





275

F

نام
نام خانوادگی
محل امضاء

صبح جمعه
۹۱/۱/۲۵

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

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

آزمون ورودی
دوره‌های دکتری (نیمه متمرکز) داخل
در سال ۱۳۹۱

رشته‌ای
شیمی فیزیک (کد ۲۲۱۱)

شماره داوطلبی:

نام و نام خانوادگی داوطلب:

مدت پاسخگویی: ۱۲۰ دقیقه

تعداد سؤال: ۴۵

عنوان مواد امتحانی، تعداد و شماره سؤالات

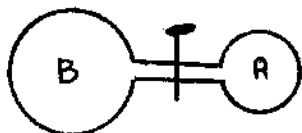
ردیف	مواد امتحانی	تعداد سؤال	از شماره	تا شماره
۱	مجموعه دروس تخصصی (شیمی فیزیک، ترمودینامیک آماری، کوانتوم)	۴۵	۱	۴۵

فروردین سال ۱۳۹۱

استفاده از ماشین حساب مجاز نمی‌باشد.

حق چاپ و تکریر سؤالات پس از برگزاری آزمون برای تمامی اشخاص حقیقی و حقوقی تنها با مجوز این سازمان مجاز می‌باشد و با متخلفین برابر مقررات رفتار می‌شود.

- ۱- در درجه حرارت $۲۷۳/۱۵$ کلوین و فشار یک اتمسفر:
- (۱) فوگاسیته آب و فوگاسیته یخ با هم برابرند.
(۲) ΔH تبدیل یخ به آب منفی است.
(۳) آنتروپی مولی آب و یخ با هم برابرند.
(۴) ΔG° تبدیل یخ به آب برابر صفر است.
- ۲- برای کدام یک از گازهای حقیقی زیر دمای بازگشت از دمای معمول اطاق (حدود ۳۰۰ K) کمتر است؟
- (۱) نیتروژن
(۲) متان
(۳) هیدروژن
(۴) نئون
- ۳- نقطه جوش نرمال یک مایع نامحلول در آب ۱۲۰°C است. مخلوطی از این مایع و آب، در چه دمایی به جوش می آید؟ (فشار جو را یک اتمسفر در نظر بگیرید.)
- (۱) دمایی بیش از ۱۲۰°C
(۲) دقیقاً در ۱۱۰°C
(۳) دمایی کمتر از ۱۰۰°C
(۴) وابسته به مقدار هر جز در مخلوط در دمایی بین ۱۰۰°C و ۱۲۰°C
- ۴- دو حباب صابون غیر هم اندازه با یک لوله و شیر مابین آنها مطابق شکل به یکدیگر متصل شده اند. در اثر باز کردن شیر چه اتفاقی می افتد؟
- (۱) حباب B کوچکتر و حباب A بزرگتر خواهد شد.
(۲) حجم دو حباب برابر می شود.
(۳) تغییری رخ نمی دهد.
(۴) حباب A کوچکتر و حباب B بزرگتر می گردد.
- ۵- کدام یک از دیفرانسیل های زیر برابر پتانسیل شیمیایی نمی باشند؟ n_j تعداد مول های اجزاء واکنش به غیر از جزء A به عبارت دیگر $i \neq j$



$$\left(\frac{\partial H}{\partial n_i}\right)_{S,P,n_j} \quad (۱)$$

$$\left(\frac{\partial A}{\partial n_i}\right)_{T,P,n_j} \quad (۲)$$

$$\left(\frac{\partial G}{\partial n_i}\right)_{T,P,n_j} \quad (۳)$$

$$\left(\frac{\partial U}{\partial n_i}\right)_{S,U,n_j} \quad (۴)$$

- ۶- با استفاده از ایزوترم جذب سطحی لانگمویر، نشان دهید جذب مولکول های گاز دو اتمی از چه رابطه ای تبعیت می کند؟

