

8. Landskeppnin í efnafræði Úrslitakeppni - fræðilegur hluti

28. mars 2009, kl. 10:00-13:00.

Eftirtalin fyrirtæki styrkja keppnina

Sparisjóður Reykjavíkur og nágrennis
Actavis hf.
Ensímtækni ehf.

Almennar leiðbeiningar

1. Opnið ekki verkefnaheftin fyrir en ykkur er sagt að gera það.
2. Verkefnin eru alls átta og eru á tíu tölusettum blaðsíðum, auk forsíðu og formúlu-
blaðs. Athugið að svo sé.
3. Einu leyfilegu hjálpargögnin eru óforritanlegar reiknivélar auk lotukerfis og formúlu-
blaðs 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	$= -\log [\text{H}_3\text{O}^+]$
ΔG°	$= -nFE^\circ$	pK_a	$= -\log K_a$
E	$= E^\circ - \frac{RT}{nF} \ln Q$	$[\text{H}_3\text{O}^+]$	$= \frac{K_a}{2} \left(-1 + \sqrt{1 + \frac{4C_{\text{HA}}}{K_a}} \right)$
k	$= A e^{-\frac{E_a}{RT}}$	pH	$= pK_a + \log \frac{[\text{A}^-]}{[\text{HA}]}$
E	$= h\nu$	E	$= \frac{hc}{\lambda}$
N_A	$= 6,0223 \times 10^{23} \text{ mól}^{-1}$	1 bar	$= 0,9869 \text{ atm}$
R	$= 8,31451 \text{ J}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{mól}^{-1}$	1 atm	$= 760 \text{ torr}$
	$= 0,08206 \text{ L}\cdot\text{atm}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{mól}^{-1}$	K_w	$= 1,00 \times 10^{-14}$
F	$= 96485 \text{ J}\cdot\text{V}^{-1}\cdot\text{mól}^{-1}$	1 kal	$= 4,186 \text{ J}$
e	$= 1,602 \times 10^{-19} \text{ C}$	$u \text{ (amu)}$	$= 1,661 \times 10^{-27} \text{ kg}$
h	$= 6,626 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$	m_p	$= 1,673 \times 10^{-27} \text{ kg}$
c	$= 2,998 \times 10^8 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$	m_e	$= 9,109 \times 10^{-31} \text{ kg}$

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 Aluminium 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 Niobium 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 Cesium 132.90545	56 Ba Barium 137.327	57 La Lanthanum 138.9055	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)	89 Ac Actinium (227)	104 Rf Rutherfordium (261)	105 Db Dubnium (262)	106 Sg Seaborgium (263)	107 Bh Bohrium (264)	108 Hs Hassium (265)	109 Mt Meitnerium (266)	110 (269)	111 (272)	112 (277)	113	114				

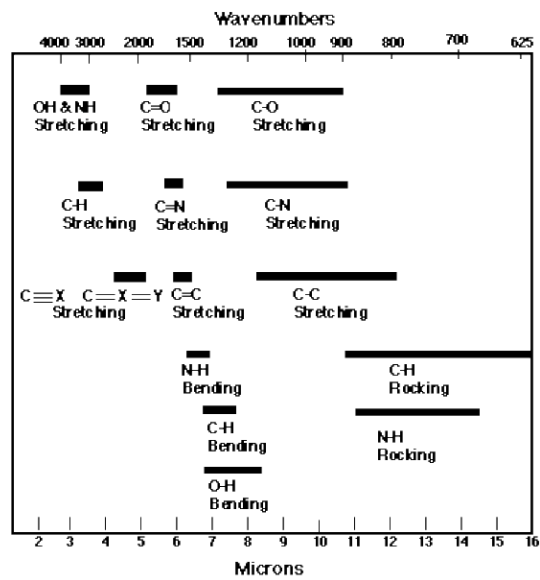
58 Ce Cerium 140.116	59 Pr Praseodymium 140.90765	60 Nd Neodymium 144.24	61 Pm Promethium (145)	62 Sm Samarium 150.36	63 Eu Europium 151.964	64 Gd Gadolinium 157.25	65 Tb Terbium 158.92534	66 Dy Dysprosium 162.50	67 Ho Holmium 164.93032	68 Er Erbium 167.26	69 Tm Thulium 168.93421	70 Yb Ytterbium 173.04	71 Lu Lutetium 174.967
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)	103 Lr Lawrencium (262)

