱) در دمای کم $k < 1$ و در دمای زیاد $k > 1$

(۲) در دمای کم $k > 1$ و در دمای زیاد $k < 1$

(۳) در هر دمایی $k > 1$

(۴) در هر دمای $k < 1$

۹- واکنش بنیادی $A + H_2O \rightarrow C + D$ در حضور مقدار زیادی آب چگونه است؟

(۱) مولکولاریته برابر واحد و مرتبه واکنش برابر دو است.

(۲) مولکولاریته برابر دو و مرتبه واکنش برابر واحد است.

(۳) مولکولاریته واکنش هر دو برابر واحد است.

(۴) مولکولاریته و مرتبه واکنش هر دو برابر دو است.

۱۰- انرژی درونی یک گاز $U(S, V) = aV^{-\frac{2}{3}} e^{\frac{2}{3} \frac{S}{R}}$ است. که a ثابت است. معادله حالت این گاز کدام است؟

$$PV = RT \quad (1)$$

$$\left(P + \frac{a}{V^2}\right)(V - b) = RT \quad (2)$$

$$\left(P + \frac{a}{V^2}\right)V = RT \quad (3)$$

$$P(V - b) = RT \quad (4)$$

۱۱- اگر یک مولکول هیدروژن (H_2) فقط بتواند روی یک خط حرکت کند، درجه آزادی انتقالی، چرخشی و

ارتعاشی آن به ترتیب (از راست به چپ) برابر کدام است؟

$$1, 1, 1 \quad (1)$$

$$0, 1, 1 \quad (2)$$

$$1, 0, 1 \quad (3)$$

$$1, 1, 0 \quad (4)$$

۱۲- برای چه نوع واکنشی نسبت غلظت فراورده‌های C و B از رابطه زیر به دست می‌آید؟ (k_1 و k_2 ثابت‌های

سرعت می‌باشند).

$$\frac{[C]}{[B]} = \frac{k_1}{k_2}$$

(۱) زنجیری

(۲) موازی

(۳) متوالی

(۴) تعادلی

۱۳- اگر معادله حالت گاز حقیقی به صورت $Z = 1 + \frac{bP}{RT}$ باشد، ضریب فوگاسیته (γ) آن کدام است؟

$$e^{\left(\frac{bp}{RT}\right)} \quad (1)$$

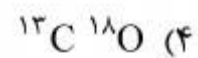
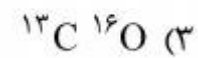
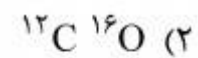
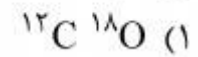
$$e^{\left(\frac{bp}{RT}\right)} \quad (2)$$

