

248

F

: نام

: نام خانوادگی

: محل امضا



صبح جمعه  
۱۳۹۵/۱۲/۶  
دفترچه شماره (۱)



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

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

## آزمون ورودی دوره دکتری (نیمه‌تمکن‌گز) داخل – سال ۱۳۹۶

رشته امتحانی شیمی – شیمی فیزیک (کد ۲۲۱۱)

مدت پاسخگویی: ۱۵۰ دقیقه

تعداد سوال: ۴۵

عنوان مواد امتحانی، تعداد و شماره سوالات

ردیف	مواد امتحانی	تعداد سوال	از شماره	تا شماره
۱	مجموعه دروس تخصصی (شیمی فیزیک – ترمودینامیک آماری ۱ – شیمی کوآنتمومی)	۴۵	۱	۴۵

این آزمون نمره منفی دارد.

استفاده از ماشین حساب مجاز نیست.

اسقندماه – سال ۱۳۹۵

حق چاپ، تکثیر و انتشار سوالات به هر روش (الکترونیکی و ...) پس از برگزاری آزمون، برای تعاملی اشخاص حقیقی و حقوقی تنها با مجوز این سازمان مجاز می‌باشد و با متخلفین بابر مقررات رفتار می‌شود.

شیمی فیزیک:

-۱ ضریب ژول - تامسون یک گاز واندروالس در دمای بولیل، به تقریب، کدام است؟

(۱) صفر

(۲) بینهایت

(۳) ثابت  $b$  واندروالس(۴) ثابت  $a$  واندروالس

-۲ در محلول ایده‌آل، همه خصیت‌های مولی جزئی با خصیت مولی جزء خالص برابر هستند، به غیر از:

 $\bar{H}_i$  (۱) $\bar{S}_i$  (۲) $\bar{U}_i$  (۳) $\bar{V}_i$  (۴)

-۳ یک گاز حقیقی از معادله حالت  $PV = n(RT + \frac{aP}{T})$  پیروی می‌کند ( $a$  عدد ثابتی است)، برای این گاز

$$\text{کدام است? } \left( \frac{\partial H}{\partial P} \right)_T$$

$$\frac{-nRT}{V} + \frac{na}{T} \quad (1)$$

$$\frac{nRT}{V} - \frac{na}{T} \quad (2)$$

$$\frac{nR}{V} - \frac{na}{T} \quad (3)$$

$$\frac{na}{T} \quad (4)$$

-۴ برای یک گاز حقیقی که از معادله ویرمال پیروی می‌کند، مقدار عبارت  $\lim_{P \rightarrow 0} (V_m - V_{m,id})$  کدام است؟

$$\frac{B(T)}{V_m} \quad (1)$$

$$\frac{C(T)}{V_m} \quad (2)$$

$$B(T) \quad (3)$$

$$C(T) \quad (4)$$

-۵ برای واکنش  $A^{2+} + B^{2+} \rightarrow P$  در قدرت یونی صفر و دمای  $25^\circ C$  مقدار ثابت سرعت برابر  $k$  به دست آمده است.

نسبت  $\frac{k}{k_0}$  واکنش وقتی که قدرت یونی در همان دما  $10^\circ C$  باشد، کدام است؟

(ثابت دبای را  $510$  فرض کنید).

- (۱)  $10/3$
- (۲)  $10/4$
- (۳)  $10/5$
- (۴)  $10/6$

-۶ در مورد به کارگیری تقریب حالت پایا (steady state) برای واکنش  $A \rightarrow B \rightarrow C$ ، کدام گزینه درست است؟

- (۱) این تقریب را همواره نمی‌توان برای این واکنش به کاربرد، زیرا حد واسط ندارد.
- (۲) این تقریب را همواره می‌توان برای این واکنش به کاربرد، زیرا حد واسط دارد.
- (۳) این تقریب را همواره نمی‌توان برای این واکنش به کاربرد، زیرا غلظت حد واسط آن با زمان تغییر می‌کند.
- (۴) این تقریب را نمی‌توان برای این واکنش به کاربرد، زیرا غلظت حد واسط آن مجھول است.

