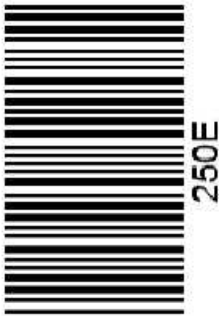


کد کنترل

250

E



250E



«اگر دانشگاه اصلاح شود مملکت اصلاح می‌شود.»
امام خمینی (ره)

دفترچه شماره (1)

صبح جمعه

۹۸/۱۲/۹

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

آزمون ورودی دوره دکتری (نیمه‌متمرکز) - سال ۱۳۹۹

رشته 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 کوانتومی	۴۵	۱	۴۵

این آزمون نمره منفی دارد.

استفاده از ماشین حساب مجاز نیست.

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 متخلفین برابر مقررات رفتار می‌شود.

۱۳۹۹

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

اینجانب با شماره داوطلبی با آگاهی کامل، یکسان بودن شماره صندلی خود را با شماره داوطلبی مندرج در بالای کارت ورود به جلسه، بالای پاسخنامه و دفترچه سؤالات، نوع و کد کنترل درج شده بر روی دفترچه سؤالات و پائین پاسخنامه را تأیید می‌نمایم.

امضا:

۱- معادله بنیادی ترمودینامیکی گیبس برای یک گاز ایده‌ال $U_m = V_m e^{-R/C_{V,m}} e^{(S_m/C_{V,m})}$ است. کدام مورد نتیجه‌ای از این معادله نیست؟

$$\left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_T = 0 \quad (۴) \quad pV = nRT \quad (۳) \quad \left(\frac{\partial U}{\partial p}\right)_T = 0 \quad (۲) \quad \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p = 0 \quad (۱)$$

۲- در مورد $|w_{rev}|$ و $|w_{irrev}|$ در یک فرایند هم‌دما، کدام یک نادرست است؟

$$|w_{rev}| = \Delta\Lambda = w_{max} \quad (۲) \quad |w_{rev}| = \Delta\Lambda \quad (۱)$$

$$|w_{irrev}| > |w_{rev}| \quad (۴) \quad |w_{rev}| \geq |w_{irrev}| \quad (۳)$$

۳- وقتی $T \rightarrow 0$ ، چه تعداد از روابط زیر درست است؟

$$\lim_{T \rightarrow 0} C_p = 0 \quad \lim_{T \rightarrow 0} C_v = 0 \quad \lim_{T \rightarrow 0} \left(\frac{\partial S}{\partial p}\right)_T = 0$$

$$\lim_{T \rightarrow 0} C_p = \frac{TV\alpha^2}{\beta} \quad \lim_{T \rightarrow 0} \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V = 0 \quad \lim_{T \rightarrow 0} \left(\frac{\partial \Delta G}{\partial T}\right)_p = \Delta S$$

۵ (۴)

۴ (۳)

۳ (۲)

۲ (۱)

۴- در یک سیستم بسته که تحت یک فرایند آدیاباتیکی قرار گرفته باشد، کدام گزینه درباره ΔS_{univ} فرایند خودبه‌خودی درست است؟

- (۱) کوچکتر از صفر
(۲) کوچکتر یا مساوی صفر
(۳) بزرگتر از صفر
(۴) بزرگتر یا مساوی صفر

۵- برای گازی، $V\alpha T^k$ که k عددی صحیح است. در آزمایش ژول - تامسون برای چه مقادیری از k ، گاز سردشونده و برای چه مقادیری از آن، گرم‌شونده است؟

- (۱) برای $k = 1$ گاز گرم‌شونده و برای $k < 1$ گاز سردشونده است.
(۲) برای $k > 1$ گاز سردشونده و برای $k < 1$ گاز گرم‌شونده است.
(۳) برای $k = 1$ گاز سردشونده و برای $k < 1$ گاز گرم‌شونده است.
(۴) برای $k > 1$ گاز گرم‌شونده و برای $k < 1$ گاز سردشونده است.

