



451F

کد کنترل

451

F

آزمون (نیمه‌متمرکز) ورود به دوره‌های دکتری - سال ۱۴۰۲

دفترچه شماره (۱)

صبح پنج‌شنبه

۱۴۰۱/۱۲/۱۱



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

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

شیمی - شیمی فیزیک (کد ۲۲۱۱)

زمان پاسخ‌گویی: ۱۳۵ 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 کوآنتومی	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 با متخلفین برابر مقررات رفتار می‌شود

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

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

امضا:

مجموعه دروس تخصصی (شیمی فیزیک - ترمودینامیک آماری ۱ - شیمی کوآنتومی):

- ۱- چند عبارت از عبارتهای زیر درست است؟ (Z فاکتور تراکم پذیری است).
- وابستگی نیروهای بین مولکولی به فاصله را می‌توان با رسم Z بر حسب فشار بررسی کرد.
 - انحراف Z از یک، معیاری از انحراف از رفتار گاز کامل است.
 - در فشارهای بالا برای تمام گازها $Z > 1$ است.
 - در فشارهای میانی برای بیشتر گازها $Z > 1$ است.
 - Z معیاری از نیروهای بین مولکولی است.

۲ (۱)

۳ (۲)

۴ (۳)

۵ (۴)

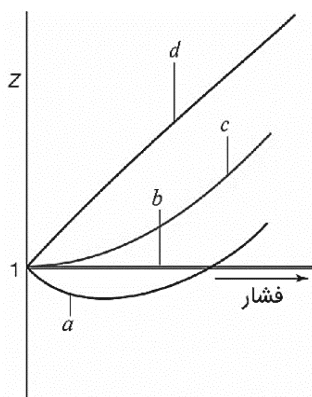
- ۲- با توجه به شکل مقابل، کدام نمودار مربوط به دمای بویل است؟

d (۱)

c (۲)

b (۳)

a (۴)



- ۳- انرژی کل یک گاز به صورت زیر است:

$$E = \frac{1}{2}mv_x^2 + \frac{1}{2}mv_y^2 + \frac{1}{2}kx^2 + \frac{1}{2}ky^2$$

مطابق نظر به جنبشی گازها و اصل تقسیم یکسان انرژی، کدام گزینه انرژی کل این گاز بر حسب دما را نشان می‌دهد؟

$\frac{1}{4} kT$ (۱)

$\frac{1}{2} kT$ (۲)

$2 kT$ (۳)

$4 kT$ (۴)

۴- برای یک گاز ایده آل ضریب تراکم پذیری همدمما با افزایش فشار چه تغییری می کند؟

(۱) کاهش می یابد.

(۲) افزایش می یابد.

(۳) ابتدا کاهش سپس با ادامه ی افزایش فشار افزایش می یابد.

(۴) ابتدا افزایش سپس با ادامه ی افزایش فشار کاهش می یابد.

۵- برای یک گاز واندروالس، μ (ضریب ژول - تامسون) کدام است؟

$$(1) \frac{-b}{C_{P,m}} \quad (2) \frac{b}{\frac{2a}{RT}(C_{P,m})} \quad (3) \frac{\left(\frac{2a}{RT}\right)}{C_{P,m}} \quad (4) \frac{\left(\frac{2a}{RT}\right) - b}{C_{P,m}}$$

۶- صفر مقیاس دمای ترمودینامیکی کدام است؟

(۱) موقعی که کارایی موتور گرمایی کارنو برابر صفر باشد.

(۲) موقعی که کارایی موتور گرمایی کارنو برابر یک باشد.

(۳) موقعی که دمای نقطه سه گانه CO_2 دقیقاً $216/8 \text{ K}$ باشد.

(۴) موقعی که دمای نقطه سه گانه آب دقیقاً $273/15 \text{ K}$ باشد.

۷- فرض کنید یک گاز کامل به صورت همدمما از V_i به V_f منبسط شود. تعداد حالت های قابل دسترس (Ω) برای چنین

فرآیندی چگونه تغییر می کند؟ (N تعداد ذرات گاز است).

$$(1) (V_f + V_i)^N \quad (2) (V_f - V_i)^N \quad (3) \left(\frac{V_f}{V_i}\right)^N \quad (4) \left(\frac{V_i}{V_f}\right)^N$$

۸- انتگرال $\frac{dq_{rev}}{T}$ در یک چرخه کارنو در چه شرایطی منفی می شود؟

(۱) اگر مرحله انبساط برگشت پذیر همدمما با یک انبساط همدمای برگشت ناپذیر جایگزین شود.

