جمهوری اسلامی ایران
وزارت آموزش و پرورش

مبارزهٔ علمی برای جوانان، زنده کردن روح جست و جو و کشف واقعیت هاست. «امام خمینی (ره)»

اینجانب ..... (شرکت کننده) این دفترچه را به صورت کامل (۱۰ برگه با احتساب جلد) دریافت نمودم امضاء

اینجانب ..... (منشی حوزه) تعداد ..... برگه (با احتساب جلد) دریافت نمودم امضاء

دفترچه سوالات تشریحی پانزدهمین دورهٔ المپیاد علوم و فناوری‌نانو
تاریخ: ۱۴۰۳/۰۱/۲۵

تعداد سوالات	ساعت شروع	مدت آزمون (دقیقه)
۶	۱۴:۰۰	۱۵۰

نام و نام خانوادگی :

شماره پرونده: **استان:**

کد ملی: **منطقه:**

نام پدر: **پایه تحصیلی:**

نام مدرسه:

حوزه:

شماره صندلی

توضیحات مهم

استفاده از هر نوع ماشین حساب مجاز است

۱. پاسخ‌نامه به صورت نیمه‌کامپیوتری تصحیح می‌شود، بنابراین از مچاله و کثیف کردن آن جداً خودداری نمایید.

۲. مشخصات خود را با اطلاعات بالای هر صفحه پاسخ‌نامه تطبیق دهید. در صورتی که حتی یکی از صفحات با مشخصات شما هم‌خوانی ندارد، بلافاصله مراقبین را مطلع نمایید.

۳. پاسخ هر سوال تشریحی را در محل تعیین شده خود در پاسخ‌برگ بنویسید. چنان‌چه همه یا قسمتی از جواب سوال را در محل پاسخ سوال دیگری بنویسید، به شما نمره‌ای تعلق نمی‌گیرد.

۴. پاسخ‌های غلط در سوالات تشریحی، نمرهٔ منفی ندارد و هر سوال تشریحی ۱۰ نمره دارد.

۵. با توجه به این‌که برگه‌های پاسخ‌نامه به نام شما صادر شده است، امکان ارائه هیچ‌گونه برگه اضافه وجود نخواهد داشت. لذا توصیه می‌شود ابتدا سوالات را در برگه چرک‌نویسی، حل کرده و آن‌گاه در پاسخ‌نامه پاک‌نویس نمایید.

۶. عملیات تصحیح دفترچه تشریحی توسط مصححین، پس از قطع سربرگ، به صورت ناشناس انجام خواهد شد. لذا از درج هرگونه نوشته یا علامت مشخصه که نشان‌دهنده صاحب برگه باشد، خودداری نمایید، در غیر این صورت تقلب محسوب شده و در هر مرحله‌ای که باشید از ادامه حضور در المپیاد محروم خواهید شد.

۷. از مخدوش کردن بارکدها و دایره‌های چهارگوشه پاسخ‌نامه خودداری کنید، در غیر این صورت برگه شما تصحیح نخواهد شد.

۸. همراه داشتن هرگونه کتاب، جزوه، یادداشت و لوازم الکترونیکی نظیر تلفن همراه، ساعت هوشمند، دستبند هوشمند و لپ‌تاب ممنوع است. همراه داشتن این قبیل وسایل حتی اگر از آن استفاده نکنید یا خاموش باشد تقلب محسوب خواهد شد.

۹. شرکت‌کنندگان در دوره تابستان از بین دانش‌آموزان پایه دهم و یازدهم و دوازدهم انتخاب می‌شوند.

۱۰. دفترچه‌ها باید همراه پاسخ‌نامه تحویل داده شوند.

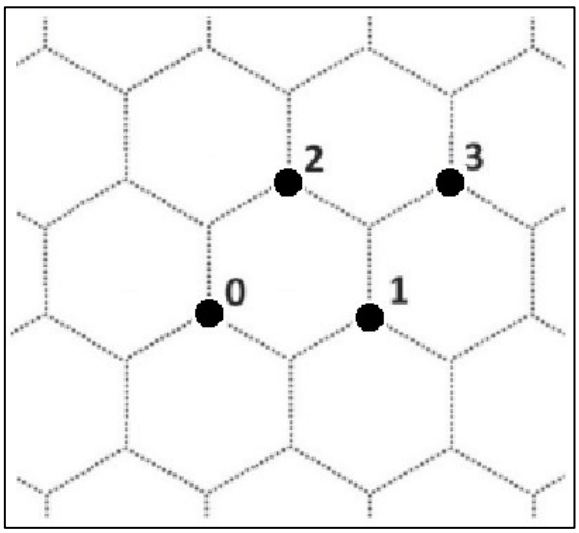
۱۱. پاسخ نهایی سوالات تشریحی تنها بخشی از نمرهٔ کامل را شامل می‌شود، لذا روند نوشتن پاسخ تشریحی و درج تمام فرضیات، پیش‌نیازهای لازم و صحیح برای رسیدن به پاسخ نهایی ضروری است.

۱۲. برای پاسخ به سوالات تشریحی، به موارد خواسته شده دقت نمایید. هر کدام از موارد، نمره مختص به خود را دارد و در صورت عدم پاسخ‌دهی به موارد خواسته شده، امتیاز آن بخش کسر خواهد شد.

در صورت لزوم از این
صفحه به عنوان چرک
نویس استفاده کنید

مطالب این صفحه
تحت هیچ شرایطی
تصحیح نخواهد شد

نام :
نام خانوادگی :
کد ملی :



۱- کامبیز از طریق بازی با یک مهره روی صفحه گرافن، CNT های مختلف می‌سازد. او قبل از انجام هر حرکت، خانه‌ای که مهره روی راس آن قرار دارد (شماره صفر) و رئوس خانه‌های همسایه را به شکل مقابل شماره‌گذاری می‌کند. روی تاس، اعداد $\{۱،۱،۲،۲،۳،۳\}$ درج شده است. با هر مرتبه انداختن تاس، مهره را روی راس متناظر با عدد تاس قرار می‌دهد. فرض کنید که بردار کایرال هر CNT، بردار واصل بین رئوس در شروع و خاتمه بازی است. **(۱۱ نمره)**

الف) چنانچه پس از ۴ مرتبه تاس انداختن، پیشامد $\{۲،۳،۱،۳\}$ رخ دهد؛ بردار کایرال را بدست آورید؟ (۲ نمره)

ب) چنانچه تعداد رخداد اعداد ۱ تا ۳ در k بار تاس انداختن با پارامترهای n_1 تا n_3 نشان داده شود، بردار کایرال را بر حسب این پارامترها بدست آورید. (۱/۵ نمره)

ج) آیا ترتیب اعداد در تاس انداختن‌های متوالی روی بردار کایرال نهایی اثرگذار است؟ (۰/۵ نمره)

د) چقدر احتمال دارد که نانولوله ساخته شده با بردار کایرال حاصل از ۸ بار تاس انداختن، دسته صندلی باشد؟ (۳ نمره)

(راهنمایی: تعداد جواب‌های ممکن برای معادله $x_1 + x_2 + \cdots + x_n = r$ به شرط آنکه x_1 تا x_n همگی اعداد صحیح غیرمنفی باشند، برابر است با $\binom{n+r-1}{r-1}$)

ه) چنانچه تعداد رخداد اعداد ۱ تا ۳ در k بار تاس انداختن با پارامترهای n_1 تا n_3 نشان داده شود، شرط رسانا بودن نانولوله را بدست آورید. (۱ نمره)

