

Développement d'une méthode prédictive de calcul des enthalpies de formation en phase solide de molécules organiques - Application aux matériaux énergétiques

Anna Salmon

▶ **To cite this version:**

Anna Salmon. Développement d'une méthode prédictive de calcul des enthalpies de formation en phase solide de molécules organiques - Application aux matériaux énergétiques. Chimie. École Nationale Supérieure des Mines de Paris, 2006. Français. NNT : . pastel-00002589

HAL Id: pastel-00002589
https://pastel.hal.science/pastel-00002589

Submitted on 26 Jun 2007

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

MINES PARIS

Collège doctoral

N° attribué par la bibliothèque

|__|__|__|__|__|__|__|__|__|__|

T H E S E

pour obtenir le grade de
Docteur de l'Ecole des Mines de Paris
Spécialité "Génie des Procédés"

présentée et soutenue publiquement par
Anna SALMON

le 21 décembre 2006

Développement d'une méthode prédictive de calcul des enthalpies de formation en phase solide de molécules organiques - Application aux matériaux énergétiques

Directeur de thèse : M. Walter Fürst

Jury :

M. Jean-Pierre Grolier ..... Président, Rapporteur
M. Claude Paillard ..... Rapporteur
M. Christian Masson ..... Examinateur
M. Walter Fürst ..... Examinateur
M. Guy Jacob ..... Invité
M. Philippe Simonetti ..... Invité
M. Laurent Catoire ..... Invité
M. Didier Dalmazzone ..... Invité

Remerciements

Cette étude a été réalisée grâce au soutien financier de la Délégation Générale pour l'Armement que je remercie vivement. Les travaux entrepris se sont déroulés en partenariat avec la Société Nationale des Poudres et Explosifs ; je tiens donc également à exprimer ma profonde gratitude à Monsieur Guy Jacob pour le temps qu'il a bien voulu accorder à ce projet.

Un comité de pilotage formé sous l'égide de la Délégation Générale pour l'Armement, constitué du Commissariat à l'Energie Atomique et de l'Office National d'Etudes et de Recherches Aérospatiales, a permis de faire le point sur l'avancée des travaux, à différents stades de l'étude. Que Monsieur Philippe SIMONETTI, Monsieur Christian MASSON, Madame Marie-Sylvie AMIET et Monsieur Jean-Yves KERMARREC soient tous les quatre chaleureusement remerciés pour l'intérêt porté à ma thèse.

Je tiens en outre à adresser mes plus sincères remerciements à l'ensemble du personnel de l'Unité de Chimie et Procédés de l'Ecole Nationale Supérieure de Techniques Avancées. Un merci tout particulier à Monsieur Didier DALMAZZONE et à Monsieur Walter FÜRST pour la confiance qu'ils m'ont accordée et pour le suivi de mes travaux. Que Monsieur DALMAZZONE soit vivement remercié quant à l'aide apportée lors de mes "petits problèmes techniques" au laboratoire.

Je préciserai que je suis particulièrement sensible à l'honneur que m'ont fait Messieurs les Professeurs Jean-Pierre GROLIER et Claude PAILLARD en acceptant d'être les rapporteurs de ma thèse. Je remercie en outre Monsieur GROLIER d'avoir bien voulu présider le Jury.

Je suis enfin très reconnaissante à Monsieur Laurent Catoire, Maître de conférences à l'Université d'Orléans, de s'être intéressé à mes travaux.

Sommaire

Introduction **1**

Chapitre I : Contexte de l'étude **3**

1. Contexte industriel **3**
1.1. Intérêt industriel 3
1.2. Types de composés étudiés 3
1.2.1. Polycycles azotés 4
1.2.2. Molécules oxydantes 6
1.2.3. Molécules réductrices 7
1.2.4. Exemples 7

