Efnafræðifélag Íslands **Félag raungreinakennara**

18. Landskeppnin í efnafræði
Úrslitakeppni - fræðilegur hluti

23. mars 2019

kl. 14:45-18:00 (17:30-20:45)

Almennar leiðbeiningar

- Ekki opna verkefnaheftið fyrr en þú hefur fengið merki.
- **Lestur prófs**: Þú hefur 15 mínútur til að lesa þetta hefti áður en þú byrjar að vinna. Ekki skrifa eða reikna á þessum tíma. Merki verður gefið þegar 15 mínútna lestrartíma er lokið. Þá hefur þú 3 klst til að ljúka verkefninu.
- **Dæmin eru alls sjö og vega þau öll jafnt, en sex dæmi gilda. Dæmi 1-4 eru skyldudæmi en valin verða til stiga þau tvö dæmi sem eru best leyst af dæmum 5-7 (val)**. Þú mátt semsagt sleppa að leysa eitt af dæmum 5-7 ef þú kýst svo.
- Verkefnið er á 9 tölusettum blaðsíðum, auk forsíðu og formúlublaðs. Athugaðu að svo sé.
- Einu leyfilegu hjálpargögnin eru óforritanlegar reiknivélar auk lotukerfis og formúlublaðs sem verkefninu fylgja.
- Verkefnunum skal svarað í prófbók, ekki í verkefnaheftið. Merktu prófbækurnar með fullu nafni og kennitölu. Dugi ein bók ekki má biðja um aðra slíka. Ekki verður farið yfir rissblöð.
- 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.
- Gangi þér vel og góða skemmtun

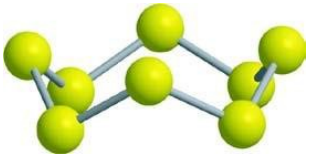
Helstu formúlur og fastar

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 72,59	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 (210)	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 (147)	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)



Brennisteinn er eitt algengasta frumefni jarðar. Hreinn brennisteinn er gulur að lit og er nánast lyktarlaus en efnasambönd brennisteins hafa oft mjög sterka lykt sem minnir helst á prump eða úldin egg. Sameindabygging hreins brennisteins er hringlaga. Stöðugasti hringurinn inniheldur 8 atóm og er táknaður S_8. Fundist hafa hringir allt frá S_3 upp í S_{12} í breinnisteini á gasfasa og þeir eru þar í efnajafnvægi. Efnajafnvægið milli $S_7(g)$ og $S_8(g)$ er eftirfarandi:

$$8\,S_7(g) \rightleftharpoons 7\,S_8(g) \qquad (1)$$

Tengjaorka í S-S tengi er 260,0 kJ/mól í S_7 og 263,3 kJ/mól í S_8.

a) Reiknaðu vermibreytingu fyrir efnahvarf (1)

Þegar brennisteinn er leystur upp í lífrænum leysi myndast þrjár stærðir af hringjum, S_6, S_7 og S_8 og eru þeir allir í jafnvægi í lausninni. Hlutfall hvers hrings í lausninni er eins og hér segir

Stærð hrings	massa%
S_6	0,32
S_7	0,76
S_8	98,92

b) Nú er 1,00 g af brennisteini leyst upp í lífrænum leysi svo að lausnin verður 1,00 L. Reiknaðu mólfjölda S_7 og S_8 í þessari lausn við jafnvægi.

c) Skrifaðu framsetningu á jafnvægisfastanum fyrir efnajöfnu (1).

d) Reiknaðu gildi jafnvægisfastans fyrir efnajöfnu (1).

Á föstu formi kristallast S_8 á tvo vegu; orthorombískt og monoklínískt. Vermibreytingin við bruna þessara tveggja formgerða við 298 K eru

$$\Delta H_{bruni}(S_8, \text{orthorombískt}) = -296{,}8 \text{ kJ/mól}$$
$$\Delta H_{bruni}(S_8, \text{monoklínískt}) = -297{,}1 \text{ kJ/mól}$$

e) Reiknaðu vermibreytingu eftirfarandi efnahvarfs við 298 K

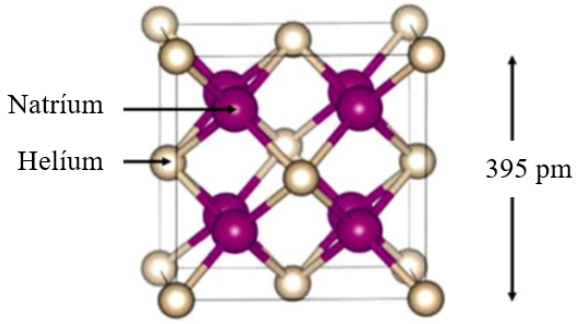
$$S_8(s,\ \textit{orthorombískt}) \rightarrow S_8(s,\ \textit{monoklínískt})$$

2. dæmi (skylda)

Frumefnið helíum uppgötvaðist við almyrkva á sólu þann 18. ágúst 1868. Efnið er gjarnan notað til að blása upp blöðrur en er þó mest notað sem kæliefni við rannsóknir, t.d. við segulómun.