۶- کدام گزینه صحیح است؟

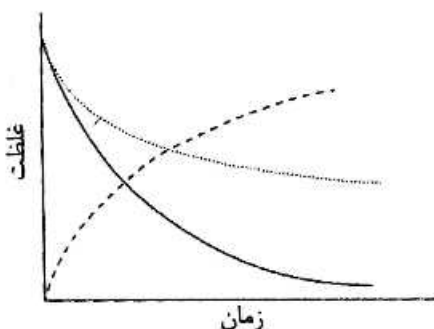
$$\kappa_S \equiv \frac{-1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial p} \right)_S, \quad \beta \equiv \frac{-1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial p} \right)_T$$

(κ_S ضریب تراکم پذیری ایزنتروپیک، β ضریب تراکم پذیری هم‌دما)

$$\frac{\kappa_S}{\beta} = \frac{C_p}{C_V} \quad (۲) \qquad \frac{\kappa_S}{\beta} = \frac{C_V}{C_p} \quad (۱)$$

$$\frac{\kappa_S}{\beta} = \frac{1}{C_p C_V} \quad (۴) \qquad \frac{\kappa_S}{\beta} = C_p C_V \quad (۳)$$

۷- واکنش $O_2(g) + 2H_2(g) \rightarrow 2H_2O(g)$ را در نظر بگیرید. کدام نمودار غلظت هیدروژن را بر حسب زمان



بهتر نشان می‌دهد؟

(۱) نمودار توپر

(۲) نمودار خط چین

(۳) نمودار نقطه چین

(۴) یا نمودار خط چین یا نمودار توپر

۸- برای واکنش $U(s) + \frac{3}{2}H_2(g) \rightarrow UH_3(s)$ فشار تعادلی H_2 در محدوده دمایی 450 K تا 710 K روی عبارت

$$\ln p = a - \frac{b}{T} - c \ln T$$

منطبق می‌شود. آنتالپی استاندارد تشکیل $UH_3(s)$ کدام است؟ (a و b و c ثابت هستند.)

$$\frac{3}{2}(cRT + b) \quad (۲) \qquad \frac{3}{2}(c - bRT) \quad (۱)$$

$$\frac{3}{2}(cRT - b) \quad (۴) \qquad \frac{3}{2}(c + bRT) \quad (۳)$$

۹- برای یک محلول منظم کدام یک از گزینه‌های زیر درست است؟

$$S^{ex} \neq 0, H^{ex} = 0 \quad (۱)$$

$$S^{ex} = 0, H^{ex} = 0 \quad (۲)$$

$$S^{ex} = 0, H^{ex} \neq 0 \quad (۳)$$

$$S^{ex} \neq 0, H^{ex} \neq 0 \quad (۴)$$

۱۰- در صورتی که K_p ثابت تعادل (بر حسب فشار) با فشار افزایش یابد، K_f (ثابت تعادل بر حسب فوگاسیتنه) چگونه

تغییر می‌کند؟

(۱) کاهش می‌یابد.

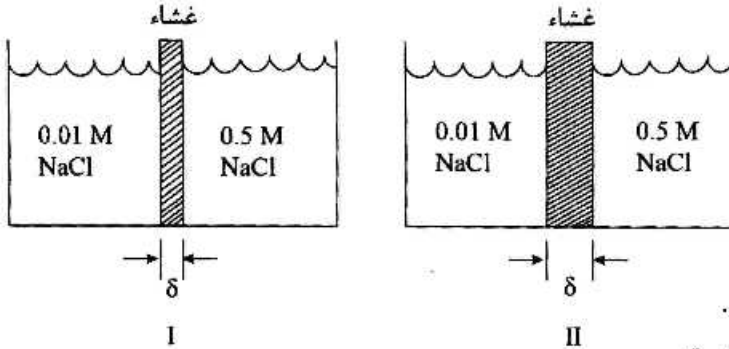
(۲) افزایش می‌یابد.

(۳) ثابت می‌ماند.

(۴) در فشارهای کم کاهش و در فشارهای بالا افزایش می‌یابد.

پی اچ دی تست؛ نخستین وب سایت تخصصی آزمون دکتری

۱۱- دو محلول از NaCl به صورت زیر با یک غشاء از هم جدا شده‌اند. کدام گزینه دربارهٔ شار و ضریب نفوذ درست است؟

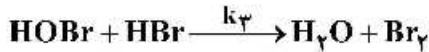
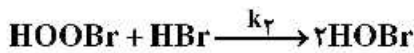
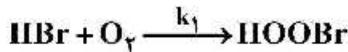


- (۱) هم شار و هم ضریب نفوذ I از II بیش تر است.
 (۲) شار I از II بیش تر و ضریب نفوذ I و II برابر است.
 (۳) هم شار و هم ضریب نفوذ I از II کم تر است.
 (۴) شار I از II کم تر و ضریب نفوذ I و II برابر است.

