Efnafræðifélag Íslands **Félag raungreinakennara**

14. Landskeppnin í efnafræði
Úrslitakeppni - fræðilegur hluti

14. mars 2015, kl. 10:00-13:00.

Eftirtalin fyrirtæki og stofnanir styrkja keppnina

Háskóli Íslands
Lýsi hf.
Málning hf.
Tandur hf.
ORF Líftækni hf.
Carbon Recycling International

Almennar leiðbeiningar

1. Opnið ekki verkefnaheftin fyrr en ykkur er sagt að gera það.
2. Verkefnin eru alls átta og eru á 11 tölusettum blaðsíðum, auk forsíðu og formúlublaðs. Athugið að svo sé.
3. Einu leyfilegu hjálpargögnin eru óforritanlegar reiknivélar auk lotukerfis og formúlublaðs sem verkefninu fylgja.
4. Verkefnunum skal svarað í prófbók, ekki í verkefnaheftið. Merkið prófbækurnar með fullu nafni og kennitölu. Dugi ein bók ekki má biðja um aðra slíka. Ekki verður farið yfir rissblöð.
5. Vægi hvers dæmis er 10 stig. Dæmi 1-4 eru skylduverkefni; þeim þurfa allir að svara. Dæmi 5-8 eru valfrjáls; einkunn verður gefin fyrir tvö best leystu verkefnin.
6. Ekki er gert ráð fyrir að allir geti svarað öllum verkefnunum. Þó þið getið ekki svarað nema hluta verkefnanna, þarf það ekki að þýða að þið standið ykkur ekki vel. Sum verkefnin eru mjög erfið.
7. Verkefnin eru öll í nokkrum liðum. Ef einhverjum lið er svarað rangt og svarið notað í síðari liðum verður ekki dregið frá í seinni liðunum svo framarlega sem útreikningarnir séu réttir.

Helstu formúlur og fastar

Δx	=	$\sum_{\text{myndefni}} x - \sum_{\text{hvarfefni}} x$	pV	=	nRT
ΔG	=	$\Delta H - T\Delta S$	p	=	$\sum_i p_i$
ΔG°	=	$-RT \ln K$	q	=	$c_{sp} m \Delta T$
ΔG	=	$\Delta G^\circ + RT \ln Q$	pH	=	$-\log [H_3O^+]$
ΔG°	=	$-nFE^\circ$	pK_a	=	$-\log K_a$
E	=	$E^\circ - \frac{RT}{nF} \ln Q$	$[H_3O^+]$	=	$\frac{K_a}{2}\left(-1 + \sqrt{1 + \frac{4C_{\text{HA}}}{K_a}}\right)$
k	=	$A\, e^{-\frac{E_a}{RT}}$	pH	=	$pK_a + \log \frac{[A^-]}{[HA]}$
E	=	$h\nu$	E	=	$\frac{hc}{\lambda}$
N_A	=	$6{,}0223 \times 10^{23}$ mól^{-1}	1 bar	=	0,9869 atm
R	=	8,31451 J·K^{-1}·mól^{-1}	1 atm	=	760 torr
	=	0,08206 L·atm·K^{-1}·mól^{-1}	K_w	=	$1{,}00\times10^{-14}$
F	=	96485 J·V^{-1}·mól^{-1}	1 kal	=	4,186 J
e	=	$1{,}602\times10^{-19}$ C	u (*amu*)	=	$1{,}661\times10^{-27}$ kg
h	=	$6{,}626\times10^{-34}$ J·s	m_p	=	$1{,}673\times10^{-27}$ kg
c	=	$2{,}998\times10^{8}$ m·s^{-1}	m_e	=	$9{,}109\times10^{-31}$ kg