1. dæmi (skylda)

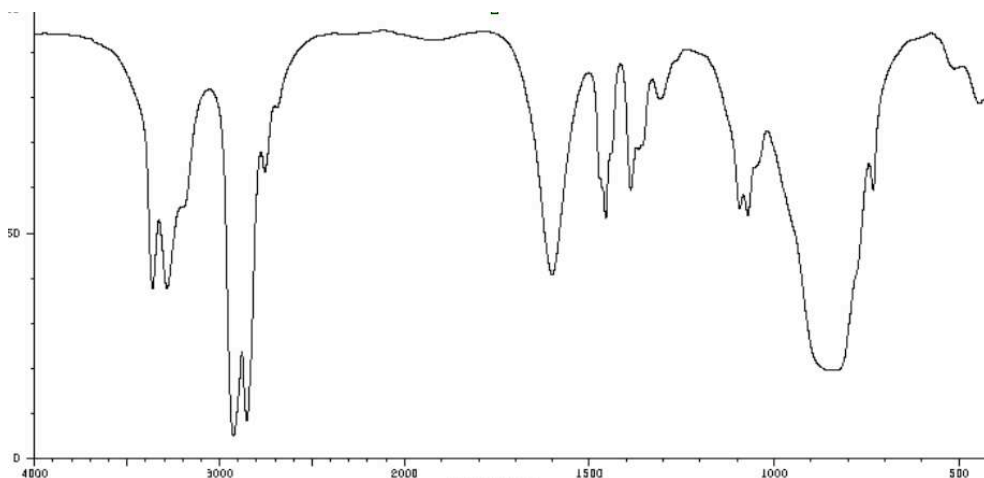
Lífrænu sameindirnar pútresín og kadaverín eru hvort tveggja mjög illa lyktandi og eitruaðar. Þessi efni myndast við rotnun holds og eru hluti af því sem kallað er nálykt.

- (i) Þegar pútresín er frumefnagreint kemur í ljós að það inniheldur 54,5% C, 13,6% H og 31,8% N (massahlutföll). Ákvarðið reynsluformúlu pútresíns.
- (ii) Kadaverín hefur svipaða samsetningu, massahlutföll þess eru 58,8% C, 13,7% H og 27,5% N. Ákvarðið reynsluformúlu kadaveríns.

Greining á hreyfingum sameinda á innrauða sviðinu (IR-róf) getur gefið upplýsingar um helstu virkniþópa þeirra, svo sem C=C tvítengi, benzenhringi, N-H tengi og svo framvegis. Staðsetning nokkurra slíkra hópa eftir bylgjutölum (*e.* wavenumber) sést á myndinni hér að neðan.

