International Scientific League of PAYA 2024

دفترچه پیش‌آزمون مرحله مقدماتی

لیگ علوم تجربی

پایه یازدهم

اسفند ۱۴۰۲

خیابان فاطمی غربی، بین سیندخت و جمالزاده شمالی، پلاک ۲۵۰، خانه ریاضی تهران
شماره تماس: ۶۷۴۱۹۰۰۰
کانال تلگرام خانه ریاضی تهران: @Mathhome
کانال ایتا و تلگرام پایا: @payaleague

پیش آزمون

انرژی نخستین یونش (IE_1):

انرژی نخستین یونش، انرژی لازم برای خارج کردن یک مول الکترون از یک مول اتم در حالت گازی و تبدیل آن به یک مول یون یک بار مثبت گازی است.

$$X(g) \rightarrow X^{+}(g) + e^{-} \qquad IE_1(kJ.mol^{-1})$$

☚ به همین ترتیب، انرژی دومین یونش، انرژی لازم برای خارج کردن یک مول الکترون از یک مول یون یک بار مثبت در حالت گازی و تبدیل آن به یک مول یون دو بار مثبت گازی است.

$$X^{+}(g) \rightarrow X^{2+}(g) + e^{-} \qquad IE_2(kJ.mol^{-1})$$

و به همین ترتیب، انرژی‌های یونش بعدی تعریف می‌شود.

☚ از دید تئوری می‌توانیم کلیه الکترون‌های یک اتم گاز را جدا کنیم، بنابراین می‌توانیم به تعداد الکترون‌های یک اتم، انرژی یونش داشته باشیم که به‌ترتیب، به آن‌ها اولین یونش (IE_1) دومین یونش (IE_2) و ... می‌گوییم. در مورد یونش‌های متوالی یک عنصر، لازم است، به نکات زیر توجه کنید:

۱- یونش، یک فرایند انرژی‌گیر است، زیرا باید در فرایند یونش و کندن الکترون، انرژی صرف کنیم تا بتوانیم بر نیروی جاذبه‌ای که از طرف هسته به الکترون وارد می‌شود، غلبه کنیم و الکترون‌ها را از قید و بند هسته رها کنیم.

۲- همواره انرژی یونش بعدی از انرژی یونش قبلی بزرگتر است $(IE_n > IE_{n-1})$. زیرا با جدا شدن هر الکترون از اتم یا یون‌های با بار مثبت مختلف یک اتم، تعداد الکترون‌های ذره مرتباً کم می‌شود، در حالی‌که تعداد پروتون‌ها ثابت است و نیروی جاذبه هسته بر الکترون‌های باقی‌مانده مرتباً افزایش می‌یابد. لذا جدا شدن الکترون‌های بعدی سخت‌تر شده و نیاز به صرف انرژی بیشتری دارد. پس در مورد انرژی‌های یونش متوالی هر عنصر می‌توان نوشت:

$$IE_1 < IE_2 < IE_3 < IE_4 < ...$$

در زیر، انرژی یونش متوالی اتم $Ca_{۲۰}$ آورده شده است: (برحسب kJ / mol)