(۲) اگر مرحله انبساط آدیاباتیکی برگشت پذیر با یک انبساط همدمای برگشت ناپذیر جایگزین شود.

(۳) اگر مرحله تراکم آدیاباتیکی برگشت پذیر با یک تراکم همدمای برگشت ناپذیر جایگزین شود.

(۴) اگر مرحله تراکم همدمای برگشت پذیر با یک تراکم همدمای برگشت ناپذیر جایگزین شود.

۹- مشتق $\left(\frac{\partial V}{\partial S}\right)_P$ بر حسب ضریب انبساط (α)، ضریب تراکم پذیری (β)، C_p و C_v کدام است؟

$$(1) \frac{\beta TV}{C_v} \quad (2) \frac{\alpha TV}{C_v} \quad (3) \frac{\beta TV}{C_p} \quad (4) \frac{\alpha TV}{C_p}$$

۱۰- یک مول از یک گاز ایده آل تک اتمی در دمای T از حجم یک لیتر به حجم دو لیتر به صورت آدیاباتیکی و تحت فشار ثابت

یک اتمسفر منبسط می شود. دمای نهایی گاز بر حسب کلون کدوم است؟

$$(1) T - \frac{2}{3 \times 0.0821} \quad (2) T + \frac{3}{2 \times 0.0821}$$

$$(3) \frac{T}{2^{\left(\frac{5}{3}-1\right)}} \quad (4) T$$

۱۱- فرض کنید نمونه‌ای از یک گاز ایده‌آل از حالت اولیه P_0, V_0, T_0 طی دو فرایند به حجم $2V_0$ منبسط می‌شود.

معادله فرایند اول $2PV^2 = k_1$ و معادله فرایند دوم $PV = k_2$ است. در این صورت کدام گزینه درست است؟

(۱) کار فشار - حجم در هر دو فرایند برابر است.

(۲) مقدار کار انجام‌شده در فرایند دوم بیشتر از فرایند اول است.

(۳) مقدار کار انجام‌شده در فرایند اول بیشتر از فرایند دوم است.

(۴) بدون داشتن رابطه بین k_1 و k_2 نمی‌توان درباره مقایسه کار انجام‌شده در دو فرایند بحث کرد.

۱۲- ظرفیت گرمایی یک کریستال در دمای بسیار کم از رابطه $C_p = \alpha T^3$ تبعیت می‌کند که α یک ثابت است. در این

محدوده دمایی، آنتروپی این کریستال از کدام رابطه تعیین می‌شود؟

(۱) αT^3

(۲) $\frac{\alpha T^2}{2}$

(۳) $\frac{\alpha T}{3}$

(۴) $\frac{1}{3}\alpha T^3$

۱۳- یک مایع طی یک مرحله به صورت آدیباتیک از حالت I به حالت II متراکم می‌شود. با توجه به شکل زیر ΔH

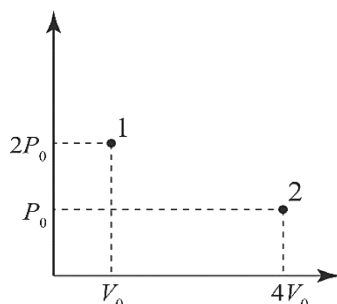
این فرایند کدام است؟ ($\gamma = C_p / C_v$)

(۱) $-P_0 V_0$

(۲) $3P_0 V_0$

(۳) $\frac{3P_0 V_0}{\gamma - 1}$

(۴) $\frac{3P_0 V_0}{\gamma}$



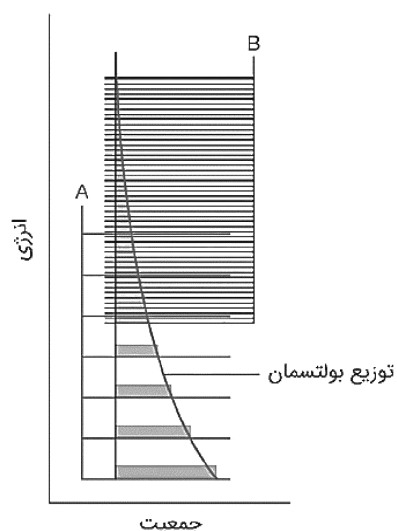
۱۴- توزیع بولتسمان برای واکنش گرماگیر $A \rightarrow B$ به صورت زیر است. کدام جمله درباره این واکنش درست است؟

(۱) A و B به مقدار یکسانی در مخلوط تعادلی وجود دارند.

