

کد کنترل

250

E



نام:

نام خانوادگی:

محل امضا:

 <p>«اگر دانشگاه اصلاح شود مملکت اصلاح می‌شود.» امام خمینی (ره)</p> <p>جمهوری اسلامی ایران وزارت علوم، تحقیقات و فناوری سازمان سنجش آموزش کشور</p>	<p>صبح جمعه ۱۳۹۶/۱۲/۴ دفترچه شماره (۱)</p>			
<p>آزمون ورودی دوره دکتری (نیمه‌متمرکز) - سال ۱۳۹۷</p> <p>رشته شیمی - شیمی فیزیک (کد ۲۲۱۱)</p>				
تعداد سؤال: ۴۵	مدت پاسخگویی: ۱۵۰ دقیقه			
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.		
<p>حق چاپ، تکثیر و انتشار سؤالات به هر روش (الکترونیکی و...) پس از برگزاری آزمون، برای نعلی اشخاص حقیقی و حقوقی آنها با مجوز این سازمان مجاز می‌باشد و با متغییرن برابر حرزرات رفتار می‌شود.</p>				

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

اینجانب با شماره داوطلبی در جلسه این آزمون شرکت می‌نمایم.

امضا:

۱- در واکنش کاهش منیزیم اکسید، در صورتی که فشار اولیه ۳۰۰ میلی‌متر جیوه باشد، ۵۰٪ واکنش در ۲۴۲ ثانیه انجام می‌شود و در صورتی که 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

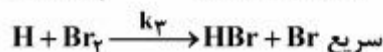
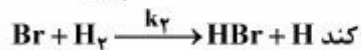
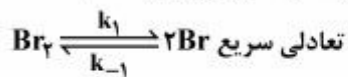
۲- چنانچه محلول اشباع آب - نمک در تعادل ترمودینامیکی باشد، آنگاه:

- (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، ΔC_p و ΔH به ترتیب چگونه هستند؟

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

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



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

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

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

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

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

$$E' = E_a + \gamma RT \quad (۱)$$

$$E' = E_a - \gamma RT \quad (۲)$$

$$E' = E_a + \frac{RT}{\gamma} \quad (۳)$$

$$E' = E_a - \frac{RT}{\gamma} \quad (۴)$$

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

$$\frac{1}{k} = \frac{k'_a}{k_a k_b} \quad (۱)$$

$$\frac{1}{k} = \frac{k_b}{k_a k'_a} \quad (۲)$$

$$\frac{1}{k} = \frac{k_a}{k'_a k_b} \quad (۳)$$

$$\frac{1}{k} = \frac{k_a k_b}{k'_a} \quad (۴)$$

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

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

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

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

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

۸- معادله کلاپیرون $\left(\frac{dP}{dT} = \frac{\Delta S}{\Delta V}\right)$ 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 $p_1 = 100x_1(1 + 2x_1^2)$ 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؟

$$100 \quad (۱)$$

$$300 \quad (۲)$$

$$400 \quad (۳)$$

$$500 \quad (۴)$$

۱۰- تغییرات آنتروپی سیستم ΔS_{sys} ، محیط اطراف ΔS_{surr} و کل ΔS_t در یک فرایند انبساط آدیاباتیکی غیربرگشت پذیر گاز ایده آل چقدر است؟

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

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

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

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

۱۱- یک مول آب مایع به طور آدیاباتیکی متراکم و فشار آن از P_1 (atm) به P_2 (atm) می‌رسد. ΔH این فرایند، کدام است؟

$$0 \quad (۱)$$

$$-nV_m \Delta P \quad (۲)$$

$$nV_m \Delta P \quad (۳)$$

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

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

$$-2bT - 6cT^{-3} \quad (۱)$$

$$2b + 6cT^{-4} \quad (۲)$$

$$2bT + 6T^{-3} \quad (۳)$$

$$2bT + 2T^{-3} \quad (۴)$$

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

$$(RT + \alpha) \ln \frac{1}{10} \quad (۱)$$

$$RT \ln 10 - 9\alpha \quad (۲)$$

$$(RT + \alpha) \ln 10 \quad (۳)$$

$$RT \ln 10 + 9\alpha \quad (۴)$$

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

$$U = U(S, V, N) \quad (۲)$$

$$U = U(T, V, N) \quad (۱)$$

$$U = U(S, P, N) \quad (۴)$$

$$U = U(T, P, N) \quad (۳)$$

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؟

$$(1) \mu_{JT} > 0, Z < 1$$

$$(2) \mu_{JT} < 0, Z < 1$$

$$(3) \mu_{JT} > 0, Z > 1$$

$$(4) \mu_{JT} < 0, Z > 1$$

۱۶- برای واکنش $2\text{Na}(g) \rightleftharpoons \text{Na}_2(g)$ ثابت تعادل K_p به ترتیب (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؟

$$(1) V$$

$$(2) V^N$$

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

$$(4) \frac{1}{V^N}$$

۱۹- مطابق معادله لیوویل کدام رابطه همواره درست است؟ (f تابع دانسیته فضای فاز است.)

