Efnafræðifélag Íslands **Félag raungreinakennara**

15. Landskeppnin í efnafræði
Úrslitakeppni - fræðilegur hluti

19. mars 2016, kl. 17:30-20:30.

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 12 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°	=	$\Delta H^\circ - T\Delta^\circ S$			
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 mmHg
	=	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 1,008																	2 **He** helium 4,003
3 **Li** lithium 6,941	4 **Be** beryllium 9,012											5 **B** boron 10,81	6 **C** carbon 12,01	7 **N** nitrogen 14,01	8 **O** oxygen 16,00	9 **F** fluorine 19,00	10 **Ne** neon 20,18
11 **Na** sodium 22,99	12 **Mg** magnesium 24,31											13 **Al** aluminum 26,98	14 **Si** silicon 28,09	15 **P** phosphorus 30,97	16 **S** sulfur 32,07	17 **Cl** chlorine 35,45	18 **Ar** argon 39,95
19 **K** potassium 39,10	20 **Ca** calcium 40,08	21 **Sc** scandium 44,96	22 **Ti** titanium 47,88	23 **V** vanadium 50,94	24 **Cr** chromium 52,00	25 **Mn** manganese 54,94	26 **Fe** iron 55,85	27 **Co** cobalt 58,93	28 **Ni** nickel 58,69	29 **Cu** copper 63,55	30 **Zn** zinc 65,39	31 **Ga** gallium 69,72	32 **Ge** germanium 72,61	33 **As** arsenic 74,92	34 **Se** selenium 78,96	35 **Br** bromine 79,90	36 **Kr** krypton 83,80
37 **Rb** rubidium 85,47	38 **Sr** strontium 87,62	39 **Y** yttrium 88,91	40 **Zr** zirconium 91,22	41 **Nb** nubidium 92,91	42 **Mo** molybdenum 95,94	43 **Tc** technetium (98)	44 **Ru** ruthenium 101,1	45 **Rh** rhodium 102,9	46 **Pd** palladium 106,4	47 **Ag** silver 107,9	48 **Cd** cadmium 112,4	49 **In** indium 114,8	50 **Sn** tin 118,7	51 **Sb** antimony 121,8	52 **Te** tellurium 127,6	53 **I** iodine 126,9	54 **Xe** xenon 131,3
55 **Cs** caesium 132,9	56 **Ba** barium 137,3	71 **Lu** lutetium 175,0	72 **Hf** hafnium 178,5	73 **Ta** tantalum 180,9	74 **W** tungsten 183,8	75 **Re** rhenium 186,2	76 **Os** osmium 190,2	77 **Ir** iridium 192,2	78 **Pt** platinum 195,1	79 **Au** gold 197,0	80 **Hg** mercury 200,6	81 **Tl** thallium 204,4	82 **Pb** lead 207,2	83 **Bi** bismuth 209,0	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 (266)	107 **Bh** bohrium (264)	108 **Hs** hassium (269)	109 **Mt** meitnerium (268)	110 **Ds** darmstadtium (281)	111 **Rg** roentgenium (272)	112 **Cn** copernicium (285)	113 **Uut** ununtrium	114 **Fl** flerovium (289)	115 **Uup** ununpentium	116 **Lv** livermorium (293)	117 **Uus** ununseptium	118 **Uuo** ununoctium
				57 **La** lanthanum 138,9	58 **Ce** cerium 140,1	59 **Pr** praseodymium 140,9	60 **Nd** neodymium 144,2	61 **Pm** promethium (145)	62 **Sm** samarium 150,4	63 **Eu** europium 152,0	64 **Gd** gadolinium 157,3	65 **Tb** terbium 158,9	66 **Dy** dysprosium 162,5	67 **Ho** holmium 164,9	68 **Er** erbium 167,3	69 **Tm** thulium 168,9	70 **Yb** ytterbium 173,0
				89 **Ac** actinium (227)	90 **Th** thorium 232,0	91 **Pa** protactinium 231,0	92 **U** uranium 238,0	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)

Efnasamband nokkurt er úr kolefni (C), vetni (H) og súrefni (O). Efnið m.a. notað sem sýrustillir í matvæli, við framleiðslu á litarefnum og í vefnaðarframleiðslu.

