Efnafræðifélag Íslands
The Icelandic Chemical Society

9. Almenna landskeppnin í efnafræði

fyrir nemendur framhaldsskóla

Þriðjudag 2. mars 2010

kl: 8-10 (120 mín.)

Málning hf

Tandur ehf

NimbleGen Systems of Iceland

9. Almenna landskeppnin í efnafræði

2. mars 2010, kl. 8:00 - 10:00 (120 mín)

Nafn: _____

Kennitala: _____

Sími: _____

Tölvupóstfang: _____

Heimili: _____

_____

Skóli: _____

Braut/áfangi: _____

Námsár: 1. ár 2. ár 3. ár 4. ár

Almennar leiðbeiningar

1. Opnið ekki spurningaheftin fyrr en ykkur er sagt að gera það.
2. Spurningarnar eru alls 21 og eru á 15 tölusettum blaðsíðum, auk forsíðu. Athugið að svo sé.
3. Spurningunum er skipt í þrennt; 10 þriggja stiga fjölvalsspurningar, 8 fimm stiga spurningar og 3 stærri spurningar sem gefa tíu stig hver. Heildarstigafjöldi spurninganna er því 100.
4. Ekki er gert ráð fyrir að allir geti svarað öllum spurningunum. Þó þið getið ekki svarað nema hluta spurninganna, þarf það ekki að þýða að þið standið ykkur ekki vel. Sumar spurningarnar eru mjög erfiðar.
5. Einu leyfilegu hjálpargögnin eru óforritanlegar reiknivélar og næsta blaðsíða, en á henni eru formúlur, fastar og lotukerfið.
6. Í fjölvalsspurningunum skal setja kross í viðeigandi kassa, en í öðrum spurningum skal svarið skrifað fyrir neðan spurninguna. Ef plássið er ekki nægjanlegt, skal skrifa aftan á blaðsíðuna fyrir framan og merkja greinilega um hvaða lið er að ræða. Ekki verður farið yfir laus blöð sem kunna að fylgja verkefninu.
7. Sumar spurningarnar eru 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 eru réttir.

Helstu formúlur og fastar

$\Delta G = \Delta H - T\Delta S$

$\Delta G^\circ = \Delta H^\circ - T\Delta S^\circ$

$\Delta G = \Delta G^\circ + RT \ln Q$

$\Delta x = \sum_{mynd} x - \sum_{hvarf} x$

$p = \sum_i p_i$

$[\mathrm{H_3O^+}] = \frac{K_a}{2}\left(-1 + \sqrt{1 + \frac{4C_0}{K_a}}\right)$

$k = Ae^{-\frac{E_a}{RT}}$

$E = E^\circ - \frac{RT}{nF} \ln Q$

$pH = pK_a + \log \frac{[A^-]}{[HA]}$

$\Delta G^\circ = -RT \ln K = -nFE^\circ$

$q = C\Delta T$

$PV = nRT$

$pH = -\log [\mathrm{H_3O^+}]$

$pK_a = -\log K_a$

$E = \frac{hc}{\lambda}$

$N_A = 6{,}0223 \cdot 10^{23}\mathrm{mól}^{-1}$

$F = 96485 \frac{\mathrm{J}}{\mathrm{V{\cdot}mól}}$

$1\mathrm{bar} = 10^5\mathrm{Pa} = 0{,}9869\mathrm{atm}$

$1\mathrm{atm} = 760\mathrm{torr}$

$K_w = 1{,}00 \cdot 10^{-14}$

$R = 8{,}3144 \frac{\mathrm{J}}{\mathrm{K{\cdot}mól}} = 0{,}08206 \frac{\mathrm{L{\cdot}atm}}{\mathrm{K{\cdot}mól}}$

$h = 6{,}626 \cdot 10^{-34}\mathrm{J \cdot s}$

$c = 3 \cdot 10^8\mathrm{m/s}$

1 kaloría = 4,184J

Lotukerfið

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)

I. hluti - Þriggja stiga spurningar

1. dæmi

Hver eftirfarandi frumefna eru til í fleiri en einu oxunarástandi í vatnslausn?

Fe, Ca og Cl.

- ☐ Fe og Ca
- ☐ Ca og Cl
- ☐ Fe og Cl
- ☐ Einungis Fe

2. dæmi

Hver er rafeindaskipan Ag^+?