Talið er að helíum sé almennt óhvarfgjarnt vegna þess hve stöðug rafeindaskipan þess er, en við mjög háan þrýsting (300 GPa) getur helíum þó myndað efnasamband með natríum (efnasamband *X*). Við lægri þrýsting brotnar *X* niður í helíum og natríum. Bygging *X* var ákvörðuð með röntgenkristalgreiningu sem sýnir hvernig atómin raðast upp í einingarsellu efnasambandsins. Einingarsella er grunneining kristalbyggingarinnar, þ.e. kristallinn er þrívíð endurtekning á einingarsellunni.

Einingarsella *X* er sýnd á mynd 1. Helíumatómin eru staðsett í hornum sellunnar og í miðju hverrar hliðar. Natríumatómin liggja inni í sellunni, í hornum tenings eins og sést á myndinni. Sum atómin liggja alveg innan einingarsellunnar, en þau atóm sem eru staðsett á hornum, köntum eða á hliðum eru aðeins að hluta til inni í einingarsellunni.



Mynd 1. Einingarsella efnasambands *X*. Sellan er teningslaga.

a) Reiknaðu fjölda natríumatóma og helíumatóma sem eru innan í einingarsellunni

b) Hver er efnaformúla *X*?

c) Útreiningar á eiginleikum *X* hafa sýnt fram á að natríumatómin eru til staðar sem natríumjónir (Na^+). Gildisrafeindir natríumatómanna hafa myndað rafeindapör sem eru staðbundnar á ákveðnum stöðum kristalgrindarinnar. Veldu einn eða fleiri eiginleika hér að neðan sem lýsa efnasambandi X.

- ☐ málmur
- ☐ samgildur kristall
- ☐ jónaefni
- ☐ leiðari
- ☐ einangrari

d) Reiknaðu eðlismassa *X* út frá fjölda helíum- og natríumatóma í hverri einingarsellu og hliðarlengd einingarsellunnar. Svaraðu með einingunni g/cm^3.

3. dæmi (skylda)

Vonir eru bundnar við að vetni (H_2) geti leyst jarðeldsneyti af hólmi sem orkugjafi, en jarðeldsneyti losar koltvíoxíð við bruna og eykur þannig á hnattræna hlýnun jarðar meðan bruni á vetni myndar einungis vatn.

Helsti vandinn við notkun vetnis er hversu erfitt er að geyma það í miklu magni, enda er vetni á gasformi við herbergishita og inniheldur því mjög litla orku í hverri rúmmálseiningu. Ýmsar aðferðir til að binda vetni hafa verið þróaðar, en rannsóknum á þessu sviði er langt í frá lokið.

H_2 geymt á gasformi

Vetni á gasformi er geymt í gaskút við háan þrýsting og herbergishita.

a) Hver er eðlismassi vetnisgass sem er geymt við 500 atm þrýsting og 293 K?

H_2 geymt á vökvaformi

Þegar vetni er geymt á vökvaformi er köldum vökvanum komið fyrir í hitaeinangrandi íláti við 1 atm. Ef vetnið á að haldast á vökvaformi þarf hitastig þess að vera mjög lágt því suðumark H_2 við 1 atm er $T_v = -252{,}78°C$.

b) Bræðslumark H_2 við 1 atm er $T_m = -259{,}2°C$ og markpunktur (krítískur punktur) H_2 er við $P_c = 13{,}0$ atm og $T_c = -240{,}01°C$. Við hvaða hitastig má finna vetni á vökvaformi?