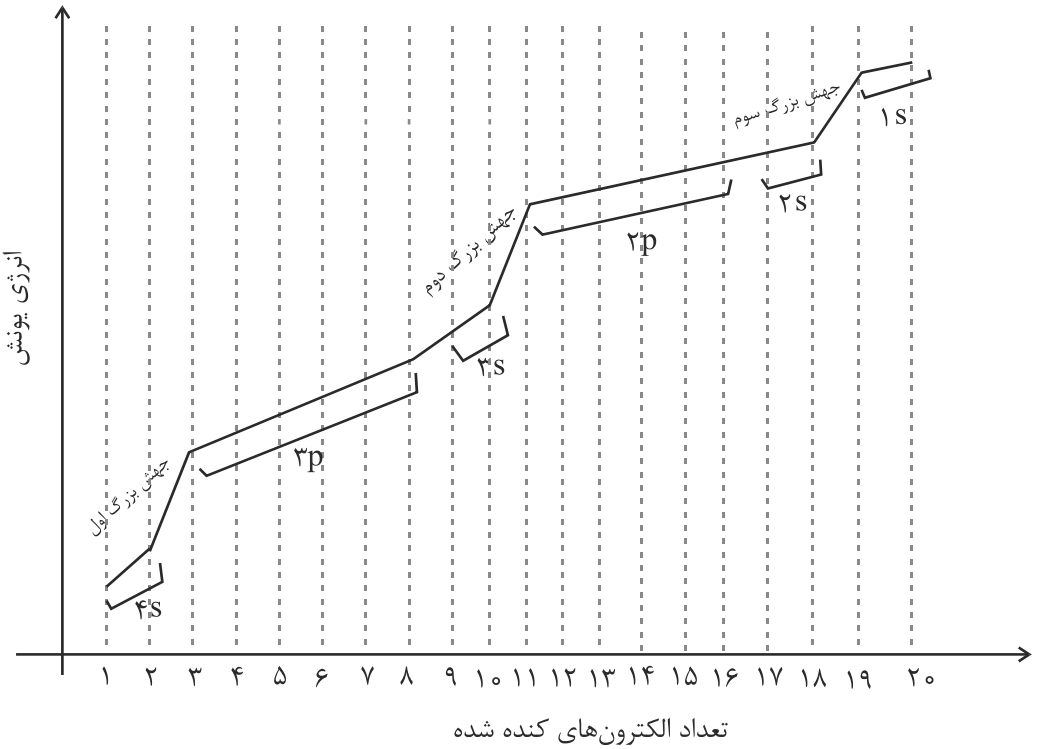
$۵۹۰/۸(IE_۱)$, $۱۱۴۵/۴(IE_۲)$, $۴۹۱۲/۰(IE_۳)$, $۶۴۷۴(IE_۴)$, $۸۱۴۴(IE_۵)$, $۱۰۴۹۶(IE_۶)$,

$۱۲۳۲۰(IE_۷)$, $۱۴۲۰۷(IE_۸)$, $۱۸۱۹۲(IE_۹)$, $۲۰۳۸۴/۹(IE_{۱۰})$, $۵۷۰۴۸(IE_{۱۱})$, $۶۳۳۳۳(IE_{۱۲})$,

$۷۰۰۵۳(IE_{۱۳})$, $۷۸۷۹۲(IE_{۱۴})$, $۸۶۳۶۸(IE_{۱۵})$, $۹۴۰۰۰(IE_{۱۶})$, $۱۰۴۹۰۰(IE_{۱۷})$, $۱۱۱۶۰۰(IE_{۱۸})$,

$۴۹۴۸۸۷/۳\ (IE_{۱۹})$, $۵۲۷۷۵۹/۸(IE_{۲۰})$

به نمودار انرژی‌های یونش متوالی عنصر $Ca_{۲۰}$ توجه کنید:



۳- بررسی انرژی‌های یونش متوالی یک عنصر، نشان می‌دهد که در قسمت‌های معینی، مقدار انرژی یونش، به میزان بیشتری افزایش می‌یابد، در این حالت گفته می‌شود که انرژی یونش دچار جهش شده است. هرگاه انرژی یونش بعدی نسبت به انرژی یونش قبلی، ۳/۵ الی ۴ برابر شده است، می‌گوییم جهش انرژی اتفاق افتاده است. جهش انرژی در یونش‌های متوالی در اثر تغییر لایه اتفاق می‌افتد. برای مثال، در یونش‌های متوالی $Ca_{۲۰}$ که در صفحه قبل آورده شده است، بین $IE_۲$ و $IE_۳$ یک جهش ناگهانی در یونش‌های متوالی دیده می‌شود. یعنی، بین $IE_۲$ و $IE_۳$ یک جهش ناگهانی در یونش‌های متوالی دیده می‌شود. یعنی، بین $IE_۲$ و $IE_۳$ یک جهش داریم.

علت این است که، الکترون دوم را از تراز $4s$ بر می‌داریم که در لایه چهارم است ولی الکترون سوم را با ید از تراز $3p$ جدا کنیم که در لایه سوم قرار دارد. یعنی در این میان، ما یک لایه به هسته نزدیک‌تر شده‌ایم، پس فاصله ما با هسته به‌طور ناگهانی کاهش یافته است، بنابراین بار مؤثر هسته، به مقدار قابل ملاحظه‌ای افزایش یافته و IE_3 از IE_2 خیلی بزرگ‌تر می‌شود و ما یک جهش را در یونش‌های متوالی $_{20}Ca$ احساس می‌کنیم.

$$_{20}Ca : 1s^2 - 2s^2\ 2p^6 - 3s^2\ 3p^6 - 4s$$

(۳) (۲) (۱)