(۲) B گونه غالب در مخلوط تعادلی است.

(۳) A گونه غالب در مخلوط تعادلی است.

(۴) تمام A به B تبدیل می‌شود.



۱۵- در یک فرایند شبه ایستا، گازی از حجم V_A به حجم V_B منبسط می‌شود ($V_B > V_A$). رابطه بین فشار و حجم در

این فرایند به صورت $P = aV^{-\frac{8}{5}}$ است که a ثابت است. کار انجام شده در این فرایند کدام است؟

$$\frac{5a}{3} \left(V_A^{-\frac{3}{5}} - V_B^{-\frac{3}{5}} \right) + P_B (V_B - V_A) \quad (۱)$$

$$\frac{5a}{3} \left(V_A^{-\frac{3}{5}} - V_B^{-\frac{3}{5}} \right) - P_B (V_B - V_A) \quad (۲)$$

$$-\frac{5a}{3} \left(V_B^{-\frac{3}{5}} - V_A^{-\frac{3}{5}} \right) \quad (۳)$$

$$P_B (V_B - V_A) \quad (۴)$$

۱۶- فرض کنید سه ذره روی سه تراز توزیع می‌شوند. تعداد راه‌های توزیع $w(a)$ مربوط به محتمل‌ترین توزیع کدام است؟

$$4 \quad (۲) \quad 3 \quad (۱)$$

$$9 \quad (۴) \quad 6 \quad (۳)$$

۱۷- فرض کنید در نتیجه تغییر حجم انرژی، تراز j ام به اندازه dE_j تغییر کند. در نتیجه این تغییر حجم، چه مقدار کار

انجام می‌شود؟ (فرض کنید A تعداد کل سیستم‌ها، a_j عدد اشغال تراز j ام و P_j احتمال اشغال تراز j ام باشد).

$$A \sum_j dE_j \quad (۱) \quad P_j \sum_j dE_j \quad (۲)$$

$$\sum_j E_j dP_j \quad (۳) \quad \sum_j a_j dE_j \quad (۴)$$

۱۸- در یک هنگرد (مجموعه آماری) NVT آنتروپی چه ارتباطی با تابع پارش (تابع تقسیم) Q دارد؟

$$\ln Q \quad (۱) \quad \left(\frac{\partial \ln Q}{\partial T} \right)_{N,V} \quad (۲) \quad \ln Q \quad (۳) \quad \left(\frac{\partial Q}{\partial T} \right)_{N,V} \quad (۴)$$

$$\ln Q \quad (۴) \quad \left(\frac{\partial \ln Q}{\partial T} \right)_{N,V} \quad (۳) \quad \ln Q \quad (۲) \quad \left(\frac{\partial \ln Q}{\partial T} \right)_{N,V} \quad (۱)$$

۱۹- تعداد حالت‌های قابل دسترس یک ذره در یک جعبه سه‌بعدی با انرژی کمتر از E ، چه ارتباطی با انرژی دارد؟

$$E^2 \quad (۱) \quad E^{1/2} \quad (۲)$$

$$E^{2/3} \quad (۳) \quad E^{3/2} \quad (۴)$$

۲۰- در یک هنگرد کانونی بزرگ، نسبت $\frac{\gamma}{\beta}$ (که γ و β ضرایب لاگرانژی هستند) کدام است؟

$$-N \quad (۱) \quad -\mu \quad (۲) \quad \mu \quad (۳) \quad N \quad (۴)$$

۲۱- نسبت تابع مشخصه در هنگرد کانونی بزرگ به تابع مشخصه در هنگرد کانونی کدام است؟

$$\frac{A}{G} \quad (۱) \quad -\frac{A}{PV} \quad (۲) \quad -\frac{G}{A} \quad (۳) \quad -\frac{PV}{A} \quad (۴)$$