و) احتمال اینکه نانولوله ساخته شده با بردار کایرال حاصل از ۶ بار تاس انداختن، از نوع کایرال و رسانا باشد؛ چقدر است؟ (۳ نمره)

نام :

نام خانوادگی :

کد ملی :

پاسخ سوال ۱ از نوشتن جواب سوالات دیگر در قسمت تعیین شده برای این سوال خودداری کنید در غیر این صورت، پاسخ داده شده تصحیح نخواهد شد

نام :

نام خانوادگی :

کد ملی :

ادامه پاسخ سوال ۱ از نوشتن جواب سوالات دیگر در قسمت تعیین شده برای این سوال خودداری کنید در غیر این صورت، پاسخ داده شده تصحیح نخواهد شد

نام :
نام خانوادگی :
کد ملی :

۲- ذره‌ای از جنس A با مورفولوژی مکعبی و شبکه بلوری مکعبی ساده را فرض کنید. تعداد N اتم روی هر یال این ذره قرار دارد. **(۹ نمره)**

الف) تعداد اتم‌های داخلی، اتم‌های سطحی (به غیر از اتم‌های واقع روی یال‌ها) و اتم‌های واقع روی یال‌ها را بدست آورید. (۲ نمره)

ب) با توجه به اینکه انرژی پیوند در یک ذره با رابطه زیر بدست می‌آید:

$$E = \frac{۱}{۲} \times \text{تعداد پیوندها} \times E_{\text{پیوند}}$$

انرژی پیوند این ذره را بر حسب N و $E_{\text{پیوند}}$ بدست آورید. (۲ نمره)

ج) بر اساس تعریف زیر، رابطه انرژی پیوند را برحسب پارامترهای E_0 و N بازنویسی کنید. (۱ نمره)

$$E_0 = 3N^3 E_{\text{پیوند}}$$

د) بر اساس تعریف زیر، رابطه بین دمای ذوب ماده بالک (T_{mb}) و دمای ذوب نانوذرات (T_{mn}) را بیابید. (۰/۵ نمره)

$$T_m = \frac{۰/۰۳۲}{k_B} E$$

ه) اگر دمای ذوب پودر بالک ۱۲۵۰ کلوین باشد، دمای ذوب پودر نانوذرات مکعبی شکل A به طول یال $۳۰a$ را بدست آورید؟ (a پارامتر شبکه است) (۱ نمره)

و) رابطه زیر برای محاسبه T_{mn} را در نظر بگیرید:

$$T_{mn} = T_{mb}\left[۱ - ۶\alpha\frac{r}{D}\right]$$

که در این رابطه، α فاکتور شکل ذره و بدون بعد، r شعاع اتم و D قطر ذره معادل است. اختلاف دمای ذوب بدست آمده برای نانوذرات مطابق روابط بخش‌های ج و د چقدر است؟ (۲/۵ نمره)

نام :

نام خانوادگی :

کد ملی :

پاسخ سوال ۲ از نوشتن جواب سوالات دیگر در قسمت تعیین شده برای این سوال خودداری کنید در غیر این صورت، پاسخ داده شده تصحیح نخواهد شد

نام :

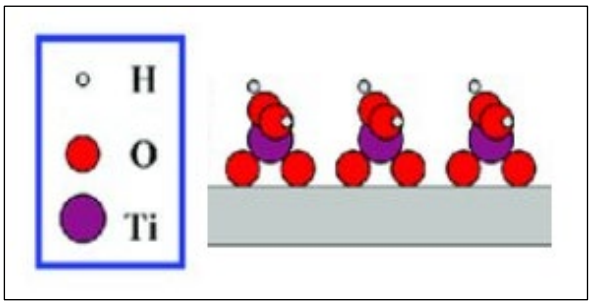
نام خانوادگی :

کد ملی :

ادامه پاسخ سوال ۲ از نوشتن جواب سوالات دیگر در قسمت تعیین شده برای این سوال خودداری کنید در غیر این صورت، پاسخ داده شده تصحیح نخواهد شد

نام :
نام خانوادگی :
کد ملی :

۳- پژوهشگری قصد دارد با استفاده از روش رسوب‌دهی لایه اتمی (ALD)، به سنتز فیلم نازک TiO_2 بپردازد. چنانچه پس از یک سیکل رسوب‌دهی، فیلم سنتز شده روی زیرلایه دارای آرایش اتمی مقابل باشد: **(۱۰ نمره)**



الف) پیش‌ماده یا پیش‌ماده‌های استفاده شده در این فرایند سنتز را نام ببرید. (۱ نمره)

ب) فرایند رشد فیلم نازک TiO_2 را گام به گام با رسم شکل توضیح دهید. (ساده‌سازی با ترسیم مراحل) (۴ نمره)

(راهنمایی: در این سنتز از مرحله تراکم صرف نظر کنید.)

ج) می‌دانیم که در ساختار چهاروجهی منتظم، زاویه بین اتم مرکزی و دو اتم مجاور ۱۰۹ درجه است. برای تولید یک لایه نازک به ضخامت ۵۰ نانومتر، چند سیکل رسوب‌دهی لازم است؟ (شعاع اتمی تیتانیوم و اکسیژن، به ترتیب۱۸۷ و ۱۵۳ پیکومتر است.) (۳ نمره)

د) چنانچه دانسیته سطح فعال شده توسط OH، $0/01$ $mole/m^2$ باشد، برای تولید لایه نازک بخش قبل با سطح $10\ cm^2$، چقدر پیش‌ماده یا پیش‌ماده‌ها لازم است؟ (۲ نمره)

نام :

نام خانوادگی :

کد ملی :

پاسخ سوال ۳ از نوشتن جواب سوالات دیگر در قسمت تعیین شده برای این سوال خودداری کنید در غیر این صورت، پاسخ داده شده تصحیح نخواهد شد

نام :
نام خانوادگی :
کد ملی :

۴- همانطور که می‌دانید، لانگمویر در تئوری جذب خود پیشنهاد کرد که جذب از طریق واکنش تعادلی زیر انجام می‌شود:

$$A_g + S \leftrightarrow AS$$

که در آن A_g مولکول‌های گاز با سطح موثر مشخص، S مکان‌های جذب و AS مکان‌های جذب پوشیده شده با مولکول‌های گاز است. **(۱۲ نمره)**

الف) رابطه ثابت تعادل را بر حسب فشار جزئی گاز(P)، تعداد مکان‌های جذب پوشیده شده با مولکول‌های گاز(n_{AS}) و تعداد کل مکان‌های جذب (n_S) بیابید؟ (۱/۵ نمره)

ب) چنانچه θ بیانگر نسبت مکان‌های جذب پوشیده شده باشد($0 \leq \theta \leq 1$) و فشار جزئی گاز با P نشان داده شود، ثابت تعادل (K) را بر حسب پارامترهای θ و P بیابید؟ K دارای چه واحدی است؟ (۲ نمره)

ج) اگر میزان حجم گاز مصرفی برای تشکیل یک لایه در شرایط STP با V_{mon} نشان داده شود و در فشار جزئی P، حجم V از گاز جذب شود، رابطه $K(P.\theta)$ را به صورت $K(P.V)$ بازنویسی کنید. (۱/۵ نمره)

د) برای نمونه پودر یک گرمی نانوذرات ZnO، نتایج جدول زیر موجود است. با توجه به داده‌های ارائه شده، مقدار V_{mon} و K را بدست آورید؟ (۴ نمره)

(راهنمایی: از رابطه $\theta(P.K)$ کمک بگیرید.)