1 **H** hydrogen 1,00794																	2 **He** helium 4,003
3 **Li** lithium 6,941	4 **Be** beryllium 9,012182											5 **B** boron 10,811	6 **C** carbon 12,0107	7 **N** nitrogen 14,00674	8 **O** oxygen 15,9994	9 **F** fluorine 18,9984032	10 **Ne** neon 20,1797
11 **Na** sodium 22,989770	12 **Mg** magnesium 24,3050											13 **Al** aluminum 26,981538	14 **Si** silicon 28,0855	15 **P** phosphorus 30,973761	16 **S** sulfur 32,066	17 **Cl** chlorine 35,4527	18 **Ar** argon 39,948
19 **K** potassium 39,0983	20 **Ca** calcium 40,078	21 **Sc** scandium 44,955910	22 **Ti** titanium 47,867	23 **V** vanadium 50,9415	24 **Cr** chromium 51,9961	25 **Mn** manganese 54,938049	26 **Fe** iron 55,845	27 **Co** cobalt 58,933200	28 **Ni** nickel 58,6934	29 **Cu** copper 63,546	30 **Zn** zinc 65,39	31 **Ga** gallium 69,723	32 **Ge** germanium 72,61	33 **As** arsenic 74,92160	34 **Se** selenium 78,96	35 **Br** bromine 79,904	36 **Kr** krypton 83,80
37 **Rb** rubidium 85,4678	38 **Sr** strontium 87,62	39 **Y** yttrium 88,90585	40 **Zr** zirconium 91,224	41 **Nb** nubidium 92,90638	42 **Mo** molybdenum 95,94	43 **Tc** technetium (98)	44 **Ru** ruthenium 101,07	45 **Rh** rhodium 102,90550	46 **Pd** palladium 106,42	47 **Ag** silver 107,8682	48 **Cd** cadmium 112,411	49 **In** indium 114,818	50 **Sn** tin 118,710	51 **Sb** antimony 121,760	52 **Te** tellurium 127,60	53 **I** iodine 126,90447	54 **Xe** xenon 131,29
55 **Cs** caesium 132,90545	56 **Ba** barium 137,327	71 **Lu** lutetium 174,967	72 **Hf** hafnium 178,49	73 **Ta** tantalum 180,9479	74 **W** tungsten 183,84	75 **Re** rhenium 186,207	76 **Os** osmium 190,23	77 **Ir** iridium 192,217	78 **Pt** platinum 195,078	79 **Au** gold 196,96655	80 **Hg** mercury 200,59	81 **Tl** thallium 204,3833	82 **Pb** lead 207,2	83 **Bi** bismuth 208,98038	84 **Po** polonium (209)	85 **At** astatine (210)	86 **Rn** radon (222)
87 **Fr** francium (223)	88 **Ra** radium 226	103 **Lr** lawrencium (262)	104 **Rf** rutherfordium (261)	105 **Db** dubnium (262)	106 **Sg** seaborgium (263)	107 **Bh** bohrium (262)	108 **Hs** hassium (265)	109 **Mt** meitnerium (266)	110 **Ds** darmstadtium (269)	111 **Rg** roentgenium (272)	112 **Cn** copernicium (277)	113 **Uut** ununtrium	114 **Uuq** ununquadium	115 **Uup** ununpentium	116 **Uuh** ununhexium	117 **Uus** ununseptium	118 **Uuo** ununoctium
				57 **La** lanthanum 138,9055	58 **Ce** cerium 140,116	59 **Pr** praseodymium 140,90765	60 **Nd** neodymium 144,24	61 **Pm** promethium (145)	62 **Sm** samarium 150,36	63 **Eu** europium 151,964	64 **Gd** gadolinium 157,25	65 **Tb** terbium 158,92534	66 **Dy** dysprosium 162,50	67 **Ho** holmium 164,93032	68 **Er** erbium 167,26	69 **Tm** thulium 168,93421	70 **Yb** ytterbium 173,04
				89 **Ac** actinium (227)	90 **Th** thorium 232,0381	91 **Pa** protactinium 231,03588	92 **U** uranium 238,0289	93 **Np** neptunium (237)	94 **Pu** plutonium (244)	95 **Am** americium (243)	96 **Cm** curium (247)	97 **Bk** berkelium (247)	98 **Cf** californium (251)	99 **Es** einsteinium (252)	100 **Fm** fermium (257)	101 **Md** mendelevium (258)	102 **No** nobelium (259)