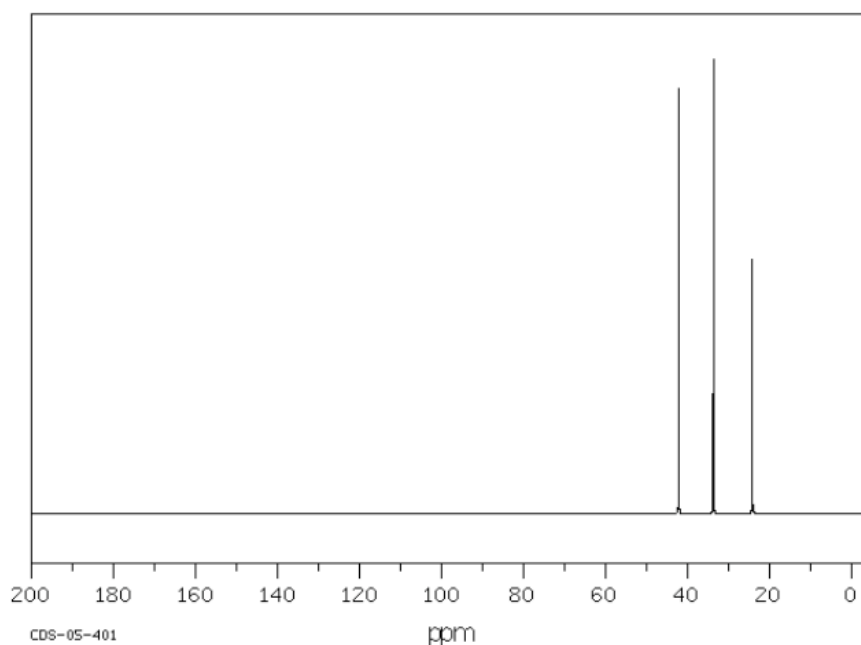


- (iii) Hér fyrir neðan er IR-róf af kadaveríni. Merkin sem við leitum að eru „dalirnir í landslaginu“. Hvaða virkniþópa má greina í sameindinni?



^{13}C kjarnspunaróf (NMR) eru notuð til að greina mismunandi umhverfi kolefnisatóma í sameindum. Því nær sem þau eru rafeindasæknum hópum (t.d. O, N eða halógenum) færast toppar þeirra lengra til vinstri á rófinu. Einnig segir heildarflatarmálið undir toppnum til um hlutfallslega hversu mörg kolefnisatóm eru í eins umhverfi. Ef flatarmál eins topps er þrefalt flatarmál annars, hljóta því að vera þrefalt fleiri kolefnisatóm í umhverfinu sem fyrrnefndi toppurinn táknar.

- (iv) Þegar ^{13}C NMR-róf er tekið af kadaveríni sjást þrjár toppar með staðsetningu og flatarmál eins og sést hér að neðan.



Hliðrun (ppm)	Hlutfallslegt flatarmál
42,14	2
33,69	2
24,20	1

Finnið mögulega byggingu kadaveríns ef gefið er að mólmassi þess sé 102 g/mól.

- (v) ^{13}C NMR-róf af pútresíni hefur tvo jafnstóra toppa. Finnið mögulega byggingu sameindarinnar.

2. dæmi (skylda)

Dæmigerður fjölskyldubíll er fjögurra strokka með heildarvélarrúmmál 1600 cm³ og eyðir 7,0 L fyrir hverja 100 km sem hann ekur á hraðanum 90 km/klst. Á hverri sekúndu gengur hver strokkur 25 umferðir og brennir 0,4 g af eldsneyti. Gerið ráð fyrir að eldsneytið sé 2,2,4-trímetýlpentan, C₈H₁₈ og að þjöppunarhlutfall hvers strokks sé 1:8.

- (i) Reiknið loftmagnið sem vélin tekur inn. Eldsneytis- og loftblandan fara inn í strokkinn þegar rúmmál hans er stærst og hafa þar þrýstinginn 101,0 kPa við hitastigið 100 °C. Gerið ráð fyrir að andrúmsloftið sé 21% súrefni og 79% nitur. Gerið einnig ráð fyrir að bruni kolefnisins í eldsneytinu sé fullkominn og að niturgasið hvarfist ekki.
- (ii) Eldsneytis- og loftblöndunni er þjappað þar til rúmmál strokksins er orðið jafnlítið og hægt er og svo er kveikt í henni. Reiknið samsetningu (rúmmálshlutföll) og hitastig afgassins strax eftir sprenginguna (þ.e. áður en gasið byrjar að þenjast út). Notið eftirfarandi gögn:

Efni	$\Delta_f H$ (kJ/mól)	C_p (J/mól K)
O ₂ (g)	0,0	29,36
N ₂ (g)	0,0	29,13
CO(g)	-110,53	29,14
CO ₂ (g)	-395,51	37,11
H ₂ O(g)	-241,82	33,58
2,2,4-trímetýlpentan	-187,82	

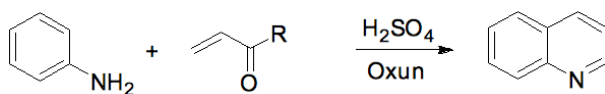
Ábending: Sambandið milli hvarfavarma og hitastigsbreytingar er:

$$\Delta H = \sum_{i=1}^N C_{p,i} n_i (T_2 - T_1)$$

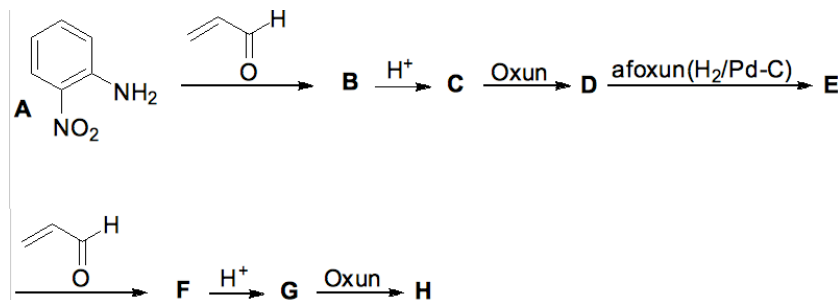
- (iii) Reiknið lokahitastig útblástursins að því gefnu að strokkurinn hafi náð hámarksrúmmáli áður en hann tæmist og að þrýstingurinn í honum sé 200 kPa. Miðið við að upphafshitastigið sé 2000 °C ef ekki tókst að reikna lokahitastigið í lið (ii).

3. dæmi (skylda)

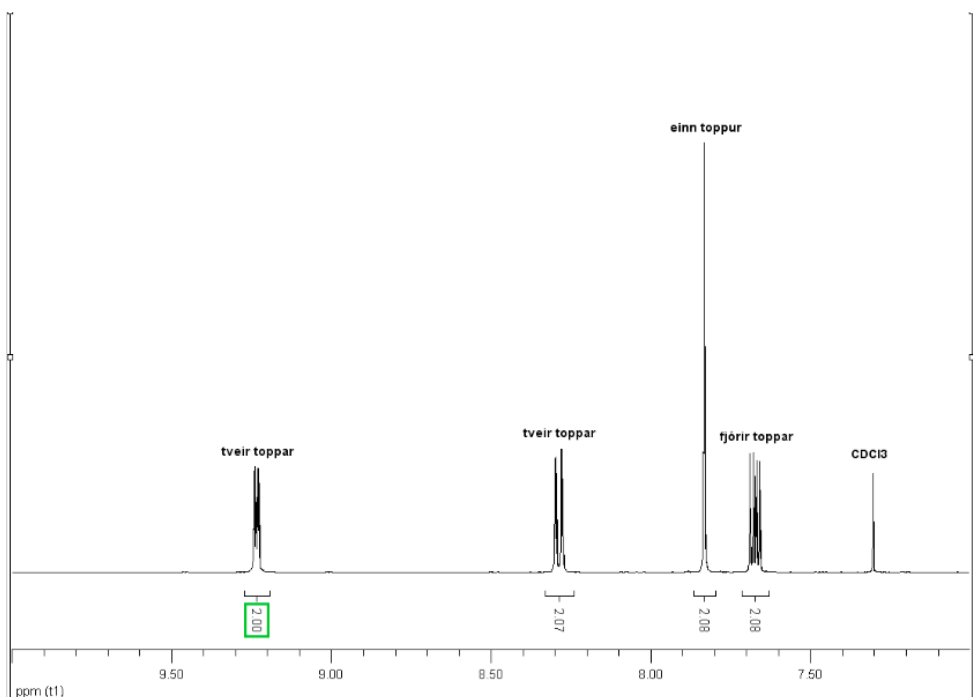
Skraup efnasmíði, kennd við tékkneska efnafræðinginn Zdenko Hans Skraup, er þekkt hvarf til að smíða quinólín



Ef 2-nítróanilín **A** er hvarfað við eftirfarandi aðstæður myndast efni **H**.