P (kPa)	V (cm^3)
0.090916	40.976
0.1215	47.379
0.2186	58.134

ه) چنانچه از مولکول‌های گاز با سطح موثر ۰/۲ nm^2، برای مشخصه‌یابی این نمونه پودر استفاده شود؛ سطح ویژه را بدست آورید. (۲ نمره)

(راهنمایی: حجم اشغال شده توسط ۱ مول گاز در شرایط STP، ۲۲۴۰۰ cm^3 است.)

و) در صورت انجام آزمون BET، کدام ایزوترم جذب و واجذب مورد انتظار است؟ (۱ نمره)

نام :

نام خانوادگی :

کد ملی :

پاسخ سوال ۴ از نوشتن جواب سوالات دیگر در قسمت تعیین شده برای این سوال خودداری کنید در غیر این صورت، پاسخ داده شده تصحیح نخواهد شد

نام :

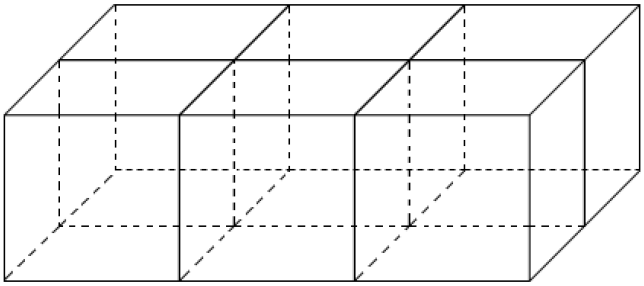
نام خانوادگی :

کد ملی :

ادامه پاسخ سوال ۴ از نوشتن جواب سوالات دیگر در قسمت تعیین شده برای این سوال خودداری کنید در غیر این صورت، پاسخ داده شده تصحیح نخواهد شد

نام :
نام خانوادگی :
کد ملی :

۵- فلز M با شبکه بلوری FCC را در نظر بگیرید. **(۱۲ نمره)**



الف) در شکل مقابل، صفحات با اندیس میلر (۰۱۱) را مشخص کنید؟ (۱/۵ نمره)

ب) فاصله هر دو صفحه موازی با اندیس میلر (۰۱۱) را بدست آورید؟ با توجه به فاصله بدست آمده برای دو صفحه موازی، کدام‌یک از روابط زیر برای فاصله صفحات (hkl) صحیح است؟ (۱/۵ نمره)

۱) $d = \frac{a_0}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}$

۲) $d = a_0\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}$

ج) در آنالیز TEM، هنگامی که پرتویی از الکترون‌ها به یک نمونه بلوری برخورد می‌کند، بعضی از الکترون‌ها بدون برهمکنش از نمونه عبور کرده و به صفحه یا فیلمی که در فاصله L از نمونه در نقطه O قرار دارد؛ برخورد می‌کنند. دیگر الکترون‌ها با زاویه θ توسط صفحات بلوری با فاصله d پراش پیدا کرده و در نقطه A به فیلمی که به فاصله r از O قرار دارد؛ برخورد می‌کنند. با استفاده از قواعد هندسی و ترسیم شکل، رابطه معادل با رابطه براگ را برای پراش الکترون‌ها بدست آورید؟ (مفروضات اصلی بیان گردد.) (۴ نمره)

د) فرض کنید نانوذرات هسته – پوسته‌ای با هسته M موجود است. اطلاعات شبکه بلوری ماده M در جدول زیر ارائه شده است.

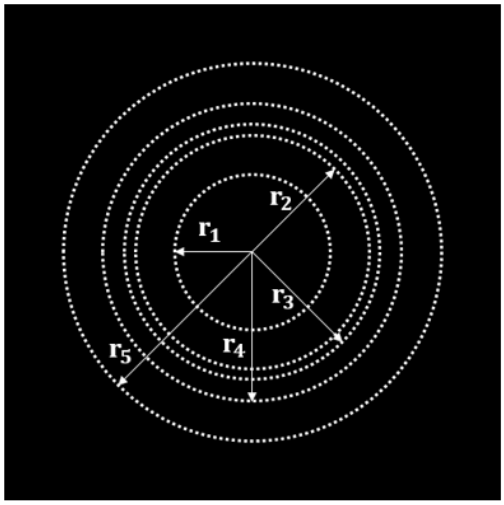
فلز	شبکه بلوری	شعاع اتمی (pm)	صفحات پراش
M	FCC	۱۵۰	(۱۱۱)، (۲۲۰)، (۳۱۱)

با فرض اینکه k ثابت دستگاه و برابر با مقدار Lλ باشد، جدول زیر را تکمیل نمایید. (۲ نمره)

نام :
نام خانوادگی :
کد ملی :

فلز	$r_{(220)}/r_{(111)}$	$r_{(311)}/r_{(111)}$
M		

ه) در آنالیز TEM صورت گرفته از این نانوذرات، طرح پراش الکترونی زیر بدست آمده است. کدام حلقه‌ها متعلق به فلز M است؟ (۱/۵ نمره)



	شعاع ($nm/1$)
r_1	۱/۴۰
r_2	۲/۱۰
r_3	۲/۲۹
r_4	۲/۶۸
r_5	۳/۴۳

و) چنانچه داده‌های زیر برای فلزات A و B موجود باشد، کدام فلز پوسته را تشکیل می‌دهد؟ (۱/۵ نمره)

فلز	شبکه بلوری	شعاع اتمی (pm)	صفحات پراش
A	FCC	۱۰۰	(۱۱۱)، (۲۲۰)
B	FCC	۱۲۵	(۱۱۱)، (۳۱۱)

نام :

نام خانوادگی :

کد ملی :

پاسخ سوال ۵ از نوشتن جواب سوالات دیگر در قسمت تعیین شده برای این سوال خودداری کنید در غیر این صورت، پاسخ داده شده تصحیح نخواهد شد

نام :

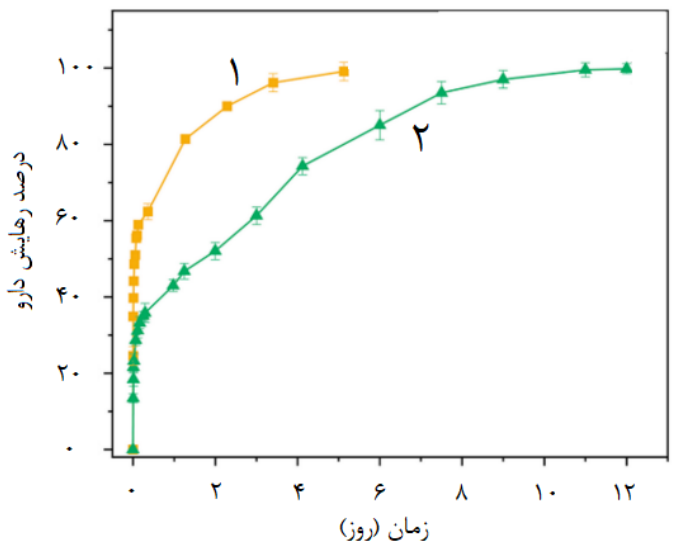
نام خانوادگی :

کد ملی :

ادامه پاسخ سوال ۵ از نوشتن جواب سوالات دیگر در قسمت تعیین شده برای این سوال خودداری کنید در غیر این صورت، پاسخ داده شده تصحیح نخواهد شد