۱۲- مشتق $\left(\frac{\partial H}{\partial T}\right)_V$ چه رابطه‌ای با α (ضریب انبساط) و β (ضریب تراکم پذیری هم‌دما) دارد؟

- (۱) α (۲) $\frac{\alpha}{\beta}$ (۳) $\frac{\beta}{\alpha}$ (۴) β

۱۳- برای واکنش اکسید شدن HBr با مکانیسم زیر، مرتبه نسبت به HBr کدام است؟



- (۱) صفر (۲) یک (۳) دو (۴) سه

۱۴- در واکنش $A + B \rightarrow C + D$ ، مواد A و B در یک طول موج خاص مطابق قانون بیر جذب دارند، اما C و D جذب

ندارند. فرض کنید $[A]_0 < [B]_0$ ، مقدار $\frac{[A]_0}{[A]}$ کدام است؟ (در چهار گزینه A نشان دهندهٔ جذب است.)

- (۱) $\frac{A_\infty - A}{A_\infty - A_0}$ (۲) $\frac{A_c - A_\infty}{A - A_\infty}$
 (۳) $\frac{A_\infty - A_0}{A_\infty - A}$ (۴) $\frac{A - A_\infty}{A_c - A_\infty}$

۱۵- فرایند ژول-تامسون چه نوع فرایندی است؟

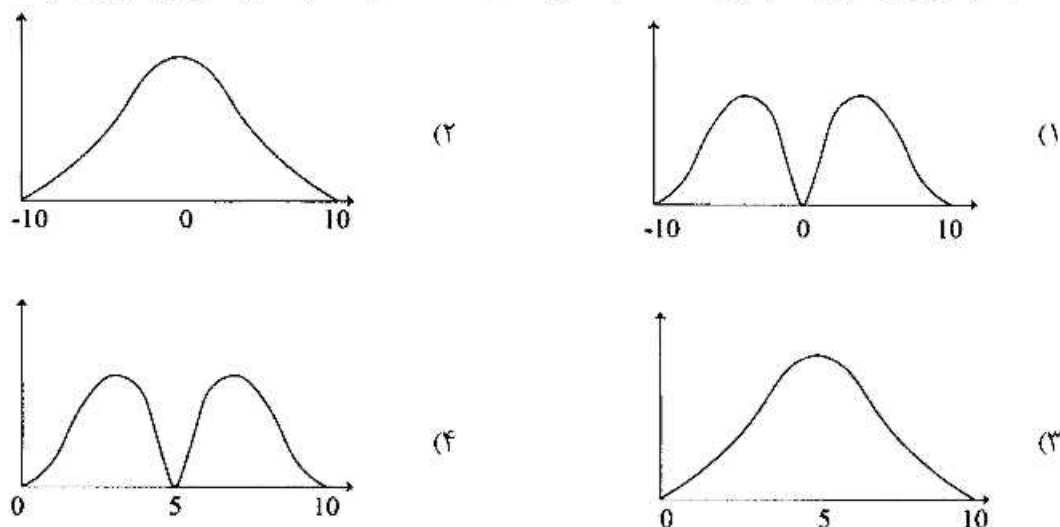
- (۱) آدیباتیک (۲) ایزونتروپیک (۳) ایزنتالپیک (۴) دیاترمیک

۱۶- برای یک سیستم با دو تراز، به طوری که حالت پایین تر در انرژی صفر و حالت بالایی در انرژی ϵ با چندحالتی

دوگانه باشد، $e^{-\beta\epsilon}$ کدام است؟ (q تابع پارش یا تابع تقسیم است.)

- (۱) $\frac{q+1}{2}$ (۲) $q+2$
 (۳) $q-1$ (۴) $\frac{q-1}{2}$

۱۷- کدام نمودار برای ظرفیت گرمایی (C_V / Nk بر حسب ϵ / kT) یک سیستم با دو تراز انرژی درست است؟



۱۸- مجموع ضرایب بخش نمایی تابع پارش چرخشی برای مولکول CH_4 در تراز دوم چرخشی کدام است؟