Til að greina efnið voru gerðar á því nokkrar tilraunir:

- Þegar 1,054 g af efninu var brennt fékkst 1,599 g CO_2 og 0,327 g af H_2O.
- Þegar 0,615 g af efninu var leyst upp í 25,10 g af kaldri ediksýru (CH_3COOH) þá lækkaði bræðslumark ediksýrunnar um 0,82°C.
  (K_f = 3,90°C/m fyrir ediksýru, og efnið jónast ekki í ediksýrunni.)
- 0,4250 g af efninu var leyst upp í vatni. Til að hlutleysa að fullu var það títrað að endapunkti með 34,03 mL af 0,2152 M KOH.
- Þegar 0,215 g af efninu er leyst upp í 50,00 mL af vatni mælist pH lausnarinnar 1,80.

a) (3 stig) Ákvarðið reynsluformúlu og sameindaformúlu efnisins.

b) (2 stig) Hversu mörg jónanleg H er að finna í sameindinni? (Hvað inniheldur hver sameind margar súrar prótónur?)

c) (2 stig) Gefið er að öll jónanleg H eru bundin í karboxýlsýruhóp. Teiknaðu byggingaformúlu sameindarinnar.

d) (3 stig) Reiknið fyrsta jónunarfasta efnisins, K_{a1}.

2. dæmi (skylda)

Tris(hydroxymethyl)aminomethane, almennt kallað TRIS, er oft notað í stuðpúðalausnir (búffer) við rannsóknir í lífefnafræði. Stuðpúðavirkni þessara lausna er á bilinu pH 7 til 9. TRIS er basi ($K_b = 1{,}19 \cdot 10^{-6}$) og efnahvarf þess er

$$\underset{\text{TRIS}}{(HOCH_2)_3CNH_2} + H_2O \rightleftharpoons \underset{\text{TRISH}^+}{(HOCH_2)_3CNH_3^+} + OH^-$$

a) Við hvaða pH gildi er virkni búfferlausnarinnar best?

b) Reiknaðu hlutfallið [TRIS]/[TRISH$^+$] við pH=7 og við pH=9.

Stuðpúðalausn er útbúin með því að þynna 50,0 g af TRIS og 65,0 g af TRISHCl í heildarrúmmál 2,0 L.

c) Hvert er pH gildi þessarar lausnar?

d) Nú er 0,50 mL af 12 M HCl bætt út í 200,0 mL af lausninni. Hvert er þá pH gildið?

3. dæmi (skylda)

Stál er málmblanda járns og ýmissa annarra frumefna. Nokkur af algengustu íblöndunarefnunum í stáli eru kolefni, mangan, króm, nikkel, tungsten og vanadíum en eiginleikar stálsins fara eftir því hvaða íblöndunarefni eru til staðar. Til dæmis eykur mangan togþol stálsins og króm eykur hörku og hækkar bræðslumark.

5,00 g stálsýni var leyst upp í sýru. Síðan var allt Mn og Cr í sýninu oxað í MnO_4^- og $Cr_2O_7^{2-}$ og lausnin að lokum þynnt með vatni að 100,0 mL í mæliflösku.

a) Tekið var 50,0 mL sýni úr mæliflöskunni og sett í $BaCl_2$ lausn. Þá var pH-gildið stillt þannig að allt krómið féll út sem 0,82 g $BaCrO_4$. Reiknaðu massa% króms í stálsýninu.

Annar 50,0 mL skammtur var tekinn úr mæliflöskunni og hann títraður með 44,9 mL af 0,487 M Fe^{2+} í súrri lausn. Í títruninni hvarfaðist Fe^{2+} við bæði MnO_4^- og $Cr_2O_7^{2-}$ samkvæmt óstilltu efnahvörfunum:

$$MnO_4^-(aq) + Fe^{2+}(aq) + H^+(aq) \rightarrow Mn^{2+}(aq) + Fe^{3+}(aq)$$

$$Cr_2O_7^{2-}(aq) + Fe^{2+}(aq) + H^+(aq) \rightarrow Cr^{3+}(aq) + Fe^{3+}(aq)$$

b) Stilltu títrunarhvörfin og reiknaðu massa% Mn í stálsýninu.

4. dæmi (skylda)

Við hitun brotnar kalsíum karbónat niður í kalsíum oxíð og koltvíoxíð. Efnahvarfið er:

$$CaCO_3(s) \rightleftharpoons CaO(s) + CO_2(g)$$

Jafnvægisfasti efnahvarfsins, K_P, hækkar með hækkandi hitastigi.
Í töflunni hér að neðan er staðalmyndunarvarmi (ΔH_f°) og staðalmyndunarfrjálsorka (ΔG_f°) efnanna við 25°C. Gerum ráð fyrir að ΔH_f° og ΔG_f° breytist ekki með hitastigi.