2. Méthodes de contribution de groupes **8**
2.1. Principe de base 8
2.2. Hiérarchie des groupes 8
2.2.1. Groupe d'ordre 0 : contribution atomique 8
2.2.2. Groupe d'ordre 1 : contribution des liaisons entre atomes 8
2.2.3. Groupe d'ordre 2 : contribution des groupements fonctionnels 9
2.3. Revue des méthodes de contribution de groupes d'ordres 1 et 2 10
2.3.1. Prévision de propriétés de composés purs 10
a. Méthode de Joback *et al.* 10
b. Méthode de Constantinou et Gani 12
c. Méthode de Basařová et Svoboda 14
d. Méthode de Tu *et al.* 14
e. Méthode de Wilson et Jasperson 15
f. Méthode de Marrero et Pardillo 16
g. Méthode de Dalmazzone *et al.* 17
2.3.2. Prévision de propriétés de mélanges 18
a. Méthode ASOG 19
b. Méthode UNIFAC 20
2.4. Méthode de Benson 22
2.4.1. Définition 22
2.4.2. Définition des pseudo-éléments 23
2.4.3. Corrections de structure et interactions à longue distance 23
2.5. Extension de la méthode de Benson à la phase liquide et à la phase solide 26
2.5.1. Méthode de Domalski et Hearing 26
2.5.2. Méthode de Cohen 27
2.6. Autres méthodes prédictives 27
2.6.1. Méthodes semi-empiriques 27
a. Méthode de Politzer *et al.* 27
b. Méthode de Rice *et al.* 29
c. Méthode de Mathieu *et al.* 30
2.6.2. Méthode mixte 31

3. Calorimétrie de combustion **33**
Origines de la calorimétrie 33
3.1. Caractéristiques de la calorimétrie en bombe statique 35
3.1.1. Généralités 35
3.1.2. Bombe calorimétrique 35
3.1.3. Seau calorimétrique 36
3.1.4. Enceinte calorimétrique 36
3.1.5. Thermomètre 36
3.2. Choix du calorimètre 37
3.2.1. Calorimètre adiabatique 37
3.2.2. Calorimètre isopéribole 37
3.3. Correction de Washburn 37

4. Bilan et Démarches de détermination **40**
4.1. Bilan de l'étude bibliographique et Objectif de l'étude 40
4.2. Démarches de détermination 40
4.2.1. Démarche indirecte 41
a. Etape 1 : Elargissement de la banque de données sur la phase gazeuse 41
b. Etape 2 : Etablissement d'une banque d'enthalpies de sublimation 41
c. Etape 3 : Prévision des enthalpies de formation en phase solide et tests de validité 41
4.2.2. Démarche directe 41
a. Etape 1 : Constitution d'une banque de données 41
b. Etape 2 : Détermination des contributions de groupes 42
c. Etape 3 : Validation par des mesures expérimentales 42

Chapitre II : Partie expérimentale **43**

1. Mesures par calorimétrie de combustion **43**
1.1. Etalonnage 43
1.2. Corrections 44
1.2.1. Fil fusible 45
1.2.2. Mèche de coton 45
1.2.3. Auxiliaire de combustion 45
1.2.4. Réactions secondaires 45
1.2.5. Correction de Washburn 46
1.3. Exploitation des résultats 46
1.3.1. Phases de l'expérimentation 46
1.3.2. Correction de l'accroissement de température 47
1.3.3. Calcul de l'enthalpie standard de formation 50

2. Mesures de masses volumiques **52**

3. Mesures d'enthalpies standard de formation en phase solide **53**
3.1. Composés C_xH_y 54

3.2. Composés $C_xH_yO_z$ 57
3.3. Composés $C_xH_yN_wO_z$ 61

4. Mesures d'enthalpies standard de formation en phase liquide 72

5. Conclusion 75

Chapitre III : Démarche indirecte 77

1. Extension de la banque de contributions de groupes concernant la phase gazeuse 77
1.1. Etat des lieux sur la banque de données existante 77
1.2. Création d'un nouveau pseudo-élément 77
1.3. Détermination de nouvelles contributions de groupes 78
1.3.1. Exploitation de la banque de données bibliographiques constituée 78
1.3.2. Exploitation des mesures d'enthalpie standard de formation en phases solide et liquide 90