-۷ در واکنش  $P \rightarrow A$  معادله سرعت به صورت:  $\text{rate} = k[A]^{\alpha}[P]$  است، اگر  $\alpha = \frac{[A]}{[P]}$  تعريف شود به ازای کدام

مقدار  $\alpha$  سرعت حداکثر می‌شود؟

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

-۸ در یک فرایند آدیاباتیک برگشت پذیر کدام است؟ ( $\alpha$  ضریب انبساط گرمایی و  $C_p$  ظرفیت گرمایی در

فشار ثابت است).

$$\frac{T\alpha}{VC_p} \quad (1)$$

$$\frac{V\alpha}{TC_p} \quad (2)$$

$$\frac{V\alpha}{C_p} \quad (3)$$

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

- ۹ در واکنش فاز گازی (ایده‌آل):  $A(g) + 2B(g) \rightarrow 2C(g) + D(g)$ ، اگر فشارهای اولیه A و B به ترتیب برابر با  $1\text{ atm}$  و  $2\text{ atm} = 2 \times 10^{-6}$  باشد، بعد از تعادل، فشار گاز B (بر حسب mmHg) کدام است؟
- (۱) ۱۲۲۰  
 (۲) ۱۳۱۵  
 (۳) ۱۴۲۰  
 (۴) ۱۵۰۵
- ۱۰ اگر mg ۵۰۰ ترکیب غیرالکترولیت Z در مقدار مشخصی از حلال A حل شود، کاهش نقطه انجماد ۲ برابر بیشتر از موقعی است که mg ۷۵۰ از جسم غیرالکترولیت U با وزن مولی  $\frac{60\text{ g}}{\text{mol}}$  در همان مقدار حلال A حل شود.
- وزن مولی الکترولیت Z بر حسب  $\frac{\text{g}}{\text{mol}}$  کدام است؟
- (۱) ۱۰  
 (۲) ۲۰  
 (۳) ۳۰  
 (۴) ۴۰
- ۱۱ برای سیستم محلول اشباع شده سدیم سولفات در آب که با بخار آب در حال تعادل است، درجه آزادی سیستم در شرایط فشار ثابت چقدر است؟
- (۱) ۰  
 (۲) ۱  
 (۳) ۲  
 (۴) ۳
- ۱۲ همه تساوی‌های زیر به جذب همدمای لانگمویر مربوط می‌شوند، به غیر از: K: ثابت تعادل است
- (۱)  $\theta = 1$  در فشار بالا
  - (۲)  $\theta = \frac{K \cdot P}{1 + K \cdot P}$
  - (۳)  $\theta = K$
  - (۴)  $\theta = K \cdot P$  در فشار پایین
- ۱۳ نسبت  $\frac{C_p}{C_V}$  برای کدام گاز، کمترین مقدار است؟
- H<sub>۲</sub>O (۱)  
 NH<sub>۳</sub> (۲)  
 CO<sub>۲</sub> (۳)  
 CO (۴)

- ۱۴- اگر برای گازی  $\mu = a + bT^r + \frac{c}{T^r}$  باشد، در این صورت  $\bar{C}_P$  این گاز کدام است؟

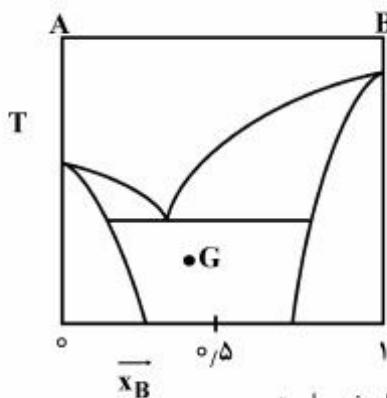
$$2bT + 6T^{-r} \quad (1)$$

$$-2bT - 6cT^{-r} \quad (2)$$

$$-2bT + 3T^{-r} \quad (3)$$

$$2bT + 6cT^{-r} \quad (4)$$

- ۱۵- در نمودار فازی زیر، برای سیستمی که در نقطه G قرار دارد، کدام جمله درست است؟



(۱) سیستم دارای دو فاز جامد، شامل B ناخالص و A ناخالص است.