نام :
نام خانوادگی :
کد ملی :

۶- در پژوهشی از نانوذرات زئولیت برای انتقال داروی داکاربازین استفاده شده است. پروفایل رهایش داروی(۱) توسط این نانوذره در شکل زیر نشان داده شده است. در مرحله بعد سطح این نانوذره با پلیمر پلی اتیلن گلایکول (PEG) اصلاح و مجددا داروی داکاربازین درون آن بارگذاری شد. پروفایل رهایش داروی این نانوذره اصلاح شده، مطابق با نمودار (۲) است. اندازه نانوذرات زئولیت اولیه در حدود ۵۰ نانومتر و اندازه نانوذرات اصلاح شده در حدود ۸۰ نانومتر است. **(۶ نمره)**



الف) با توجه به اهداف رهایش داروی کنترل شده کدام یک از این دو نانوذره برای انتقال داروی داکاربازین مناسب‌تر است؟ (با ذکر دلیل) (۱/۵ نمره)

ب) مکانیسم انتقال دارو در این دو نانوذره را شرح دهید؟ (۱/۵ نمره)

ج) در صورتی که این دو نانوذره در داخل رگ تزریق شوند کدام‌یک مدت زمان بیشتری در گردش خون پایدار باقی می‌ماند؟ (با ذکر دلیل) (۱/۵ نمره)

د) به نظر شما سمیت کدام‌یک از این نانوذرات بیشتر است؟ (با ذکر دلیل) (۱/۵ نمره)

نام :

نام خانوادگی :

کد ملی :

پاسخ سوال ۶ از نوشتن جواب سوالات دیگر در قسمت تعیین شده برای این سوال خودداری کنید در غیر این صورت، پاسخ داده شده تصحیح نخواهد شد

در صورت لزوم از این
صفحه به عنوان چرک
نویس استفاده کنید

مطالب این صفحه
تحت هیچ شرایطی
تصحیح نخواهد شد

به نام خدا

پاسخنامه سوالات تشریحی

– ۱

با توجه به شکل و توضیحات صورت سوال، بردار کایرال پس از k مرتبه تاس انداختن از فرمول زیر بدست می‌آید:

$$\left(m_k ,n_k\right)=\left(m_{k-1} ,n_{k-1}\right)+\left(a_k ,b_k\right) \quad \text{و} \quad \left(m_0 ,n_0\right)=\left(0 ,0\right)$$

مقادیر a_k و b_k با توجه به عدد تاس در مرتبه k، از جدول زیر بدست می‌آید.

عدد تاس	a	B
۱	۱	۰
۲	۰	۱
۳	۱	۱

الف)

$$\left(m_1 ,n_1\right)=\left(m_0 ,n_0\right)+\left(a_1 ,b_1\right) \quad \text{و} \quad \left(m_0 ,n_0\right)=\left(0 ,0\right)$$

$$\left(m_2 ,n_2\right)=\left(m_1 ,n_1\right)+\left(a_2 ,b_2\right)$$

$$\left(m_3 ,n_3\right)=\left(m_2 ,n_2\right)+\left(a_3 ,b_3\right)$$

$$\left(m_4 ,n_4\right)=\left(m_3 ,n_3\right)+\left(a_4 ,b_4\right)$$

$$\left(m_1 ,n_1\right)=\left(0 ,0\right)+\left(0 ,1\right)$$

$$\left(m_2 ,n_2\right)=\left(0 ,1\right)+\left(1 ,1\right)$$

$$\left(m_3 ,n_3\right)=\left(1 ,2\right)+\left(1 ,0\right)$$

$$\left(m_4 ,n_4\right)=\left(2 ,2\right)+\left(1 ,1\right)=(3 ,3)$$

ب) با توجه به رابطه بالا برای k بار تاس انداختن داریم:

$$(m_k\text{ و }n_k) = (0\text{ و }0) + (a_1\text{ و }b_1) + (a_2\text{ و }b_2) + (a_{k-1}\text{ و }b_{k-1}) + (a_k\text{ و }b_k)$$
$$= n_1(1\text{ و }0) + n_2(0\text{ و }1) + n_3(1\text{ و }1) = (n_1 + n_3\text{ و }n_2 + n_3)$$

ج) با توجه به رابطه زیر، جابجایی اعداد پیشامد منجر به تغییر بردار کایرال نخواهد شد.

$$(m_k\text{ و }n_k) = (0\text{ و }0) + (a_1\text{ و }b_1) + (a_2\text{ و }b_2) + (a_{k-1}\text{ و }b_{k-1}) + (a_k\text{ و }b_k)$$

د) تعداد نانولوله‌های با بردار کایرال مختلف برابر است با تعداد جواب‌های صحیح غیرمنفی معادله زیر:

$$n_1 + n_2 + n_3 = 8$$

تعداد نانولوله‌های با بردار کایرال مختلف $\binom{3+8-1}{8-1} = \binom{10}{7}$

برای نانولوله دسته صندلی داریم:

$$n_1 + n_3 = n_2 + n_3 \rightarrow \quad n_1 = n_2$$

n_1	n_2	n_3	بردار کایرال
۰	۰	۸	(8 و 8)
۱	۱	۶	(7 و 7)
۲	۲	۴	(6 و 6)
۳	۳	۲	(5 و 5)
۴	۴	۰	(4 و 4)
۵ حالت			

$$\text{احتمال تشکیل نانولوله دسته صندلی} = \frac{5}{\binom{10}{7}}$$

ه) برای رسانا بودن نانولوله داریم:

$$(n_2 + n_3) - (n_1 + n_3) = 3q \rightarrow \quad (n_2) - (n_1) = 3q$$

و) تعداد نانولوله‌های با بردار کایرال مختلف برابر است با تعداد جواب‌های صحیح غیرمنفی معادله زیر:

$$n_1 + n_2 + n_3 = 6$$

تعداد نانولوله‌های با بردار کایرال مختلف $\binom{3+6-1}{6-1} = \binom{8}{5}$

n_1	n_2	n_3	بردار کایرال	نوع نانولوله
~~۶~~	~~-~~	~~-~~	~~(6 و 0)~~	~~زیگزاگ~~
۴	۱	۱	(5 و 2)	کایرال
۳	۰	۳	(6 و 3)	کایرال

کایرال	(3و6)	۳	۳	۰
کایرال	(2و5)	۱	۴	۱
~~زیگزاگ~~	~~(0و6)~~	~~-~~	~~۶~~	~~-~~
۴ حالت				

احتمال تشکیل نانولوله دسته صندلی $= \frac{4}{\binom{8}{5}}$

۲ –

الف) برای یک ذره مکعبی با طول یال N، تعداد کل اتم‌ها N^3 خواهد بود. تعداد اتم‌های داخلی این ذره برابر با $(N-2)^3$ خواهد بود. با توجه به اینکه مکعب دارای ۱۲ یال است، تعداد اتم‌های روی یال‌ها برابر است با: $12(N-2)+8$

با توجه به اینکه مکعب دارای ۶ وجه است، تعداد اتم‌های سطحی (به غیر از اتم‌های روی یال‌ها) برابر است با: $6(N-2)^2$

ب) اتم‌های داخلی ذرات با ساختار مکعبی ساده دارای عدد همسایگی ۶ و در نتیجه ۶ پیوند هستند. اتم‌های واقع روی هر سطح ۵ پیوند و اتم‌های واقع روی هر یال ۴ پیوند دارد.