H hefur sameindaformúluna $C_{12}H_8N_2$ og hér að neðan má sjá 1H NMR-róf af efninu, sem tekið var í $CDCl_3$:



1H NMR er tækni sem greinir nánasta umhverfi róteinda (vetniskjarna) í sameindum. Auk þess að merki róteindar sýni mismunandi hliðrunargildi (ppm) eftir nánasta umhverfi hennar, skiptist merkið einnig upp eftir því hve margar aðrar róteindir eru á þeim kolefnisatómum sem tengjast því kolefni sem róteindin sjálf er tengd. Þessi uppskipting er kölluð kúplun og fjöldi hluttoppa er gefinn með $n + 1$ þar sem n er fjöldi nálægra róteinda. Róteindir sem skynja sama umhverfi kúpla ekki hver við aðra. Samanburður á flatarmálinu undir toppunum sýnir hlutfallslegan fjölda róteinda á bak við hvern topp.

Sýnið byggingar efnanna **B-H**.

4. dæmi (skylda)

Rafgreining áls er umfangsmikill iðnaður á Íslandi. Hún felst í að súrál (Al_2O_3) er tekið og afoxað þannig að útkoman verði fljótandi ál. Til þess að auðvelda þetta ferli er súrálið leyst upp í fljótandi krýólíti (Na_3AlF_6) þar sem það bráðnar við tæpar 900°C en súrálið þyrfti annars tæpar 2000°C til þess að bráðna. Ofan í þetta fljótandi krýólít eru sett grafitrafskaut (hreint kolefni) sem oxast að fullu í rafgreiningarferlinu.

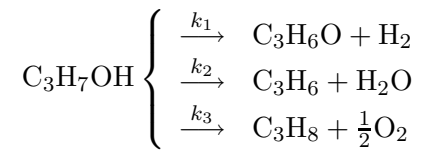
- (i) Setjið upp stillta efnajöfnu fyrir rafgreiningu áls. Sýnið oxunarástönd þeirra frumefna sem oxast eða afoxast.
- (ii) Reiknið út hversu mikið af áli er hægt að framleiða úr 3 tonnnum af súráli og hversu mörg mól af rafeindum þarf til að afoxa allt þetta súrál.

Meðal þekktustu efnahvarfa áls er svokallaðað þermíthvarf, sem m.a. er notað við járnsuðu. Þermít er í raun blanda málmoxíðs og áls og það sem drífur hvarfið áfram er sækni álsins í súrefni, þ.e. hversu auðveldlega það oxast. Venjulega er járn(III)oxíð notað sem oxari. Þessi blanda hvarfast mjög kröftuglega og myndefnin eru fljótandi járn og súrál.

- (iii) Setjið upp stillta efnajöfnu fyrir þermíthvarfið eins og því er lýst hér að ofan. Sýnið oxunarástönd þeirra frumefna sem oxast eða afoxast.
- (iv) Í nýlegum þætti af MythBusters var notað óhóflegt magn af þermíti, alls 500 kg. Reiknið út hversu mikið þarf af áldufti og járn(III)oxíði til þess að búa til 500 kg af þermítblöndu.

5. dæmi (val)

Sundrun ísóprópanóls, sem er fyrsta stigs hvarf, er hvötuð af V_2O_5 hvata og getur farið eftir þremur mismunandi hvarfleiðum.



