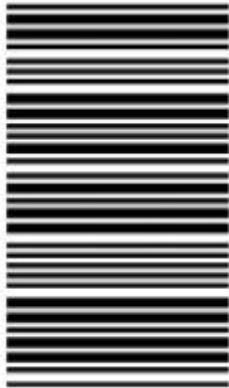


پی اچ دی تست؛ نخستین وب سایت تخصصی آزمون دکتری



308F

308

F

نام:

نام خانوادگی:

محل امضا:

صبح جمعه
۹۳/۱۲/۱۵
دفترچه شماره ۱۱ 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 متوجه) 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 جاپ، تکثیر و انتشار سوالات به هر روش (الکترونیکی و ...) پس از برگزاری آزمون، برای تمامی اشخاص حرفی و حقوقی تنها با مجوز این سازمان مجاز می‌باشد و با مخلفین برای مردانه رفتار می‌شود.

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

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

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

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

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

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

-۲ برای واکنشی با قانون سرعت $\log t_1 - \log t_2 = k[A]^n$ از رسم خط راستی با شیب $-1/95$ بدست آمده است. مرتبه واکنش n برابر کدام است؟

-۲ (۱)

-۱ (۲)

۲ (۳)

۳ (۴)

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

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

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

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

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

-۴ ضریب تراکم گاز واندروالس برابر کدام است؟

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

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

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

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

پی اچ دی تست؛ نخستین وب سایت تخصصی آزمون دکتری

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

۱) ۱

۲) $\frac{3}{2}$

۳) ۲

۴) $\frac{\pi}{8}$

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

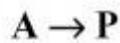
۱) نقطه سه گانه کربن دی‌اکسید بالاتر از فشار یک بار است

۲) دیاگرام فازی کربن دی‌اکسید نقطه سه گانه ندارد

۳) فشار بحرانی کربن دی‌اکسید برابر یک بار دست

۴) نقطه جوش نرمال کربن دی‌اکسید پایین‌تر 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_{∞} [] مقدار اولیه‌اند) و

$$b = \frac{[P_{\infty}]}{[A_{\infty}]} \text{ و } a = k([A_{\infty}] + [P_{\infty}])$$

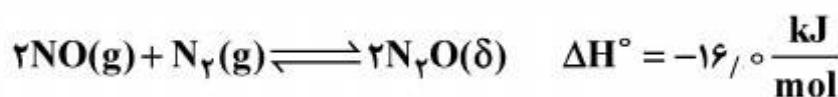
$$[P_{\infty}] \left(1 + \frac{e^{at} - 1}{1 + b e^{at}} \right) \quad (1)$$

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

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

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

-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 دمایی $k < 1$

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

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

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

$$(P + \frac{a}{V})V = RT \quad (3)$$

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

-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؟

۱, ۱, ۱ (۱)

۰, ۱, ۱ (۲)

۱, ۰, ۱ (۳)

۱, ۱, ۰ (۴)

-۱۲- برای چه نوع واکنشی نسبت غلظت فراورده‌های C و B از رابطه زیر به دست می‌آید؟ (k_۱ و k_۲ ثابت‌های سرعت می‌باشند).

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

(۱) زنجیری

(۲) موازی

(۳) متواالی

(۴) تعادلی

-۱۳- اگر معادله حالت گاز حقیقی به صورت $Z = 1 + \frac{bP}{RT^2}$ باشد، ضریب فوگاسیته (γ) آن کدام است؟

$$e^{\left(\frac{bp}{RT^2}\right)} \quad (1)$$

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

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

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

پی اچ دی تست؛ نخستین وب سایت تخصصی آزمون دکتری

- ۱۴- بر اساس نظریه کمپلکس فعال، سرعت واکنش مناسب 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_e 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_1 و ϵ_2 که چندحالتی هر تراز برابر یک است، تابع پارش و میانگین انرژی در شرایط $\infty \rightarrow T$ به ترتیب عبارتست از:
- (۱) $\epsilon_1 + \epsilon_2$
 - (۲) $\frac{\epsilon_1 + \epsilon_2}{2}$
 - (۳) $\frac{\epsilon_1 + \epsilon_2}{\epsilon_1 - \epsilon_2}$
 - (۴) $\frac{\epsilon_1 + \epsilon_2}{2}$
- ۱۷- نسبت احتمال بروز حداکثر تجمع در حالت‌های چرخشی برای مولکول H_2 (هر هسته H_2 دارای اسپین $\frac{1}{2}$ است) با عدد کوانتمی چرخشی است.
- (۱) فرد چرخشی سه برابر عدد کوانتمی زوج
 - (۲) فرد چرخشی همسان با عدد کوانتمی زوج
 - (۳) زوج چرخشی سه برابر عدد کوانتمی فرد
 - (۴) فرد چرخشی نصف عدد کوانتمی زوج
- ۱۸- اگر مقدار دمای مشخصه چرخشی برای مولکول H_2 ، θ_r باشد، این کمیت برای HD چقدر است؟