- ☐ 16 K
- ☐ 25 K
- ☐ 77 K
- ☐ 293 K

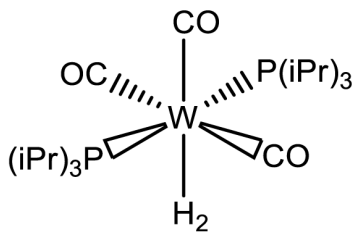
Ef vitað er suðumark efnis við ákveðinn þrýsting og uppgufunarvarmi efnisins (ΔH_{vap}), má reikna suðumark efnisins við annan þrýsting með því að nota jöfnu Clausius-Clapeyron:

$$\ln\left(\frac{P_2}{P_1}\right) = \frac{\Delta H_{vap}}{R}\left(\frac{1}{T_{v1}} - \frac{1}{T_{v2}}\right)$$

c) Notaðu jöfnu Clausius-Clapeyron til að reikna hversu mikinn þrýsting þarf til að þétta H_2 við 27,15 K. Uppgufunarvarmi vetnis er $\Delta H_{vap} = 897{,}38$ J/mól.

H_2 geymt í flóka

Árið 1984 tókst G. J. Kubas að smíða og greina tungsten flóka (complex) sem inniheldur H_2 sem tengihóp (mynd 1).



Mynd 1: $[W(CO)_3(P(iPr)_3)_2(\eta^2-H_2)]$

(iPr) = iso-propyl (C_3H_7). Táknið η^2 merkir *hvernig* H_2 tengist flókanum.

H_2 losnar auðveldlega af flókanum við lágan þrýsting og þá kallast flókinn *afvetnaður* en vetnið sest aftur á flókann í viðurvist vetnisgass. Þannig er hægt að geyma vetni á flókanum og losa það af eftir hentugleika.

d) Hversu mikinn massa þarf af afvetnuðum flóka til að geyma 1,0 kg af H_2?

4. dæmi (skylda)

Samsetning málmgrýtis er oft gefin eingöngu út frá oxíð innihaldi þess. Til dæmis inniheldur málmgrýti eitt 45,6% Cr_2O_3, 16,12% MgO og 7,98% Fe_2O_3. Í raun samanstendur málmgrýtið af $Fe(CrO_2)_2$, $Mg(CrO_2)_2$, $MgCO_3$ og $CaSiO_3$.

a) Reiknaðu massasamsetningu málmgrýtisins, þ.e. reiknaðu massaprósentu $Fe(CrO_2)_2$, $Mg(CrO_2)_2$, $MgCO_3$ og $CaSiO_3$. *Ath*, málmgrýtið inniheldur ekki önnur efni.

b) Efnaformúla málmgrýtisins er $xFe(CrO_2)_2 \cdot yMg(CrO_2)_2 \cdot zMgCO_3 \cdot dCaSiO_3$, þar sem x, y, z og d eru heilar tölur. Ákvarðaðu gildin á x, y, z og d.

c) Sýni af málmgrýtinu var meðhöndlað með HCl(*aq*). Aðeins þau efnasambönd sem innihalda **ekki** Cr hvarfast við HCl. Skrifaðu efnajöfnur og nettó jónajöfnur fyrir hvörf þessara efnasambanda við HCl.

Fe^{3+} og SCN^- bindast í vatnslausn og mynda litaðan flóka (complex), $[FeSCN]^{2+}$

$$Fe^{3+} + SCN^- \rightarrow [FeSCN]^{2+}$$

Mæla má styrk á lituðu efni í lausn með ljósgleypnimælingu. Gleypni efnis, A, er línulega háð styrk efnisins í lausn og er gefin með