برای بدست آوردن انرژی پیوند در ذره‌ای با تعداد N اتم روی ضلع ذره داریم:

$$E = \frac{1}{2} \times \text{تعداد پیوندها} \times E_{\text{پیوند}}$$

$$= \frac{1}{2} \times \left[\left(5 \times \text{تعداد اتم‌های سطحی}\right) + \left(6 \times \text{تعداد اتم‌های داخلی}\right) + \left(4 \times \text{تعداد اتم‌های روی یال‌ها}\right)\right] \times E_{\text{پیوند}}$$

$$E = \frac{1}{2} \times \text{تعداد پیوندها} \times E_{\text{پیوند}} = \frac{1}{2} \times [(5 \times 6(N-2)^2) + 6(N-2)^3 + 4(12N-16)] \times E_{\text{پیوند}}$$

$$= 3N^3 E_{\text{پیوند}} \left[1 - \frac{3N^2-4}{3N^3}\right]$$

ج)

$$E_0 = 3N^3 E_{\text{پیوند}} \qquad \rightarrow \qquad E = E_0 \left[1 - \frac{3N^2-4}{3N^3}\right]$$

د)

$$\mathrm{T_m} = \frac{۰/۰۳۲}{\mathrm{k_B}}\mathrm{E} \qquad \rightarrow \qquad \mathrm{E} = \frac{\mathrm{k_B}}{۰/۰۳۲}\mathrm{T_m}$$

$$E = E_0\left[1 - \frac{3N^2-4}{3N^3}\right] \rightarrow \frac{\mathrm{k_B}}{\cdot/\cdot\mathrm{۳۲}}\mathrm{T_{mn}} = \frac{\mathrm{k_B}}{\cdot/\cdot\mathrm{۳۲}}\mathrm{T_{mb}}\left[1 - \frac{3N^2-4}{3N^3}\right] \rightarrow T_{mn} = T_{mb}\left[1 - \frac{3N^2-4}{3N^3}\right]$$

ه) با توجه به اینکه طول ضلع ذرات، ۳۰a است و ذرات ساختار بلوری مکعبی ساده دارند، تعداد ۳۰ اتم روی یال این ذره مکعبی قرار دارد. در نتیجه دمای ذوب برابر است با:

$$T_{mn} = T_{mb}\left[1 - \frac{3N^2-4}{3N^3}\right] = T_{mb}\left[1 - \frac{3\times(30^2)-4}{3\times(30^3)}\right] = T_{mb}\left[1 - \frac{2700-4}{81000}\right]$$
$$= T_{mb}\left[1 - \frac{2696}{81000}\right] \cong 1208$$

در نتیجه دمای ذوب پودر نانوذرات حدود ۱۲۰۸ کلوین خواهد بود.

و) برای هر ذره با مورفولوژی مکعبی شکل، یک ذره کروی معادل که حجم برابر با ذره مکعبی دارد، در نظر گرفته می‌شود. بر اساس تعریف، فاکتور شکل بدین صورت محاسبه می‌شود:

$$\alpha = \frac{\text{مساحت ذره مکعبی شکل}}{\text{مساحت ذره کروی شکل معادل}} = \frac{12\sqrt[3]{2}R^2}{4\pi R^2} = \sqrt[3]{2}$$

$$\text{مساحت ذره مکعبی شکل} = 6\times\left[\sqrt[3]{\frac{4}{3}\pi R^3}\right]^2 = 6\times\left[R\sqrt[3]{4}\right]^2 = 12\sqrt[3]{2}R^2$$

$$\mathrm{T_{mn.2}} - \mathrm{T_{mn.1}} = \mathrm{T_{mb}}\left[\text{۱} - 6\alpha\frac{\mathrm{r}}{\mathrm{D}}\right] - \mathrm{T_{mb}}\left[1 - \frac{3N^2-4}{3N^3}\right] = \mathrm{T_{mb}}\left[\frac{3N^2-4}{3N^3} - 6\sqrt[3]{2}\frac{\mathrm{r}}{\mathrm{D}}\right]$$

محاسبه قطر ذره کروی معادل:

$$V = [30a]^3 \quad \rightarrow \quad \frac{\pi D^3}{6} = [30a]^3 \quad \rightarrow \quad D = \sqrt[3]{\frac{6[30a]^3}{\pi}} = 30a\left(\sqrt[3]{\frac{6}{\pi}}\right)$$

$$T_{mn.2} - T_{mn.1} = T_{mb}\left[\frac{3N^2-4}{3N^3} - \frac{6\sqrt[3]{2}r}{30a\left(\sqrt[3]{\frac{6}{\pi}}\right)}\right] = T_{mb}\left[\frac{3N^2-4}{3N^3} - \frac{(2r)3\sqrt[3]{2}}{30a\left(\sqrt[3]{\frac{6}{\pi}}\right)}\right]$$

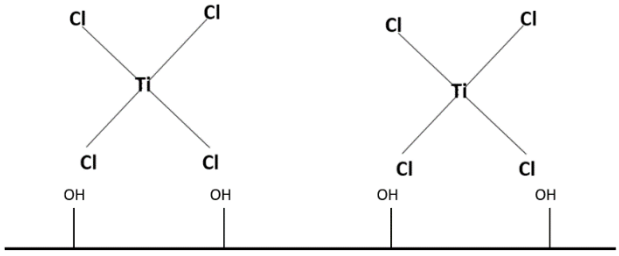
$$= T_{mb}\left[\frac{2696}{81000} - \frac{1}{10\left(\sqrt[3]{\frac{3}{\pi}}\right)}\right] = \frac{T_{mb}}{10}\left[\frac{2696}{8100} - \sqrt[3]{\frac{\pi}{3}}\right] = 125 \times (-0.68) = -85$$

– ۳

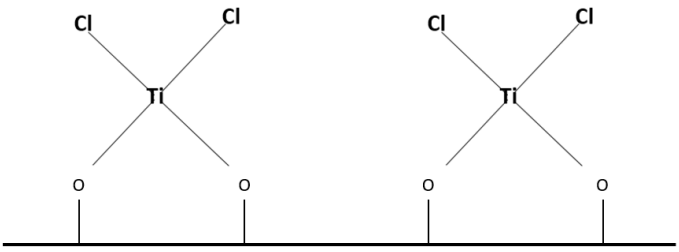
الف) پیش‌ماده‌های مورد استفاده در این فرایند سنتز $TiCl_4$ و H_2O است. (چنانچه منطبق بر مراجع علمی، پیش‌ماده‌های دیگری معرفی شده باشد و کل بخش‌های سوال مبتنی بر آن‌ها حل شده باشد، قابل قبول است.)

ب) ابتدا باید سطح مورد نظر توسط یون هیدروکسیل پوشش داده شود.

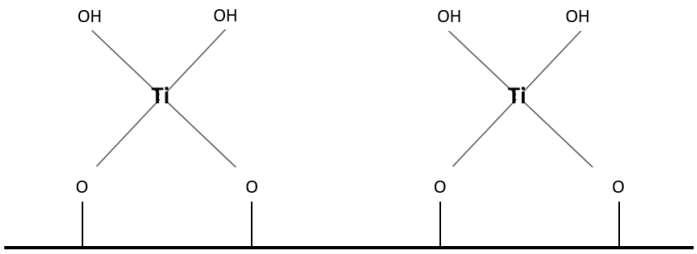
پیش‌ماده $TiCl_4$ افزوده شده و با لایه هیدروکسیدی وارد واکنش می‌شود.