2. Etablissement d'une banque d'enthalpies standard de sublimation et Détermination de contributions de groupes 92
2.1. Constitution d'une base de données 92
2.2. Détermination des contributions de groupes à l'enthalpie standard de sublimation 95
2.2.1. Procédure 95
2.2.2. Résultats 96

3. Prévision des enthalpies standard de formation en phase solide 103
3.1. Méthode A : méthode semi-prédictive 103
3.2. Méthode B : méthode entièrement prédictive 109

4. Limites de la démarche indirecte 116
4.1. Méthode A : méthode semi-prédictive 116
4.2. Méthode B : méthode entièrement prédictive 116

5. Conclusion 118

Chapitre IV : Démarche directe 119

1. Etablissement d'une banque d'enthalpies standard de formation en phase solide et Détermination de contributions de groupes 119
1.1. Constitution d'une base de données 119
1.2. Détermination des contributions de groupes à l'enthalpie standard de formation en phase solide 146
1.2.1. Procédure 146
1.2.2. Résultats 147

a. Valeurs de contributions de groupes à l'enthalpie standard de formation en phase solide 147
b. Détail des résultats de représentation des valeurs d'enthalpies standard de formation en phase solide 162
1.3. Mise en évidence des points problématiques 166
1.3.1. Remarques générales 166
1.3.2. Polymorphisme 167
1.3.3. Mise en évidence de problèmes d'estimation pour certaines familles de molécules 168
a. Composés C_xH_y 168
b. Composés $C_xH_yO_z$ 169
c. Composés $C_xH_yN_w$ 169
d. Composés $C_xH_yN_wO_z$ 170
1.4. Conclusion 170

2. Prévision d'enthalpies standard de formation en phase solide - Comparaison des méthodes de contribution de groupes 172
2.1. Prévision et comparaison avec les enthalpies standard de formation en phase solide issues de la littérature 172
2.1.1. Détail des résultats de prévision 175
a. Composés C_xH_y 175
b. Composés $C_xH_yO_z$ 176
c. Composés $C_xH_yN_w$ 176
d. Composés $C_xH_yN_wO_z$ 177
2.1.2. Détermination de nouvelles contributions de groupes 178
2.1.3. Conclusion 179
2.2. Prévision et comparaison avec les enthalpies standard de formation en phase solide mesurées 181
2.2.1. Détail des résultats de prévision 182
a. Composés C_xH_y 182
b. Composés $C_xH_yO_z$ 182
c. Composés $C_xH_yN_w$ 184
d. Composés $C_xH_yN_wO_z$ 185
2.2.2. Détermination de nouvelles contributions de groupes 186
2.2.3. Conclusion 187

3. Représentation et Prévision d'enthalpies standard de formation en phase solide - Comparaison avec les méthodes existantes 189
3.1. Représentation d'enthalpies standard de formation en phase solide et comparaison avec d'autres méthodes de contribution de groupes 189
3.1.1. Comparaison avec la méthode de Cohen 189
a. Détail des résultats de prévision 206
b. Conclusion 209
3.1.2. Comparaison avec la méthode de Domalski et Hearing 209
a. Détail des résultats de prévision 246
b. Conclusion 251
3.2. Prévision d'enthalpies standard de formation en phase solide de molécules énergétiques et comparaison avec des méthodes semi-empiriques 252

3.2.1. Comparaison avec la méthode de Politzer *et al.* 252
3.2.2. Comparaison avec la méthode de Rice *et al.* 256
3.2.3. Comparaison avec la méthode de Mathieu *et al.* 262

4. Conclusion **269**

Conclusion **271**

Liste des figures

Figure I-1 : Molécule de butane dans sa conformation *antipériplanaire*, correspondant à l'énergie la plus basse de la molécule 24

Figure I-2 : Les quatre isomères de conformation du butane 24

Figure I-3 : Projections de Newman des quatre isomères de conformation du butane 24

Figure I-4 : Représentation de l'évolution de l'énergie potentielle de la molécule de butane en fonction de l'angle dièdre θ [50] 25

Figure I-5 : La correction de Washburn 38

Figure II-1 : Evolution de la température du système calorimétrique en fonction du temps, au cours d'une mesure [69] 47