1. dæmi (skylda)

Venjulegt bensín er blanda af fjöldamörgum mislöngum og misgreinóttum lífrænum sameindum. Um 30% blöndunnar er oktan en aðrar sameindir finnast í mun minna mæli. Til einföldunar skulum við gera ráð fyrir því að bensín sé hreint oktan. Þar sem olíulindir heimsins eru takmarkaðar og olíuvinnsla hefur slæm umhverfisáhrif hafa menn lengi leitað að efnum sem geta komið í stað bensíns. Eitt þeirra efna sem horft hefur verið til í því skyni er metanól.
Í töflunni hér að neðan er staðalmyndunarvarmi (ΔH_f°) og staðalóreiða (ΔS°) nokkurra efna við 25°C. Gerum ráð fyrir að ΔH_f° og S° breytist ekki með hitastigi.

Efni	ΔH_f°(kJ/mól)	$S^\circ(\frac{J}{mól \cdot K})$
$C_8H_{18}(l)$	-208,4	361,2
$CH_3OH(l)$	-238,4	126,8
$O_2(g)$	0,0	205,1
$CO_2(g)$	-393,5	213,7
$H_2O(g)$	-241,8	188,8

a) Þegar lífræn efni brenna hvarfast þau við súrefni og mynda koltvíoxíð og vatn. Ritið stilltar efnajöfnur fyrir bruna oktans annars vegar og metanóls hins vegar.

b) Brennsluvarmi efnis, ΔH_c, er sá varmi sem losnar við bruna á efni. Reiknið brennsluvarma eins móls af oktani og metanóli.

c) Það hve mikil orka fæst til að framkvæma vinnu ræðst þó ekki beint af brennsluvarmanum, heldur af Gibbs-orkunni; ΔG. Reiknið ΔG fyrir bruna á bæði oktan og metanóli. Gerið ráð fyrir að hitastigið í bílvél sé 90°C.

d) Gerum ráð fyrir að öll Gibbs-orkan nýtist í vinnu. Reiknið orkuna sem nýta má til vinnu úr einum lítra af annars vegar oktani og hins vegar metanóli. Eðlismassi oktans er 0,703 kg/L og eðlismassi metanóls er 0,792 kg/L.

2. dæmi (skylda)

Nitryl fluoríð er hvarfgjarnt gas sem er m.a. notað í eldflaugaeldsneyti. Massahlutfall frumefna í nitryl flúoríð eru eftirfarandi:

Frumefni	massaprósenta
N	21,55%
O	49,23%
F	29,23%

Eðlismassi efnisins er 2,7 g/L við 20°C og 1,00 atm þrýsting.

a) Hver er reynsluformúla nitryl flúoríðs?

b) Hver er mólmassi nitryl flúoríðs?

c) Hver er sameindaformúla nitryl flúoríðs?

d) Teiknið allar mögulegar Lewis myndir af efninu þar sem formleg hleðsla allra atóma kemur fram. (Ef ekki tókst að leysa liði a-c skal vinna liði d-g með efnasambandið SO_2.)

e) Hver er svigrúmablöndun miðatómsins?

f) Hver er þrívíddarlögun sameindarinnar og hversu stór eru tengjahornin?

g) Er sameindin skautuð? Gerið grein fyrir svari ykkar.

3. dæmi (skylda)

Eggjaskurn er að mestu leyti úr kalsíumkarbónati, en inniheldur einnig önnur sölt og svolítið af lífrænum efnum. Forvitnum efnafræðingi lék hugur á að vita hvert hlutfall kalsíumkarbónats væri í skurninni og því tók hann 0,512 g af eggjaskurn og leysti hana upp í 125 mL af 0,100 M saltsýru. Efnahvarfið er eftirfarandi:

$$CaCO_3(s) + 2\,HCl(aq) \longrightarrow CaCl_2(aq) + H_2O(l) + CO_2(g)$$

Eftir tvo daga var öll skurnin uppleyst, svo að gera mátti ráð fyrir að enn væri óhvörfuð saltsýra í lausninni. Efnafræðingurinn færði þá alla lausnina í 250 mL mæliflösku, fyllti hana að marki með eimuðu vatni og blandaði vel og vandlega. Að því loknu tók hann 50,0 mL skammt af lausninni og títraði hana með 0,0985 M NaOH lausn, með brómthýmólbláan sem litvísi. Til að ná bláum endapunkti þurfti 7,17 mL af basanum (meðaltal þriggja bestu títrananna).

