

کد کنترل

451

F

451F

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 می شود.
امام خمینی (ره)

شیمی - شیمی فیزیک (کد ۲۲۱۱)

زمان پاسخ‌گویی: ۱۳۵ دقیقه

تعداد سؤال: ۴۵

عنوان مواد امتحانی، تعداد و شماره سوالات

ردیف	مواد امتحانی	تعداد سؤال	از شماره	تا شماره
۱	مجموعه دروس تخصصی: - شیمی فیزیک - ترمودینامیک آماری ۱ - شیمی کوآنتمی	۴۵	۱	۴۵

این آزمون نمره منفی دارد.

استفاده از ماشین حساب مجاز نیست.

* داوطلب گرامی، عدم درج مشخصات و امضا در مندرجات جدول زیر، بهمنزله 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 پاسخ نامه و دفترچه سوالات، نوع و کد کنترل درج شده بر روی جلد دفترچه سوالات و پایین پاسخ نامه ام را تأیید می نمایم.

امضا:

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

-۱ چند عبارت از عبارت های زیر درست است؟ (Z فاکتور تراکم پذیری است).

- وابستگی نیروهای بین مولکولی به فاصله را می توان 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 $1 < Z$ است.
- در فشارهای میانی برای بیشتر گازها $1 > Z$ است.
- معیاری از نیروهای بین مولکولی است.

2 (۱)

3 (۲)

4 (۳)

5 (۴)

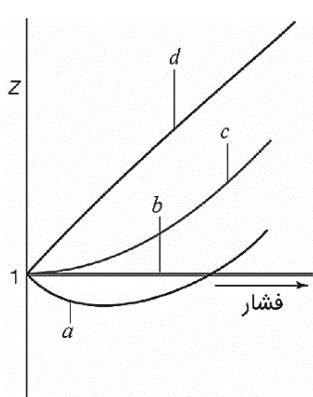
-۲ با توجه به شکل مقابل، کدام نمودار مربوط به دمای بولبل است؟

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 نظریه جنبشی گازها و اصل تقسیم یکسان انرژی، کدام گزینه انرژی کل این گاز بر حسب دما را نشان می دهد؟

$\frac{1}{4} kT$ (۱)

$\frac{1}{2} kT$ (۲)

$2 kT$ (۳)

$4 kT$ (۴)

-۴ برای یک گاز ایده‌آل ضریب تراکم‌پذیری همدما با افزایش فشار چه تغییری می‌کند؟

۱) کاهش می‌یابد.

۲) افزایش می‌یابد.

۳) ابتدا کاهش سپس با ادامه‌ی افزایش فشار افزایش می‌یابد.

۴) ابتدا افزایش سپس با ادامه‌ی افزایش فشار کاهش می‌یابد.

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

$$\left(\frac{2a}{RT} \right) - b \quad (4)$$

$$\left(\frac{2a}{RT} \right) \quad (3)$$

$$\frac{b}{2a(C_{P,m})} \quad (2)$$

$$\frac{-b}{C_{P,m}} \quad (1)$$

-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 سه‌گانه $CO_2 / 8 K$ دقیقاً 216 باشد.

۴) موقعی که دمای نقطه سه‌گانه آب دقیقاً 273 باشد.

-۷ فرض کنید یک گاز کامل به صورت همدما از V_f به V_i منبسط شود. تعداد حالت‌های قابل دسترس (Ω) برای چنین فرایندی چگونه تغییر می‌کند؟ (N تعداد ذرات گاز است).

$$\left(\frac{V_i}{V_f} \right)^N \quad (4)$$

$$\left(\frac{V_f}{V_i} \right)^N \quad (3)$$

$$(V_f - V_i)^N \quad (2)$$

$$(V_f + V_i)^N \quad (1)$$

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

۱) اگر مرحله انبساط برگشت‌پذیر همدما با یک انبساط همدما برگشت‌ناپذیر جایگزین شود.

۲) اگر مرحله انبساط آدیباتیک برگشت‌پذیر با یک انبساط همدما برگشت‌ناپذیر جایگزین شود.

۳) اگر مرحله تراکم آدیباتیک برگشت‌پذیر با یک تراکم همدما برگشت‌ناپذیر جایگزین شود.

۴) اگر مرحله تراکم همدما برگشت‌پذیر با یک تراکم همدما برگشت‌ناپذیر جایگزین شود.