$$\theta = \frac{kp}{1 + \sqrt{kp}} \quad (۱)$$

$$\theta = \frac{(kp)^2}{1 + kp} \quad (۲)$$

$$\theta = \frac{kp}{(1 + kp)^2} \quad (۳)$$

$$\theta = \frac{\sqrt{kp}}{1 + \sqrt{kp}} \quad (۴)$$

۷- اگر دستگاهی ناهمگن که دیواره‌هایی رسانای گرما، غیر صلب و تراوا، فازهای آن را از هم جدا می‌کند در حضور میدان الکتریکی باشد، حداکثر تعداد فازهایی که با هم به طور همزمان در تعادل خواهند بود، چقدر است؟

$$\begin{array}{ll} C_{ind} + 2 & (1) \\ C_{ind} + 1 & (2) \\ C_{ind} & (3) \\ C_{ind} + 3 & (4) \end{array}$$

۸- با توجه به قانون حد دبی - هوکل رابطه حلالیت m یک نمک کم محلول M^+X^- با قدرت یونی I کدام است؟

$$\begin{array}{ll} \ln m = A |z_+ z_-| \sqrt{I} & (1) \\ \log m = \frac{1}{4} k_{sp} + A |z_+ z_-| \sqrt{I} & (2) \\ \ln m = \ln k_{sp} + A |z_+ z_-| \sqrt{I} & (4) \\ \log m = A |z_+ z_-| \sqrt{I} & (3) \end{array}$$

۹- چنانچه فشار بخار فلز روی به حالت جامد بر حسب تور از رابطه زیر به دست آید

$$\log P = -\frac{6946}{T} + 9/2$$

ΔH فرآیند تصعید روی بر حسب کیلوکالری کدام است؟

$R =$ ثابت گازها $= 1/98 \frac{\text{cal}}{\text{kmol}}$

$$\begin{array}{l} 31/79 \text{ (1)} \\ 31/22 \text{ (2)} \\ 30 \text{ (3)} \\ -32 \text{ (4)} \end{array}$$

۱۰- اگر از معادله حالت $Z = 1 + \frac{BP}{RT}$ استفاده شود، کدام رابطه برای $\left(\frac{\partial H}{\partial P}\right)_T$ صحیح است؟

$$\begin{array}{ll} \left(\frac{\partial H}{\partial P}\right)_T = R & (1) \\ \left(\frac{\partial H}{\partial P}\right)_T = 0 & (2) \\ \left(\frac{\partial H}{\partial P}\right)_T = B & (3) \\ \left(\frac{\partial H}{\partial P}\right)_T = Z & (4) \end{array}$$

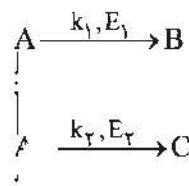
۱۱- آنتروپی یک گاز در فشار ثابت از رابطه $S = A + B \ln T$ (که A و B ثابت‌اند) پیروی می‌کند، در اثر تغییر دما ΔG این گاز کدام است؟

$$\begin{array}{ll} -A \Delta T - B \int \ln T dT & (2) \\ -A \Delta T - B T \ln T & (1) \\ A \Delta T + B T \ln T & (4) \\ A \Delta T + B \int \ln T dT & (3) \end{array}$$

۱۲- برای یک واکنش تعادلی نظیر $A \xrightleftharpoons[k_{-1}]{k_1} B$ اگر واکنش ΔH° برابر صفر باشد:

$$\begin{array}{ll} (1) \text{ ثابت تعادل } k \text{ مستقل از دما است.} & \Delta G^\circ \text{ واکنش نیز مستقل از دما است.} \\ (2) \text{ } \Delta S \text{ واکنش } = 0 & \Delta C_p \text{ (تغییرات ظرفیت حرارتی) } \\ (3) \text{ } \Delta S \text{ واکنش } = 0 & \end{array}$$

۱۳- برای سری واکنش‌های موازی زیر:



انرژی فعال‌سازی به وسیله کدام یک از روابط زیر به انرژی فعال‌سازی r یک از مراحل i وابسته است؟

$$E = \frac{\prod_{i=1}^r E_i}{\sum_{i=1}^n E_i} \quad (۲)$$

$$E = \frac{\prod_{i=1}^n k_i E_i}{\sum_{i=1}^n k_i} \quad (۱)$$

$$E = \frac{\sum_{i=1}^n k_i E_i}{\sum_{i=1}^n k_i} \quad (۴)$$

$$E = \sum_{i=1}^n E_i \quad (۳)$$

۱۴- برای واکنش $A + B \rightarrow P$ رابطه انرژی فعال‌سازی (E_a) و آنتالپی تشکیل کمپلکس فعال ($\Delta H^\ddagger$) کدام است؟

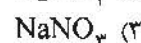
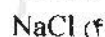
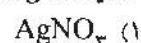
$$E_a = \Delta H^\ddagger + \gamma RT \quad (۲)$$

$$E_a = \Delta H^\ddagger - \gamma RT \quad (۱)$$

$$E_a = \Delta H^\ddagger - RT \quad (۴)$$

$$E_a = \Delta H^\ddagger + RT \quad (۳)$$

۱۵- حلالیت $AgCl$ در آب با اضافه کردن کدام یک از ترکیبات به محلول اشباع آن افزایش می‌یابد؟ دما و فشار ثابت هستند.



۱۶- سیستمی شامل N ذره‌ی مستقل است که هر ذره می‌تواند فقط در یکی از دو تراز انرژی ϵ_0 و $2\epsilon_0$ قرار گیرد. وزن آماری حالتی با انرژی کل $E = M\epsilon_0$ عبارت است از:

$$W = \frac{N!}{[\frac{1}{\gamma}(M-N)]! [\frac{1}{\gamma}(\gamma N - M)]!} \quad (۲)$$

$$W = \frac{(M+N-1)!}{M!(N-1)!} \quad (۱)$$

$$W = \frac{(M+N-1)!}{(M-1)!N} \quad (۴)$$

$$W = \frac{N!}{(M-N)! (\gamma N - M)!} \quad (۳)$$

۱۷- کدام عبارت مفهوم کار برگشت‌پذیر در مجموعه آماری کانونی است؟

$$\sum_j \frac{1}{E_j} dp_j \quad (۴)$$

$$\sum_j E_j dp_j \quad (۳)$$

$$\sum_j \frac{1}{p_j} dE_j \quad (۲)$$

$$\sum_j P_j dE_j \quad (۱)$$

۱۸- در صورتی که تابع تقسیم یک گاز تک ذره‌ای بدون برهم کنش هر کدام به جرم m و در دمای T در مجموعه آماری کانونی بزرگ به صورت $\exp(zV)$ باشد که Z تابعی از T و μ است. فشار سیستم کدام است؟