a) Reiknið upphaflegan mólfjölda saltsýrunnar sem hellt var á eggjaskurnina.

b) Reiknið mólfjölda saltsýru sem þurfti til að leysa eggjaskurnina upp.

c) Reiknið mólfjölda kalsíumkarbónats í eggjaskurnarsýninu.

d) Reiknið massahlutfall (%) kalsíumkarbónats í eggjaskurn.

Þegar egg fúlna myndast illa lyktandi lofttegund, brennisteinsvetni (H_2S), sem við þekkjum einnig sem hveralykt. Brennisteinsvetni er dauf tveggja róteinda sýra sem leysist og klofnar í vatni. Efnarannsóknastofa fékk sent sýni af fúleggjum til ákvörðunar á styrk brennisteinsvetnis. 50,0 mL af sýninu voru látnir hvarfast við 50,0 mL af 0,0500 M joðlausn (I_2), sem er meira en nóg til að hvarfast við allt brennisteinsvetnið. Við hvarfið oxaðist brennisteinninn úr súlfíði (S^{2-}) í brennistein á föstu formi (oxunartala 0) en joðsameindirnar afoxuðust í joðíð (I^-). Umframmagn joðs var títrað í súrri lausn með 15,2 mL af 0,100 M þíósúlfatlausn ($S_2O_3^{2-}$), sem myndaði þá tetraþíónat ($S_4O_6^{2-}$).

e) Ritið jöfnu fyrir hvarf H_2S og I_2

f) Ritið jöfnu fyrir hvarf I_2 og $S_2O_3^{2-}$.

g) Reiknið styrk brennisteinsvetnis í fúleggjunum.

4. dæmi (skylda)

Kalk (CaO) fæst með því að hita kalkstein ($CaCO_3$) en kalksteinn finnst víða í náttúrunni og því er kalk mjög ódýr uppspretta basískra efna. Kalk er þó torleyst í vatni. Reyndar hvarfast það við vatnið og myndar $Ca(OH)_2$, en þetta efni er líka torleyst og er því heldur ekki vænn kostur til að mynda vatnslausnir með hátt pH gildi. Leysnijafnvægi $CaCO_3$ og $Ca(OH)_2$ ásamt leysnimargfeldi þeirra eru

$$CaCO_3(s) \rightleftharpoons Ca^{2+}(aq) + CO_3^{2-}(aq) \qquad K_{sp} = 2{,}8 \cdot 10^{-9} \quad \textbf{(1)}$$

$$Ca(OH)_2(s) \rightleftharpoons Ca^{2+}(aq) + 2\,OH^-(aq) \qquad K_{sp} = 5{,}5 \cdot 10^{-6} \quad \textbf{(2)}$$

En viljum við endilega nota kalk til að búa til basíska lausn, þá er hægt að komast hjá þessu vandamáli því að $Ca(OH)_2$ hvarfast við *leysanleg* karbónöt eins og t.d. $Na_2CO_3(aq)$ og séu þessi efni saman í lausn getur pH gildi lausnarinnar orðið mun hærra. Eftirfarandi efnahvarf á sér þá stað í lausninni

$$Ca(OH)_2(s) + CO_3^{2-}(aq) \rightleftharpoons CaCO_3(s) + 2\,OH^-(aq) \qquad \textbf{(3)}$$

Gerum nú ráð fyrir að upphafsstyrkur $[CO_3^{2-}] = 1{,}0$ M í hvarfi (3).

a) Reiknið pH gildi í mettaðri $Ca(OH)_2$ lausn.