- (۱) ۵ (۲) ۶ (۳) ۸ (۴) ۹

۱۹- عدد تقارن در تابع پارش چرخشی کدام دو مولکول با هم برابر است؟

- (۱) H_2O و NH_3 (۲) CH_4 و C_2H_6
(۳) C_2H_6 و C_6H_{12} (۴) CH_4 و NH_3

۲۰- اعداد موجی سه شیوه نرمال ارتعاشی H_2O عبارتند از:

$$\nu_1 = 3656.7 \text{ cm}^{-1} \quad \nu_2 = 1594.8 \text{ cm}^{-1} \quad \nu_3 = 3755.8 \text{ cm}^{-1}$$

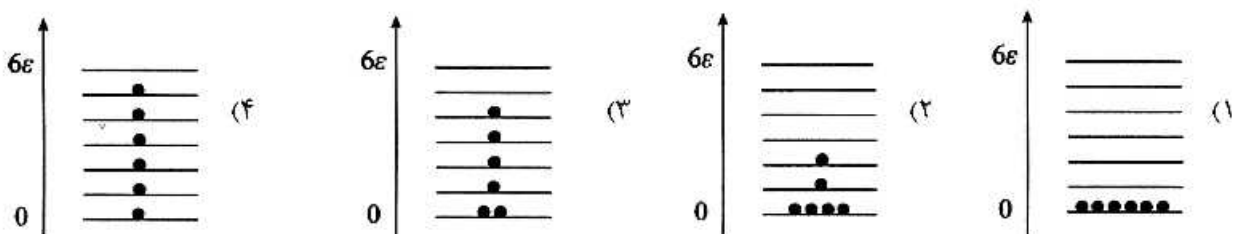
سه سهم کدام شیوه در تابع پارش ارتعاشی مولکول آب بیشتر است؟

- (۱) اول (۲) دوم (۳) سوم (۴) سهم هر سه شیوه برابر است.

۲۱- در مقایسه سهم تابع پارش الکترونی Na و He کدام جمله درست است؟

- (۱) Na از He کمتر است. (۲) Na از He بیشتر است.
(۳) Na کمتر یا مساوی یا He است. (۴) Na بزرگتر یا مساوی یا He است.

۲۲- برای سیستمی با تعداد ذرات و انرژی مشخص، کدام توزیع به تعادل نزدیک تر است؟



۲۳- چگالی حالت‌ها برای یک ذره در یک جعبه سه بعدی چه ارتباطی با انرژی آن دارد؟

- (۱) $\epsilon^{-1/2}$ (۲) ϵ (۳) $\epsilon^{1/2}$ (۴) ϵ^{-1}

۲۴- در کدام هنگرد (مجموعه آماری) محدودیت‌های کمتری روی توزیع ذرات وجود دارد؟

- (۱) کانونی (۲) کانونی کوچک (۳) کانونی بزرگ (۴) هم‌دمال-هم‌فشار

۲۵- مطابق اصول مکانیک آماری تغییر در انرژی حالت‌های سیستمی که جمعیت روی آن حالت‌ها ثابت باشد، چه مفهومی دارد؟

(۱) آنتروپی (۲) گرما (۳) کار (۴) انرژی درونی

۲۶- در هنگرد (مجموعه آماری) کانونی، با افزایش تعداد ذرات خطای نسبی در انرژی چه تغییری می‌کند؟

(۱) کاهش می‌یابد. (۲) افزایش می‌یابد. (۳) تغییر نمی‌کند. (۴) به صورت نمایی تغییر می‌کند.

۲۷- حالت برانگیخته ارتعاشی کدام مولکول در دمای 1000K سهم بیشتری در تابع پارش ارتعاشی دارد؟

(۱) CO (۲) N_2

(۳) I_2 (۴) H_2

۲۸- چه تعداد از موارد زیر باعث تغییر در ثابت تعادل واکنش $I_2(g) \rightleftharpoons 2I(g)$ می‌شود؟

«میدان مغناطیسی - دما - فشار - غلظت - کاتالیزگر»

(۱) ۱ (۲) ۲

(۳) ۳ (۴) ۴

۲۹- در یک هنگرد NVT ، ظرفیت گرمایی در حجم ثابت (C_V) متناسب با کدام واریانس است؟

(۱) σ_E^2 (انرژی) (۲) σ_{II}^2 (انتالپی)

(۳) σ_A^2 (انرژی آزاد هلمهولتز) (۴) σ_p^2 (فشار)

۳۰- از نظر ترمودینامیکی، $\lambda \rightarrow 0$ مربوط به کدام وضعیت نیست؟ ($\lambda = e^{h^2/kT}$)