$$(1) \frac{\partial f}{\partial t} = 0$$

$$(2) \frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t}$$

$$(3) \frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} = 0$$

$$(4) \frac{df}{dt} = 0$$

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 حالات الکترونی برانگیخته در تابع پارش الکترونی، قابل صرف نظر نیست؟

(۱) H (۲) Ar (۳) Cl (۴) Na

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

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

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

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

$$(۱) \frac{\lambda \pi^2 I k T}{h^2}$$

$$(۲) \frac{\lambda \pi^2 I k T}{2 h^2}$$

$$(۳) \frac{\lambda \pi^2 I k T}{3 h^2}$$

$$(۴) \frac{\lambda \pi^2 I k T}{4 h^2}$$

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

$$(۱) ۱۲$$

$$(۲) ۶$$

$$(۳) ۴$$

$$(۴) ۳$$

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

$$(۱) \frac{q}{\lambda}$$

$$(۲) \lambda q$$

$$(۳) \frac{\lambda}{q}$$

$$(۴) \frac{1}{\lambda q}$$

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

$$(۱) \frac{3/4}{e k T}$$

$$(۲) \frac{3/4}{e k T}$$

$$(۳) \frac{3/4}{6 e k T}$$

$$(۴) \frac{3/4}{1 e k T}$$

- ۲۷- برای محاسبه انرژی آزاد گیبس از کدام هنگرد (مجموعه آماری)، استفاده می‌شود؟
 (۱) کانونی (۲) کانونی کوچک (۳) هم‌دما - 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 $\langle x \rangle$ 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؟

$$\int_{-1}^{+1} \delta(x) dx \quad (۱)$$

$$\int_{-\infty}^{-1} \delta(x) dx \quad (۲)$$

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

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

۳۳- کدام یک از انتگرال‌های زیر، مخالف صفر است؟ $(\psi_{\alpha} = B \alpha e^{\frac{Zr}{a_0}}, \psi_{\beta} = A(2 - \frac{Zr}{a_0})e^{\frac{Zr}{a_0}})$ ، $\alpha = x, y, z$.

A و B هر دو ثابت هستند.

$$(1) \langle \psi_{\beta} | x^2 | \psi_{\alpha} \rangle$$

$$(2) \langle \psi_{\beta} | x^2 | \psi_{\beta} \rangle$$

$$(3) \langle \psi_{\beta} | x | \psi_{\beta} \rangle$$

$$(4) \langle \psi_{\beta} | x | \psi_{\alpha} \rangle$$

۳۴- با در نظر گرفتن عملگر اسپین - اوربیت به صورت $\hat{S} \cdot \hat{L}$ در یک اتم چند الکترونی با جمله طیفی 3D ، اختلاف انرژی D_1 و D_2 بر حسب A کدام است؟

$$(1) 1$$

$$(2) 2$$

$$(3) 3$$

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

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؟

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

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

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

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

(4) \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؟

$$(1) 3, 0$$

$$(2) 4, -1$$

$$(3) 2, -2$$

$$(4) 3, 2i$$

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

$$(1) \text{ صفر}$$

$$(2) 1$$

$$(3) i\hbar \hat{p}_z$$

$$(4) -i\hbar \hat{p}_z$$

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

$$(1) \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{121} - \psi_{211})$$

$$(2) \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{121} + \psi_{211})$$

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

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

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

$$(1) \phi = x(L-x) \text{ با } 0 \leq x \leq L \text{ برای ذره در جعبه یک بعدی}$$

$$(2) \phi = e^{-cx} \text{ برای اتم H}$$

$$(3) \phi = \left(\frac{x}{L}\right)^{\frac{1}{2}} \text{ برای } 0 \leq x \leq L \text{ برای ذره در جعبه یک بعدی}$$

$$(4) \phi = e^{-\frac{cx^2}{a_0}} \text{ برای اتم H}$$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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{H} و $\hat{\mu}$ به ترتیب عملگر گشتاور دو قطبی و هامیلتونی مولکول هستند.)

$$\int \psi_1^* \hat{\mu} \psi_2 \, dr \quad (1)$$

$$\int \psi_1^* \psi_2 \, dr \quad (2)$$

$$\int \psi_1^* \hat{H} \psi_2 \, dr \quad (3)$$

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

۴۳- هماهنگ‌های کروی (Y_l^m) با کدام ویژه مقدار، ویژه توابع عملگر $\hat{L}_x \hat{L}_y + \hat{L}_y \hat{L}_x$ 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 نرمال‌کنندگی تابع است. احتمال آن که L^2 اندازه‌گیری و مقدار آن $12\hbar^2$ باشد، چقدر است؟

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

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

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

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

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

۴۵- حالت مقید حالتی است که برای آن باشد.

(۱) $\psi \rightarrow 0, x \rightarrow 0$

(۲) $\psi \rightarrow 0, x \rightarrow \pm\infty$

(۳) $\psi \rightarrow \pm\infty, x \rightarrow \pm\infty$

(۴) $\psi \rightarrow \pm\infty, x \rightarrow 0$