- ☐ $[Kr]5s^2 4d^8$
- ☐ $[Kr]4d^{10}$
- ☐ +1
- ☐ 46 rafeindir

3. dæmi

Hvaða efni myndast við fullkominn bruna C-vítamíns og hvað þarf mörg mól súrefnis til að brenna 1 mól C-vítamíns?

$$C_6H_8O_6 + O_2 \rightarrow$$

- ☐ $H_2O_{(l)}$ og $CO_{2\,(g)}$, 5 mól O_2
- ☐ $H_2O_{(g)}$ og $CO_{2\,(g)}$, 5 mól O_2
- ☐ $CO_{(g)}$ og $H_2O_{(l)}$, 2 mól O_2
- ☐ $CO_{(g)}$ og $H_2O_{(g)}$, 2 mól O_2

4. dæmi

Hvaða svigrúmablöndun má búast við hjá BrF_3?

- ☐ sp^2
- ☐ dsp^3
- ☐ d^2sp^3
- ☐ sp^3

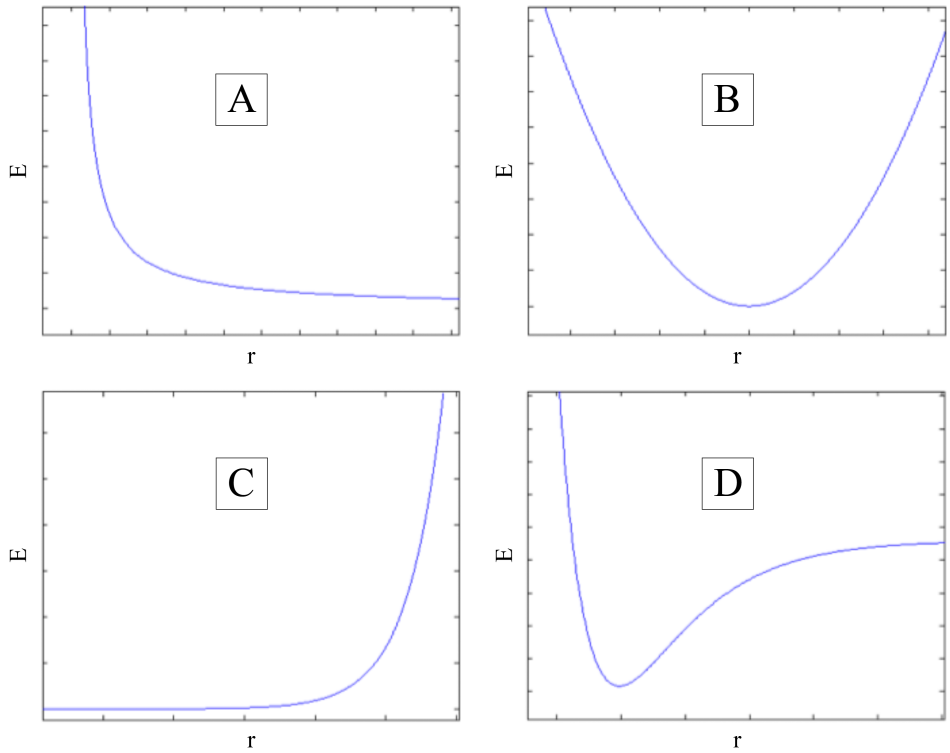
5. dæmi

Raðið eftirfarandi efnum eftir sýrustyrkleika (remmu) þeirra í vatni: HF, HBr, HCl og HI

- ☐ HF > HCl > HBr > HI
- ☐ HCl > HF > HBr > HI
- ☐ HI > HBr > HCl > HF
- ☐ Þær eru allar jafn sterkar

6. dæmi

Hvaða graf lýsir best stöðuorku tveggja vetnisatóma er þau nálgast hvort annað til að mynda H_2? (Gröfin sýna stöðuorku sem fall af fjarlægðinni milli atómanna)



- ☐ A
- ☐ B
- ☐ C
- ☐ D

7. dæmi

Hver er bygging $SOCl_2$ samkvæmt VSEPR aðferð?