(۱): اولین جهش (بین IE_2 و IE_3) ناشی از تغییر لایه، از چهار به سوم

(۲): دومین جهش (بین IE_{10} و IE_{11}) ناشی از تغییر لایه، از سوم به دوم

(۳): سومین جهش (بین IE_{18} و IE_{19}) ناشی از تغییر لایه، از دوم به اول

۴- با استفاده از انرژی‌های یونش متوالی یک عنصر می‌توانیم، شماره دوره و شماره گروه آن را در جدول تناوبی تعیین کنیم:

تعداد الکترون قبل از اولین جهش بزرگ = تعداد الکترون‌های ظرفیتی

۱ + تعداد جهش بزرگ = شماره دوره (تناوب)

برای مثال، عنصر $_{20}Ca$ که انرژی‌های یونش متوالی آن را دیدید، دارای سه جهش بزرگ انرژی است و اولین جهش بزرگ آن در IE_3 اتفاق می‌افتد. بنابراین در دوره چهارم و گروه دوم جدول تناوبی جای گرفته است.

پیش آزمون ۲

نمک آبپوشیده

نمک به صورت طبیعی به دو شکل یافت می‌شود: سنگ جامد و محلول

بیشترین بخش نمک جهان به صورت محلول در آب اقیانوس‌ها بین ۱ تا ۵ درصد و مقدار متوسط آن در حدود ۵/۳ درصد است. تغییرات ایجاد شده در میزان نمک دریاها و اقیانوس‌ها به میزان تبخیر، درصد یخ و میزان املاح آب رودخانه‌ها بستگی دارد. در سواحلی که مقدار تبخیر آب دریا زیاد باشد، نمک را از آب دریا استخراج می‌کنند. در سواحل دریاچه‌های بسته درون قاره‌ای که میزان تبخیر آن‌ها زیاد باشد، نمک تشکیل می‌گردد و این دریاچه‌ها برای استخراج نمک مناسب هستند

با افزایش مقدار املاح در آب دریاچه و بالارفتن سطح آب، املاح مختلف که به ترتیب کربنات‌ها، سولفات‌ها، کلرها و بالاخره املاح پتاسیم و منیزیم هستند که رسوب‌گذاری می‌شوند. ضخامت پوسته نمکی در مرکز دریاچه بیش از سایر نقاط می‌رسد. این نمک به وسیله رنگ سیاه یا نمک یا رنگ‌های مختلف از یکدیگر جدا می‌شود. در مورد نمک آبی، ذخایر اقیانوسی و دریایی از اهمیت بسیاری برخوردارند. حجم کلی اقیانوس‌های جهان تقریباً ۱۳۴۷کیلومتر مکعب است. تخمین زده می‌شود که میزان نمک آب دریاها ۴۰×۱۰^{۱۵} میلیون تن است. این نظریه منبع عظیم نمک از مقایسه سطح محصول جهانی حدود ۱۸۰ میلیون تن درسال به دست آمده است. حدود ۲۲۲ میلیون سال طول می‌کشد تا فقط ذخایر نمک در دریاها تمام شود. همچنین با اضافه شدن یون‌های کلرید و سدیم به طور پیوسته به دریا از سایر منابع دیگر، نمک‌های برداشت شده، جایگزین می‌شوند. این بدین معناست که مقدار زیادی نمک که در اقیانوس‌های جهان به وجود می‌آید،از بین نمی‌روند. با تبخیرشدن آب به وسیله خورشید، شوری آب حدود ۲۰ درصد یا بیشتر است. نمک همچنین از منابع زیرزمینی طبیعی، به وسیله پالایش آب دریا و یا از تجزیه و انحلال سنگ نمک به وجود آید. نمک به دست آمده از کریستال‌های آب نمک، نمک سود نامیده می‌شود.

علاوه بر حجم زیاد نمک موجود دراقیانوس‌ها، نمک روی زمین نیز یافت می‌شود، که به صورت سنگ نمک می‌باشد و به کانی هالیت معروف است که به آسانی قابل تشخیص است. این کانی معمولاً بی‌رنگ، نرم و به خاطر مزه شورش به راحتی قابل تشخیص است. هالیت یکی از کانی‌های تبخیری است که از عمل تبخیر شدن جزئی یا کلی از محلول نمکی به صورت جامد به دست می‌آید.