۲۲- کدام محدودیت در یک هنگرد هم‌دما - هم‌فشار وجود ندارد؟

$$\sum_v \sum_j a_{vj} V = V \quad (۲) \quad \sum_v \sum_j a_{vj} N = N \quad (۱)$$

$$\sum_v \sum_j a_{vj} = A \quad (۴) \quad \sum_v \sum_j a_{vj} E_{vj} = \varepsilon \quad (۳)$$

۲۳- در آمار فرمی - دیراک و بوز - اینشتین، کدام نسبت با تابع پارش مولکولی برابر است؟

$$\frac{\lambda}{N} \quad (۴) \quad \frac{N}{\lambda} \quad (۳) \quad -N\lambda \quad (۲) \quad +N\lambda \quad (۱)$$

۲۴- نسبت تابع پارش حرکت انتقالی یک گاز کامل تک اتمی در روش کوانتومی به روش مکانیک کلاسیکی کدام است؟

$$\frac{1}{h^2} \quad (۴) \quad h^2 \quad (۳) \quad \frac{1}{h^3} \quad (۲) \quad h^3 \quad (۱)$$

۲۵- حالت پایه الکترونیکی مولکول H_2 ، $^1\Sigma_g^+$ و برای O_2 ، $^3\Sigma_g^-$ است. کدام گزینه درباره سهم ترازهای چرخشی

زوج و فرد در خواص ترمودینامیکی این دو مولکول درست است؟

(۱) ترازهای چرخشی زوج و فرد برای O_2 و H_2 مجازند.

(۲) ترازهای چرخشی زوج و فرد برای O_2 و H_2 مجاز نیستند.

(۳) تراز چرخشی فرد برای مولکول O_2 وجود ندارد، اما برای H_2 مجاز است.

(۴) تراز چرخشی زوج برای مولکول O_2 وجود ندارد، اما برای H_2 مجاز است.

۲۶- دو ذره برهم‌کنش در ظرفی به حجم V قرار دارند. انتگرال پیکربندی این سیستم کدام است؟

$$\frac{1}{V^2} \quad (۴) \quad \frac{1}{V} \quad (۳) \quad V^2 \quad (۲) \quad V \quad (۱)$$

۲۷- تابع پارش الکترونی برای اتم هیدروژن با انرژی $E_n = -13.6 \frac{1}{n^2}$ کدام است؟

$$q = e^{\frac{13.6}{KT}} + 4e^{\frac{13.6}{4KT}} + 9e^{\frac{13.6}{9KT}} + \dots \quad (۲) \quad q = e^{\frac{13.6}{KT}} + e^{\frac{13.6}{4KT}} + e^{\frac{13.6}{9KT}} + \dots \quad (۱)$$

$$q = 4e^{\frac{13.6}{KT}} + 9e^{\frac{13.6}{4KT}} + 16e^{\frac{13.6}{9KT}} + \dots \quad (۴) \quad q = 2e^{\frac{13.6}{KT}} + 8e^{\frac{13.6}{4KT}} + 18e^{\frac{13.6}{9KT}} + \dots \quad (۳)$$

۲۸- در مولکول D_2 ، نسبت سهم حالات اسپین هسته‌ای متقارن به نامتقارن در تابع پارش و خواص مکانیکی کدام است؟

$$\frac{1}{3} \quad (۴) \quad \frac{1}{2} \quad (۳) \quad 2 \quad (۲) \quad 3 \quad (۱)$$

۲۹- برای واکنش تعویض ایزوتوپی $H_2 + D_2 \rightleftharpoons 2HD$ نسبت K_p به K_c (با بیان ثابت‌های تعادل برحسب تابع

پارش) کدام است؟

$$q_{H_2} q_{D_2} \quad (۴) \quad q_{HD} \quad (۳) \quad 2 \quad (۲) \quad 1 \quad (۱)$$