(۲) سیستم دارای دو فاز جامد شامل B خالص و A خالص است.

(۳) سیستم از یک فاز جامد که شامل ۰.۵۰٪ مولی A و ۰.۵۰٪ مولی B است، تشکیل شده است.

(۴) سیستم دارای دو فاز جامد بوده که شامل ۰.۵۰٪ مولی B ناخالص و ۰.۵۰٪ مولی A ناخالص است.

#### ترمودینامیک آماری:

- ۱۶- فرض کنید که سه ذره بر روی سه تراز کوانتمومی توزیع شده باشند. احتمال اینکه سیستمی در تراز کوانتمومی دوم باشد، چقدر است؟

$$\frac{1}{6} \quad (1)$$

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

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

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

- ۱۷- کدام عبارت، مفهوم مولکولی گرمای است؟

$$E \sum_j dP_j \quad (1)$$

$$\sum_j E_j dP_j \quad (2)$$

$$P \sum_j dE_j \quad (3)$$

$$\sum_j P_j dE_j \quad (4)$$

-۱۸ تابع مشخصه هنگرد کانونی بزرگ، کدام است؟

A (۱)

G (۲)

H (۳)

PV (۴)

-۱۹ کدام رابطه، احتمال اشغال یک تراز را در یک هنگرد کانونی بزرگ، نشان می‌دهد؟

$$\frac{e^{-\beta EN_j}}{\sum_N \sum_j e^{-\beta EN_j} e^{-\gamma N}} \quad (1)$$

$$\frac{e^{-\beta EN_j} e^{-\gamma N}}{\sum_N \sum_j e^{-\beta EN_j} e^{-\gamma N}} \quad (2)$$

$$\frac{e^{-\beta E_j N} e^{-\gamma N}}{\sum_j \sum_N e^{-\beta EN_j} e^{-\gamma N}} \quad (3)$$

$$\frac{e^{-\beta E_j N}}{\sum_j \sum_N e^{-\beta EN_j} e^{-\gamma N}} \quad (4)$$

-۲۰ در یک هنگرد NVT، افت‌وخیز در انرژی به کدام مورد به‌طور مستقیم مرتبط است؟

 $C_v$  (۱) $\beta$  (ضریب تراکم پذیری) $\alpha$  (ضریب انبساط) $\frac{\alpha}{\beta}$  (۴)

-۲۱ کدام رابطه برای میانگین تعداد ذرات ( $\bar{N}$ ) برای فرمیون‌ها و بوزون‌ها در شرط دمای بالا، صحیح است؟ (q تابع

$\lambda = e^{\mu/kT}$  پارش مولکولی است و

 $\frac{1}{\lambda q}$  (۱) $\frac{q}{\lambda}$  (۲) $\lambda q$  (۳) $\frac{\lambda}{q}$  (۴)

- ۲۲- مولکول اکسیژن ..... است و فقط دارای ترازهای ..... چرخشی است.

(۱) بوزون - فرد

(۲) فرمیون - زوج

(۳) بوزون - زوج

(۴) فرمیون - فرد

- ۲۳- در یک فضای فاز  $3N \times 3N$  بعدی، کدام یک دارای واحد مشابه واحد  $\hbar$  (ثابت پلانک) است؟

(۱)  $dp$

(۲)  $dq$

(۳)  $\frac{dp}{dq}$

(۴)  $dp \cdot dq$

- ۲۴- برای یک سیستم  $N$  ذرهای در کدام شرایط انتگرال بیکربندی‌ای با  $V^N$  (حجم به توان تعداد ذرات) برابر است؟

(۱) انرژی پتانسیل کوچکتر از صفر باشد.

(۲) انرژی پتانسیل صفر باشد.

(۳) انرژی پتانسیل بزرگتر از صفر باشد.