Figure II-2 : Evolution de l'enthalpie standard de formation en phase condensée de quatre azido-alcanes en fonction du nombre d'atomes de carbone 74

Figure III-1 : Evaluation globale des résultats de représentation des enthalpies standard de sublimation de 89 molécules C_xH_y 101

Figure III-2 : Evaluation globale des résultats de prévision des enthalpies standard de formation en phase solide de 91 composés C_xH_y, après application de la méthode semi-prédictive 108

Figure III-3 : Evaluation globale des résultats de prévision des enthalpies standard de formation en phase solide de 122 composés C_xH_y, après application de la méthode entièrement prédictive 115

Figure IV-1 : Evaluation globale des résultats de représentation des enthalpies standard de formation en phase solide de 145 composés C_xH_y 163

Figure IV-2 : Evaluation globale des résultats de représentation des enthalpies standard de formation en phase solide de 256 composés $C_xH_yO_z$ 164

Figure IV-3 : Evaluation globale des résultats de représentation des enthalpies standard de formation en phase solide de 134 composés C_xN_w et $C_xH_yN_w$ 165

Figure IV-4 : Evaluation globale des résultats de représentation des enthalpies standard de formation en phase solide de 482 composés $C_xN_wO_z$ et $C_xH_yN_wO_z$ 166

Figure IV-5 : Evaluation globale des résultats de prévision par la méthode de Cohen des enthalpies standard de formation en phase solide de 144 composés C_xH_y 207

Figure IV-6 : Evaluation globale des résultats de prévision par la méthode de Cohen des enthalpies standard de formation en phase solide de 248 composés $C_xH_yO_z$ 208

Figure IV-7 : Evaluation globale des résultats de prévision par la méthode de Domalski *et al.* des enthalpies standard de formation en phase solide de 142 composés C_xH_y 247

Figure IV-8 : Evaluation globale des résultats de prévision par la méthode de Domalski *et al.* des enthalpies standard de formation en phase solide de 217 composés $C_xH_yO_z$ 248

Figure IV-9 : Evaluation globale des résultats de prévision par la méthode de Domalski *et al.* des enthalpies standard de formation en phase solide de 42 composés $C_xH_yN_w$ 249

Figure IV-10 : Evaluation globale des résultats de prévision par la méthode de Domalski *et al.* des enthalpies standard de formation en phase solide de 253 composés $C_xH_yN_wO_z$ 251

Figure IV-11 : Evaluation globale des résultats de prévision par la méthode développée des enthalpies standard de formation en phase solide de 3 composés énergétiques 254

Figure IV-12 : Evaluation globale des résultats de prévision par la méthode de Politzer *et al.* des enthalpies standard de formation en phase solide de 5 composés énergétiques 255

Figure IV-13 : Comparaison de la valeur absolue des résidus obtenus grâce à la méthode développée et à la méthode de Politzer *et al.* 256

Figure IV-14 : Evaluation globale des résultats de prévision par la méthode développée des enthalpies standard de formation en phase solide de 42 composés énergétiques 260

Figure IV-15 : Evaluation globale des résultats de prévision par la méthode de Rice *et al.* des enthalpies standard de formation en phase solide de 44 composés énergétiques 261

Figure IV-16 : Comparaison de la valeur absolue des résidus obtenus grâce à la méthode développée et à la méthode de Rice *et al.* 261

Figure IV-17 : Evaluation globale des résultats de prévision par la méthode développée des enthalpies standard de formation en phase solide de 31 composés énergétiques 265

Figure IV-18 : Evaluation globale des résultats de prévision par la méthode de Mathieu *et al.* (PIMM) des enthalpies standard de formation en phase solide de 33 composés énergétiques 266

Figure IV-19 : Evaluation globale des résultats de prévision par la méthode de Mathieu *et al.* (PM3) des enthalpies standard de formation en phase solide de 33 composés énergétiques 266

Figure IV-20 : Evaluation globale des résultats de prévision par la méthode de Mathieu *et al.* (P2) des enthalpies standard de formation en phase solide de 33 composés énergétiques 267