(۱) $\frac{N}{V} \rightarrow 0$ برای دمای ثابت

(۲) $T \rightarrow \infty$ برای دانسیته ثابت

(۳) $\frac{N}{V} \rightarrow 0$ برای دمای ثابت و $T \rightarrow \infty$ برای دانسیته ثابت

(۴) $\frac{N}{V} \rightarrow 0$ برای $T \rightarrow \infty$ و $T \rightarrow 0$ برای دانسیته ثابت

۳۱- برای ذره‌ای به جرم m در بالاترین حالت انرژی خود، در یک جعبه یک‌بعدی از $x = a$ تا $x = -a$ ، کدام عبارت درست است؟

(۱) انرژی $\frac{h^2}{\lambda ma^2}$ است. (۲) انرژی $\frac{h^2}{32ma^2}$ است.

(۳) تابع موج $N \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)$ است. (۴) تابع موج در $x = 0$ یک گره دارد.

۳۲- برای یک مولکول مرتعش‌شونده در یک حالت ارتعاشی با عدد گوانتومی $v = 0$ کدام یک از خواص زیر به خوبی تعریف شده و قابل محاسبه است؟

(۱) انرژی جنبشی (۲) انرژی پتانسیل

(۳) انرژی ارتعاشی کل (۴) انحراف از طول پیوند تعادلی

۳۳- برای یک ذره در جعبه یک بعدی با تابع حالت $\Psi(x, t) = \left(\frac{2}{a}\right)^{1/2} \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) e^{-iEt/\hbar}$ چند عبارت از عبارات‌های

زیر درست است؟

- انرژی جنبشی ذره با زمان تغییر می‌کند.
- مقدار میانگین موقعیت ذره با زمان تغییر می‌کند.
- مقدار میانگین اندازه حرکت با زمان تغییر می‌کند.

(۱) صفر (۲) ۱ (۳) ۲ (۴) ۳

۳۴- در یک آزمایش فوتوالکتریک، سریع‌ترین الکترون خارج شده دارای تابعی موجی است که برهم‌نهدی از ویژه توابع اندازه حرکت است:

$$\Psi(x) = \frac{1}{3} N_1 e^{\frac{ip_1 x}{\hbar}} + \frac{1}{3} N_2 e^{\frac{ip_2 x}{\hbar}} + \sqrt{\frac{2}{3}} N_3 e^{\frac{ip_3 x}{\hbar}}$$

که $p_1 = 1/0$ ، $p_2 = 2/0$ و $p_3 = 2/0$ (همه بر حسب 10^{-24} kg m/s). مقدار میانگین اندازه حرکت خطی این

الکترون در حالت $\Psi(x)$ بر حسب $\frac{\text{kg m}}{\text{s}}$ ، کدام است؟

(۱) $1/0 \times 10^{-24}$ (۲) $3/0 \times 10^{-24}$
 (۳) $4/0 \times 10^{-24}$ (۴) $2/0 \times 10^{-24}$

۳۵- تابع آزمایشی نرمال $\phi = \left[\frac{2\beta}{4\pi 6!}\right]^{1/2} \gamma^2 e^{-\beta}$ برای تعیین انرژی حالت پایه اتم هیدروژن استفاده شده است

(β یک پارامتر تنظیم‌پذیر است). مشخص شده که $\int \phi \hat{H} \phi d\tau = \frac{\beta^2}{10} - \frac{\beta}{3}$. بهترین مقدار انرژی این تابع

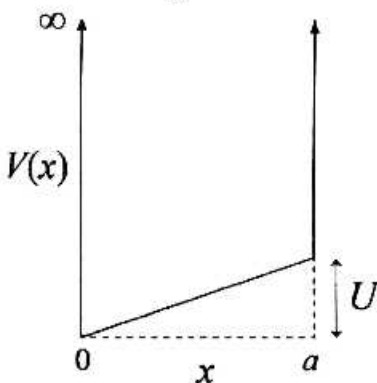
آزمایشی کدام است؟

(۱) $-\frac{5}{18}$ (۲) $-\frac{10}{18}$
 (۳) $-\frac{18}{5}$ (۴) $-\frac{18}{10}$

۳۶- یک ذره در یک جعبه یک بعدی با تابع موج $\psi_n^{(0)} = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$ تحت پتانسیل خارجی $\frac{U}{a} x$ قرار می‌گیرد.