- ☐ Þríhyrnt flatt (trigonal planar)
- ☐ Ferflötungslaga (tetrahedral)
- ☐ Þrístrendur pýramídi (trigonal pyramidal)
- ☐ Þrístrendur tvípýramídi (trigonal bipyramid)

8. dæmi

Eftirfarandi er hluti úr hrörnunarkeðju 238-úrans:

$$^{214}_{84}\mathrm{Po} \rightarrow X + {}^{4}_{2}\alpha$$

$$X \rightarrow {}^{210}_{83}\mathrm{Bi} + Y$$

- ☐ $X = {}^{218}_{86}\mathrm{Rn}$ $Y = {}^{8}_{3}\mathrm{Li}$
- ☐ $X = {}^{210}_{84}\mathrm{Po}$ $Y = {}^{0}_{1}e$
- ☐ $X = {}^{210}_{82}\mathrm{Pb}$ $Y = {}^{0}_{-1}\beta$
- ☐ $X = {}^{214}_{86}\mathrm{Rn}$ $Y = {}^{4}_{2}\alpha + {}^{0}_{1}e$

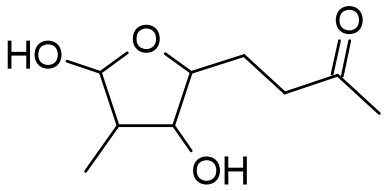
9. dæmi

Hversu margar ísómerur má mynda úr $C_4H_{10}O$?

- ☐ 4
- ☐ 5
- ☐ 6
- ☐ 7

10. dæmi

Hversu mörg hendin kolefni eru í sameindinni hér að neðan?



- ☐ 3
- ☐ 4
- ☐ 5
- ☐ 6

II. hluti - Fimm stiga spurningar

11. dæmi

Járngrýti mælist 0,9050g að þyngd og er leyst upp í sýru. Því næst er járnið afoxað yfir í Fe^{2+} og títrað með 53,15ml af 0,02524M $KMnO_4$ lausn. Finnið massahlutfall (%) járns í járngrýtinu. Byrjið á því að stilla eftirfarandi hálfhvörf:

$$Fe^{3+} + e^- \rightleftharpoons Fe^{2+}$$

$$MnO_4^- + 8\,H^+ + 5\,e^- \rightleftharpoons Mn^{2+} + 4\,H_2O$$

- ☐ 12,54%
- ☐ 41,39%
- ☐ 58,61%
- ☐ 39,67%

12. dæmi

$$23\,KClO_{3\,(l)} + 3\,C_{12}H_{22}O_{11\,(s)} \longrightarrow 36\,CO_{2\,(g)} + 30\,H_2O_{(l)} + 23\,KCl_{(s)}$$

Þetta er mjög útvermið hvarf. Gerum ráð fyrir að við höfum ofgnótt af kalíumklórati ($KClO_3$) og bætum útí einum hlaupbangsa sem vegur 3,4 g. Látum hlaupbangsann vera 100% súkrósa ($C_{12}H_{22}O_{11}$). Notið myndunarvarmana hér að neðan til að reikna hversu mikill varmi losnar í kílójúlum per hlaupbangsa?

$\Delta H_{f\ C_{12}H_{22}O_{11\,(s)}} = -2221{,}7\ ^{kJ}/_{mól}$ $\Delta H_{f\ CO_{2\,(g)}} = -393{,}5\ ^{kJ}/_{mól}$ $\Delta H_{f\ H_2O_{(l)}} = -285{,}8\ ^{kJ}/_{mól}$

$\Delta H_{f\ KCl_{(s)}} = -435{,}87\ ^{kJ}/_{mól}$ $\Delta H_{f\ KClO_{3\,(l)}} = -391{,}20\ ^{kJ}/_{mól}$

- ☐ $-81\ ^{kJ}/_{hlaupbangsa}$
- ☐ $-169{,}9\ ^{kJ}/_{hlaupbangsa}$
- ☐ $-56{,}7\ ^{kJ}/_{hlaupbangsa}$
- ☐ $169{,}9\ ^{kJ}/_{hlaupbangsa}$

Til gamans má geta að til að hita einn 250 ml kaffibolla þarf ca. 80-90 kJ.

13. dæmi

Galvanihlöðu er lýst á eftirfarandi hátt:

$$Ni_{(s)} \mid Ni^{2+}_{(aq)}\,(0{,}030M) \| Cr^{3+}_{(aq)}\,(0{,}860M) \mid Cr_{(s)}$$

Hálfhvörfin eru

$$Ni^{2+}_{(aq)} + 2\,e^- \longrightarrow Ni_{(s)} \quad E^\circ = -0{,}25V$$
$$Cr^{3+}_{(aq)} + 3\,e^- \longrightarrow Cr_{(s)} \quad E^\circ = -0{,}74V$$

Finnið ΔG hvarfsins við $25°C$. Athugið að hægt er að reikna dæmið á tvo vegu.