(۴) بهمازای هر انرژی پتانسیل

- ۲۵- کدام تعبینه قابل پارش (تابع تقسیم) چرخشی یک مولکول به صورت فرفره کروی را نشان می‌دهد؟

$$\frac{1}{\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} (J+1) e^{-\frac{-J(J+1)\hbar^2}{\tau kT}} dJ \quad (1)$$

$$\frac{1}{\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} (J+1)^2 e^{-\frac{-J(J+1)\hbar^2}{\tau kT}} dJ \quad (2)$$

$$\frac{1}{\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} (2J+1) e^{-\frac{-J(J+1)\hbar^2}{\tau kT}} dJ \quad (3)$$

$$\frac{1}{\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} (2J+1)^2 e^{-\frac{-J(J+1)\hbar^2}{\tau kT}} dJ \quad (4)$$

- ۲۶- در حرکت چرخشی یک مولکول، ترازی که حد اکثر جمعیت را دارد با دما چه رابطه‌ای دارد؟

(۱)  $\sqrt{T}$

(۲)  $\frac{1}{T}$

(۳)  $\frac{1}{\sqrt{T}}$

(۴)  $T$

- ۲۷- رابطه تابع پارش ارتعاشی برای یک مولکول در دمای بالا با دما کدام است؟

- $\frac{1}{\sqrt{T}}$  (۱)  
T (۲)  
 $\sqrt{T}$  (۳)  
 $\frac{1}{T}$  (۴)

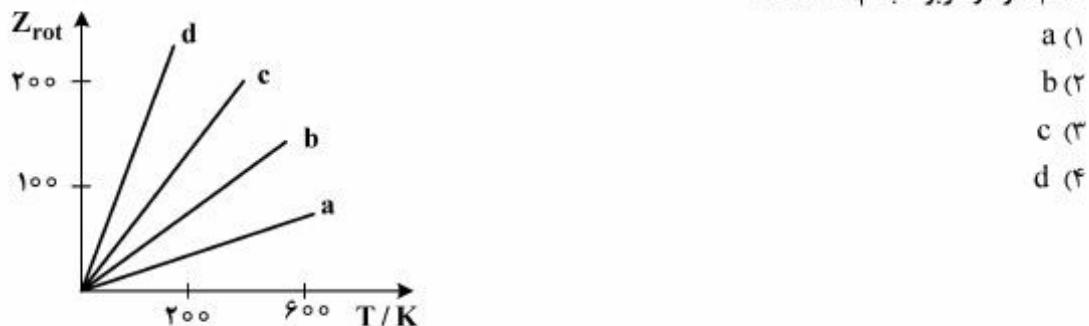
- ۲۸- ترازهای ارتعاشی برانگیخته کدام مولکول در تابع پارش ارتعاشی، سهم بیشتری دارند؟

- ( $\Theta_{vib} = 463$  K) Br<sub>۲</sub> (۱)  
( $\Theta_{vib} = 3374$  K) N<sub>۲</sub> (۲)  
( $\Theta_{vib} = 810$  K) Cl<sub>۲</sub> (۳)  
( $\Theta_{vib} = 3100$  K) CO (۴)

- ۲۹- رابطه طول موج گرمایی گاز آرگون با دمای آن کدام است؟

- $\sqrt{T}$  (۱)  
 $\frac{1}{T}$  (۲)  
 $\frac{1}{\sqrt{T}}$  (۳)  
T (۴)

- ۳۰- تابع پارش چرخشی برای مولکول‌های Cl<sub>۲</sub> ، O<sub>۲</sub> ، N<sub>۲</sub> ، H<sup>۳۵</sup>Cl بر حسب دما در شکل زیر داده شده است.  
کدام نمودار مربوط به Cl<sub>۲</sub> است؟



شیمی کوآنتمومی:

- ۳۱- اگر عامل اختلالی برای یک نوسانگر برابر  $c\chi^3$  باشد، انرژی حالت پایه با تصحیح مرتبه اول، کدام است؟

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

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

$$\frac{1}{2}hv + \frac{3ch^3}{64\pi^4 v^2 m^2} \quad (3)$$

$$\frac{3}{2}hv - \frac{3ch^3}{64\pi^4 v^2 m^2} \quad (4)$$

- ۳۲- کدام یک از توابع موج زیر، نرمال است؟

$$\Psi = (\psi_{120} + \psi_{300} + \psi_{101} + \psi_{211}) \quad (1)$$

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{120} + \psi_{300} + 2\psi_{101} + \psi_{211}) \quad (2)$$