-۹ مشتق $\left(\frac{\partial V}{\partial S} \right)_P$ بر حسب ضریب انبساط (α)، ضریب تراکم‌پذیری (β)، C_P و C_V کدام است؟

$$\frac{\alpha TV}{C_P} \quad (4)$$

$$\frac{\beta TV}{C_P} \quad (3)$$

$$\frac{\alpha TV}{C_V} \quad (2)$$

$$\frac{\beta TV}{C_V} \quad (1)$$

-۱۰ یک مول از یک گاز ایده‌آل تکاتمی در دمای T از حجم یک لیتر به حجم دو لیتر به صورت آدیباتیک و تحت فشار ثابت یک اتمسفر منبسط می‌شود. دمای نهایی گاز بر حسب کلوین کدام است؟

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

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

$$T \quad (4)$$

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

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

معادله فرایند اول $k_1 = 2PV^2$ 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 کربستال در دمای بسیار کم از رابطه $C_P = \alpha T^3$ تبعیت می‌کند که α یک ثابت است. در این محدوده دمایی، آنتروپی این کربستال از کدام رابطه تعیین می‌شود؟

$$\alpha T^3 \quad (1)$$

$$\frac{\alpha T^2}{2} \quad (2)$$

$$\frac{\alpha T}{3} \quad (3)$$

$$\frac{1}{3}\alpha T^3 \quad (4)$$

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

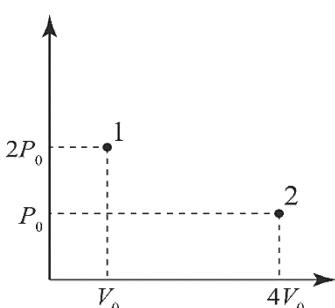
$(\gamma = C_P / C_V)$ این فرایند کدام است؟

$$-P_0 V_0 \quad (1)$$

$$3P_0 V_0 \quad (2)$$

$$\frac{3P_0 V_0}{\gamma - 1} \quad (3)$$

$$\frac{3P_0 V_0}{\gamma} \quad (4)$$



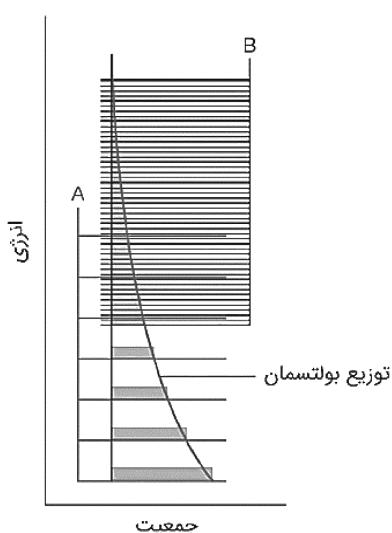
-۱۴- توزیع بولتسمن برای واکنش گرمائیر $A \rightarrow B$ به صورت زیر است. کدام جمله درباره این واکنش درست است؟

(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 شبیه 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 انجام‌شده در این فرایند کدام است؟

$$\frac{5a}{3} \left(V_A^{-\frac{3}{5}} - V_B^{-\frac{3}{5}} \right) + P_B(V_B - V_A) \quad (1)$$

$$\frac{5a}{3} \left(V_A^{-\frac{3}{5}} - V_B^{-\frac{3}{5}} \right) - P_B(V_B - V_A) \quad (2)$$

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

$$P_B(V_B - V_A) \quad (4)$$

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

$$4 \quad (2) \quad 3 \quad (1)$$

$$9 \quad (4) \quad 6 \quad (3)$$

- ۱۷ فرض کنید در نتیجه تغییر حجم انرژی، تراز ΔE 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 ΔE و P_j احتمال اشغال تراز ΔE باشد).

$$P_j \sum_j dE_j \quad (2) \quad A \sum_j dE_j \quad (1)$$

$$\sum_j a_j dE_j \quad (4) \quad \sum_j E_j dP_j \quad (3)$$

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

$$\left(\frac{\partial Q}{\partial T} \right)_{N,V} \quad (2) \quad \text{متناسب با } \ln Q \quad (1) \quad \text{متناسب با } \left(\frac{\partial \ln Q}{\partial T} \right)_{N,V}$$

$$\ln Q \quad (4) \quad \text{متناسب با } \left(\frac{\partial \ln Q}{\partial T} \right)_{N,V} \quad (3) \quad \text{متناسب با }$$

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

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

$$E^{3/2} \quad (4) \quad E^{2/3} \quad (3)$$

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

$$N \quad (4) \quad \mu \quad (3) \quad -\mu \quad (2) \quad -N \quad (1)$$

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

$$-\frac{PV}{A} \quad (4) \quad -\frac{G}{A} \quad (3) \quad -\frac{A}{PV} \quad (2) \quad \frac{A}{G} \quad (1)$$