$$e^{\left(\frac{bp^2}{RT^2}\right)} \quad (3)$$

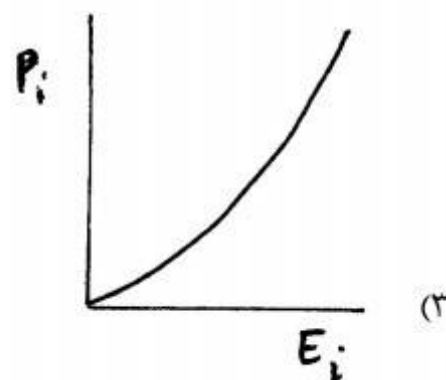
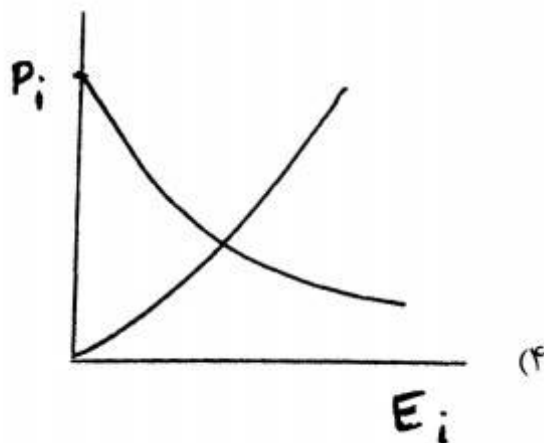
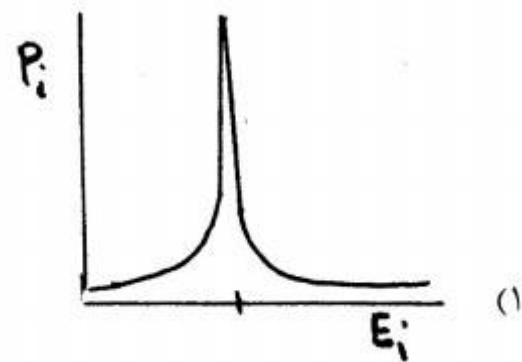
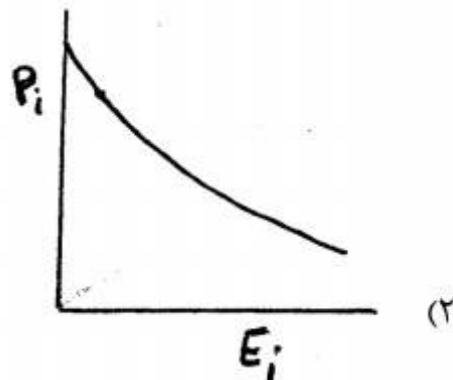
$$e^{\left(\frac{bp}{RT^2}\right)} \quad (4)$$

- ۱۴- بر اساس نظریه کمپلکس فعال، سرعت واکنش متناسب با کدام است؟
- (۱) تعداد برخوردها
 - (۲) سطح مقطع برخورد
 - (۳) تعداد برخوردهای موثر
 - (۴) فرکانس ارتعاشی یکی از پیوندهای ضعیف
- ۱۵- اگر نیروهای بین ملکولی گاز A قویتر از B باشد، اما هر دو گاز از معادله حالت و اندروالس تبعیت کنند و ملکول‌های هم اندازه داشته باشند، Z_c و T_c مربوط به گاز A نسبت به گاز B به ترتیب ... است.
- (۱) مساوی و بزرگتر
 - (۲) بزرگتر و مساوی
 - (۳) مساوی و کوچکتر
 - (۴) کوچکتر و مساوی
- ۱۶- در یک سیستم دوترازی با انرژی‌های ϵ_0 و ϵ_1 که چندحالتی هر تراز برابر یک است، تابع پارش و میانگین انرژی در شرایط $T \rightarrow \infty$ به ترتیب عبارتست از:
- (۱) ϵ_0 و ϵ_1
 - (۲) ϵ_0 و ۲
 - (۳) ϵ_0 و $\frac{\epsilon_0 + \epsilon_1}{2}$
 - (۴) ۲ و $\frac{\epsilon_0 + \epsilon_1}{2}$
- ۱۷- نسبت احتمال بروز حداکثر تجمع در حالت‌های چرخشی برای مولکول H_2 (هر هسته H دارای اسپین $\frac{1}{2}$ است) با عدد کوانتومی چرخشی است.
- (۱) فرد چرخشی سه برابر عدد کوانتومی زوج
 - (۲) فرد چرخشی همسان با عدد کوانتومی زوج
 - (۳) زوج چرخشی سه برابر عدد کوانتومی فرد
 - (۴) فرد چرخشی نصف عدد کوانتومی زوج
- ۱۸- اگر مقدار دمای مشخصه چرخشی برای مولکول H_2 ، θ_r باشد، این کمیت برای HD چقدر است؟
- (۱) $\frac{\theta_r}{2}$
 - (۲) $\frac{3\theta_r}{4}$
 - (۳) $\frac{\theta_r}{4}$
 - (۴) $\frac{2\theta_r}{3}$

۱۹- برای کدام ملکول، عدد کوانتومی چرخشی که به ازاء آن حداکثر تجمع در حالت‌های چرخشی رخ می‌دهد بزرگتر است؟