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{6}}(2\psi_{120} + 2\psi_{300} - \psi_{101} + \psi_{211}) \quad (3)$$

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{15}}(\psi_{120} + 3\psi_{300} + 2\psi_{101} + \psi_{211}) \quad (4)$$

- ۳۳- در صورتی که در زمان  $t$  یک ذره، تابع حالت  $\Psi = Ne^{-ar^2} Y_l^m(\theta, \phi)$  را داشته باشد ( $a, N$  ثابت هستند)،  $L^2$

کدام است؟

$$6\hbar^2 \quad (1)$$

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

$$4\hbar^2 \quad (3)$$

$$5\hbar^2 \quad (4)$$

- ۳۴- اگر  $[\hat{A}, \hat{B}^\dagger] = 1$  باشد، مقدار  $[\hat{A}, \hat{B}]$  کدام است؟

$$2\hat{A} \quad (1)$$

$$2\hat{B} \quad (2)$$

$$\hat{A} + \hat{B} \quad (3)$$

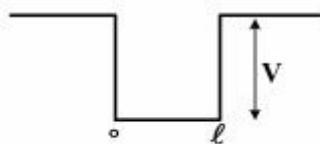
$$\hat{A} - \hat{B} \quad (4)$$

۳۵- در عبارت زیر مقدار عددی  $a$  کدام است؟

$$(\hat{s}_1 + \hat{s}_2)^T [\alpha(1)\beta(2) + \alpha(2)\beta(1)] = a \hbar^2 [\alpha(1)\beta(2) + \alpha(2)\beta(1)]$$

- (۱) صفر
- (۲)  $\frac{3}{4}$
- (۳)  $\frac{3}{2}$
- (۴) ۲

۳۶- ذرهای در چاه مربعی به طول  $\ell$  قرار گرفته است. دیواره چاه محدود به اندازه  $V$  دارد. در مکانیک کوانتومی اگر انرژی ذره  $E > V$  باشد، در این صورت، کدام گزینه صحیح است؟



- (۱) احتمال یافتن ذره در بیرون چاه برابر صفر است.
- (۲) اصولاً احتمال یافتن ذره در داخل و بیرون چاه تفاوت نخواهد کرد.
- (۳) احتمال یافتن ذره در بیرون چاه صفر نیست.
- (۴) در چنین حالتی ذره از چاه نمی‌تواند خارج شود مگراینکه انرژی آن  $E < V$  باشد.

۳۷- همه گزینه‌ها زیر صحیح است به غیر از: ( $\hat{\Pi}$ : عملگر پارتیه)

- (۱)  $(\hat{H}, \hat{\Pi}) = (\hat{T}, \hat{\Pi})$
- (۲)  $(\hat{H}, \hat{\Pi}) = (\hat{V}, \hat{\Pi})$
- (۳)  $(\hat{T}, \hat{\Pi}) = 0$
- (۴)  $(\hat{V}^T, \hat{\Pi}) = 0$

۳۸- حالت‌های ایستاده (Stationary states) ذره در جعبه سه بعدی، ویژه توابع کدام عملگر است؟

- (۱)  $\hat{P}_x$
- (۲)  $\hat{x}$
- (۳)  $\hat{P}_z$
- (۴)  $\hat{x}^T$

۳۹- تابع حالت ایستاده یک ذره در جعبه مستطیلی سه بعدی به ابعاد  $a$  و  $b$  و  $c$ .

$$\psi_{111} = \left(\frac{\lambda}{abc}\right)^{\frac{1}{2}} \sin \frac{\pi x}{a} \sin \frac{\pi y}{b} \sin \frac{\pi z}{c}$$

چه مقداری قابل پیش‌بینی است؟

- (۱)  $+\frac{h}{2a}$
- (۲)  $-\frac{h}{2a}$
- (۳)  $\pm \frac{h}{2a}$

(۴) با قطعیت نمی‌توان پیش‌بینی کرد.