- ۲۲- کدام محدودیت در یک هنگرد هم دما - هم فشار وجود ندارد؟

$$\sum_v \sum_j a_{vj} V = V \quad (2)$$

$$\sum_v \sum_j a_{vj} N = N \quad (1)$$

$$\sum_v \sum_j a_{vj} = A \quad (4)$$

$$\sum_v \sum_j a_{vj} E_{vj} = \varepsilon \quad (3)$$

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

$$\frac{\lambda}{N} \quad (4)$$

$$\frac{N}{\lambda} \quad (3)$$

$$-N\lambda \quad (2)$$

$$+N\lambda \quad (1)$$

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

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

$$h^2 \quad (3)$$

$$\frac{1}{h^3} \quad (2)$$

$$h^3 \quad (1)$$

- ۲۵- حالت پایه الکترونیکی مولکول H_2 , O_2^- و برای O_2 , Σ_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 برهم‌گش در ظرفی به حجم V قرار دارند. انTEGRال پیکربندی این سیستم کدام است؟

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

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

$$V^2 \quad (2)$$

$$V \quad (1)$$

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

$$q = e^{\frac{13.6}{KT}} + 4e^{\frac{13.6}{4KT}} + 9e^{\frac{13.6}{9KT}} + \dots \quad (2)$$

$$q = e^{\frac{13.6}{KT}} + e^{\frac{13.6}{4KT}} + e^{\frac{13.6}{9KT}} + \dots \quad (1)$$

$$q = 4e^{\frac{13.6}{KT}} + 9e^{\frac{13.6}{4KT}} + 16e^{\frac{13.6}{9KT}} + \dots \quad (4)$$

$$q = 2e^{\frac{13.6}{KT}} + 8e^{\frac{13.6}{4KT}} + 18e^{\frac{13.6}{9KT}} + \dots \quad (3)$$

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

$$\frac{1}{3} \quad (4)$$

$$\frac{1}{2} \quad (3)$$

$$2 \quad (2)$$

$$3 \quad (1)$$

- ۲۹- برای واکنش تعویض ایزوتوبی $H_2 + D_2 \rightleftharpoons 2HD$ نسبت K_p به K_e (با بیان ثابت‌های تعادل برحسب تابع پارش) کدام است؟

$$q_{H_2} q_{D_2} \quad (4)$$

$$q_{HD} \quad (3)$$

$$2 \quad (2)$$

$$1 \quad (1)$$

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

$$N_2 \quad (4)$$

$$I_2 \quad (3)$$

$$Cl_2 \quad (2)$$

$$HCl \quad (1)$$

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

$$i\hbar |\beta\rangle \quad (2)$$

$$i\hbar |\alpha\rangle \quad (1)$$

$$\frac{i\hbar}{2} |\beta\rangle \quad (4)$$

$$\frac{i\hbar}{2} |\alpha\rangle \quad (3)$$

- ۳۲- فرض کنید سیستمی با یک تابع موج به صورت $\Psi(x, 0) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \psi_n(x)$ توصیف می شود که ψ_n ویژه تابعی از معادله شرودینگر با ویژه مقدار E_n است. اگر انرژی سیستم اندازه گیری شود، چه مقداری به دست می آید؟

(۱) تمام ویژه مقدار انرژی E_n

(۲) فقط یکی از ویژه مقدار انرژی E_n

(۳) فقط تمام ویژه مقدار با انرژی منفی

- ۳۳- با استفاده از $e^{-\alpha r^2} = \psi$ به عنوان تابع آزمایشی، اتم H در روش تغییری انرژی در واحد های اتمی به صورت زیر به دست می آید:

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

مقدار بهینه α کدام است؟

$$Z \frac{8}{9\pi} \quad (۲)$$

$$Z^2 \frac{8}{9\pi} \quad (۱)$$

$$\sqrt{Z} \frac{9}{8\pi} \quad (۴)$$

$$Z \frac{\sqrt{9}}{8\pi} \quad (۳)$$

- ۳۴- یک نوسانگر هماهنگ تحت تأثیر عامل اختلال $\frac{\gamma}{6}x^3$ قرار می گیرد. 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؟

$$\frac{6}{\gamma} \quad (۲)$$

$$\frac{\gamma}{6} \quad (۱)$$

(۳) صفر

(۴) ۱

- ۳۵- چندگانگی های اسپینی ممکن برای جمله های طیفی ای که از آرایش f^2 به دست می آید، کدام است؟

(۱) ۳, ۰

(۲) ۳, ۱

(۳) ۳, ۰

(۴) ۲, ۱

- 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{L} مربوط به یک نوسانگر هماهنگ به صورت $\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_i^* \hat{L} \psi_j dx$ هستند. وقتی $j \neq i$

باشد، عنصر ماتریس Π_{ij} کدام است؟

(۱) ۰

(۲) صفر

(۳) ± 1

(۴) +1

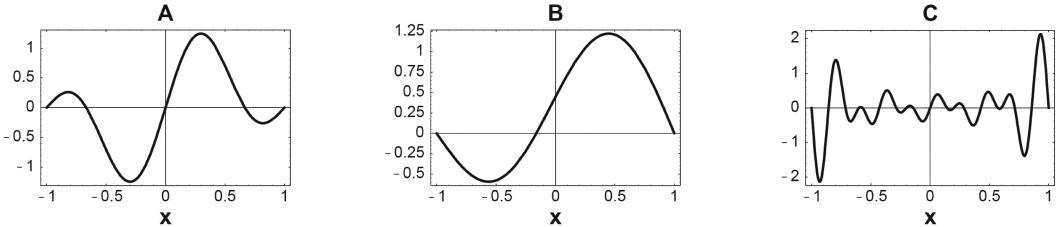
- ۳۸- کدام گزینه درباره اوربیتال های اتم هیدروژن نادرست است؟

(۱) تابع $2p_z$ ویژه تابعی از \hat{L}_z با ویژه مقدار صفر است.