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

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

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

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

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

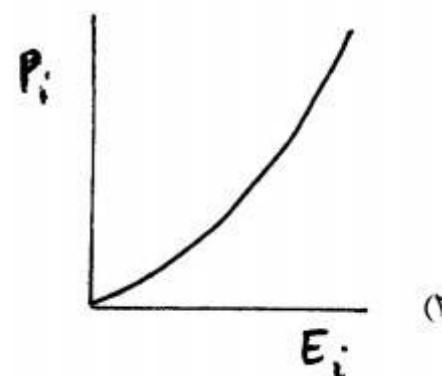
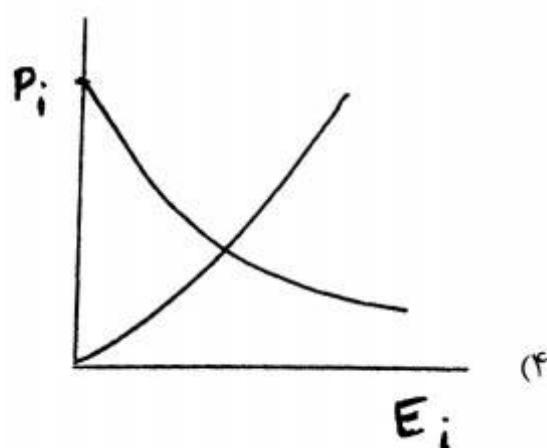
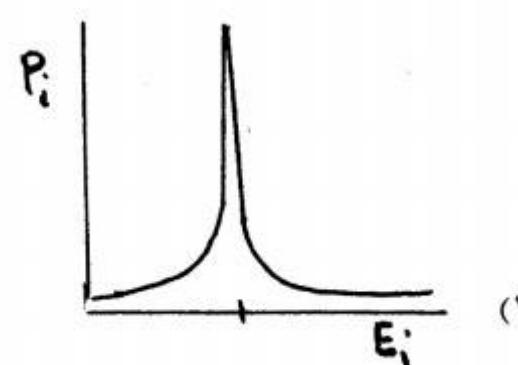
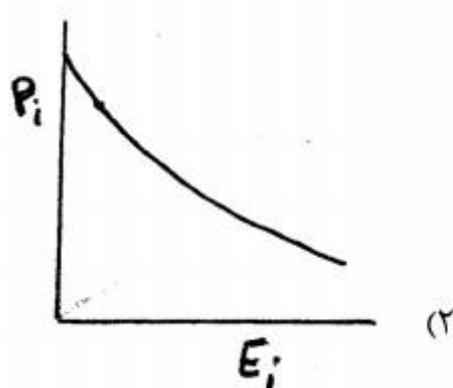
$^{12}\text{C}^{18}\text{O}$ (۱)

$^{12}\text{C}^{16}\text{O}$ (۲)

$^{13}\text{C}^{16}\text{O}$ (۳)

$^{12}\text{C}^{18}\text{O}$ (۴)

- 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) همدمابودن 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 $E_1 = E_2 = 0$ و $E_1 = E_2 = g$ پر جمعیت باشد. فاکتور وزن آماری $\frac{N(E_1)}{N(E_2)}$ در هر دو حالت یکسان است. در

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

۱ (۱)

۰ (۲)

$\frac{1}{2}$ (۳)

∞ (۴)

- ۲۳- تابع پارش مولکول گازی از رابطه $C_p = bT^{\frac{7}{2}}$ به دست می‌آید، b مولی گاز برابر کدام است؟ (b مقداری ثابت است).

$$\frac{7}{2}bR \quad (1)$$

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

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

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

- ۲۴- دو ذره کلاسیکی دارای ترازهای با انرژی $0, 4, 2E$ با چند حالتی‌های به ترتیب ۱، ۲ و ۴ در اختیار است. چند حالت ممکن برای این سیستم وجود دارد؟

۱۸) (۱)

۲۰) (۲)

۲۱) (۳)

۴۲) (۴)

- ۲۵- هرگاه انرژی ذره‌ای یکی از مقادیر $1, 2, 3, 4, 5, 6$ 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؟

۴/۵) (۱)

۴/۳) (۲)

۵/۱) (۳)

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

- ۲۶- هرگاه انرژی یک نوسانگر کوانتمی برابر $E_n = nhV$ باشد تابع پارش این سیستم چیست؟

$$\frac{1}{1 - e^{\frac{hv}{kT}}} \quad (1)$$

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

$$e^{-\frac{hv}{kT}} \quad (3)$$

$$\frac{hv}{e^{kT}} \quad (4)$$

پی اچ دی تست؛ نخستین وب سایت تخصصی آزمون دکتری

- 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 مناسب با چند حالتی در آن تراز است.