سپس HCl تولید شده پاکسازی می‌شود.

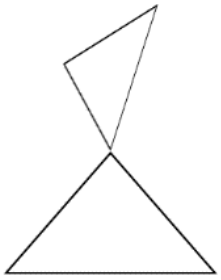


سپس پیش‌ماده H_2O افزوده شده و HCl تولیدشده پاکسازی می‌شود.

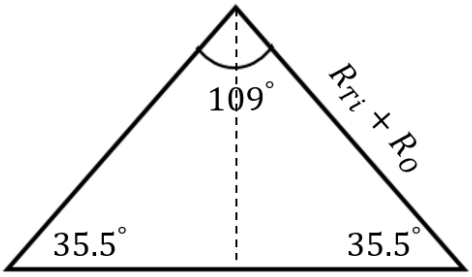


ج)

ساختار چهاروجهی هر لایه تشکیل شده به صورت زیر است.



در نتیجه ضخامت هر لایه تشکیل شده برابر است با دو برابر ارتفاع مثلث.



ضخامت یک لایه تشکیل شده $= 2H = 2(R_{Ti} + R_O)\sin(35.5) = 2(187 + 153) \times 0.581 \cong 395pm$

با توجه به تصویر ارائه شده در صورت سوال، برای محاسبه تعداد سیکل رسوب دهی داریم:

$$\text{تعداد سیکل رسوب‌دهی} = n \quad \text{و} \quad \text{ضخامت لایه}(pm) = R_O + 395n$$

$$50 \times 1000 = 153 + 395n \rightarrow 49847 = 395n \rightarrow n \cong 126$$

د)

$$\text{میلی مول } TiCl_4 \text{ مورد نیاز} = 126 \text{ لایه} \times \frac{10cm^2}{\text{یک لایه}} \times \frac{10^{-4}m^2}{1cm^2} \times \frac{0.01\ mole\ OH}{1m^2} \times \frac{1000\ mmole\ OH}{1\ mole\ OH} \times \frac{1\ mmole\ TiCl_4}{2mmole\ OH}$$

$$= 0.63$$

$$\text{میلی مول } H_2O \text{ مورد نیاز} = 0.63\ mmole\ TiCl_4 \times \frac{2\ mmole\ H_2O}{1\ mmole\ TiCl_4} = 1.26$$

نکته: مقدار آب مورد نیاز محاسبه شده با فرض تشکیل لایه هیدروکسیدی پس از آخرین مرحله رسوب‌دهی است. چنانچه بعد از آخرین مرحله رسوب دهی افزودن آب به منظور تشکیل لایه هیدروکسیدی نداشته باشیم از راه حل زیر استفاده می‌شود.

میلی مول H_2O مورد نیاز

$$= 125 \text{ لایه} \times \frac{10cm^2}{\text{یک لایه}} \times \frac{10^{-4}m^2}{1cm^2} \times \frac{0.01\ mole\ OH}{1m^2} \times \frac{1000\ mmole\ OH}{1\ mole\ OH} \times \frac{1\ mmole\ TiCl_4}{2mmole\ OH}$$
$$\times \frac{2\ mmole\ H_2O}{1\ mmole\ TiCl_4} = 1.25$$

بدیهی است که هر دو مقدار ۱/۲۵ و ۱/۲۶ میلی‌مول برای پیش‌ماده آب قابل قبول است.

۴ –

الف) ثابت تعادل به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\mathrm{K} = \frac{\text{تعداد مکان‌های جذب پوشیده شده با گاز}}{\text{فشار جزئی گاز} \times \left(\text{تعداد مکان‌های جذب پوشیده شده با گاز} - \text{تعداد کل مکان‌های جذب}\right)}$$

$$\mathrm{K} = \frac{\mathrm{n_{AS}}}{(\mathrm{n_S} - \mathrm{n_{AS}}) \times \mathrm{P}}$$

ب) با توجه به توضیحات بخش الف داریم:

$$\theta = {}^{\mathrm{n_{AS}}}/_{\mathrm{n_S}} \quad \text{و} \quad \mathrm{K} = \frac{\mathrm{n_{AS}}}{(\mathrm{n_S} - \mathrm{n_{AS}}) \times \mathrm{P}}$$

$$\mathrm{K} = \frac{{}^{\mathrm{n_{AS}}}/_{\mathrm{n_S}}}{\left[{}^{(\mathrm{n_S} - \mathrm{n_{AS}})}/_{\mathrm{n_S}}\right] \times \mathrm{P}} = \frac{{}^{\mathrm{n_{AS}}}/_{\mathrm{n_S}}}{\left[{}^{\mathrm{n_S}}/_{\mathrm{n_S}} - {}^{\mathrm{n_{AS}}}/_{\mathrm{n_S}}\right] \times \mathrm{P}}$$

$$\mathrm{K} = \frac{\theta}{(1-\theta)\mathrm{P}}$$

با توجه به رابطه بدست آمده، ثابت تعادل K دارای واحد ${}^{1}/_{\text{واحد فشار}}$ است.

ج) با جذب مقدار $\mathrm{V_{mon}}$ از گاز $\mathrm{A_g}$ تمام مکان‌های جذب سطح ماده جاذب با تشکیل یک لایه (تئوری لانگمویر) پر می‌شوند. در نتیجه در صورتی که مقدار V از گاز جذب شود می‌توان نوشت:

$$\theta = \frac{\mathrm{V}}{\mathrm{V_{mon}}}$$

$$\mathrm{K} = \frac{\left({}^{\mathrm{V}}/_{\mathrm{V_{mon}}}\right)}{\left[1 - \left({}^{\mathrm{V}}/_{\mathrm{V_{mon}}}\right)\right]\mathrm{P}}$$

د)

$$K = \frac{\theta}{(1-\theta)P} \quad \rightarrow \quad \theta = \frac{KP}{KP+1}$$

$$\theta = \frac{V}{V_{mon}} \quad \rightarrow \quad \frac{V}{V_{mon}} = \frac{KP}{KP+1} \quad \rightarrow \quad \frac{1}{V} = (\frac{1}{KV_{mon}})\frac{1}{P} + \frac{1}{V_{mon}}$$

لازم است تا جدول نتایج زیر تکمیل گردد.