آب تبلور

آب تبلور آبی است که به همراه مولکول‌های بعضی بلورهای جامدهای یونی است. هنگامی که یک جامد یونی از محلول آبی متبلور می شود، باریم کلرید محلول در آب که با تبخیر یک مقدار از محلول و اشباع کردن محلول، مقداری بلور $BaCl_۲$ به دست می‌آوریم. در این هنگام تعدادی از مولکول‌های آب در شبکه بلور به دام افتاده و با بلور پیوندهای ضعیف واندروالسی برقرار می‌کند.

در نتیجه ما به جای $BaCl_2$ خالص، نمک متبلور آن را داریم و فرمول آن به صورت $(BaCl_2.2H_2O)$ می‌باشد. به این گونه بلورهای نمکی که با مولکول‌های آب همراه هستند، هیدرات و به آبی که این بلورها را همراهی می‌کند و در شبکه‌ی= بلوری نمک‌ها وارد شده است، **آب تبلور** گفته می‌شود. مثال دیگر سولفات مس هیدراته است که دارای ۵ مولکول آب تبلور می باشد. معمولاً ظاهر هیدرات‌ها با ترکیبات بی آب آن‌ها کاملاً تفاوت دارد. به طور معمول، هیدرات‌ها بلورهای نسبتا بزرگ و غالبا شفاف تشکیل می‌دهند. هیدرات‌ها بر اثر گرم شدن تجزیه می‌شوند و آب تبلور خود را به صورت بخار آب از دست می‌دهند. از بین رفتن آب تبلور یک هیدرات را **شکوفا شدن** می‌نامند. رنگ برخی از نمک های آب پوشیده با رنگ نمک بی‌آب آن‌ها متفاوت است، به خاطر همین ، این نمک‌ها را به عنوان شناساگر رطوبت استفاده می‌کنند. به مثال‌های زیر توجه کنید.

قرمز رنگ: $CoCl_2.2H_2O$

صورتی رنگ: $CoCl_2.5H_2O$

بنفش رنگ: $CoCl_2.4H_2O$

آبی رنگ: $CoCl_2$

در یک نمک متبلور به فرمول $Mx.nH_2O$ که n عدد آب تبلور نام دارد برابر است با:

$$n = \frac{mol\,H_2O}{mol\,Mx}$$ (نسبت مولی آب به نمک خشک)

پیش آزمون ۳

لُگاریتم

لگاریتم، تابع وارون عبارت نمایی است. یعنی یک عدد در یک پایه، برابر با توانی از پایه‌است که آن عدد را می‌دهد. برای مثال لگاریتم ۱۰۰۰ در پایه‌ی ۱۰، برابر با ۳ است. چون ۱۰ × ۱۰ × ۱۰ = ۱۰۰۰ یا به بیان کلی‌تر اگر $\mathbf{x = b^y}$ باشد آنگاه لگاریتم x در پایه‌ی b رابر با $\mathbf{y}$ خواهد بود و به زبان ریاضی آن را به صورت $\mathbf{\log_b x = b}$ نمایش می‌دهیم.

به مثال‌های زیر توجه کنید:

$$\log_{۳} ۸۱ = ۴$$

$$\log_{۱۰} ۱۰۰۰ = ۳$$

آنتروپی : معیاری عددی برای اندازه گرفتن اطلاعات، یا تصادفی بودن یک متغیر تصادفی است. به بیان دقیق‌تر، آنتروپی یک متغیر تصادفی، متوسط اطلاعات آن است و به صورت زیر تعریف می‌شود:

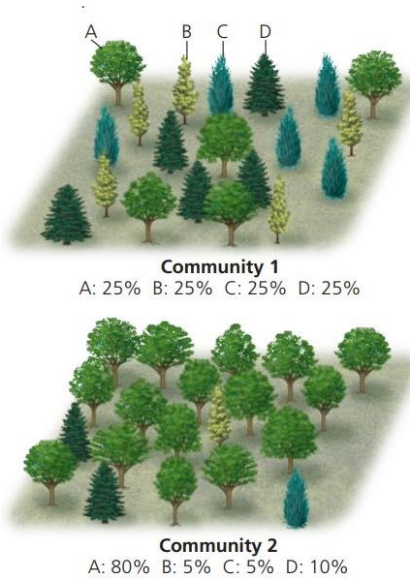
$$\mathbf{H(X) := -\sum_{x \in X} p(x) \log p(x)}$$

که به این مفهوم است:

فراوانی هر گونه (p) ×لگاریتم فراوانی خودش (با همان p)

هرچه آنتروپی یک متغیر تصادفی بیشتر باشد، ابهام ما درباره آن بیشتر است و تنوع آن مجموعه بیشتر خواهد بود ؛ به این معنی که پس از مشاهده‌ی آن، اطلاعات به‌دست آمده از آن بیشتر خواهد بود.