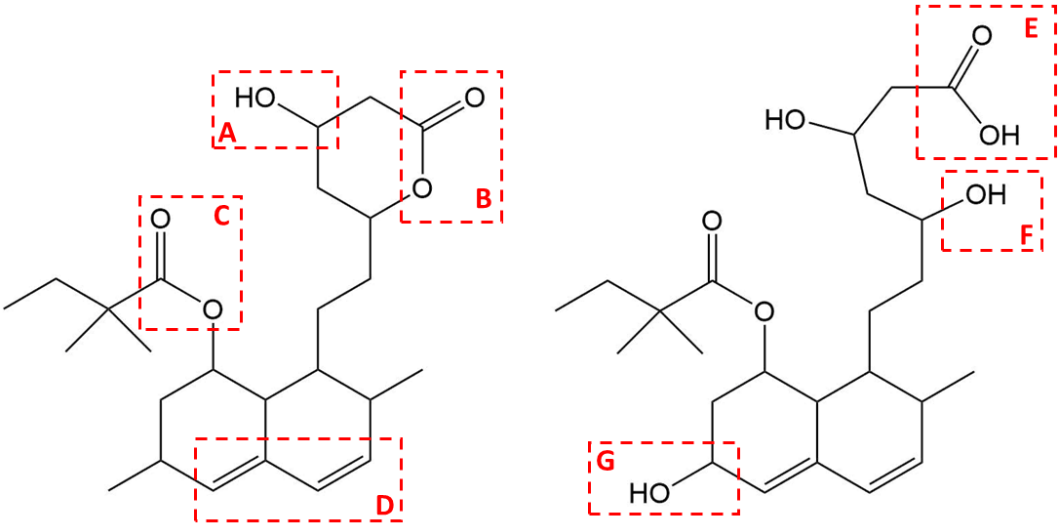
$$A = \epsilon bc$$

þar sem ϵ er mólar gleypni efnisins, b er lengd geisla í mælilausninni (hér fasti) og c er mólstyrkur.

d) Útbúnar voru tvær lausnir. Í aðra lausnina var notað 5,39 g af óþekktu málmgrýti (greinilausn). Í hina lausnina var notað 0,5166 g af hreinu járni (staðallausn). Báðar lausnirnar voru svo meðhöndlaðar þannig að allt járn oxaðist í Fe^{3+}, og næst var yfirmagni af SCN^- bætt út í. Þá voru báðar lausnirnar þynntar að 100,0 mL.
Samkvæmt ljósgleypnimælingu á sýnunum tveimur mældist gleypni greinilausnarinnar $A_x = 0{,}27$ og gleypni staðallausnarinnar $A_s = 0{,}50$.
Ákvarðaðu massaprósentu Fe_2O_3 í þessu málmgrýti.

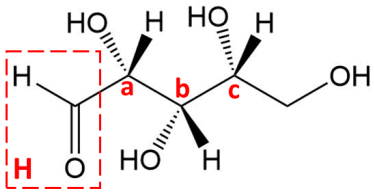
5. dæmi (val)

Statín er flokkur lyfja sem hafa blóðfitulækkandi áhrif og eru ein mest seldu lyfin í heiminum. Simvastatín og Pravastatín tilheyra þessum flokki lyfja.



a) Búið að draga utan um nokkra virknihópa í Simvastatín og Pravastatín á myndinni hér að ofan, og merkja þá með **A-G**. Hvað kallast þessir virknihópar?

Einsykrur eru sykrur sem aðeins hafa eina sykrueiningu í sameindabyggingu sinni. Xylose, eða viðarsykur, er dæmi um einsykru sem finna má í við og er meðal annars notuð í tyggigúmmí. Xylose var fyrst einangrað af Finnanum Koch árið 1881.



(+)-Xylose

b) Hvað kallast virknihópurinn sem er merktur **H**?

c) (+)-Xylose sameind inniheldur þrjár hendnimiðjur (ósamhverf kolefni), merktar **a-c** á mynd. Segðu til um hvort hendniðmiðjurnar **a-c** eru *R* eða *S*.

d) Hversu margar rúmhverfur (stereoisomers) eru til af xylose?

e) Teiknaðu handhverfu (+)-xylose.

f) Teiknaðu eina fjölhverfu (diastereomer) (+)-xylose.

6. dæmi (val)

Blóðið í mannslíkamanum er stuðpúðalausn (búffer) sem heldur sýrustigi þess (pH) innan heilsufarslegra marka eða á bilinu 7,36-7,44. Á degi hverjum losnar sýra úr líkamanum út í blóðið og blóðið þarf að geta tekið við sýrunni án þess að pH gildi þess breytist.

Mikilvægasta stuðpúðakerfi blóðsins er svokallaður bíkarbónat (HCO_3^-) búffer. (Þótt bíkarbónat búffer sé mikilvægasti þátturinn í stýringu á pH í blóði þá koma fleiri þættir þar við sögu sem ekki verður fjallað um hér.) Almennt, þegar CO_2 er í vatnslausn þá hvarfast það við vatn (H_2O) og myndar kolsýru (H_2CO_3). Efnajafnvæginu er lýst með

$$CO_2(aq) + H_2O(l) \rightleftharpoons H_2CO_3(aq) \qquad (1)$$

en kolsýra er veik sýra

$$H_2CO_3(aq) \rightleftharpoons HCO_3^-(aq) + H^+(aq) \qquad (2)$$

Nú er styrkur kolsýru í blóði mjög lágur og gera má ráð fyrir að $[H_2CO_3] = 0$. Kerfið má því einfalda í

$$CO_2(aq) + H_2O(l) \rightleftharpoons HCO_3^-(aq) + H^+(aq) \qquad pK_a = 6{,}1 \text{ við } 37\ ^\circ\text{C} \qquad (3)$$