$$TZ \quad (۴)$$

$$-k_B TZ \quad (۳)$$

$$k_B TZ \quad (۲)$$

$$-TZ \quad (۱)$$

۱۹- در مجموعه آماری کانونی بزرگ فعالیت مطلق (λ) کدام است؟

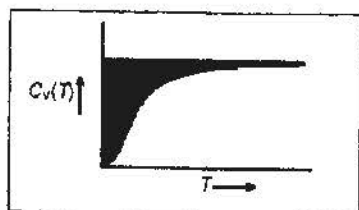
$$e^{\mu/kT} \quad (۴)$$

$$e^{-\mu/kT} \quad (۳)$$

$$e^{\mu kT} \quad (۲)$$

$$e^{-\mu/kT} \quad (۱)$$

- ۲۰- کدام جمله صحیح است؟
 (۱) مجموعه آماری کانونی بزرگ و مجموعه آماری کانونی کوچک ربطی به هم ندارند.
 (۲) کل مجموعه آماری کانونی بزرگ را می‌توان به صورت یک سیستم در مجموعه آماری کانونی کوچک تصور کرد.
 (۳) کل مجموعه آماری کانونی کوچک را می‌توان به صورت یک سیستم در مجموعه آماری کانونی بزرگ تصور کرد.
 (۴) ارتباط مجموعه آماری کانونی کوچک و بزرگ به نوع سیستم مورد مطالعه بستگی دارد.
- ۲۱- مولکول $O^{16}O^{16}$ در حالت الکترونی پایه خود،
 (۱) فقط ترازهای چرخشی فرد را دارد.
 (۲) هیچکدام از ترازهای چرخشی زوج و فرد را نخواهد داشت.
 (۳) فقط ترازهای چرخشی زوج را دارد.
 (۴) هم ترازهای چرخشی زوج و هم ترازهای چرخشی فرد دارد.
- ۲۲- در چه صورتی ذرات سازنده یک سیستم از آمار بولتسمان تبعیت می‌کنند؟
 (۱) در صورتی که تعداد حالت‌های مولکولی بسیار بیشتر از تعداد مولکول‌های واقع در سیستم باشد.
 (۲) سیستم با هر تعداد مولکولی و با هر مقدار حالت مولکولی از آمار بولتسمان تبعیت می‌کند.
 (۳) در صورتی که تعداد حالت‌های مولکولی بسیار کمتر از تعداد مولکول‌های واقع در سیستم باشد.
 (۴) در صورتی که تعداد حالت‌های مولکولی برابر تعداد مولکول‌های واقع در سیستم باشد.
- ۲۳- میانگین ذرات در یک مجموعه آماری کانونی بزرگ با ذرات فرمیون یا بوزون کدام است؟
 (۱) $-\lambda q$ (۲) λq (۳) $\frac{\lambda}{q}$ (۴) $-\frac{\lambda}{q}$
- ۲۴- کدام تعریف درباره تابع تقسیم مولکولی صحیح است؟
 (۱) تابع تقسیم همواره با افزایش فاصله بین نوارهای انرژی زیاد می‌شود.
 (۲) تابع تقسیم مولکولی میزانی از تعداد میانگین حالاتی که از نظر گرمایی برای یک مولکول در دمای سیستم قابل دسترسی هستند، خواهد بود.
 (۳) تابع تقسیم مولکولی میزانی از تعداد میانگین حالاتی که از نظر گرمایی برابر یک مولکول در دمای پایین قابل دسترسی هستند، خواهد بود.
 (۴) به طور کلی تابع تقسیم همواره با چند حالتی پایین‌تر از برابر است.
- ۲۵- برای یک نوسانگر هماهنگ با جرم m و فرکانس زاویه‌ای ω ، تابع تقسیم کلاسیکی عبارت است از:
 (۱) $\frac{kT}{\hbar\omega}$ (۲) $\frac{kT}{4\hbar\omega}$ (۳) $\frac{kT}{2\hbar\omega}$ (۴) $\frac{kT}{\hbar\omega}$
- ۲۶- کدام معادله برای یک مجموعه آماری کانونی بزرگ صادق است؟
 (۱) $S = k \ln \Xi$ (۲) $G = kT \ln \Xi$ (۳) $Pv = kT \ln \Xi$ (۴) $A = -kT \ln \Xi$
- ۲۷- پتانسیل شیمیایی (μ) برای سیستمی شامل N نوسانگر فرمی که بوسیله دو ویژه مقدار ϵ و ϵ مشخص شده‌اند، کدام است؟
 (۱) $\mu = -NKT \ln(1 + e^{-\beta\epsilon})$ (۲) $\mu = NK \ln(1 + e^{-\beta\epsilon})^{-1}$
 (۳) $\mu = (1 + e^{-\beta\epsilon})^N$ (۴) $\mu = NK \ln(1 + e^{-\beta\epsilon})$
- ۲۸- در مجموعه آماری بنیادی بزرگ، تحت چه شرایطی نمی‌توان از افت و خیز در چگالی صرف‌نظر کرد؟
 (۱) در نقطه بحرانی (۲) در نقطه انجماد (۳) در نقطه جوش (۴) در نقطه سه‌گانه
- ۲۹- شکل زیر C_V بر حسب T برای یک جامد است، ناحیه مشکی برابر است با:
 (۱) انتروپی جامد در دماهای کم
 (۲) ظرفیت گرمایی کلاسیکی
 (۳) ظرفیت گرمایی جامد در دماهای کم
 (۴) انرژی نقطه صفر جامد