۳۰- در دمای $1000K$ سهم ترازهای برانگیخته برای کدام مولکول در تابع پارش ارتعاشی قابل صرف‌نظر نیست؟

$$N_2 \quad (۴) \quad I_2 \quad (۳) \quad Cl_2 \quad (۲) \quad HCl \quad (۱)$$

۳۱- نتیجه $\hat{S}_y |\alpha\rangle$ برای اسپین یک الکترون کدام است؟

$$i\hbar |\beta\rangle \quad (۲) \quad i\hbar |\alpha\rangle \quad (۱)$$

$$\frac{i\hbar}{2} |\beta\rangle \quad (۴) \quad \frac{i\hbar}{2} |\alpha\rangle \quad (۳)$$

۳۲- فرض کنید سیستمی با یک تابع موج به صورت $\Psi(x,0) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \Psi_n(x)$ توصیف می‌شود که Ψ_n ویژه‌تابعی از

معادله شرودینگر با ویژه‌مقدار E_n است. اگر انرژی سیستم اندازه‌گیری شود، چه مقداری به دست می‌آید؟

- (۱) تمام ویژه‌مقادیر انرژی E_n فقط یکی از ویژه‌مقادیر انرژی E_n
 (۲) فقط یکی از ویژه‌مقادیر انرژی E_n
 (۳) فقط تمام ویژه‌مقادیر با انرژی مثبت
 (۴) فقط تمام ویژه‌مقادیر با انرژی منفی

۳۳- با استفاده از $\psi = e^{-\alpha r^2}$ به عنوان تابع آزمایشی، اتم H در روش تغییر انرژی در واحدهای اتمی به صورت زیر به دست می‌آید:

$$E = \frac{3\alpha}{2} - Z \frac{\sqrt{8\alpha}}{\pi}$$

مقدار بهینه α کدام است؟

- (۱) $Z^2 \frac{8}{9\pi}$
 (۲) $Z \frac{8}{9\pi}$
 (۳) $Z \frac{\sqrt{9}}{8\pi}$
 (۴) $\sqrt{Z} \frac{9}{8\pi}$

۳۴- یک نوسانگر هماهنگ تحت تأثیر عامل اختلال $\frac{\gamma}{6} x^3$ قرار می‌گیرد. تابع موج حالت پایه این

نوسانگر $\left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\alpha x^2}$ است. تصحیح مرتبه اول در انرژی حالت پایه این نوسانگر کدام است؟

- (۱) $\frac{\gamma}{6}$
 (۲) $\frac{\gamma}{6}$
 (۳) 1
 (۴) صفر

۳۵- چندگانگی‌های اسپینی ممکن برای جمله‌های طیفی‌ای که از آرایش f^2 به دست می‌آید، کدام است؟

- (۱) 2, 1 (۲) 3, 0 (۳) 3, 1 (۴) 3, 2

۳۶- در مقایسه ممان مغناطیسی الکترون و هسته، کدام گزینه درست است؟

- (۱) ممان مغناطیسی یک هسته بسیار بیشتر از ممان مغناطیسی یک الکترون است.
 (۲) ممان مغناطیسی یک هسته بسیار کمتر از ممان مغناطیسی یک الکترون است.
 (۳) ممان مغناطیسی یک هسته بیشتر از ممان مغناطیسی یک الکترون است.
 (۴) ممان مغناطیسی یک هسته کمتر از ممان مغناطیسی یک الکترون است.

۳۷- عناصر ماتریس Π_{ij} برای عملگر $\hat{\Pi}$ مربوط به یک نوسانگر هماهنگ به صورت $\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_i^* \hat{\Pi} \psi_j dx$ هستند. وقتی $i \neq j$

باشد، عنصر ماتریس Π_{ij} کدام است؟

- (۱) -1
 (۲) صفر
 (۳) +1
 (۴) ± 1

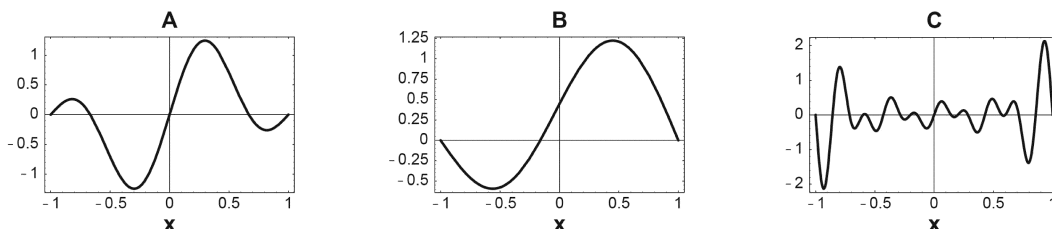
۳۸- کدام گزینه درباره اوربیتال‌های اتم هیدروژن نادرست است؟