- ☐ $275\ {}^{kJ}/_{mól}$
- ☐ $565\ {}^{kJ}/_{mól}$
- ☐ $-414\ {}^{kJ}/_{mól}$
- ☐ $-86\ {}^{kJ}/_{mól}$

14. dæmi

Stillið eftirfarandi oxunar/afoxunarhvarf:

$$NO^-_{3(aq)} + H_2C_2O_{4\,(aq)} \rightleftharpoons NO_{(g)} + CO_{2\,(g)} \quad \text{(Basísk lausn)}$$

Teljið samanlagðan fjölda súrefnisatóma (O) báðum megin jöfnunnar þegar hún hefur verið stillt með minnstu mögulegu heiltölustuðlum.

- ☐ 27
- ☐ 58
- ☐ 18
- ☐ 36

15. dæmi

Efnafræðinemi þarf við framkvæmd tilraunar 1,00 L af 0,315 M saltsýru (HCl) en finnur bara 5,00 L af 6,00 M saltsýru. Hvernig fer neminn að því að búa það til sem hann þarf?

- ☐ Tekur 52,5 ml af 6,00 M HCl og þynnir með 1,00 L af vatni.
- ☐ Tekur 52,5 ml af 6,00 M HCl og þynnir upp að 1,00 L með vatni.
- ☐ Tekur 49,7 ml af 6,00 M HCl og þynnir með 1,00 L af vatni.
- ☐ Tekur 49,7 ml af 6,00 M HCl og þynnir upp að 1,00 L með vatni.

16. dæmi

Hvernig lítur hraðalögmál eftirfarandi hvarfs út og hver er hraðafasti hvarfsins?

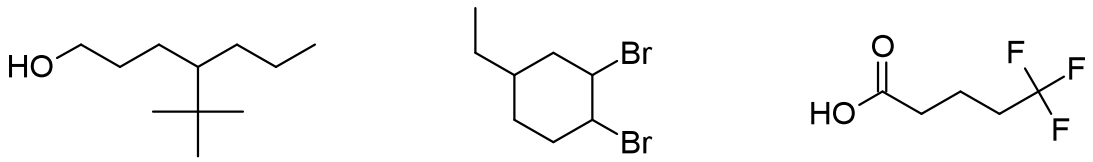
$$S_2O_{8(aq)}^{2-} + 3\,I_{(aq)}^{-} \longrightarrow 2\,SO_{4(aq)}^{2-} + I_{3(aq)}^{-}$$

Tilraun	$[S_2O_8^{2-}]$ (M)	$[I^-]$ (M)	Upphafshvarfhraði ($^M/_s$)
1	0,08	0,034	$2{,}2 \cdot 10^{-4}$
2	0,08	0,017	$1{,}1 \cdot 10^{-4}$
3	0,16	0,017	$2{,}2 \cdot 10^{-4}$

- ☐ *hvarfhraði* $= k[S_2O_8^{2-}][I^-]^3, k = 0{,}08 M^{-1}s^{-1}$
- ☐ *hvarfhraði* $= k[S_2O_8^{2-}][I^-], k = 0{,}08 M^{-1}s^{-1}$
- ☐ *hvarfhraði* $= k[S_2O_8^{2-}][I^-]^3, k = 12{,}6 M^{-1}s^{-1}$
- ☐ *hvarfhraði* $= k[S_2O_8^{2-}][I^-]^{\frac{1}{3}}, k = 0{,}008 M^{-1}s^{-1}$

17. dæmi

Nefnið eftirfarandi efni skv. IUPAC kerfinu.



1 2 3

Hakið við liðinn þar sem öllum efnunum er gefið rétt nafn.

☐
1: 5,5-dimetýl-4-própýlhexan-1-ól
2: 1,2-dibrómó-4-etýlcyclóhexan
3: 5-carboxypentan-1,1,1-triflúorat

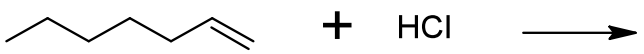
☐
1: 4-tert-bútýlheptan-1-ól
2: 1,2-dibrómó-4-etýlcyclóhexan
3: 5,5,5-triflúrópentansýra

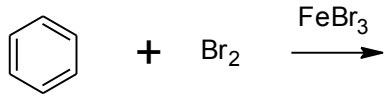
☐
1: 4-tert-bútýlheptan-1-ól
2: 3,4-dibrómó-1-etýlcyclóhexan
3: 5,5,5-triflúrópentansýra