۲۰- کدام نمودار احتمال یافتن سیستم با انرژی مشخص را نشان می‌دهد؟



۲۱- براساس اصل برابری احتمالات پیشین در چه شرایطی ذرات تمایل بیشتری به اشغال ترازهای پایه دارند؟

(۱) دماهای پایین

(۲) همدمای بودن سیستم

(۳) حذف شرط منزوی بودن سیستم

(۴) کم بودن تعداد ذرات سیستم

۲۲- سیستمی را که دارای تعداد زیادی ذره (N) در دمای T است در نظر گرفته به طوری که این سیستم تنها در دو حالت انرژی $E_1 = 0$ و $E_2 = E$ پرجمعیت باشد. فاکتور وزن آماری g در هر دو حالت یکسان است. در

حد $T \rightarrow \infty$ نسبت $\frac{N(E_1)}{N(E_2)}$ چقدر است؟

(۱) ۱

(۲) ۰

(۳) $\frac{1}{2}$ (۴) ∞

۲۳- تابع پارش مولکول گازی از رابطه $q = bT^{\frac{\gamma}{2}}$ به دست می‌آید، C_p مولی گاز برابر کدام است؟ (b مقداری ثابت است.)

$$\frac{\gamma}{2} bR \quad (1)$$

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

$$\frac{9}{2} R \quad (3)$$

$$\frac{9}{2} bR \quad (4)$$

۲۴- دو ذره کلاسیکی دارای ترازهای با انرژی ۰، ۴، ۲۴ با چند حالتی‌های به ترتیب ۱، ۲ و ۴ در اختیار است. چند حالت ممکن برای این سیستم وجود دارد؟

$$18 \quad (1)$$

$$20 \quad (2)$$

$$21 \quad (3)$$

$$42 \quad (4)$$

۲۵- هرگاه انرژی ذره‌ای یکی از مقادیر ۱، ۲، ۳، ۴، ۵ و ۶ واحد با احتمال $\frac{1}{21}$ ، $\frac{2}{21}$ ، $\frac{3}{21}$ ، $\frac{4}{21}$ ، $\frac{5}{21}$ و $\frac{6}{21}$ باشد، میانگین انرژی این ذره چقدر است؟

$$4.5 \quad (1)$$

$$4.3 \quad (2)$$

$$5.1 \quad (3)$$

$$\frac{5}{21} \quad (4)$$

۲۶- هرگاه انرژی یک نوسانگر کوانتومی برابر $E_n = nh\nu$ ($n = 0, 1, 2, \dots, \infty$) باشد تابع پارش این سیستم چیست؟