- (۱) تابع $2p_z$ ویژه‌تابعی از \hat{L}_z با ویژه‌مقدار صفر است.
 (۲) تابع $2p_x$ ویژه‌تابعی از \hat{L}_x با ویژه‌مقدار صفر است.
 (۳) تابع $2p_0$ ویژه‌تابعی از \hat{L}_z با ویژه‌مقدار صفر است.
 (۴) تابع $2p_x$ ویژه‌تابعی از \hat{L}_x با ویژه‌مقدار ± 1 است.

۳۹- کدام عبارت، درجه‌ی چندحالتی یک تراز انرژی در اتم هیدروژن را نشان می‌دهد؟

$$(1) \sum_{\ell=0}^{n-1} (2\ell+1) \quad (2) \sum_{\ell=0}^{n-1} (\ell+1) \quad (3) (2\ell+1) \quad (4) (\ell+1)$$

۴۰- در شکل زیر نمودار $\psi(x)$ بر حسب x برای یک ذره در جعبه با $-1 \leq x \leq 1$ نشان داده شده است. کدام تابع موج‌ها به ترتیب از راست به چپ، بیشترین مقادیر برای $\langle x \rangle$ و $\langle x^2 \rangle$ را دارند؟



$$(1) \psi_B \text{ و } \psi_A \quad (2) \psi_B \text{ و } \psi_C$$

$$(3) \psi_C \text{ و } \psi_B \quad (4) \psi_A \text{ و } \psi_B$$

۴۱- جمله طیفی الکترونی برای مولکول دواتمی با آرایش π^4 کدام است؟

$$(1) 1\Pi \quad (2) 3\Pi \quad (3) 2\Sigma^+ \quad (4) 1\Sigma^+$$

۴۲- کدام یک از روش‌های مکانیک کوانتومی محاسباتی داده‌شده، شامل اثرات اختلال روی سیستم است؟

$$(1) \text{Møller-Plesset (MP)} \quad (2) \text{MCSCF}$$

$$(3) \text{DFT} \quad (4) \text{CI}$$

۴۳- در به‌کار بردن شیمی کوانتومی برای واکنش‌های شیمیایی، کدام گزینه درست است؟

- (۱) دقت دو روش VB ساده و MO ساده مشابه است.
- (۲) روش VB ساده تقریب دقیق‌تری از MO ساده است.
- (۳) روش MO ساده تقریب دقیق‌تری از VB ساده است.
- (۴) از روش VB ساده و MO ساده برای مطالعه واکنش‌های شیمیایی استفاده نمی‌شود.

۴۴- اگر عملگری هرمیتی باشد، کدام گزینه درباره انتگرال $\langle \mathbf{f} | \hat{A} | \mathbf{f} \rangle$ درست است؟

(۱) باید عددی حقیقی باشد.

(۲) در صورتی که $[\hat{H}, \hat{A}] = 0$ باشد، مقدار انتگرال صفر است.

(۳) در صورتی که \hat{A} پارته زوج داشته باشد، مقدار انتگرال صفر است.

(۴) در صورتی که \mathbf{f} ویژه‌تابع دلخواهی از \hat{A} باشد، مقدار انتگرال صفر است.

۴۵- فرض کنید $\hat{H} = \hat{h}_1 + \hat{h}_2 + \hat{h}_3$ باشد و $\hat{h}_1\psi_1 = 3\psi_1$ ، $\hat{h}_2\psi_2 = 3\psi_2$ و $\hat{h}_3\psi_3 = 2\psi_3$. در صورتی

که ψ_1 ، ψ_2 و ψ_3 نرمال باشند، مقدار $\langle \psi_1\psi_2\psi_3 | \hat{H} | \psi_1\psi_2\psi_3 \rangle$ کدام است؟

$$(1) -2 \quad (2) \text{صفر}$$

$$(3) 8 \quad (4) 18$$