برای مثال تصویر زیر را مشاهده کنید :



که همانطور که می‌بینید **شاخص شانون** برای جمعیت اول ۰/۶ و برای جمعیت دوم ۰/۳۱ است و در نتیجه جمعیت اول متنوع‌تر است .

آنتروپی شانون (Shannon Entropy) معیار بسیار مناسبی برای مقایسه میزان شباهت و حفظ‌شدگی تکاملی بین چندین توالی DNA یا پروتئین، در الگوریتم‌های بیوانفورماتیکی می‌باشد.

$$H = -\sum_{i=1}^{m} Pi \times \log_2 Pi$$

در این رابطه H، آنتروپی یا میزان اختلاف نوکلئوتید مثلاً شماره K ام توالی‌هاست. به عنوان مثال ژن چندین پروتئین هموگلوبین از موجودات مختلف مقایسه می‌شود. برای هر جایگاه نوکلئوتیدی توالی‌های DNA ای که میزان شباهت آن‌ها مطلوب است، یک H محاسبه می‌شود. مجموع Hهای تمام جایگاه‌ها (از نوکلئوتید اول تا انتها) میزان کل اختلاف موجود بین توالی‌های DNA را محاسبه می‌کند. نام این فرآیند **"هم ردیفی چندگانه"** است که میزان شباهت و اختلاف تکاملی چندین توالی DNA را محاسبه می‌کند. Pi فراوانی هر نوکلئوتید A,T,C,G در هر جایگاه است که ممکن است نوکلئوتیدی، فراوانی صفر داشته باشد.

پیش آزمون ۴

قطبیت شیمیایی

قطبیت شیمیایی مفهومی است در علم شیمی که بر اساس آن مولکول‌ها از دیدگاه بار الکتریکی به دو دسته **قطبی** و **غیرقطبی** تقسیم‌بندی می‌شوند. در مولکول‌های قطبی مانند آب، نسبت پراکنش الکترون‌ها در اطراف مولکول نامتوازن از نظر بار الکتریکی خنثی است. هیدروکربن‌ها نمونه مهمی از این نوع مواد هستند.

تفاوت بین مولکول قطبی و ناقطبی

مولکول‌ها را می‌توان در دو دسته بزرگ مولکول‌های قطبی و ناقطبی تقسیم کرد. قطبیت مولکول توزیع بار الکتریکی اطراف مولکول را مشخص می‌کند. در یک مولکول ناقطبی، بار الکتریکی به طور مساوی در بین اتم‌ها تقسیم شده و این درحالی است که در مولکول قطبی، این تقسیم بار به شکل مساوی انجام نمی‌گیرد. به بیان دیگر، یک مولکول قطبی دارای بار جزئی مثبت و منفی است.

مولکول قطبی

یک مولکول قطبی دارای یک دوقطبی است؛ یعنی دارای بخشی با بار جزئی مثبت و بخشی با بار جزئی منفی است. مولکول قطبی به طور معمول شکلی نامتقارن دارد و شامل جفت‌الکترون ناپیوندی است یا این‌که اتم مرکزی به اتم‌هایی با مقادیر الکترونگاتیوی مختلف، پیوند دارد. در زیر، نمونه‌هایی از مولکول قطبی آورده شده است.

- آب
- آمونیاک
- دی‌اکسید گوگرد
- سولفید هیدروژن
- مونواکسید کربن
- هیدروفلوئوریک اسید
- اتانول
- ساکاروز

مولکول‌های قطبی به طور معمول آب‌دوست هستند و در حلال‌های قطبی، انحلال‌پذیرند. همچنین در بیشتر موارد، این مولکول‌ها نقطه ذوبی بالاتر از مولکول‌های قطبی با جرم مولی مشابه دارند. این اختلاف را باید در نیروهای بین‌مولکولی در مولکول‌های قطبی همچون پیوند هیدروژنی جستجو کرد.