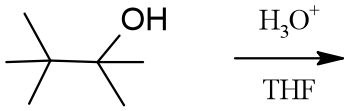
☐
1: 2,2-dimetýl-3-própýlhexan-5-ól
2: 1,2-dibrómó-5-etýlcyclóhexan
3: 5,5,5-triflúrópentansýra

18. dæmi

Klárið eftirfarandi hvörf:







III. hluti - Tíu stiga spurningar

19. dæmi - Varmarýmdir og hljóðhraði

Hljóðbylgjur einkennast af því að sameindir (eða atóm) efnisins rekast á aðrar sameindir og bera þannig orku árekstranna áfram með sér. Þessar hljóðbylgjur geta verið breytilegar eftir bylgjulengd og tíðni. Einnig getur þetta allt gerst með mismunandi hraða eftir því í hvaða fasa efnið er, hversu þétt það er í sér, hver mólmassi þess er og breytingar á hitastigi hafa auðvitað áhrif á árekstur sameindanna.

Hraða þessum má lýsa á einfaldan hátt, $V_s = \lambda \cdot \nu$, þar sem V_s er hljóðhraði bylgjunnar, λ er bylgjulengd hennar og ν tíðnin. Það má einnig lýsa hljóðhraðanum með varmarýmd efnisins. Varmarýmd er sú orka sem þar til að hita tiltekið magn af efni um eina gráðu. Ef við gefum okkur að efnið sé kjörgas fæst að:

$$\gamma = \frac{C_p}{C_v} \qquad \gamma = \frac{V_s^2 \cdot M_W}{R \cdot T} \qquad C_p - C_v = R$$

Hér er γ svokallað varmarýmdarhlufall og einingarlaus stærð, C_p er varmarýmd efnisins við fastan þrýsting og C_v er varmarýmdin við fast rúmmál. M_W er mólmassi efnisins í kg/mól, R er gasfastinn og T er hitastig efnisins í K. Um C_v gildir:

$$C_v = C_v(T) + C_v(R) + C_v(V)$$

þar sem $C_v(T)$ er framlag færslu sameindarinnar til varmarýmdarinnar, $C_v(R)$ er framlag snúnings og $C_v(V)$ er framlag titrings. Eftirfarandi tafla sýnir gildi þessa framlaga:

	Stök atóm	Línuleg sameind	Ólínuleg sameind
$C_v(T)$	$\frac{3}{2}R$	$\frac{3}{2}R$	$\frac{3}{2}R$
$C_v(R)$	0	R	$\frac{3}{2}R$
$C_v(V)$	0	$\theta_{vib} \cdot R$	$\theta_{vib} \cdot R$

Stærðin θ_{vib} er $3N - 5$ fyrir línulegar sameindir en $3N - 6$ fyrir ólínulegar og N tilgreinir fjölda atóma í hverri sameind.

a) Þurrt loft er 78,1% N_2, 20,9% O_2, 0,9% Ar og 0,1% CO_2. Reiknið út hljóðhraða í þurru lofti miðað við að $T = 298K$.