Mælingar voru gerðar á hvarfinu við 590 K og 5 sekúndum eftir að hvarfið hófst voru eftirfarandi styrkir mældir:

$$\begin{aligned} c_{C_3H_7OH} &= 28,2 \text{ mmól/L} & c_{C_3H_6O} &= 7,8 \text{ mmól/L} \\ c_{C_3H_6} &= 8,3 \text{ mmól/L} & c_{C_3H_8} &= 1,8 \text{ mmól/L} \end{aligned}$$

- (i) Reiknið upphafsstyrk ísóprópanóls, c_0 .
- (ii) Reiknið gildi hraðafastanna þriggja, k_1 , k_2 , k_3 og heildarhraðafastans, k .
- (iii) Reiknið helmingunartíma hvarfsins, $t_{1/2}$, þ.e. tímann sem það tekur fyrir styrk ísóprópanóls að falla niður í $c = c_0/2$.
- (iv) Heildað hraðalögmál fyrsta stigs efnahvarfs er:

$$c = c_0 e^{-kt}$$

Reiknið styrki myndefnanna þriggja við tímann $t_{1/2}$.

6. dæmi (val)

Málmur geta tengst öðrum efnum með svokölluðum komplextengjum, sem myndast milli málmjónar og svokallaðs tengils. Þessir tenglar eru venjulega Lewis basar eins og t.d. NH_3 , þar sem staka rafeindaparið getur tengst málmjón í miðju.

- (i) Dæmi um komplex er $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]^{3+}$, hexaammínkóbalt(III). (Athugið að hér er hornklofinn ekki tákn um styrk, heldur er þetta tákn um að öll romsan innan hans er eitt komplexefni.) Teiknið upp líklega byggingarmynd þess.

Hversu oft tengill getur tengst við málmjónina fer eftir því hversu tenntur tengillinn er. Til dæmis er NH_3 eintenntur tengill þar sem það hefur bara eitt laust rafeindapar, oxalatjónin ($\text{C}_2\text{O}_4^{2-}$) er hinsvegar tvítennt þar sem báðir sýruhóparnir geta tengst málmjóninni.

- (ii) Hvernig eru kolmónoxíð og etýlendíamín tetraedíksýra (EDTA) tennt? Athugið að EDTA er í raun fjörgild sýra en hér er spurt um fjörgilda anjón hennar.

- (iii) En hvernig er þá etýlendíamín tennt?

Komplexar geta haft ísómerur og getur efnafræði þeirra verið mjög ólík, líkt og á við um venjulega lífræna efnafræði. Frægt dæmi er krabbameinslyfið *cis*-platín, $\text{cis-Pt}(\text{NH}_3)_2\text{Cl}_2$ en það hefur aðra ísómeru, *trans*- $\text{Pt}(\text{NH}_3)_2\text{Cl}_2$.

- (iv) Teiknið báðar ísómerurnar upp. Athugið að komplexar geta einnig verið hendnir!

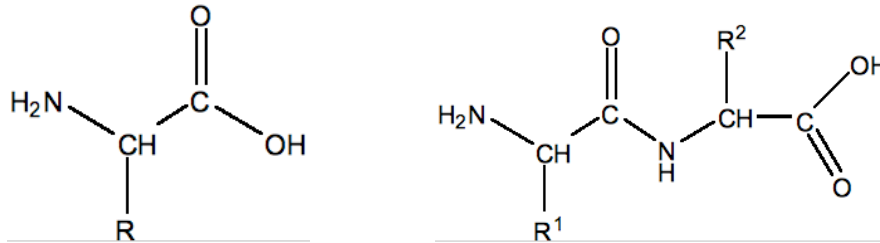
Kristalsviðsfræði er kenning sem lýsir tengslum litar og efna hliðarmálma. Í grófum dráttum segir hún að orkumunurinn milli *d*-svigrúma efnis fari eftir tenglinum sem tengdur er við efnið. Þessi orkumunur er þá sama orka og rafeind þarf til að geta færst á milli *d*-svigrúma. Af því að þessi orkumunur svarar venjulega til ljóseinda á sýnilega sviðinu endurspeglar litur efnisins hann.