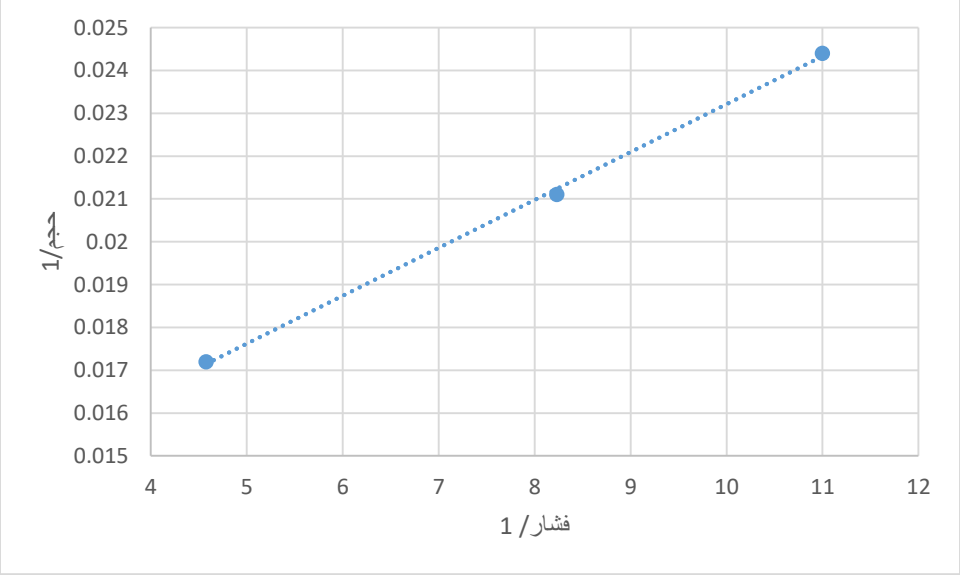
P (kPa)	V (cm^3)	$1/V$	$1/p$
0.090916	40.976	0.0244	11.000
0.1215	47.379	0.0211	8.230
0.2186	58.134	0.0172	4.574

با انتخاب دو ردیف از جدول فوق و بدست آوردن معادله خط حاصل، معادله زیر بدست می‌آید:

$$\frac{1}{V} = (0.0011)\frac{1}{P} + 0.012$$

$$\frac{1}{V} = (\frac{1}{KV_{mon}})\frac{1}{P} + \frac{1}{V_{mon}}$$

$$\frac{1}{V_{mon}} = 0.012 \rightarrow V_{mon} \cong 83\ cm^3 \quad \text{و} \quad \frac{1}{KV_{mon}} = 0.0011 \rightarrow K \cong 10.95\ {}^{1}/_{kPa}$$



ه) با توجه به اینکه در تئوری لانگمویر، مقدار V_{mon} بیانگر کل سطح جاذب است، برای یک گرم از پودر ZnO داریم:

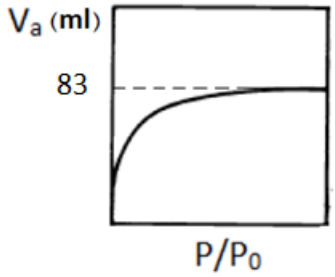
$$\text{سطح ایجاد شده } (m^2) = (V_{mon})\ cm^3 \times \frac{1\ \text{mole}\ A_g}{22400\ cm^3} \times \frac{6.022 \times 10^{23}\ A_g \text{ مولکول}}{1\ \text{mole}\ A_g} \times \frac{A_g \text{ سطح موثر مولکول}}{A_g \text{ یک مولکول}}$$

$$\text{سطح ایجاد شده } (m^2) = 83\ cm^3 \times \frac{1\ \text{mole}\ A_g}{22400\ cm^3} \times \frac{6.022 \times 10^{23}\ A_g \text{ مولکول}}{1\ \text{mole}\ A_g} \times \frac{0.2 \times 10^{-18} m^2}{A_g \text{ یک مولکول}}$$

$$\cong 446(m^2)$$

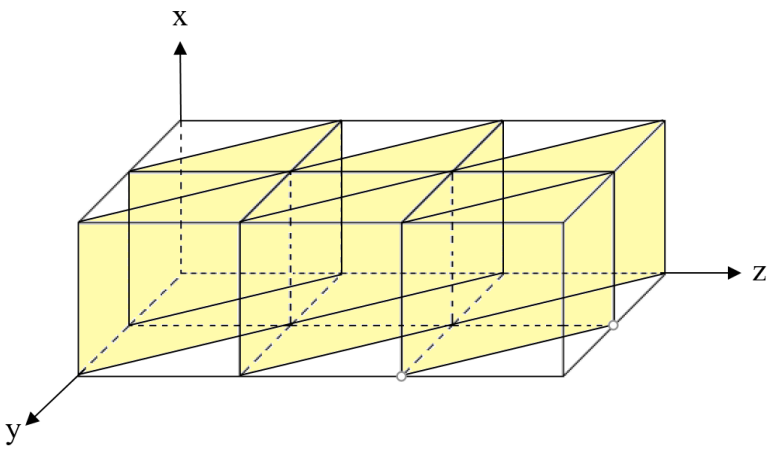
بنابراین سطح ویژه پودر ZnO برابر است با $446\ \left(m^2/gr\right)$

و) با توجه به حاکم بودن تئوری لانگمویر برای این پودر، ایزوترم زیر مورد انتظار است.

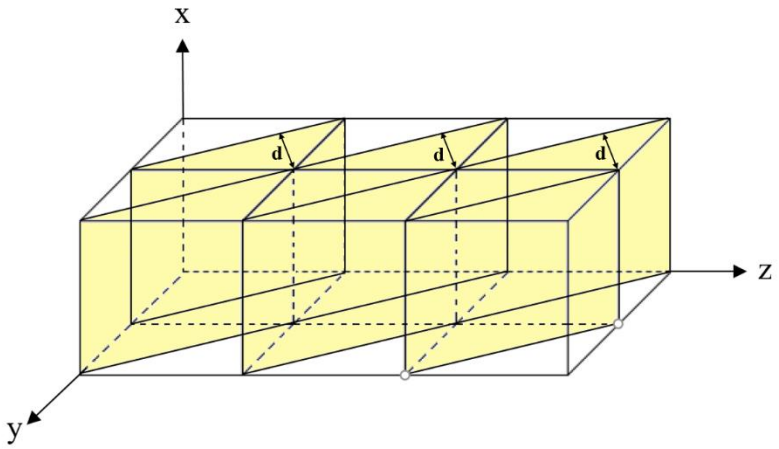


۵ –

الف)



ب)



$$d = \frac{\sqrt{2}}{2}a$$

طبق رابطه ۱، مقدار d برابر است با $\frac{\sqrt{2}}{2}a$ و طبق رابطه ۲، مقدار d برابر است با $\sqrt{2}a$. بنابراین رابطه ۱، برای فاصله صفحات صحیح است.

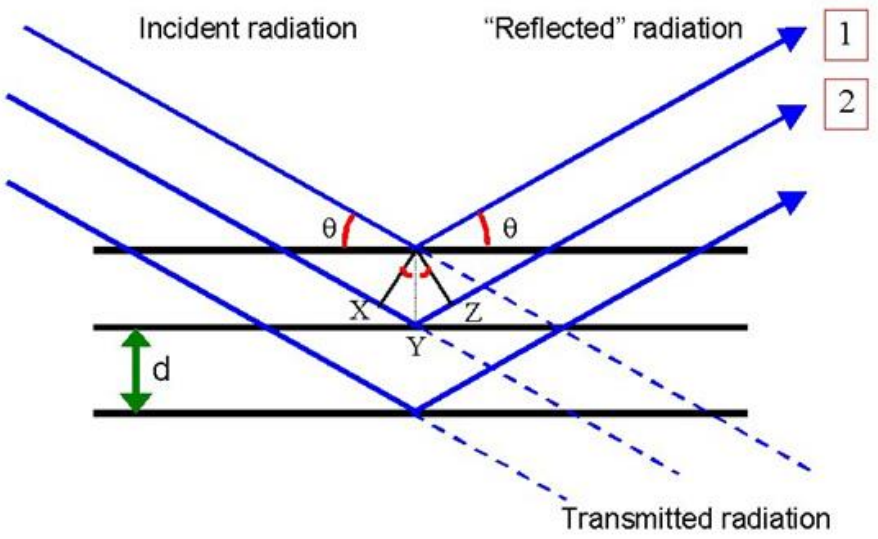
ج)

برهمکنشی بین یک پرتو الکترونی با یک بلور کامل، که همه اتم‌های آن در شبکه سیستم مکعبی قرار دارند، را در نظر می‌گیریم.