(۲) تابع $2p_x$ ویژه تابعی از \hat{L}_x با ویژه مقدار صفر است.

(۳) تابع $2p_0$ ویژه تابعی از \hat{L}_z با ویژه مقدار ± 1 است.

(۴) تابع $2p_x$ ویژه تابعی از \hat{L}_x با ویژه مقدار صفر است.

- ۳۹ - کدام عبارت، درجه‌ی چندحالتی یک تراز انرژی در اتم هیدروژن را نشان می‌دهد؟
- ($\ell+1$) (۴) ($2\ell+1$) (۳) $\sum_{\ell=0}^{n-1} (\ell+1)$ (۲) $\sum_{\ell=0}^{n-1} (2\ell+1)$ (۱)
- ۴۰ - در شکل زیر نمودار $(x)\psi$ 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 $\langle x^2 \rangle$ و $\langle x \rangle$ را دارند؟
- 
- A: ψ_B و ψ_C (۲)
B: ψ_A و ψ_B (۴)
C: ψ_B و ψ_A (۱)
 ψ_C و ψ_B (۳)
- ۴۱ - جمله طیفی الکترونی برای مولکول دواتمی با آرایش π^4 کدام است؟
- $1\Sigma^+$ (۴) $2\Sigma^+$ (۳) $^3\Pi$ (۲) $^1\Pi$ (۱)
- ۴۲ - کدام یک از روش‌های مکانیک کوانتومی محاسباتی داده شده، شامل اثرات اختلال روی سیستم است؟
- MCSCF (۲) Møller-Plesset (MP) (۱)
CI (۴) DFT (۳)
- ۴۳ - در به کار بردن شیمی کوانتومی برای واکنش‌های شیمیابی، 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 شیمیابی استفاده نمی‌شود.
- ۴۴ - اگر \hat{A} عملگری هرمیتی باشد، کدام گزینه درباره انتگرال $\langle f | \hat{A} | f \rangle$ 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} پاریته زوج داشته باشد، مقدار انتگرال صفر است.
(۴) در صورتی که 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 $\hat{h}_1\psi_1 = 3\psi_1$ ، $\hat{h}_2\psi_2 = 2\psi_2$ و $\hat{h}_3\psi_3 = 3\psi_3$. 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؟
- ۲) صفر (۲)
18 (۴) -2 (۱)
8 (۳)

مشاهده کلید اولیه سوالات آزمون دکتری 1402

تیری سال 1402

و اطلاع می رساند، کلید اولیه سوالات که در این سایت قرار گرفته است، غیر قابل استناد است و پس از دریافت نظرات داوطلبان و صاحب نظران کلید نهایی سوالات تهیه و بر اساس آن کارنامه داوطلبان استخراج خواهد شد. در صورت تمایل می توانید حداکثر تا تاریخ 24/12/1401 با مراجعه به سامانه پاسخگویی (request.sanjesh.org) نسبت به تکمیل فرم "اعتراض به کلید سوالات" / "آزمون دکتری سال 1402" اقدام نمایید. ازم به ذکر است نظرات داوطلبان فقط تا تاریخ مذکور و از طریق فرم ذکر شده دریافت خواهد شد و به موارد ارسالی از طریق دیگر (نامه مكتوب یا فرم عمومی در سامانه پاسخگویی و ...) یا پس از تاریخ اعلام شده رسیدگی نخواهد شد.

عنوان دفترچه	نوع دفترچه	شماره پاسخنامه	گروه امتحانی
شیمی - شیمی فیزیک	F	1	علوم پایه

شماره سوال	گزینه صحیح	شماره سوال	گزینه صحیح
1	3	31	4
2	2	32	2
3	3	33	1
4	1	34	4
5	4	35	3
6	2	36	2
7	3	37	2
8	1	38	4
9	4	39	1
10	1	40	3
11	2	41	4
12	4	42	1
13	1	43	2
14	2	44	1
15	3	45	3
16	3		
17	4		
18	1		
19	4		
20	2		
21	4		
22	1		
23	3		
24	2		
25	4		
26	2		
27	3		
28	2		
29	1		
30	3		

خروج