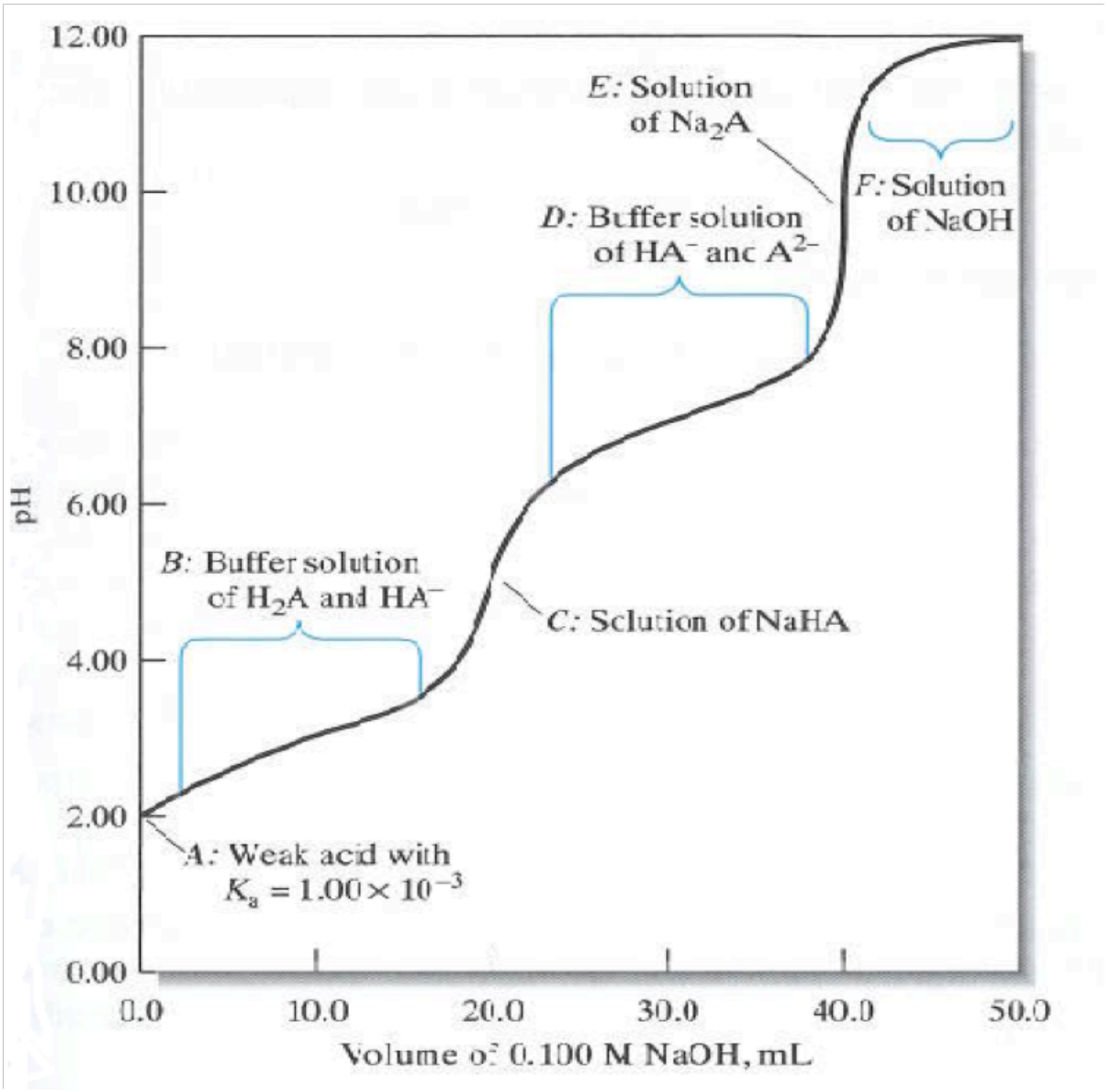
b) Hvernig kemur hljóðhraðinn til með að breytast með hitastigi? Er hljóðhraðinn í gasi meiri en í vökva? En föstu efni? Hvers vegna?

c) Talað mál er að meðaltali með tíðni uppá $125Hz$. Reiknið út bylgjulengd hljóðbylgjunnar miðað við að hljóðhraðinn sé $343\,{}^{m}/_{s}$.

d) Hver er orka rafsegulbylgju með sömu bylgjulengd og hljóðbylgjan úr lið c) og hversu hratt fer hún?

20. dæmi - Títrun fjölprótóna sýru

Efni með tvo eða fleiri sýruvirka hópa knýja fram marga endapunkta við títrun. Með þeirri tækni sem þið ættuð að þekkja er hægt að reikna út pH gildi á mismunandi stöðum títrunarinnar en það gefur oft rangar niðurstöður þegar ákvarða skal pH gildi hjá fjölprótónasýrum. Sem betur fer kemur í ljós að ef hlutfall K_{a1}/K_{a2} er stærra en 10^3 þá eru niðurstöður útreikninga innan leyfilegra skekkjumarka og gefa sem sé nokkuð nákvæmar niðurstöður. Skoðum títrunarferil fyrir tvíprótónasýru H_2A, sjá mynd 1, með klofningsfasta $K_{a1} = 1{,}00 \cdot 10^{-3}$ og $K_{a2} = 1{,}00 \cdot 10^{-7}$.



Mynd 1: Títrun 20 ml af 0,100 M fjölprótónasýru HA með 0,100 M NaOH.