- ۲۸ - کدام معادله در ترمودینامیک، حاوی تمام اطلاعات ترمودینامیکی (معادله‌ی اساسی) است؟

$$S = S(U, V, N) \quad (1)$$

$$S = U(T, V, N) \quad (2)$$

$$S = U(P, V, N) \quad (3)$$

$$S = S(T, P, N) \quad (4)$$

- ۲۹ - احتمال جهش از اولین حالت برانگیخته ارتعاشی ($n=1$) به دومین حالت ($n=2$) برای کدام مولکول در دمای $298K$ بیشتر است؟

$$H_{\gamma}(g) \quad (1)$$

$$O_{\gamma}(g) \quad (2)$$

$$N_{\gamma}(g) \quad (3)$$

$$I_{\gamma}(g) \quad (4)$$

- ۳۰ - اگر مقدار ثابت b به سطوح انرژی (ویژه مقادیر) در $q = \sum_i e^{-\beta \epsilon_i}$ اضافه شود، کدام متغیرهای

$$\beta = \frac{1}{kT} \text{ ترمودینامیکی تغییر نخواهد کرد؟}$$

۱) انتروپی و انرژی آزاد هلمهولتز

۳) انرژی درونی و فشار

- ۳۱ - حاصلضرب عدم قطعیت در اندازه‌گیری دو عملگر $\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$ کدام است؟

$$\geq \frac{\hbar^4}{2} \quad (1)$$

$$\geq \frac{\hbar^3}{2} \quad (2)$$

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

$$= 0 \quad (4)$$

- 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،

$y_m^\ell(\theta, \phi)$ توابع هارمونیک کروی هستند).

$$[\ell(\ell+1) - m(m-1)]\hbar^2 y_m^\ell(\theta, \phi) \quad (1)$$

$$[\ell(\ell+1) - m(m+1)]\hbar^2 y_m^\ell(\theta, \phi) \quad (2)$$

$$[\ell(\ell+1) + m(m+1)]\hbar^2 y_m^\ell(\theta, \phi) \quad (3)$$

$$[\ell(\ell+1) + m(m-1)]\hbar^2 y_m^\ell(\theta, \phi) \quad (4)$$

پی اچ دی تست؛ نخستین وب سایت تخصصی آزمون دکتری

- 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 (۱۰۰) و (۳,۲,۱) 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) $\text{Arc cos} \sqrt{2}$

پی اچ دی تست؛ نخستین وب سایت تخصصی آزمون دکتری

- ۳۷- برای اتم هیدروژن در یک حالت p، مقدار L_z برای Ψ_{2p_z} ، Ψ_{2p_y} و Ψ_{2p_x} به ترتیب با چه احتمالی بدست می‌آید؟

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

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

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

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

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

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

۱) x^3

۲) $-x^3$

۳) $x^2 - 3$

۴) 3

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

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

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

(۳) یک الکترون در یک اتم را نمی‌توان 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 اندازه‌گیری می‌شود.

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

۱) CI

۲) HF

۳) MP_Z

۴) DFT

- ۴۱- همه انتقالات الکترونی زیر مجازند بجز:

۱) ۳S → ۵P

۲) ۲P → ۳D

۳) ۳S → ۵D

۴) ۱S → ۲P

پی اچ دی تست؛ نخستین وب سایت تخصصی آزمون دکتری

- ۴۲- تابع هارمونیک کروی $Y_\ell^m(\theta, \phi)$ ویژه تابع عملگرهای:
- (۱) \hat{L}^2 بوده اما ویژه تابع \hat{L}_\pm, \hat{L}_z^3 نیست.
 - (۲) \hat{L}^2, \hat{L}_z^3 بوده، اما ویژه تابع \hat{L}_\pm نیست.
 - (۳) \hat{L}^2 و \hat{L}_\pm, \hat{L}_z^3 نیست.
 - (۴) \hat{L}_\pm و \hat{L}_z^3 است.
- ۴۳- در کدام اوربیتال هیدروژنی هر سه خاصیت انرژی، بزرگی اندازه حرکت زاویه‌ای، و مؤلفه Z اندازه حرکت زاویه‌ای الکترون معین است؟
- (۱) $3d_{xy}$
 - (۲) $2p_x$
 - (۳) $2p_y$
 - (۴) $2d_z^3$
- ۴۴- عملگر انتقال مطابق با $\hat{T}_h f(x) = f(x+h) - f(x)$ برابر کدام است?
- (۱) Z
 - (۲) 1
 - (۳) $2+x$
 - (۴) $2-x$
- ۴۵- برای یک سیستم کوانتومی یک ذره‌ای سه بعدی، کدام رابطه صحیح است؟ (V انرژی پتانسیل است)
- $$[\hat{p}_y, \hat{H}] = +h \frac{\partial V}{\partial y} \quad (1)$$
- $$[\hat{p}_y, \hat{H}] = -h \frac{\partial V}{\partial y} \quad (2)$$
- $$[\hat{p}_y, \hat{H}] = -ih \frac{\partial V}{\partial y} \quad (3)$$
- $$[\hat{p}_y, \hat{H}] = ih \frac{\partial V}{\partial y} \quad (4)$$