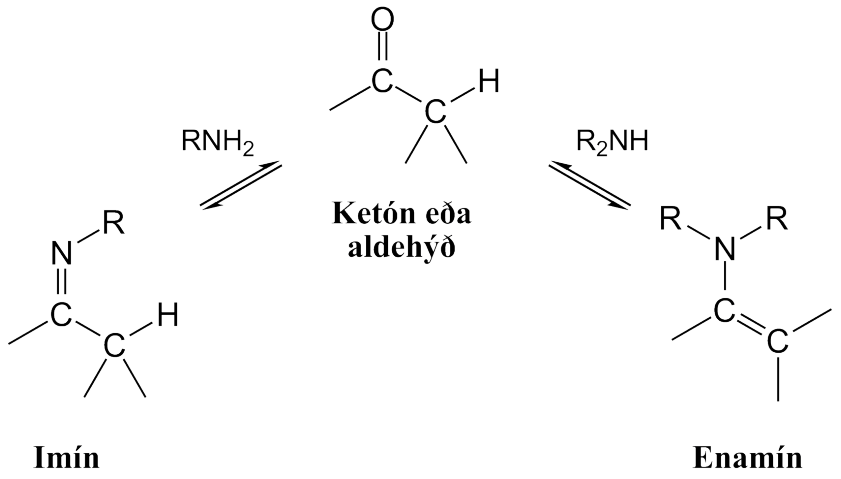
b) Reiknið jafnvægisfastann, K, fyrir hvarf (3).

c) Reiknið jafnvægisstyrk $[OH^-]$ og pH gildi í hvarfi (3).

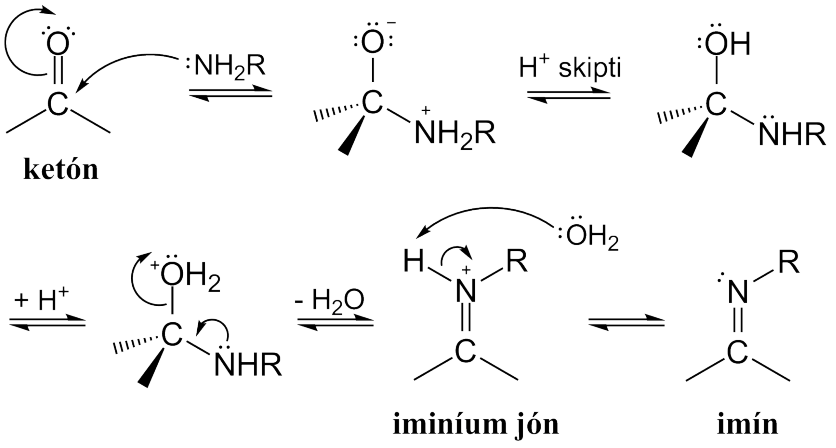
d) Hvor lausnin er basískari, mettaða $Ca(OH)_2$ lausnin, eða blandan af $Ca(OH)_2$ og Na_2CO_3?

5. dæmi (val)

Eingreind amín, RNH_2, hvarfast við ketón og aldehýð og mynda imín $R_2C{=}NR$.
Tvígreind amín, R_2NH, hvarfast á sambærilegan hátt en þá er myndefnið enamín $R_2N{-}CR{=}CR_2$



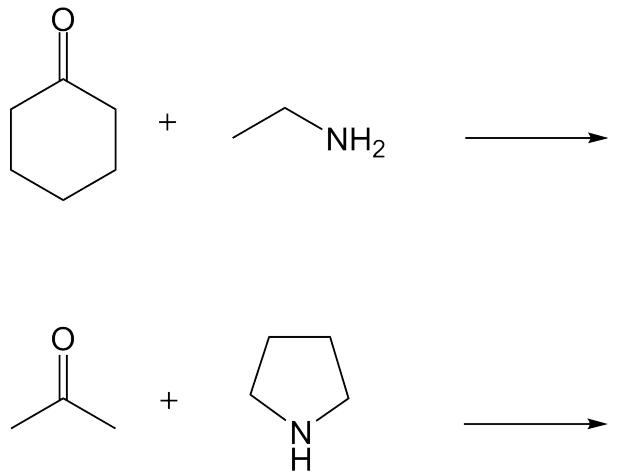
Þegar *eingreind* amín hvarfast við ketón er hvarfgangurinn eftirfarandi