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

$$1 - e^{-\frac{h\nu}{kT}} \quad (2)$$

$$\frac{1}{1 - e^{-\frac{h\nu}{kT}}} \quad (3)$$

$$1 - e^{-\frac{h\nu}{kT}} \quad (4)$$

$$e^{-\frac{h\nu}{kT}} \quad (5)$$

$$\frac{h\nu}{kT} \quad (6)$$

$$e^{\frac{h\nu}{kT}} \quad (7)$$

- ۲۷- در حد دمای بسیار بالا کدام عبارت صحیح است؟
 (۱) جمعیت کلیه ترازها با هم برابر می‌شوند.
 (۲) جمعیت پایین‌ترین تراز صفر می‌شود.
 (۳) جمعیت بالاترین تراز بیشترین مقدار را دارد.
 (۴) جمعیت هر تراز متناسب با چند حالتی در آن تراز است.
- ۲۸- کدام معادله در ترمودینامیک، حاوی تمام اطلاعات ترمودینامیکی (معادله‌ی اساسی) است؟
 (۱) $S = S(U, V, N)$
 (۲) $S = U(T, V, N)$
 (۳) $S = U(P, V, N)$
 (۴) $S = S(T, P, N)$
- ۲۹- احتمال جهش از اولین حالت برانگیخته ارتعاشی ($n=1$) به دومین حالت ($n=2$) برای کدام مولکول در دمای $298K$ بیشتر است؟
 (۱) $H_2(g)$
 (۲) $O_2(g)$
 (۳) $N_2(g)$
 (۴) $I_2(g)$
- ۳۰- اگر مقدار ثابت b به سطوح انرژی (ویژه مقادیر) در $q = \sum_i e^{-\beta \epsilon_i}$ اضافه شود، کدام متغیرهای ترمودینامیکی تغییر نخواهند کرد؟ $\beta = \frac{1}{kT}$
 (۱) انتروپی و انرژی آزاد هلمهولتز
 (۲) انرژی درونی و انرژی آزاد هلمهولتز
 (۳) انرژی درونی و فشار
 (۴) انتروپی و فشار
- ۳۱- حاصلضرب عدم قطعیت در اندازه‌گیری دو عملگر $\hat{L}_x + \hat{L}_y, \hat{L}_z$ کدام است؟
 (۱) $\geq \frac{\hbar^2}{2}$
 (۲) $\geq \frac{\hbar^2}{2}$
 (۳) $\geq \frac{\hbar}{2}$
 (۴) $= 0$
- ۳۲- اگر $\hat{L}_{\pm} = (\hat{L}_x \pm i\hat{L}_y)$ باشد که \hat{L}_x و \hat{L}_y به ترتیب مولفه‌های x و y اندازه حرکت زاویه‌ای هستند، عبارت است از: $(\hat{L}_+ \hat{L}_- y_m^\ell(\theta, \phi))$ توابع هارمونیک کروی هستند.
 (۱) $[\ell(\ell+1) - m(m-1)] \hbar^2 y_m^\ell(\theta, \phi)$
 (۲) $[\ell(\ell+1) - m(m+1)] \hbar^2 y_m^\ell(\theta, \phi)$
 (۳) $[\ell(\ell+1) + m(m+1)] \hbar^2 y_m^\ell(\theta, \phi)$
 (۴) $[\ell(\ell+1) + m(m-1)] \hbar^2 y_m^\ell(\theta, \phi)$

۳۳- ذره‌ای با انرژی مشخص به طور آزاد در یک بعد در حرکت است، دانسیته احتمال ... بوده و عدم قطعیت مکانی آن ... است.

(۱) فقط مستقل از زمان بوده - محدود

(۲) مستقل از مکان بوده - بینهایت

(۳) مستقل از زمان بوده - محدود

(۴) مستقل از زمان و مکان بوده - صفر

۳۴- چند حالتی تابع $\Psi_{(4,3)}$ برای اتم هیدروژن برابر کدام است؟

(۱) ۱۴

(۲) ۱۶

(۳) ۱۸

(۴) ۲۰

۳۵- تابع موج یک اتم هیدروژن به صورت زیر است:

$$\Psi_{(r,t=0)} = \frac{1}{\sqrt{14}} [2\Psi_{100}(r) - 3\Psi_{200}(r) + \Psi_{222}(r)]$$

احتمال پیدا کردن سیستم در حالت (100) و $(3,2,1)$ به ترتیب کدام است؟

(۱) $(\frac{1}{\sqrt{14}}, \frac{1}{\sqrt{14}})$

(۲) $(0, \frac{2}{\sqrt{14}})$

(۳) $(0, \frac{2}{7})$

(۴) $(\frac{1}{14}, \frac{2}{14})$

۳۶- زاویه‌ای که بردار اسپین S با محور Z برای الکترونی با تابع اسپینی α می‌سازد چقدر است؟

(۱) $\text{Arc sin} \frac{\sqrt{2}}{2}$

(۲) $\text{Arc cos} \frac{\sqrt{3}}{3}$

(۳) $\text{Arc sin} \frac{\sqrt{3}}{3}$

(۴) $\text{Arc cos} \sqrt{2}$

۳۷- برای اتم هیدروژن در یک حالت p ، مقدار $\langle L_z \rangle$ برای ψ_{2p_z} ، ψ_{2p_y} و ψ_{2p_x} به ترتیب با چه احتمالی بدست می آید؟

(۱) $\pm \hbar$ با احتمال ۲۵٪، $\pm \frac{\hbar}{2}$ با احتمال ۵۰٪، $\pm \hbar$ با احتمال صفر

