

# OLIMPIADA DE CHIMIE 2021

## Proba de baraj

17 aprilie

### Chimie fizică - Structură

Barem de evaluare și de notare

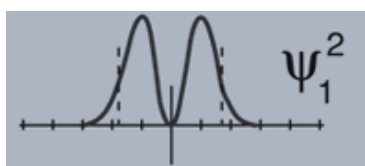
Se punctează orice modalitate de rezolvare corectă a cerințelor!

#### Subiectul I

(2 puncte)

1. Pentru cazul (I) funcția de unda de vibrație are 2 noduri, rezulta  $n=2$ . Pentru cazul (II) funcția de unda de vibrație nu are niciun nod, rezulta  $n=0$ . (2×0.5 puncte)

2. Densitatea de probabilitate =  $\psi_1^2$ , asadar:



(1 punct)

#### Subiectul al II lea

(3 puncte)

Se afla fractia de molecule aflate pe nivelul  $n=0$ .

$$\frac{h\nu}{kT} = 1,496 \quad \text{si} \quad f_0 = 1 - e^{-1,496} = 0,776$$

De aici rezulta ca fractia de molecule care au o energie mai mare decat cea de nul, adica mai mare decat energia corespunzatoare lui  $n=0$ , este:

$$f = 1 - 0,776 = 0,224$$

#### Subiectul al III lea

(5 puncte)

1. Valoarea maxima a energiei de vibrație are valoarea  $D_e$  si este caracterizata de numarul cuantic de vibrație  $n_{\text{maxim}}$ . Din grafic se observa ca la maximul energiei de vibrație  $n$  este 21. Asadar, stările posibile de vibrație permise pentru molecula  $^1\text{H}^{127}\text{I}$  corespund lui  $n = 0, 1, 2, \dots, 20$ , adica sunt 21 de stari (la  $n=21$  molecula a disociat!). (2 puncte)

2. Strict matematic  $E=f(n)$  conduce la o scadere a energiei cu cresterea numarului de vibrație pentru numere de vibrație mai mari decat cel corespunzator starii in care molecula disociaza. Dar aceasta nu are nicio semnificatie fizica. Dupa disocierea unei molecule diatomice nu se mai poate vorbi de miscare de vibrație, ecuatia nu mai este valabila. (1 punct)

**3.**

$$D_0 = D_e - E_0$$

$$D_0 = D_e - \left[ \frac{h\nu_0}{2} - \frac{(h\nu_0)^2}{16D_e} \right]$$

$$D_0 = 4,72 \cdot 10^{-19} \text{ J} = 284,24 \text{ kJ/mol}$$

**(2 puncte)**

*Barem elaborat de:*

Lector dr. Cristina TĂBLEȚ, Universitatea Titu Maiorescu, Universitatea din Bucuresti, Bucuresti.