مولکول ناقطبی

مولکول‌های ناقطبی زمانی شکل می‌گیرند که یا الکترون‌ها به طور مساوی بین اتم‌ها در یک مولکول توزیع شده باشند یا اینکه مولکولی متقارن داشته باشیم به شکلی که گشتاورهای دوقطبی یکدیگر را خنثی کنند. در زیر ، مثال‌هایی از مولکول ناقطبی آورده شده است.

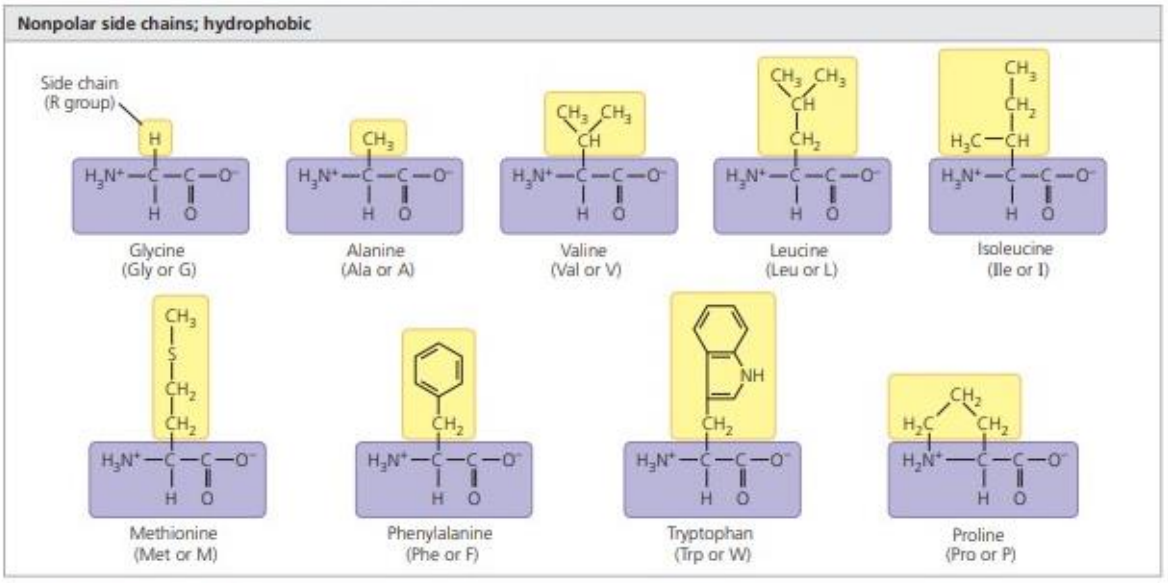
- مولکول‌های جورهسته مانند H_2O_2 ، N_2 ، O_2 و Cl_2
- دی‌اکسید کربن
- بور تری‌فلوئورید
- بنزن C_6H_6)
- کربن تترا کلرید (CCl_4)
- متان
- اتیلن
- هیدروکربن‌های مایع همچون گازوئیل و تولوئن
- بسیاری از مولکول‌های آلی (البته الکل و شکر استثناء محسوب می‌شوند.)

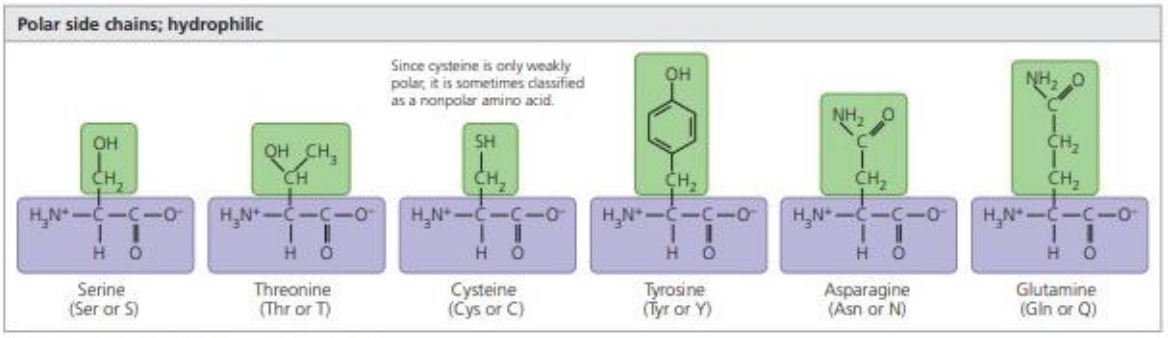
مولکول‌های جور هسته مولکول‌هایی ۲ اتمی هستند که از اتم‌های یکسان تشکیل شده‌اند و قاعدتا ۲ اتم مشابه و یکسان تمایل برابری برای الکترون‌ها دارند و الکترونگاتیویتی آن‌ها با هم برابر است.