- (v) Hugsum okkur að við höfum 0,1 M lausn af $[\text{CoCl}_4]^{2-}$. Hvaða áhrif hefur það á bylgjulengd ljóssins (og þar með lit lausnarinnar) ef að við aukum styrk lausnarinnar? En ef við skiptum um tenglana?

- (vi) Hvaða áhrif hefur það á ljósgeypanna að auka styrk lausnarinnar?

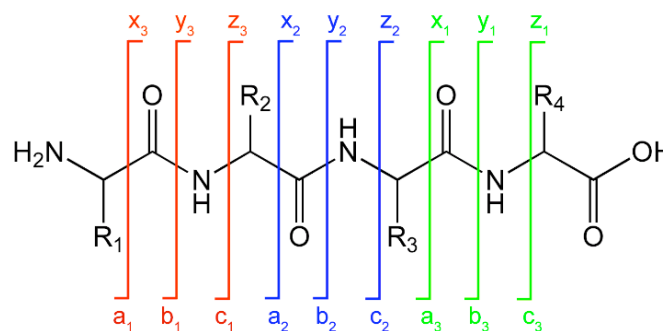
7. dæmi (val)

Aminósýrur eru byggingareiningar prótína og peptíða. Þær eru 20 talsins og tengjast með svokölluðum peptíðtengjum, sem myndast í þéttingarhvarfi milli tveggja aminósýra. Grunnbygging aminósýra er sýnd vinstra megin hér að neðan og einfalt tvípeptíð hægra megin.

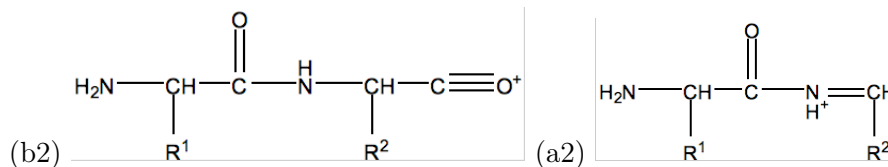


- (i) Sýnið hvarfgang fyrir myndun peptíðtengis. Útskýrið hvers vegna amíð eru jafnstöðug og raun ber vitni.

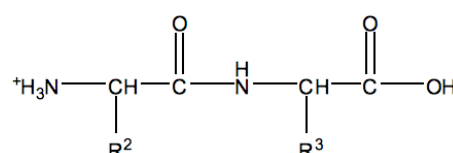
Massagreining á niðurbroti peptíða (MS/MS) er mjög hentug aðferð til að raðgreina peptíð, þ.e. ákvarða röð aminósýranna í peptíðinu. Fyrir hvert tengi sem rofnar fæst jákvætt hlaðið brot með ákveðinn massa. Hvert brot fær bókstaf og númer eftir því hvaða tengi rofnaði og hvar í peptíðinu það er. Sjá myndina af fjórpeptíðinu hér fyrir neðan.



Bókstafirnir a, b, c, x, y, z eru einungis notaðir fyrir rof á því tengi sem merkt er hér inn á og til að skilgreina hvorum hluta peptíðsins brotið tilheyrir. Tölustafirnir tákna hve margar aminósýrur eru að enda peptíðsins í hvora átt fyrir sig. Skoðið til útskýringar brotin b2 og a2 hér að neðan.



Brotið y2 er talið frá hinum endanum og hefur eftirfarandi byggingu:



Peptíðið sekretín er línulegt hormón, samsett úr 27 amínósýrum og hefur mólmassa 3055 g/mól. Það inniheldur eftirfarandi amínósýrur:

Nafn	Mólmassi (g/mól)
histidín	155,15
serín	105,09
aspartíksýra	133,10
glýsín	75,07
þreónín	119,12
fenýlalanín	165,19
glútamat	147,13
levsín	131,17
arginín	174,20
alanín	89,09
glútamín	146,14

Ef sekretín er mælt í massagreini með MS/MS tækni má raðgreina það út frá þeim massatoppum sem þar mælast. Inni í miðju peptíðinu er níu amínósýra röð sem inniheldur aðeins fimm af amínósýrunum ellefu hér að ofan. Í töflunni hér að neðan eru massar brotanna sem gætu komið á massarófi fyrir þessa miðju peptíðsins gefnir upp.