۳۰- اگر ثابت b به سطوح انرژی ε سیستم اضافه شود، چه تغییری در فشار (p)، انرژی درونی (U) و آنتروپی (S) ایجاد می‌شود؟

- (۱) S تغییر نمی‌کند، اما p و U تغییر می‌کنند.
 (۲) U و S تغییر نمی‌کند، اما p تغییر می‌کند.
 (۳) p و S تغییر نمی‌کند، اما U تغییر می‌کند.
 (۴) هر سه تغییر می‌کنند.

۳۱- کدام ماتریس، هامیلتونی یک سیستم را نشان می‌دهد؟

$$\begin{pmatrix} 1 & 3i & 2 \\ -i & 5 & 7 \\ -5 & 7 & 0 \end{pmatrix} \quad (1)$$

$$\begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 2i \\ 0 & -2i & 0 \end{pmatrix} \quad (2)$$

$$\begin{pmatrix} 2 & -i & 0 \\ -i & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix} \quad (3)$$

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

۳۲- ماتریس متناظر $\hat{S}_x$ (مؤلفه x عملگر اسپین) کدام است؟

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

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

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

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

۳۳- اگر حالت $|\psi\rangle$ یک ویژه حالت $\hat{L}_z$ و $\hat{L}^2$ با ویژه مقادیر به ترتیب $\hbar^2 I(I+1)$ و $m\hbar$ باشد، $\langle \hat{L}_x \rangle$ و $\langle \hat{L}_y \rangle$ به ترتیب برابرند با:

$$[I(I+1) - m^2]\hbar^2, \hbar \quad (1)$$

$$\frac{1}{2}[I(I+1) - m^2]\hbar^2, 0 \quad (2)$$

$$[I(I+1) - m^2]\hbar^2, 0 \quad (3)$$

$$\frac{1}{2}[I(I+1) - m^2]\hbar^2, \hbar \quad (4)$$

۳۴- برای نوسانگر هماهنگ تعداد گرہ‌ها در تابع موج آن برابر با..... است. (n عدد کوانتومی ارتعاشی است).

(۱) $n - 2$

(۲) $n + 1$

(۳) n

(۴) $n - 1$

۳۵- محاسبات روی اتم Li با چهار تابع تغییر خوش - رفتار مقادیر $203/2$ ، -192 ، $-198/5$ و $201/2$ - (بر حسب الکترون ولت) را به دست می‌دهند. انرژی واقعی حالت پایه Li به کدام نزدیکتر است؟

(۱) $-203/2$

(۲) -192

(۳) $-198/5$

(۴) $-201/2$

۳۶- فرض کنید الکترون در اتم هیدروژن در لحظه‌ای که انرژی آن اندازه‌گیری می‌شود در حالت کوانتومی

$$\left(\psi_{1s} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} a^{-\frac{3}{2}} e^{-\frac{r}{a}} \right) \quad \Psi = \left(\frac{27}{\pi a^3} \right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{r}{a}}$$

(۱) $\frac{27}{22}$

(۲) $\frac{54}{96}$

(۳) $\frac{27}{96}$

(۴) $\frac{27}{64}$

۳۷- اگر g_i و g_j ویژه توابع عملگر هرمیتی $\hat{A}$ با ویژه مقادیر متفاوت باشند و اگر $\hat{B}$ یک عملگر خطی باشد که با $\hat{A}$ جابه‌جایی پذیر باشد، آنگاه:

(۱) $\langle g_i | \hat{A} \hat{B} | g_i \rangle = 0$

(۲) $\langle g_j | \hat{A} | g_i \rangle = 0$

(۳) $\langle g_j | \hat{B} \hat{A} | g_i \rangle = 0$

(۴) $\langle g_j | \hat{B} | g_i \rangle = 0$

۳۸- در محاسبه انرژی یونیده شدن اتم‌ها کدام روش نتیجه بهتری می‌دهد؟

(۱) روش تغییراتی

(۲) روش هارتری

(۳) روش هارتری - فاک

(۴) نظریه اختلال

۳۹- پایه و اساس روش هارتری - فاک بر چه اصل مکانیک کوانتومی استوار است؟

(۱) به‌کارگیری تابع موج به صورت حاصلضرب توابع پایه و روش اختلال

(۲) به‌کارگیری تابع موج به صورت دترمینان اسلیتر و روش‌های تغییراتی و اختلال

(۳) به‌کارگیری تابع موج به صورت دترمینان اسلیتر و روش وردشی

(۴) به‌کارگیری تابع موج به صورت دترمینان اسلیتر و روش اختلال

۴۰- قسمت شعاعی یک اوربیتال اتم هیدروژن به صورت $R(r) = a + br + cr^2$ داده شده است، این چه اوربیتالی است؟

(۱) ۳s

(۲) ۵p

(۳) ۴f

(۴) ۳d

۴۱- اگر بخواهیم خط طیفی P_{-1}^2 را برای اتم کربن محاسبه کنیم هامیلتونی باید شامل چه جملاتی باشد؟

(۱) هامیلتونی شامل جمله اثر زمین هم باشد. $H = H^0 + H_{rep} + H_{so} + H_{ziman}$

(۲) هامیلتونی شامل جمله اثر استارک هم باشد. $H = H^0 + H_{rep} + H_{so} + H_{ziman} + H_{stark}$

(۳) $H = H^0 + H_{rep}$

(۴) هامیلتونی شامل جمله برهم کنش اسپین - اوربیتال H_{so} هم باشد. $H = H^0 + H_{rep} + H_{so}$

۴۲- معادله‌ی زیر چه درجه‌ای از اختلال را در روش اختلال نشان می‌دهد؟

$$H^{(1)}\Psi^{(3)} + E^{(2)}\Psi^{(2)} + H^{(0)}\Psi^{(4)} + H^{(2)}\Psi^{(0)} + E^{(1)}\Psi^{(2)} + E^{(2)}\Psi^{(1)} + E^{(0)}\Psi^{(4)} = 0$$

(۱) سه

(۲) شش

(۳) پنج

(۴) چهار

۴۳- کدام یک از جملات زیر برای آرایش الکترونی ۱s²s¹ اتم هلیوم صحیح است؟

(۱) کلیه توابع موج مرتبه صفر ناشی از این آرایش ویژه تابع عملگرهای $\hat{L}^2$ و $\hat{S}^2$ هستند.

(۲) فقط توابعی که به شکل یک دترمینان اسلیتر هستند ویژه تابع عملگرهای $\hat{L}^2$ و $\hat{S}^2$ هستند.

(۳) هیچ یک از توابع موج مرتبه صفر این آرایش ویژه تابع عملگرهای $\hat{L}^2$ و $\hat{S}^2$ نیستند.

(۴) فقط توابعی که ترکیبی از دو دترمینان اسلیتر هستند ویژه تابع عملگرهای $\hat{L}^2$ و $\hat{S}^2$ هستند.

۴۴- کاربرد نظریه هلمن - فاینمن برای اتم هیدروژن منجر به کدام یک از نتایج زیر می‌شود؟

$$-\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle = \frac{1}{n^2} \left(\frac{1}{a_0} \right) \quad (۱)$$

$$-\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle = \frac{1}{n^2} \left(\frac{1}{2a_0} \right) \quad (۲)$$

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle = \frac{1}{n^2} \left(\frac{1}{2a_0} \right) \quad (۳)$$

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle = \frac{1}{n^2} \left(\frac{1}{a_0} \right) \quad (۴)$$

۴۵- با استفاده از نظریه اختلال وابسته به زمان نشر خودبه‌خود را

(۱) نمی‌توان پیش‌بینی کرد.

(۲) می‌توان پیش‌بینی کرد.

(۳) برای ترازهای بالا می‌توان پیش‌بینی کرد.

(۴) برای ترازهای پایین می‌توان پیش‌بینی کرد.