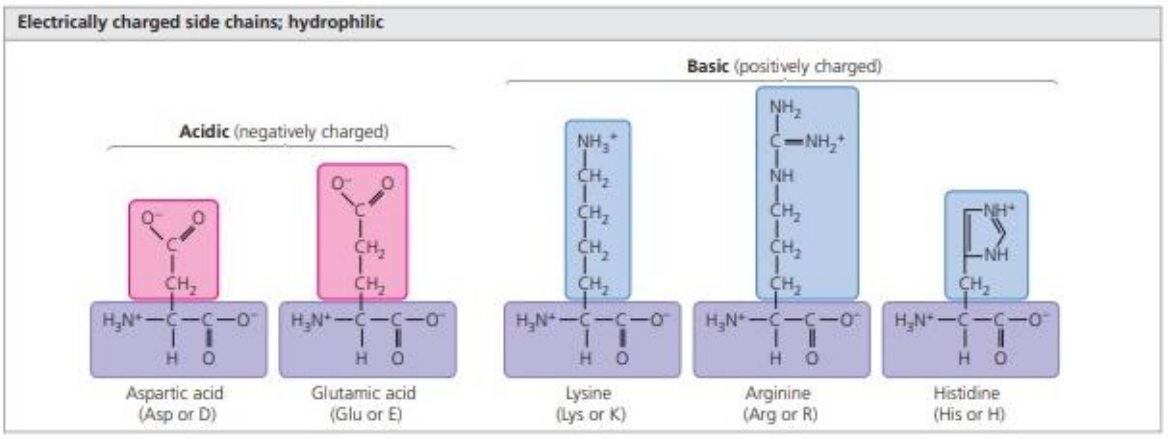
مولکول‌های ناقطبی خواص مشترکی نیز دارند. این مولکول‌ها در دمای اتاق، در آب انحلال‌پذیر نیستند، چرا که خاصیتی آب‌گریز دارند و به همین دلیل، به خوبی در ترکیبات ناقطبی حل می‌شوند.

به مولکول های قطبی که در آب حل می‌شوند آبدوست (هیدروفیل) و به مولکول های غیرقطبی که در آب حل نمی‌شوند، آب‌گریز می‌گوییم (هیدروفوب) که با شاخص هیدروپاتی می‌توانیم هیدروفیل یا هیدروفوب بودن یک ماده را مشخص کنیم .

همچنین در آمینواسید ها قطبیت و آب دوست / آبگریز بودن مهم است که تصویر آن‌ها و دسته‌بندی شاخص هیدروپاتی آن‌ها را مشاهده می‌کنید (دقت کنید در یک پروتئین از انتهای N آمینواسید ها را شماره گذاری می‌کنیم :


Nonpolar side chains; hydrophobic
Side chain (R group)
Glycine (Gly or G)
Alanine (Ala or A)
Valine (Val or V)
Leucine (Leu or L)
Isoleucine (Ile or I)
Methionine (Met or M)
Phenylalanine (Phe or F)
Tryptophan (Trp or W)
Proline (Pro or P)


Polar side chains; hydrophilic
Since cysteine is only weakly polar, it is sometimes classified as a nonpolar amino acid.
Serine (Ser or S)
Threonine (Thr or T)
Cysteine (Cys or C)
Tyrosine (Tyr or Y)
Asparagine (Asn or N)
Glutamine (Gln or Q)

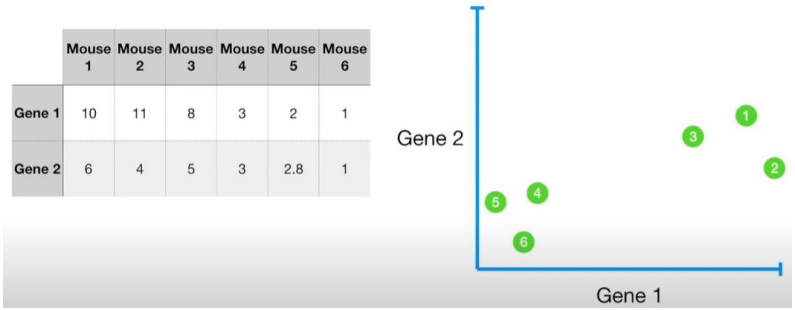

Electrically charged side chains; hydrophilic
Acidic (negatively charged)
Basic (positively charged)
Aspartic acid (Asp or D)
Glutamic acid (Glu or E)
Lysine (Lys or K)
Arginine (Arg or R)
Histidine (His or H)