Þegar *tvígreind* amín hvarfast við ketón er hvarfgangurinn sá sami fram að myndun iminíum jónarinnar en í því tilfelli er engin prótóna tengd nitrinu svo að lokaskrefið felst í afprótónun á aðliggjandi kolefni (α-kolefni) sem lýkur með myndun enamíns.

a) Umrædd efnahvörf kallast kjarnsækin álagningarhvörf. Þá er annað hvarfefnið *kjarnsækir* og hitt *rafsækir*. Gerið grein fyrir hvort efnið er hvað og rökstyðjið með vísan í hvarfganginn hér að ofan.

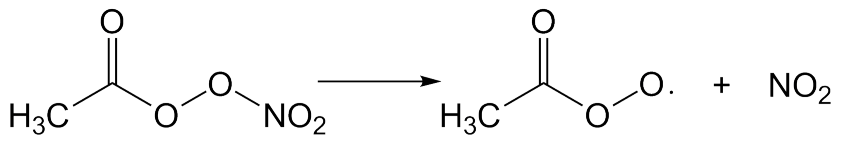
b) Hver eru myndefnin í eftirfarandi efnahvörfum?



c) Teiknið hvarfgang fyrir bæði efnahvörfin í b-lið.

6. dæmi (val)

Peroxyacetyl nítrat (PAN) er mengunarvaldur sem myndast í efnahvörfum milli vetniskolefna og nituroxíða þar sem sólarljós kemur við sögu. PAN er óstöðugt og brotnar niður í peroxyacetyl radikal og NO_2(g) en NO_2 er eitrað gas sem er brúnt að lit.



PAN **Peroxyacetyl radikal**

Niðurbrot PAN er fyrsta stigs og hefur helmingunartímann 35 klst við 0°C og 30,0 mín við 25°C.

Hraðalögmál niðurbrotsins er

$$hraði = k[\text{PAN}]$$

þar sem [PAN] er fjöldi PAN sameinda í hverjum líter af lofti og k er hraðafasti niðurbrotsins, en fastinn k er breytilegur eftir hitastigi. Í fyrsta stigs niðurbrotum er samband helmingunartíma ($t_{1/2}$) og hraðafastans (k) gefið með jöfnunni

$$t_{1/2} = \frac{\ln 2}{k}$$

Hraði efnahvarfs er almennt háður virkjunarorku þess (E_a). Því hærra sem hitastigið er, þeim mun hraðar gengur efnahvarfið. Ef hraðafastinn er þekktur fyrir tvö ólík hitastig, þ.e. k_1 við T_1 og k_2 við T_2, má reikna virkjunarorku efnahvarfsins (E_a) samkvæmt eftirfarandi jöfnu

$$\ln \frac{k_2}{k_1} = \frac{E_a}{R}\left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2}\right)$$

a) Ákvarðið gildið á hraðafastanum k fyrir niðurbrotshvarfið, annars vegar við 0°C og hins vegar við 25°C.

b) Reiknið virkjunarorku niðurbrotsins, E_a

c) Við hvaða hitastig mun loftsýni sem inniheldur $5{,}0 \cdot 10^{14}$ PAN sameindir á líter brotna niður með hraðann $1{,}0 \cdot 10^{12}$ PAN L^{-1}mín^{-1}

7. dæmi (val)

Í framtíðinni er hugsanlegt að hægt verði að knýja farartæki með rafhlöðum sem ganga fyrir áli og súrefni úr andrúmsloftinu. Rafhlaða af þessu tagi er svokölluð *flæði-rafhlaða* þar sem oxun verður við ál-anóðu og afoxun við loft-katóðu úr kolefni. Hægt er að halda rahlöðunni gangandi með því að dæla inn á hana rafvakanum NaOH(aq) meðan hún er í notkun. Myndefni rafhlöðunnar er $[Al(OH)_4]^-(aq)$ en það er fellt út sem $Al(OH)_3(s)$ *utan við* sjálfa rafhlöðuna. Þannig er styrk myndefnisins haldið í lágmarki en það er grundvöllur þess að rafhlaðan geti gengið sjálfkrafa um nokkurt skeið. Hægt er að fylla á rafhlöðuna með því að setja hreint endurunnið Al(s) í stað þess $Al(OH)_3(s)$ sem féll út.
Afoxunarhálfhvörfin sem rafhlaðan byggir á eru eftirfarandi:

(1) $[Al(OH)_4]^-(aq) + 3\,e^- \longrightarrow Al(s) + 4\,OH^-(aq)$ $\quad E^\circ = \ ?$

(2) $O_2(g) + 2\,H_2O(l) + 4\,e^- \longrightarrow 4\,OH^-(aq)$ $\quad E^\circ = +0{,}401V$

a) Skrifið heildarefnahvarfið sem á sér stað í rafhlöðunni.

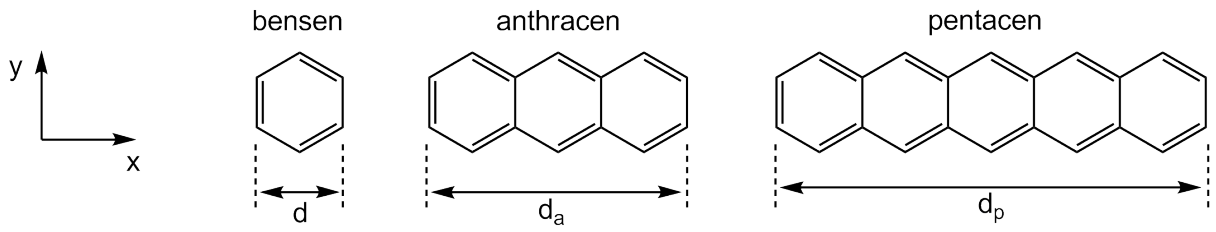
b) Staðalíspenna heildarhvarfsins er $E^\circ_{cell} = +2{,}73V$.
Reiknið staðalafoxunarspennu, E°, fyrir hálfhvarf (1).

c) Hleðsla í einu móli af rafeindum er $96485\frac{C}{mol\ e^-}$. Hversu mörg grömm af áli notar rafhlaðan ef hún gefur frá sér 10,0A straum í 4 klst? (1A = 1C/s)

d) Nú er $\Delta G^\circ_f[OH^-(aq)] = -157\,{}^{kJ}/_{mól}$ og $\Delta G^\circ_f[H_2O(aq)] = -237{,}2\,{}^{kJ}/_{mól}$.
Notið þessar upplýsingar ásamt því að $E^\circ_{cell} = +2{,}73V$ til að reikna staðal Gibbs-myndunarorku fyrir $[Al(OH)_4]^-(aq)$ ·

8. dæmi (val)

Fjölhringja arómatísk vetniskolefni (PAH) eru mengandi efni sem finnast í andrúmsloftinu. Þetta dæmi fjallar um línuleg PAH en þau eru aðeins einn bensenhringur að breidd en breytileg að lengd. Bensen, anthracen og pentacen falla undir þennan flokk en byggingar þeirra eru sýndar hér að neðan. Eðlis- og efnafræðilegir eiginleikar þessara efna eru háðir því hvernig π-rafeindaskýin eru dreifð í hverri sameind. π-rafeindir eru þær rafeindir sem tilheyra tvítengjunum, en tvær π-rafeindir eru í hverju tvítengi. Þannig má sjá að fjöldi π-rafeinda í t.d. bensen er 6.



Liður I

Breidd bensenhrings er $d = 240$ pm. Notið þessar upplýsingar til að meta láréttar lengdir (eftir x-ás) anthracens (d_a) og pentacens (d_p).