- ۴۰ در روش تغییری (واریاسیون)، برای ذره در جعبه یک بعدی به طول  $\ell$  با دیواره‌های پتانسیل بی‌نهایت، توابع زیر پیشنهاد شده است. همه توابع مناسب‌اند، به جز:

$$x(\ell - x)^r \quad (1)$$

$$x^r(\ell - x) \quad (2)$$

$$x(\ell + x) \quad (3)$$

$$\cos \pi \left( \frac{1}{2} - x^r / \ell^r \right) \quad (4)$$

- ۴۱ اگر عملگر هامیلتونی یک سیستم به صورت  $H = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ -1 & 3 & -2 \\ 0 & -2 & 5 \end{pmatrix}$  باشد، مقدار مورد انتظار انرژی برای تابع

$$\psi | \psi \rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}$$

$$\frac{7}{6} \quad (1)$$

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

$$2 \quad (3)$$

$$0 \quad (4)$$

- ۴۲ ماتریس متناظر  $S_x$  (مؤلفه  $\alpha$  عملگر اسپین) کدام است؟

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

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

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

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

- ۴۳ با در نظر گرفتن تابع آزمایشی  $\phi = \exp(-c_1 r - c_2 r^3)$  برای حالت پایه اتم هیدروژن غیرنسبیتی، درصد خطا در انرژی محاسبه شده از روش تغییر، چقدر است؟

$$(1) \text{ صفر}$$

$$(2) ۱ تا ۲ درصد$$

$$(3) ۲ تا ۵ درصد$$

$$(4) بیشتر از ۵ درصد$$

- ۴۴- در روش اختلال، تصحیح انرژی مرتبه اول برای حالت پایه یک ذره در جعبه یک بعدی با شرایط زیر کدام است؟

$$\begin{cases} V = \infty & x \leq 0, x \geq \ell \\ V = \frac{bx}{\ell} & 0 < x < \ell \end{cases}$$

(۱) صفر

(۲)  $b$ (۳)  $\frac{b}{2}$ (۴)  $\frac{3b}{2}$ 

- ۴۵- فرض کنید ذرهای در یک جعبه با طول  $\ell$  در یک حالت ناایستاده  $\psi = 0$  برای  $x < 0$  و  $x > \ell$  و

$$\Psi = \frac{1}{2} e^{-\frac{i\hbar^2 t}{\lambda m \ell^2 \hbar}} \left( \frac{1}{\ell} \right)^{\frac{1}{2}} \sin\left(\frac{\pi x}{\ell}\right) + \frac{1}{2} \sqrt{3} e^{i\pi} e^{\frac{-i\hbar^2 t}{\lambda m \ell^2 \hbar}} \left( \frac{1}{\ell} \right)^{\frac{1}{2}} \sin\left(\frac{2\pi x}{\ell}\right)$$

بدست آوردن  $\frac{2^2 h^2}{\lambda m \ell^2}$  برای انرژی چقدر است؟

(۱)  $\frac{3}{4}$ (۲)  $\frac{1}{4}$ (۳)  $\frac{1}{2}$ (۴)  $\frac{1}{3}$

## کلید اولیه دکترای سال 1396

کلید اولیه دکترای سال 1396

به اطلاع داوطلبان شرکت کننده در آزمون دکترای سال 1396 می رساند، در صورت تمایل می توانید حداکثر تا تاریخ 16/12/95 با مراجعه به سیستم پاسخگویی اینترنتی، نسبت به تکمیل فرم «اعتراض به کلید سوالات آزمون» اقدام نمایید. لازم به ذکر است نظرات داوطلبان فقط از طریق سامانه پاسخگویی اینترنتی و فرم مذکور دریافت خواهد شد و به موارد ارسالی از طرف دیگر و پس از تاریخ اعلام شده، به هیچ عنوان 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	1	31	1
2	2	32	4
3	4	33	1
4	3	34	2
5	3	35	4
6	3	36	3
7	4	37	1
8	4	38	3
9	4	39	4
10	2	40	3
11	1	41	2
12	3	42	1
13	2	43	1
14	2	44	3
15	1	45	1
16	3		
17	2		
18	4		
19	2		
20	1		
21	3		
22	1		
23	4		
24	2		
25	4		
26	1		
27	2		
28	1		
29	3		
30	4		

خروج