Númer	Mólmassi (g/mól)
b10	1075
a11	1134
y10	1197
a12	1290
a13	1403
b14	1431
a15	1559
b15	1587
y14	1625
b16	1702
y13	1739
a17	1761
b17	1861
b18	2017
a19	2102
b19	2130

- (ii) Hvaða fimm amínósýrur eru í þessum níu amínósýra peptíðbút?
- (iii) Hver er röð þeirra innan bútsins?

8. dæmi (val)

Ein allra mikilvægasta undirgrein eðlisfræði og efnafræði er skammtafræðin, sem nær að varpa ljósi á ýmis áður óskilin fyrirbæri. Ein slík hagnýting skammtafræðinnar er að reikna út og spá fyrir um hvernig litróf einstakra efna ættu að vera.

Flestar aðferðirnar sem notaðar eru til þessa byggja á tölulegum lausnum á tímaóháðu Schrödingerjöfnunni

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi}{dx^2} + V(x)\Psi(x) = E\Psi(x)$$

þar sem $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ er minnkaði Plancksfastinn, $\Psi(x)$ er svokallað bylgjufall agnarinnar, m er massi, $V(x)$ er mættisfall sem lýsir umhverfi hennar og E er orka hennar.

Þessi diffurjafna er of flókin til að hægt sé að leysa hana almennt en til eru ófáar aðferðir til þess að leysa hana tölulega fyrir sameindir, þar sem ekki er til aðferð til þess að leysa hana algebraískt. Oft má einnig einfalda dæmið.

Eitt fyrstu dæmanna sem nemendur í skammtafræði læra um er hin víðfræga ögn í kassa. Þessi kassi er í raun bara eftirfarandi skilgreining á stöðuorku agnarinnar:

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{ef } x \leq 0 \\ 0 & \text{ef } 0 < x < L \\ \infty & \text{ef } x \geq L \end{cases}$$

Þetta lítur í fljótu bragði ekki út fyrir að vera neitt sérstaklega nytsamlegur kassi. Það er hinsvegar hægt að horfa á hann með það í huga að rafeindir eru oft bundnar fast við sameindir og þurfa ótrúlega mikla orku til þess að sleppa alveg frá sameindinni. Þannig að ögn í kassa getur lýst sameindum og rafeindum þeirra.

Þökk sé kassanum er hægt að finna lausn á Schrödingerjöfnunni:

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$

Auk bylgjufallanna fæst að orka n . þreps er

$$E_n = \frac{n^2 \hbar^2 \pi^2}{2mL^2}$$

þar sem n er jákvæð heiltala.

- (i) Lýsum nú sameindinni bútadíen sem ögn í kassa. Reiknið orkuna sem þarf til þess að færa rafeind úr $n = 2$ yfir í $n = 3$.

Athugið að hér nægir að hugsa um π rafeindirnar en hafið í huga að þær hafa spuna, ýmist upp eða niður. Tengjalengd C=C er $1,35 \cdot 10^{-10}$ m og C-C tengi er $1,54 \cdot 10^{-10}$ m. Gera má ráð fyrir að sameindin sé línuleg.

Þegar orkumunurinn milli þrepanna er þekktur má reikna út við hvaða bylgjulengd bútadíen gleypir ljós, samkvæmt jöfnunni

$$\lambda = \frac{h \cdot c}{E}$$

þar sem h er Plancksfastinn, c ljóshraðinn og E er orkumunurinn sem um ræðir.

- (ii) Reiknið bylgjulengd ljóssins sem getur örvað rafeind í $n = 2$ yfir í $n = 3$.

Mælt gildi á bylgjulengdinni sem þarf er 220,8 nm.