Efni	ΔH_f°(kJ/mól)	ΔG_f°(kJ/mól)
$CaCO_3(s)$	-1207	-1129
$CaO(s)$	-635,1	-604,0
$CO_2(g)$	-393,5	-394,4

a) (2 stig) Reiknaðu staðalfrjálsorkubreytingu (ΔG°) efnahvarfsins.
Er efnahvarfið sjálfgengt við 25°C?

b) (2 stig) Reiknaðu jafnvægisfastann, K_P, við 25°C.

Nú er sýni af hreinu $CaCO_3(s)$ komið fyrir í íláti og það tengt við vacuum dælu sem er fær um að minnka þrýsting kerfisins niður í 10^{-9} mmHg. Við 25°C er þrýstingur $CO_2(g)$ vegna niðurbrotshvarfsins þó mun minni en 10^{-9} mmHg svo að $CO_2(g)$ er ekki greinanlegt í þessu kerfi. Sé hitastigið hins vegar hækkað brotnar kalsíum karbónat mun betur niður. Þá eykst þrýstingur $CO_2(g)$ og verður loks greinanlegt í kerfinu þegar $P_{CO_2} = 10^{-9}$ mmHg

c) (1 stig) Hver er þrýstingur $CO_2(g)$ í mmHg vegna niðurbrotshvarfsins við 25°C?

d) (2 stig) Reiknið staðalóreiðubreytingu efnahvarfsins (ΔS°).

e) (3 stig) Hvert er lágmarks hitastig sem þarf að hita $CaCO_3(s)$ í svo að þrýstingur $CO_2(g)$ sé nægur til að greinast í kerfinu?

5. dæmi (val)

Í nálgun um jafnhraðamyndun (steady-state approximation) er gert ráð fyrir að milliefni í hvarfgangi myndist jafnhratt og það eyðist (hvarfast). Styrkur milliefnisins helst þá jafn meðan á hvarfinu stendur. Sem dæmi um þetta er eftirfarandi hvarfgangur:

$$(1) \qquad \mathrm{A} \longrightarrow \mathrm{B} \qquad k_1$$

$$(2) \qquad \mathrm{B} \longrightarrow \mathrm{C} \qquad k_2$$

Hér eru k_1 og k_2 hraðafastar viðkomandi skrefa. Heildarhvarfið er: A $\longrightarrow$ C, og B er milliefni í hvarfinu. Nú er hraðalögmál eða hraðajafna (rate law) hvers skrefs í hvarfgangi í beinu hlutfalli við styrk hvarfefnanna. Ef B eyðist jafnhratt og það myndast þá er d[B]/dt = 0 eða:

$$\text{myndunarhraði B} = \text{eyðingarhraði B}$$

$$k_1[A] = k_2[B]$$

$$[B] = \frac{k_1}{k_2}[A]$$

Hraðajafnan fyrir myndunarhraða C er því:

$$\frac{d[C]}{dt} = k_2[B] = k_2\frac{k_1}{k_2}[A] = k_1[A]$$

Þessi jafna er jafnframt hraðalögmál heildarhvarfsins samkvæmt hvarfgangnum.

Ensím, E, eru talin hvata efnahvörf samkvæmt eftirfarandi hvarfgangi:

$$(1) \qquad \mathrm{E} + \mathrm{S} \longrightarrow \mathrm{ES} \qquad k_1$$

$$-(1) \qquad \mathrm{ES} \longrightarrow \mathrm{E} + \mathrm{S} \qquad k_{-1}$$

$$(2) \qquad \mathrm{ES} \longrightarrow \mathrm{E} + \mathrm{P} \qquad k_2$$

Í hvarfgangnum er S hvarfefni, E er óbundið ensím, ES er ensím-hvarfefnis komplex og P er myndefni.

a) (4 stig) Notaðu nálgunina um jafnhraðamyndun til að leiða út jöfnu sem sýnir hvernig styrkur ES-komplexins, [ES], er háður styrk [E] og [S].

Í hraðamælingum ensíma er [E] oftast óþekkt stærð en hins vegar er upphafsstyrkur ensímsins, $[E]_0$, þekktur. Þá gildir að

$$[E]_0 = [E] + [ES]$$

Í ensímhvötun er fasti Michaelis, K_m, skilgreindur sem:

$$K_m = \frac{k_{-1} + k_2}{k_1}$$

b) (3 stig) Leiddu út jöfnu sem sýnir hvernig [ES] er háð [S], $[E_0]$ og K_m.

c) (3 stig) Leiddu út jöfnu sem sýnir hvernig hraðamyndun P (þ.e. d[P]/dt) er háð [S], $[E_0]$ og K_m. Þessi jafna er hraðalögmál ensímhvataðs hvarfs.