پیش آزمون ۵

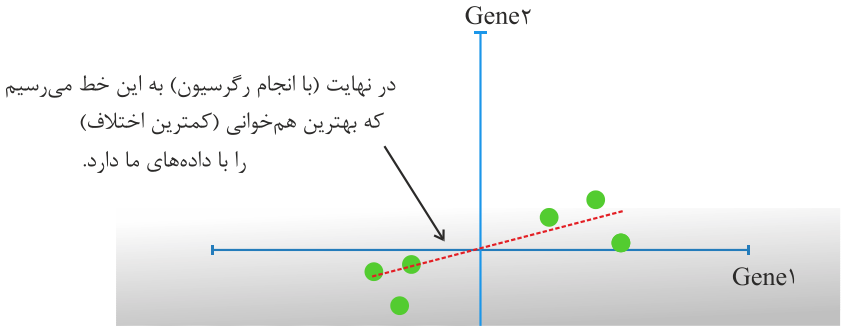
اندازه داده‌ها در عصر مدرن، نه فقط یک چالش برای سخت‌افزارهای کامپیوتر، بلکه تنگنایی برای کارایی بسیاری از الگوریتم‌های «یادگیری ماشین» (Machine Learning) محسوب می‌شود. هدف اصلی تحلیل‌های PCA شناسایی الگوهای موجود در داده‌ها است؛ تحلیل مولفه اساسی(PCA) قصد دارد، همبستگی بین متغیرها را شناسایی کند. اگر یک همبستگی قوی بین متغیرها وجود داشت، تلاش‌ها برای کاهش ابعاد معنادار خواهد بود.

برای مثال فرض کنید ما اطلاعات زیر را از ارتباط ۲ ژن در اختیار داریم :

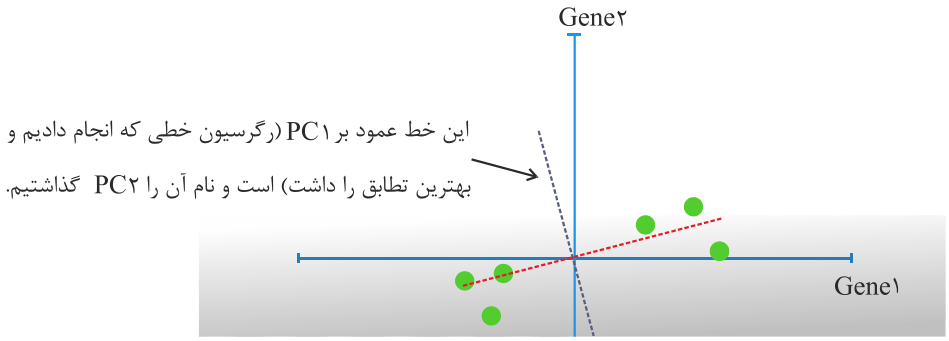
	Mouse 1	Mouse 2	Mouse 3	Mouse 4	Mouse 5	Mouse 6
Gene 1	10	11	8	3	2	1
Gene 2	6	4	5	3	2.8	1



حال اگر ارتباط آن‌ها را در میانگین خود داده‌ها روی صفر مرکز مختصات قرار دهیم (بدون تغییر فواصل و در واقع واریانس) و بهترین خط منطبق با داده ها را بکشیم (رگرسیون) به شکل زیر می‌رسیم:



حال اگر نام این خط (رگرسیون نقاط) را PC1 بگذاریم، خط عمود بر آن را PC2 معرفی می‌کنیم:



این تعداد PC که همگی برهم عمودند برای ساخت نمودار ۲ بعدی نیاز به ۲ شاخص PC داریم که آن دو تایی که بهترین حالت واریانس را نشان می‌دهند و تصویر نقاط واریانس صحیح و دیدی واضح‌تر از آن‌ها را به ما می‌دهد، بر می‌گزینیم.