

ĐẠI HỌC QUỐC GIA HÀ NỘI
TRƯỜNG ĐẠI HỌC KHOA HỌC TỰ NHIÊN

ĐỀ THI KẾT THÚC HỌC KỲ I
NĂM HỌC 2013-2014

Môn thi: Hoá lý I
Mã số môn học: 1083
Dành cho: K56
(Thời gian làm bài: 90 phút, không kể thời gian phát đề)

Số tín chỉ: 3
Ngành Hoá
Đề số 1

Câu I. Cho hàm góc của nguyên tử H có các giá trị sau:

$$Y_{1,-1} = \left(\frac{3}{8\pi}\right)^{1/2} \sin\theta e^{-i\varphi}; \quad Y_{2,1} = \left(\frac{15}{8\pi}\right)^{1/2} \sin\theta \cos\theta e^{i\varphi}.$$

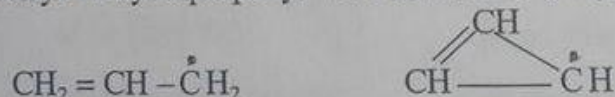
Hãy chứng minh hàm $Y_{1,-1}$ là chuẩn hoá và hai hàm $Y_{1,-1}$, $Y_{2,1}$ là trực giao với nhau.

Câu II. Áp dụng mô hình hạt chuyển động tự do trong hộp thế một chiều cho hệ electron π của phân tử liên hợp mạch hở decapentaen với 10 electron π ở trạng thái cơ bản. Độ dài hiệu dụng của phân tử decapentaen bằng 12,6 Å. Hãy tính:

- Năng lượng của hệ electron π đó theo KJ.mol⁻¹.
- Số sóng theo cm⁻¹ của bức xạ cần để chuyển dời 1 (e- π) từ MO bị chiếm cao nhất (HOMO) lên MO trống chưa bị chiếm thấp nhất (LUMO).

Cho: $h = 6,625 \cdot 10^{-34}$ J.s ; $m_e = 9,1 \cdot 10^{-31}$ kg ; $c = 3 \cdot 10^8$ m/s.

Câu III. 1. Áp dụng phương pháp HMO, hãy viết định thức thế kỉ cho các electron π trong gốc allyl và xyclopropenyl với 3 electron π ở trạng thái cơ bản:



- Trên cơ sở đó, hãy xác định các giá trị năng lượng E_i ứng với các MO - π của các electron π trên. Vẽ giản đồ năng lượng của các MO - π .
- Xác định tổng năng lượng E_i của các electron π trong cation $(\text{C}_3\text{H}_5)^+$ và cation $(\text{C}_3\text{H}_3)^+$ cho biết phân tử nào bền hơn, tại sao?
Biết rằng α , β của hai phân tử trên là như nhau, α , β và đều < 0 , trong đó $|\alpha| \gg |\beta|$.

Cán bộ coi thi không cần giải thích gì thêm