6. dæmi (val)

Hægt er að beita hlutleysitítrunum bæði til að þáttgreina og magngreina lausn sem inniheldur einn eða blöndu tveggja af eftirfarandi þáttum: natríum karbónat (Na_2CO_3), natríum vetniskarbónat ($NaHCO_3$) og natríum hydroxíð (NaOH).

Greining á lausn af þessu tagi krefst þess að sama rúmmál hennar sé títrað tvisvar með sterkri sýru (HCl) og notaður sé mismunandi efnaviti við títranirnar.

Hentugir efnavitar eru phenolphthalein (PHP) annars vegar og bromocresól grænn (BC) hins vegar en þeir breyta um lit við pH = 8,3-10 (PHP) og pH = 3,8-5,4 (BC).

Na_2CO_3 er tvívirkur basi og við títrun þess er tvisvar farið yfir jafngildispunkt. PHP greinir fyrri jafngildispunktinn en BC þann síðari. Bæði PHP og BC geta greint endapunkt við títrun á NaOH.

Með því að bera saman rúmmálið af HCl sem þarf að endapunkti við títranirnar tvær, er hægt að ákvarða hvaða þáttur/þættir eru til staðar í óþekktu lausninni. Þegar ljóst er hvaða þáttur/þættir eru til staðar má nota títrunarrúmmálið til að ákvarða styrki.

Taflan sýnir samanburð á títrunarrúmmáli þegar sama rúmmál lausnar er títrað, annars vegar að endapunkti með PHP (V_{PHP}) og hins vegar að endapunkti með BC (V_{BC}) og hvaða þáttur/þættir eru til staðar þegar viðkomandi skilyrði er uppfyllt.

Vensl V_{PHP} og V_{BC}	Þáttur/þættir í lausn
$V_{PHP} = V_{BC}$	NaOH
$V_{PHP} = \frac{1}{2}V_{BC}$	Na_2CO_3
$V_{PHP} = 0; V_{BC} > 0$	$NaHCO_3$
$V_{PHP} > \frac{1}{2}V_{BC}$	NaOH, Na_2CO_3
$V_{PHP} < \frac{1}{2}V_{BC}$	Na_2CO_3, $NaHCO_3$

Lausn A inniheldur einn eða blöndu tveggja þátta eins og lýst er hér að ofan. 25,00 mL skammtar af lausninni voru títraðir með 0,1202 M HCl, annars vegar með PHP efnavita og hins vegar með BC efnavita. Titrun að endapunkti með PHP krafðist 22,42 mL en títrun að endapunkti með BC krafðist 22,44 mL.

a) (2 stig) Hvaða þátt/þætti inniheldur lausn A?

b) (3 stig) Hver er mólstyrkur efnisins/efnanna í lausn A?

Lausn B var greind á sama hátt. 25,00 mL skammtar af lausninni voru títraðir með 0,1202 M HCl. Titrun að endapunkti með PHP krafðist 15,67 mL en títrun að endapunkti með BC krafðist 42,13 mL.

c) (2 stig) Hvaða þátt/þætti inniheldur lausn B?

d) (3 stig) Hver er mólstyrkur efnisins/efnanna í lausn B?

7. dæmi (val)

Fasta efnið PbO er tvíhegða (amphoteric) þar sem það leysist bæði upp í súrri og basískri vatnslausn. Eftirfarandi efnajafnvægi koma þá við sögu:

$$PbO(s) + H_2O(l) \leftrightharpoons Pb^{2+}(aq) + 2\,OH^-(aq) \qquad K_{sp} = 8{,}0 \cdot 10^{-16} \quad (1)$$

$$PbO(s) + 2\,H_2O(l) \leftrightharpoons Pb(OH)_3{}^-(aq) + H^+(aq) \qquad K_a = 1{,}0 \cdot 10^{-15} \quad (2)$$