Þar sem hlutfallið K_{a1}/K_{a2} er mun stærra en 10^3 er okkur óhætt að halda áfram og skoða ferilinn nánar. Til að finna hvert pH gildið er í upphafi (punktur A) látum við eins og um einprótónasýru sé að ræða með klofningsfasta $K_{a1} = 1{,}00 \cdot 10^{-3}$. Næst kemur fyrsta buffer (stuðpúða) svæðið (svæði B) sem samanstendur af veiku sýrunni H_2A og samokabasanum NaHA. Á þessu svæði

getum við með góðri nálgun sagt að styrkur A^{2-} skipti engu máli þar sem hann er hverfandi miðað við styrk H_2A og NaHA. Við fyrsta jafnvægispunkt (svæði C) höfum við lausn af salti sýrunnar en nú þurfum við að íhuga það hvernig skal finna pH gildi fyrir salt sem bæði hefur sýru- og basa eiginleika þ.e lausnin gæti verið súr:

$$HA^- + H_2O \rightleftharpoons A^{2-} + H_3O^+$$

eða basísk :

$$HA^- + H_2O \rightleftharpoons H_2A + OH^-$$

Lausn salts sem hefur þessa eiginleika inniheldur í raun fimm efni þ.e H_3O^+, OH^-, H_2A, HA^- og A^{2-}. Við þyrftum því fimm mismunandi jöfnur til þess að ákvarða styrk H_3O^+ jónarinnar og þar með pH lausnarinnar svo út fáist rétt gildi. Þó er hægt með ýmsum krókaleiðum að leysa þessar fimm jöfnur sem ekki verður farið í nánar hér en lausn þeirra er hentug og gefur okkur styrk á H_3O^+ sem er nokkuð nærri lagi:

$$[H_3O^+] = \sqrt{\frac{K_{a2}[\text{NaHA}] + K_w}{1 + [\text{NaHA}]/K_{a1}}}$$

Þessa jöfnu ætti aðeins að nota þegar NaHA er eini þátturinn sem leggur eitthvað að marki til pH lausnarinnar. Eftir fyrsta jafnvægispunkt tekur við næsta buffersvæðið (svæði D) sem samanstendur af veiku sýrunni HA^- og samokabasa hennar Na_2A. Við seinni jafnvægispunkt (svæði E) inniheldur lausnin aðeins A^{2-} og þyrfti hér eingöngu að hugsa um hvarf basans við vatn, athugið sérstaklega að:

$$K_{b1} = \frac{K_w}{K_{a2}} = \frac{[OH^-][HA^-]}{[A^{2-}]}$$

Eftir seinni jafnvægispunkt (svæði F) er OH^- í aðalhlutverki og þarf aðeins að íhuga umfram basann.
ă

Finnið pH gildi á eftirfarandi stöðum þegar títraðir eru 25,00 ml af 0,1000 M fosforsýrling (H_3PO_3) með 0,1000 M NaOH. Leysnijafnvægi fosforsýrlings er:

$$H_3PO_3 + H_2O \rightleftharpoons H_3O^+ + H_2PO_3^- \qquad K_{a1} = 3{,}00 \cdot 10^{-2}$$

$$H_2PO_3^- + H_2O \rightleftharpoons H_3O^+ + HPO_3^{2-} \qquad K_{a2} = 1{,}62 \cdot 10^{-7}$$

a) Hvers vegna er í lagi að reikna pH gildi á títrunarkúrfu þessarar sýru?

b) Hvert er upphafs pH gildið?

c) Fyrsta buffer svæðið, finnið pH gildið eftir títrun með 5 ml af basa.

d) Fyrsti jafnvægispunkturinn, finnið pH gildið eftir títrun með 25 ml af basa.

e) Seinna buffer svæðið, finnið pH gildið eftir títrun með 25,5 ml af basa.

f) Seinni jafnvægispunktur, finnið pH gildið eftir títrun með 50 ml af basa.

g) Eftir seinni jafnvægispunkt, finnið pH gildið eftir títrun með 51 ml af basa.

21. dæmi - Nuclear Magnetic Resonance

NMR greiningar eru ein mikilvægasta og mest notaða aðferð í dag til þess að greina uppbyggingu lífrænna og ólífrænna sameinda. NMR mælir víxlverkun milli kjarna atóma og útvarpsbylgna (rafsegulbylgna) í sterku segulsviði. Flestir kjarnar snúast um eigin möndul, þ.e. þeir hafa kjarnspuna. Í NMR mælingum örvum við kjarna af orkulægra ástandi yfir á orkuhærra ástand og getum mælt svörunina eða orkuupptökuna.