تصحیح مرتبه اول انرژی آن کدام است؟

(۱) $\frac{2}{U}$
 (۲) $\frac{a}{U}$
 (۳) $\frac{U}{2}$
 (۴) $\frac{U}{a}$



۳۷- برای حالت ایستاده $n = 2$ یک ذره در یک جعبه یک بعدی، کدام جمله درست است؟

- (۱) احتمال پیدا شدن در همه جای جعبه یکسان است.
- (۲) احتمال پیدا شدن ذره در ربع سمت چپ جعبه با احتمال پیدا شدن در ربع سمت راست جعبه برابر است.
- (۳) احتمال پیدا شدن ذره در ربع سمت چپ جعبه از احتمال پیدا شدن در ربع سمت راست جعبه کمتر است.
- (۴) احتمال پیدا شدن ذره در ربع سمت چپ جعبه از احتمال پیدا شدن در ربع سمت راست جعبه بیشتر است.

۳۸- برای سیستمی با $l = 2$ ، کدام زاویه (بر حسب $\cos\theta$) بین محور z و بردار اندازه حرکت زاویه‌ای تشکیل می‌شود؟

$$\begin{aligned} \cos\theta &= \frac{2}{\sqrt{6}} & (1) \\ \cos\theta &= \frac{\sqrt{2}}{2} & (2) \\ \cos\theta &= \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{6}} & (3) \\ \cos\theta &= \frac{1}{\sqrt{2}} & (4) \end{aligned}$$

۳۹- در انتگرال محاسبه $\langle r \rangle$ برای یک اتم هیدروژن مانند در حالت ایستاده‌ای با اعداد کوانتومی n ، l و m چه توانی از r وارد می‌شود؟

- (۱) ۱ (۲) ۲ (۳) ۳ (۴) ۴

۴۰- اتم هلیوم در حالت پایه چند تابع موج اسپینی متقارن و نامتقارن دارد؟

- (۱) یک متقارن، دو نامتقارن
(۲) دو متقارن، سه نامتقارن
(۳) سه متقارن، یک نامتقارن
(۴) چهار متقارن، صفر نامتقارن

۴۱- کدام یک ماتریس عملگر اسپین \hat{S}_x است؟

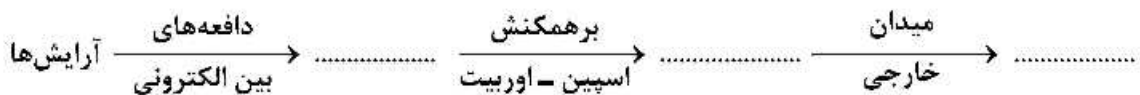
$$\begin{aligned} \frac{1}{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} & (1) \\ \frac{1}{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & i \\ i & 0 \end{pmatrix} & (2) \\ \frac{1}{2}\hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} & (3) \\ \frac{1}{2}\hbar \begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix} & (4) \end{aligned}$$

۴۲- انرژی تجربی حالت پایه سیستم از کدام رابطه محاسبه می‌شود؟ (E انرژی لازم برای خارج شدن الکترون از اوربیتال مربوطه است.)

$$\begin{aligned} E_{2s} + 2E_{1s} & (1) \\ 2E_{1s} - E_{2s} & (2) \\ E_{2s} - 2E_{1s} & (3) \end{aligned}$$

(۴) هیچ کدام

۴۳- کدام گزینه نمودار را کامل می‌کند؟



- (۱) حالت‌ها، ترازها، جمله‌های طیفی
(۲) جمله‌های طیفی، ترازها، حالت‌ها
(۳) ترازها، حالت‌ها، جمله‌های طیفی
(۴) جمله‌های طیفی، حالت‌ها، ترازها

۴۴- برای چه حالتی از نوسانگر هماهنگ یک بعدی، $\langle T \rangle = \langle V \rangle$ است؟

- (۱) اول (۲) دوم (۳) سوم (۴) پایه

۴۵- آرایش الکترونی حالت برانگیخته اتمی به صورت $1s^2 2s^2 2p^1 3p^1$ است. با لحاظ کردن تقریب ذره مستقل، انرژی این حالت بر حسب واحدهای اتمی کدام است؟

- (۱) -۵۲ (۲) -۵۱٫۵ (۳) -۵۰٫۵ (۴) -۴۹٫۵