Liður II

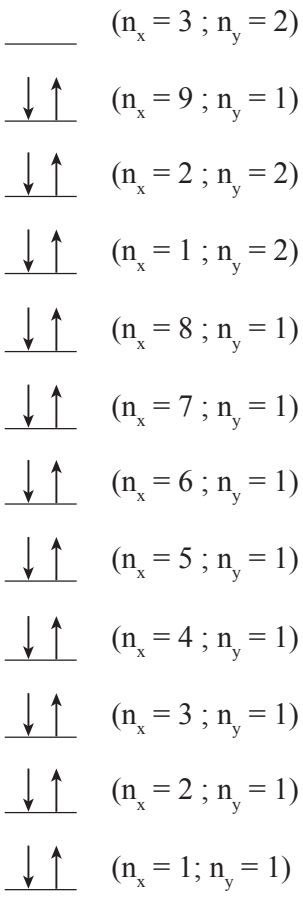
Hægt er að setja upp líkan þar sem π-rafeindir bensens eru einskorðaðar við ferning. Þá má líta á π-rafeindir PAH hringja sem frjálsar agnir í tvívíðum rétthyrningi í x-y plani.
Orkuástand rafeindar í tvívíðum rétthyrningi sem liggur eftir x- og y- ásum er fengið með

$$E = \left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2}\right)\frac{h^2}{8m_e}$$

Í þessari jöfnu eru n_x og n_y skammtatölur orkuástands og eru gildi þeirra heiltölur á bilinu 1 til ∞, h er fasti Plancks, m_e er massi rafeindar og L_x og L_y eru lengd og breidd rétthyrningsins. Skammtatölurnar n_x og n_y eru **óháðar**.

a) Gerum ráð fyrir að x- og y-víddir bensen einingar hafi báðar lengdina d. Leiðið út almenna formúlu fyrir orkuástönd línulegra PAH-hringja sem fall af skammtatölunum n_x og n_y, lengdinni d, fjölda samfastra hringja w og grunnföstunum h og m_e.

b) Á myndinni hér fyrir neðan eru sýnd í grófum dráttum orkuþrep **pentacens** og hvert þrep er merkt með skammtatölunum $(n_x; n_y)$. Á hvert orkuþrep komast tvær π-rafeindir og eru þær táknaðar með örvum. Á myndinni sjást 11 orkuþrep sem eru fyllt með 22 π-rafeindum auk lægsta ófyllta þrepsins.



Á myndinni hér til hliðar eru sýnd orkuþrep **anthracens**. Hafið í huga að tvö orkuþrep hafa sömu orkuna og eru því teiknuð hlið við hlið. Færið myndina inn í prófbókina og fyllið inn á orkuþrepin réttan fjölda af örvum til að tákna π-rafeindir anthracens. Auðu reitirnir í svigunum eru fyrir skammtatölurnar n_x og n_y, sem þið verðið einning að ákvarða, bæði fyrir fylltu þrepin og fyrir orkulægsta tóma þrepið/þrepin.

_____ (n_x = ___ ; n_y = ___)

_____ (n_x = ___ ; n_y = ___) _____ (n_x = ___ ; n_y = ___)

_____ (n_x = ___ ; n_y = ___)

_____ (n_x = ___ ; n_y = ___)

_____ (n_x = ___ ; n_y = ___)

_____ (n_x = ___ ; n_y = ___)

_____ (n_x = ___ ; n_y = ___)

_____ (n_x = ___ ; n_y = ___)

_____ (n_x = ___ ; n_y = ___)

c) Hvarfgirni PAH-hringja er háð orkubilinu, ΔE, milli hæsta fyllta orkuþrepsins og lægsta ófyllta orkuþrepsins. Minna orkubil, ΔE, felur í sér meiri hvarfgirni.
Notið niðurstöður frá liðum a og b til að reikna orkubilið ΔE (í Joule) milli hæsta fyllta orkuþrepsins og lægsta ófyllta þrepsins fyrir anthracen og pentacen. Ef þið hafið engar niðurstöður úr liðum a og b má nota (2;2) fyrir hæsta fyllta orkuþrepið og (3;2) fyrir lægsta ófyllta þrepið fyrir báðar sameindirnar (þetta eru ekki endilega réttu gildin).

d) Notið niðurstöður úr lið c til að meta hvort er hvarfgjarnara; anthracen eða pentacen?