(۲) $\pm \frac{\hbar}{2}$ با احتمال ۵۰٪، صفر با احتمال ۱۰۰٪، $\pm \hbar$ با احتمال ۱۰۰٪

(۳) صفر با احتمال ۱۰۰٪، $\frac{\hbar}{2}$ و $-\frac{\hbar}{2}$ هر یک با احتمال ۵۰٪، \hbar با احتمال ۱۰۰٪

(۴) \hbar با احتمال صفر، $\pm \frac{\hbar}{2}$ هر یک با احتمال ۲۰٪، صفر با احتمال ۱۰۰٪

۳۸- اگر برای یک سیستم $\hat{H} = -\hat{D}^2 + \hat{x}^2$ و $\psi = A x e^{-x^2}$ ویژه تابع آن باشد، ویژه مقدار آن کدام است؟

$$\hat{D} = \frac{d}{dx}$$

(۱) $3 - x^2$

(۲) -3

(۳) $x^2 - 3$

(۴) 3

۳۹- کدام عبارت یک نتیجه صحیح از اصل عدم قطعیت هایزنبرگ نیست؟

(۱) اندازه حرکت یک الکترون را نمی توان دقیقاً مشخص کرد.

(۲) یک نوسانگر هماهنگ دارای انرژی نقطه صفر است.

(۳) یک الکترون در یک اتم را نمی توان با یک مدار کاملاً معین توصیف کرد.

(۴) هر چقدر طول عمر یک حالت برانگیخته در یک اتم کمتر باشد، انرژی آن با دقت کمتری اندازه گیری می شود.

۴۰- انرژی الکترونی محاسبه شده با کدام روش، ممکن است از انرژی واقعی سیستم کمتر باشد؟

(۱) CI

(۲) HF

(۳) MP₂

(۴) DFT

۴۱- همه انتقالات الکترونی زیر مجازند بجز:

(۱) $3s \rightarrow 5p$

(۲) $2p \rightarrow 3d$

(۳) $3s \rightarrow 5d$

(۴) $1s \rightarrow 2p$

۴۲- تابع هارمونیک کروی $Y_{\ell}^m(\theta, \phi)$ ویژه تابع عملگرهای:

$$(1) \hat{L}^2 \text{ بوده اما ویژه تابع } \hat{L}_z, \hat{L}_{\pm} \text{ نیست.}$$

$$(2) \hat{L}^2, \hat{L}_z \text{ بوده، اما ویژه تابع } \hat{L}_{\pm} \text{ نیست.}$$

$$(3) \hat{L}^2, \hat{L}_z \text{ و } \hat{L}_{\pm} \text{ نیست.}$$

$$(4) \hat{L}^2, \hat{L}_z \text{ و } \hat{L}_{\pm} \text{ است.}$$

۴۳- در کدام اوربیتال هیدروژنی هر سه خاصیت انرژی، بزرگی اندازه حرکت زاویه‌ای، و مؤلفه Z اندازه حرکت زاویه‌ای الکترون معین است؟

$$(1) 3d_{xy}$$

$$(2) 2p_x$$

$$(3) 2p_y$$

$$(4) 3d_z^2$$

۴۴- عملگر انتقال مطابق با $\hat{T}_h f(x) = f(x+h)$ تعریف می‌شود. عبارت $\hat{T}_1^{-1} x^2$ برابر کدام است؟

$$(1) Z$$

$$(2) 1$$

$$(3) 2+x$$

$$(4) 2-x$$

۴۵- برای یک سیستم کوانتومی یک ذره‌ای سه بعدی، کدام رابطه صحیح است؟ (V انرژی پتانسیل است)

$$(1) [\hat{p}_y, \hat{H}] = +h \frac{\partial V}{\partial y}$$

$$(2) [\hat{p}_y, \hat{H}] = -h \frac{\partial V}{\partial y}$$

$$(3) [\hat{p}_y, \hat{H}] = -ih \frac{\partial V}{\partial y}$$

$$(4) [\hat{p}_y, \hat{H}] = ih \frac{\partial V}{\partial y}$$

