

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

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

Môn thi: Hoá lý I  
Số tín chỉ: 03  
Lớp: CHE 1083  
Thời gian làm bài: 90 phút (không kể thời gian phát đề)

Lớp môn học: CHE 1083  
Đề số 1

**Câu 1.** Cho toán tử  $\hat{X} = X$ ;  $\hat{U} = \frac{d}{dx}$  và hàm số  $f(x) = e^{-x^2}$ . Hỏi  $\hat{X}$  và  $\hat{U}$  có giao hoán với nhau hay không? Tại sao? 0/

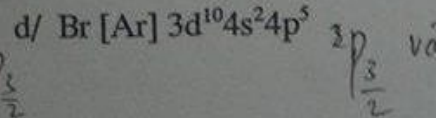
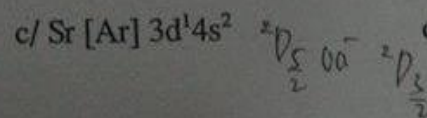
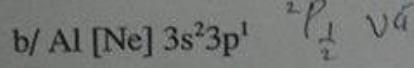
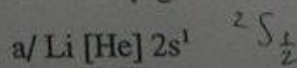
**Câu 2.** Trạng thái có mức năng lượng thấp nhất của electron trong nguyên tử hydro được mô tả bởi hàm sóng đã được chuẩn hoá:

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0} \quad (a_0 = 0,53 \text{ \AA})$$

0,063 Å<sup>0</sup>

Hãy xác định khoảng cách trung bình từ electron đến hạt nhân khi electron ở trạng thái  $\psi$  đó.

**Câu 3.** Hãy xác định các số hạng khả dĩ ở trạng thái cơ bản của các nguyên tử sau:



**Câu 4.** Trên cơ sở của phương pháp MO – Huckel hãy xác định giá trị năng lượng electron  $\pi$  ( $E_\pi$ ) và hàm sóng  $\psi$  tương ứng đối với phân tử focmandehit biết rằng phân tử này có 2 electron  $\pi$  ở trạng thái cơ bản.

Cho  $\alpha_c = \alpha + 0,2 \beta$ ;  $\alpha_o = \alpha + 0,7 \beta$ ;  $\beta_{co} = 1,1 \beta$