رابطه(۱) $n\lambda=2d\sin\theta$

به رابطه (۱)، قانون براگ گفته می‌شود. در این رابطه d فاصله بین اتم‌هایی است که موجب پراکنش الکترون‌ها می‌شوند و در یک بلور سه بعدی فاصله بین صفحات اتمی است. عدد صحیح n در معادله براگ، نظم پراش می‌باشد و در یک صفحه بخصوص پراش زمانی رخ می‌دهد که n=۱،۲،۳... باشد. در پراش الکترون مرسوم است که مرتبه اول پراش یا n=1 مورد استفاده قرار می‌گیرد (فرض اصلی):

رابطه(۲) $\lambda=2d\sin\theta$



شماتیکی از برهمکنش تشعشع و بلور با استفاده از قانون براگ

با توجه به اینکه پراش الکترون‌ها در زوایای کوچکی اتفاق می‌افتد، رابطه $\sin\theta=\theta$ را می‌توان بیان نمود و بنابراین معادله بالا به صورت زیر تبدیل می‌شود:

رابطه (۳) $\lambda=2d\theta$

به دلیل اینکه θ خیلی کوچک است در عمل یک پرتو الکترونی فقط زمانی پراش شدید از صفحات اتمی خواهد داشت که تقریباً موازی با صفحات اتمی حرکت کند.

هنگامی که پرتویی از الکترون ها بر روی یک نمونه بلوری برخورد می‌کند، بعضی از الکترون ها بدون برهمکنش از نمونه عبور می‌نمایند و به صفحه یا فیلمی که در فاصله L از نمونه در نقطه O قرار دارد برخورد می‌نماید. دیگر الکترون‌ها با زاویه θ توسط سطح بلوری با فاصله d پراش پیدا کرده و این الکترون‌ها در نقطه A به فیلمی که به فاصله r از O قرار دارد برخورد می‌نماید. با استفاده از قواعد هندسی برای زاویه کوچک پراش می‌توان نوشت:

رابطه(۴) $r/L=2\theta$

با ترکیب روابط ۳ و۴، رابطه زیر بدست می‌آید:

رابطه(۵) $rd=L\lambda$ یا $r/L=\lambda/d$

از آنجا که طول دوربین و طول‌موج پرتوی الکترونی λ مستقل از نمونه می‌باشد و برای دستگاه ثابت است، $L\lambda$ ثابت بوده و ثابت دوربین نامیده می‌شود. می‌توان دید که فاصله نقطه‌ای که توسط پرتو پراشیده بر روی صفحه

ایجاد می‌شود تا نقطه‌ای که توسط پرتویی که پراش نکرده است بوجود آمده است، r؛ با فاصله صفحاتی که باعث ایجاد پراش شده اند، d؛ نسبت معکوس دارد.

د) با فرض اینکه مقدار k ثابت دستگاه باشد، داریم:

$$rd = k \quad \rightarrow \quad r = \frac{k}{d} \quad \text{و} \quad \mathrm{d} = \frac{\mathrm{a_0}}{\sqrt{\mathrm{h^2 + k^2 + l^2}}}$$

فلز	$d_{(111)}$	$d_{(220)}$	$d_{(311)}$	$r_{(111)}$	$r_{(220)}$	$r_{(311)}$	$r_{(220)}/r_{(111)}$	$r_{(311)}/r_{(111)}$
M	$\frac{a_{0.M}}{\sqrt{3}}$	$\frac{a_{0.M}}{\sqrt{8}}$	$\frac{a_{0.M}}{\sqrt{11}}$	$\frac{k\sqrt{3}}{a_{0.M}}$	$\frac{k\sqrt{8}}{a_{0.M}}$	$\frac{k\sqrt{11}}{a_{0.M}}$	$\sqrt{\frac{8}{3}} \cong 1.633$	$\sqrt{\frac{11}{3}} \cong 1.915$

ه)

برای حلقه‌های ۱ تا ۵ در صورت سوال داریم:

r_1	r_2/r_1	r_3/r_1	r_4/r_1	r_5/r_1
1.4	$\frac{2.1}{1.4} = 1.5$	$\frac{2.29}{1.4} = 1.636$	$\frac{2.68}{1.4} = 1.914$	$\frac{3.43}{1.4} = 2.45$

- ✓ با توجه به اینکه نسبت شعاع دو حلقه ۳ و ۱ برابر با نسبت $\sqrt{\frac{8}{3}}$ و نسبت دو حلقه ۴ و ۱ برابر با $\sqrt{\frac{11}{3}}$ است، حلقه‌های ۱و ۳ و ۴ مربوط به ماده M است.

و)

فلز	$d_{(111)}$	$d_{(220)}$	$d_{(311)}$	$r_{(111)}$	$r_{(220)}$	$r_{(311)}$	$r_{(220)}/r_{(111)}$	$r_{(311)}/r_{(111)}$
A	$\frac{a_{0.A}}{\sqrt{3}}$	$\frac{a_{0.A}}{\sqrt{8}}$	-	$\frac{k\sqrt{3}}{a_{0.A}}$	$\frac{k\sqrt{8}}{a_{0.A}}$	-	$\sqrt{\frac{8}{3}} \cong 1.633$	-
B	$\frac{a_{0.B}}{\sqrt{3}}$	-	$\frac{a_{0.B}}{\sqrt{11}}$	$\frac{k\sqrt{3}}{a_{0.B}}$	-	$\frac{k\sqrt{11}}{a_{0.B}}$	-	$\sqrt{\frac{11}{3}} \cong 1.915$

نکته مهم: از آنجایی که M و A شعاع اتمی متفاوت و در نتیجه شعاع حلقه‌های متفاوتی دارند، امکان روی هم افتادن حلقه‌های مربوط به دو ماده وجود ندارد.

برای دو حلقه باقیمانده ۲ و ۵ داریم:

r_2	r_5/r_2
2.1	$\frac{3.43}{2.1} = 1.633$

✓ با توجه به اینکه نسبت شعاع دو حلقه ۵ و ۲ برابر با نسبت $\sqrt{\frac{8}{3}}$ است، این حلقه‌ها مربوط به فلز A است.

در نتیجه A تشکیل‌دهنده پوسته ماده است.

– ۶

الف) نانوذره اصلاح شده به دلیل اینکه دارو را با سرعت کمتری و در مدت زمان بیشتری رهاسازی می‌کند.

ب) در نانوذره اول مکانیسم‌های غالب رهایش دارو، آزاد سازی داروهای متصل شده به سطح و داروهای نفوذ کرده در داخل حفرات است. در نانو ذره دوم، علاوه بر مکانیسم‌های بالا، مکانیسم نفوذ از میان زمینه پلیمری نیز غالب است؛ بنابراین مدت زمان بیشتری نیاز است تا تمامی دارو رهاسازی شود.

ج) نانوذره اصلاح شده به دلیل اینکه سطح آن با یک پلیمر آبدوست اصلاح شده است.

د) در صورتی که از این دو نانوذره تست سمیت گرفته شود نمونه اصلاح نشده سمیت بیشتری نشان می‌دهد، ولی نمونه‌ای که با پلیمر اصلاح شده است سمیت کمتری به دلیل وجود پلیمر زیست سازگار از خود نشان می‌دهد.