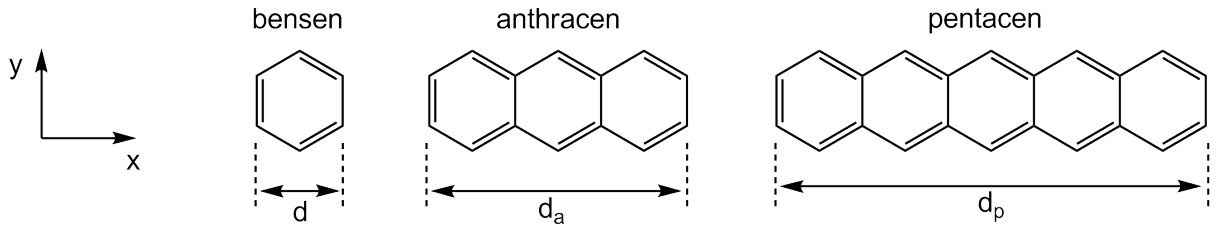
Í liðum a) og b) hér á eftir má gera ráð fyrir að rúmmál lausnar breytist ekki þegar pH-gildinu er breytt.

a) (4 stig) PbO er algjörlega uppleyst ef pH-gildi lausnar er nógu lágt. Ef upphafsstyrkur Pb^{2+} í lausn er $1{,}00 \cdot 10^{-2}$ M, hvaða pH-gildi verður lausnin að ná til að PbO byrji að falla út?

b) (6 stig) Nú er pH-gildi lausnarinnar í a)-lið er hækkað áfram þar til allt PbO er uppleyst. Hvert er þá pH-gildi lausnarinnar? Reiknaðu jafnframt styrk $Pb(OH)_3{}^-$ og Pb^{2+} í lausninni.

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.



a) (1 stig) Breidd bensenhrings er $d = 240$ pm. Notið þessar upplýsingar til að meta láréttar lengdir (eftir x-ás) anthracens (d_a) og pentacens (d_p).

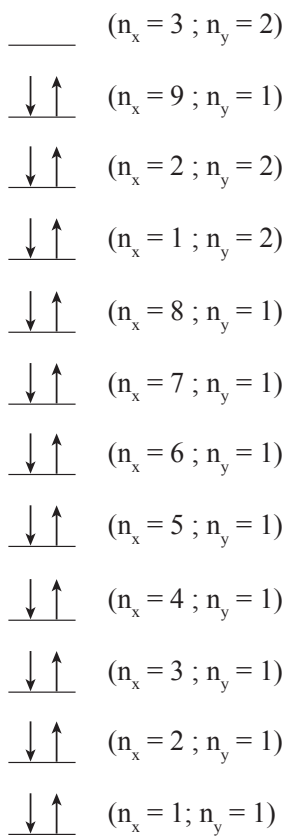
Hægt er að setja upp líkan þar sem π-rafeindir bensens eru einskorðaðar við ferning. Þá má líta á π-rafeindir PAH hringja sem frjálsar agnir í tvívíðum rétthyrningi í x-y plani.
Orkuástand rafeindar í tvívíðum rétthyrningi sem liggur eftir x- og y- ásum er fengið með

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

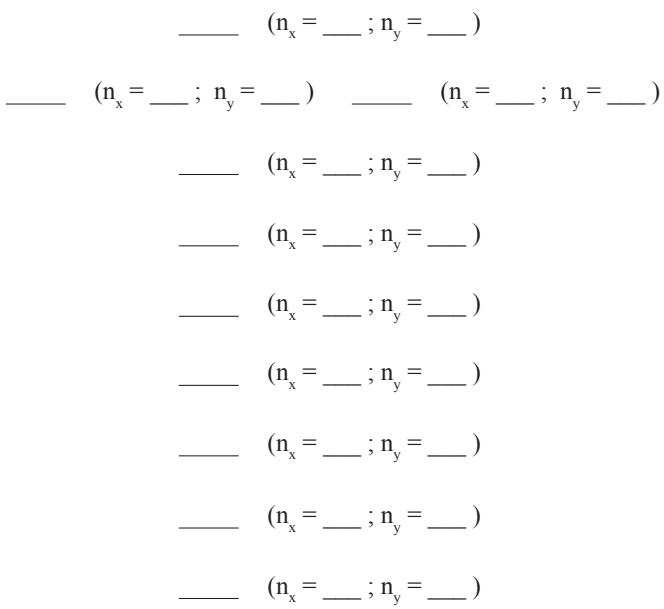
Í þessari jöfnu eru n_x og n_y skammtatölur orkuástands og eru gildi þeirra heiltölur á bilinu 1 til ∞, h er fasti Plancks, m_e er massi rafeindar og L_x og L_y eru lengd og breidd rétthyrningsins. Skammtatölurnar n_x og n_y eru **óháðar**.

b) (3 stig) 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.

Á myndinni hér til hliðar 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.



c) (2 stig) 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.



d) (3 stig) 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).

e) (1 stig) Notið niðurstöður úr lið c til að meta hvort er hvarfgjarnara; anthracen eða pentacen?