og best er að líta svo á að CO_2 sé sýra og HCO_3^- sé basi stuðpúðakerfisins.
Hægt er að reikna pH í stuðpúðakerfi HA/A^- með jöfnu Henderson-Hasselbalch:

$$pH = pK_a + log_{10}\frac{[A^-]}{[HA]} \qquad (4)$$

Samkvæmt lögmáli Henrys er mólstyrkur á uppleystri gastegund X í lausn ($[X(aq)]$) línulega háður hlutþrýstingi gastegundarinnar (P_X) yfir lausninni:

$$[X(aq)] = H \cdot P_X \qquad H = 2{,}3 \cdot 10^{-4}\frac{mól}{m^3 Pa} \text{ fyrir } CO_2 \text{ í blóði við } 37^\circ\text{C}$$

Í liðum a-c verður litið á blóð sem lokað kerfi, þ.e. ekkert CO_2 losnar úr kerfinu.

a) Hlutþrýstingur CO_2 í blóði mælist $P_{CO_2} = 5{,}3$ kPa. Reiknaðu mólstyrk CO_2 í blóðinu.

b) Lítum svo á að stuðpúðakerfi blóðs sé eingöngu stjórnað með efnajöfnu (3) og að pH gildi þess sé 7,4. Reiknaðu mólstyrk vetniskarbónats, $[HCO_3^-]$, í blóðinu.

c) Fullvaxta maður hefur um 6,0 L af blóði í líkamanum og á degi hverjum losnar 60 mmól af sýru út í blóðið. Lítum svo á að pH gildi blóðsins sé upphaflega 7,4. Reiknaðu pH gildi blóðsins eftir að það hefur tekið við 60 mmól af sýru.

d) Fellur pH gildi blóðsins eftir viðbót sýrunnar innan heilsufarslegra marka?

Í raun er blóðið ekki lokað stuðpúðakerfi. Gera má ráð fyrir að hlutþrýstingur CO_2 í blóðinu haldist óbreyttur því líkaminn losar sig stöðugt við CO_2 með útöndun.

e) Reiknaðu aftur c-lið, en gerðu þá einu breytingu að hlutþrýstingur CO_2 í blóðinu haldist óbreyttur þrátt fyrir viðbót sýrunnar.

f) Fellur þetta pH gildi innan heilsufarslegra marka?

7. dæmi (val)

Í töflunni hér að neðan eru sýnd fimm hálfhvörf og staðalafoxunarmætti þeirra.

Hálfhvarf			E° (25°C)
$Sn^{2+}(aq) + 2\,e^-$	$\rightarrow$	$Sn(s)$	-0,14 V
$Sn^{4+}(aq) + 2\,e^-$	$\rightarrow$	$Sn^{2+}(aq)$	0,15 V
$Ag^+(aq) + e^-$	$\rightarrow$	$Ag(s)$	0,80 V
$Hg_2^{2+}(aq) + 2\,e^-$	$\rightarrow$	$2\,Hg(l)$	0,79 V
$Hg_2Cl_2(s) + 2\,e^-$	$\rightarrow$	$2\,Hg(l) + 2\,Cl^-(aq)$	0,27 V

a) Reiknaðu staðalíspennu (E°) og jafnvægisfasta (K) við 25°C fyrir efnahvarfið

$$Sn(s) + Sn^{4+}(aq) \rightleftharpoons 2\,Sn^{2+}(aq)$$

b) Skrifaðu efnajöfnu fyrir oxunar-afoxunarhvarf milli $Ag^+(aq)$ og $Sn(s)$. Reiknaðu staðalfríorku hvarfsins (ΔG°) og segðu til um hvort það sé sjálfgengt við 25°C.

c) Efnið kvikasilfur(I)klóríð, Hg_2Cl_2, nefnist í daglegu tali kalómel og er fremur torleyst í vatni. Reiknaðu leysni, s (í g/L), kalómels í vatni við 25°C. Athugaðu að kvikasilfursjónin í vatnsfasanum er á forminu Hg_2^{2+}.

d) Reiknaðu staðalíspennu (E°) rafhlöðu sem byggir á eftirfarandi tveggja rafeinda oxunar-afoxunarhvarfi:

$$H_2(g) + \frac{1}{2}O_2(g) \rightarrow H_2O(l), \qquad \Delta G^\circ = -237{,}1\ \mathrm{kJ/mol}$$