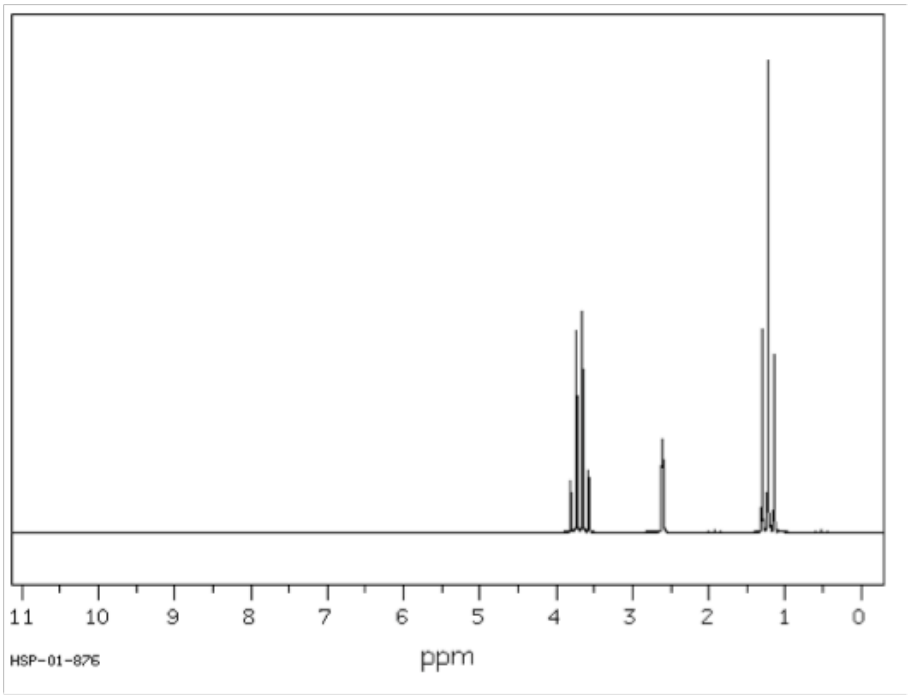
Allir ^{1}H-kjarnar gleypa eða örvast við sömu orku miðað við ákveðið segulsvið og er því hægt að kalla fram svörun frá þeim með því að keyra NMR mælingu miðað við þetta ákveðna segulsvið. Merkin sem fást úr slíkri mælingu eru einungis frá vetnisatómum. Vilji maður fá svörun frá öðrum atómum þarf að keyra mælingu miðað við annað segulsvið (eða tíðni).

Sameindir innihalda ekki aðeins kjarna, þær innihalda einnig rafeindir bæði í tengjum og virkum hópum. Sumir lífrænir hópar eru rafeindaveitandi og aðrir rafeindatogandi. Segulsviðið sem sameindin er stödd í við NMR mælinguna hefur ekki aðeins áhrif á kjarnana heldur einnig áhrif á rafeindirnar í efnasambandinu, þær eru hlaðnar agnir á hreyfingu sem þar að auki eru í sterku segulsviði. Í NMR mælingum gefa agnirnar merki á svokölluðu NMR-rófi. Lega merkjanna, þ.e. hvort þau eru langt til vinstri eða hægri í rófinu, ræðst af kemísku umhverfi kjarnanna.

Eitt af því sem gerir NMR-tæknina að svona öflugu tóli, er að vetnisatómin „sjá hvert annað“ , þ.e.a.s. ef það er eitt vetnisatóm á einu kolefni og eitt á því næsta, kúpla þau saman. Þetta veldur því að hvort vetnisatóm gefur frá sér 2 toppa á NMR-rófi, þ.e.a.s. topparnir í merki atómsins eru einum fleiri en fjöldi „nágranna“ þess. Þetta kallast (n+1)-reglan. Ef tvö vetnisatóm eru jafngild (í sams konar efnafræðilegu umhverfi) leggjast merkin frá þeim saman og flatarmál toppanna eykst.

Merki sem klofna ekki kallast singlet, merki sem klofna í tvennt doublet, í þrennt triplet, fernt quartet o.s.frv. Flatarmál undir merki fæst með heildun yfir toppana og er í réttu hlutfalli við fjölda H-atóma sem gefa merkin.

Eftirfarandi mynd er róf sem fékkst úr ^{1}H-NMR, mælingu. Aðrar mæliaðferðir gáfu til kynna að efnið sem spurt er um innihéldi kolefni, vetni og súrefni. Auk þess gaf massagreining á efninu að mólmassi þess væri 46 $^{g}/_{mól}$.



	Hliðrun (ppm)	Heildi
Quartet	3,69	2
Singlet	2,61	1
Triplet	1,23	3

Hvert er efnið? Færið rök fyrir niðurstöðum ykkar. Gefið til kynna hvaða vetnisatóm gefa hvaða merki á rófinu.