Figure IV-21 : Comparaison de la valeur absolue des résidus obtenus grâce à la méthode développée et à la méthode de Mathieu *et al.* 268

Liste des tableaux

Tableau I-1 : Contributions de quelques fonctions énergétiques aux performances des molécules [2] 4

Tableau I-2 : Découpage de la molécule de butane en groupes d'ordre 0, en groupes d'ordre 1 et en groupes d'ordre 2 10

Tableau I-3 : Erreurs absolues moyennes et déviations standard obtenues grâce à la méthode de Joback et Reid [11] 12

Tableau I-4 : Erreurs absolues moyennes obtenues grâce à la méthode de Constantinou et Gani [14] 13

Tableau I-5 : Erreurs absolues moyennes obtenues grâce à la méthode de Marrero et Pardillo pour les deux listes de composés étudiés [24] 17

Tableau I-6 : Récapitulatif des méthodes estimant des propriétés de corps purs 18

Tableau I-7 : Appellations de l'atome de carbone suivant l'hybridation des orbitales atomiques 23

Tableau I-8 : Stéréodescripteurs désignant les différentes conformations d'une molécule 25

Tableau I-9 : Comparaison de l'écart-type calculé sur les erreurs expérimentales avec les écart-types calculés suite à l'application des deux méthodes les plus performantes 32

Tableau II-1 : Détail de la mesure d'un équivalent énergétique du calorimètre Parr 6200 44

Tableau II-2 : Détail des mesures effectuées sur le pentaméthylbenzène 54

Tableau II-3 : Détail des mesures effectuées sur le nonadécane 55

Tableau II-4 : Détail des mesures effectuées sur le docosane 55

Tableau II-5 : Détail des mesures effectuées sur le tricosane 56

Tableau II-6 : Détail des mesures effectuées sur le tétracosane 56

Tableau II-7 : Energies internes standard de combustion, enthalpies standard de combustion, enthalpies standard de formation en phases solide et gazeuse et enthalpies standard de sublimation des cinq composés solides C_xH_y analysés 57

Tableau II-8 : Détail des mesures effectuées sur le 2-adamantanone 58

Tableau II-9 : Détail des mesures effectuées sur l'acide 2-méthylbenzoïque 58

Tableau II-10 : Détail des mesures effectuées sur l'acide salicylique 59

Tableau II-11 : Détail des mesures effectuées sur l'acide pentanedioïque 59

Tableau II-12 : Détail des mesures effectuées sur l'acide hexanedioïque 60

Tableau II-13 : Energies internes standard de combustion, enthalpies standard de combustion, enthalpies standard de formation en phases solide et gazeuse et enthalpies standard de sublimation des cinq composés solides $C_xH_yO_z$ analysés 61

Tableau II-14 : Détail des mesures effectuées sur la diphénylamine 62

Tableau II-15 : Détail des mesures effectuées sur la 2-aminopyridine 62

Tableau II-16 : Détail des mesures effectuées sur le phtalonitrile 63

Tableau II-17 : Détail des mesures effectuées sur le 5,6-diméthylbenzimidazole 63

Tableau II-18 : Détail des mesures effectuées sur le 1,2,4-triazole 64

Tableau II-19 : Détail des mesures effectuées sur le benzotriazole 64

Tableau II-20 : Détail des mesures effectuées sur le 4-amino-1,2,4-triazole 65

Tableau II-21 : Détail des mesures effectuées sur la mélamine 65

Tableau II-22 : Détail des mesures effectuées sur l'acide picolinique N-oxyde 66

Tableau II-23 : Détail des mesures effectuées sur l'uracile 66

Tableau II-24 : Détail des mesures effectuées sur le phtalhydrazide 67

Tableau II-25 : Détail des mesures effectuées sur le 4-nitro-imidazole 67

Tableau II-26 : Détail des mesures effectuées sur le 2-méthyl-5-nitro-imidazole 68

Tableau II-27 : Détail des mesures effectuées sur le 5-nitro-uracile 68

Tableau II-28 : Détail des mesures effectuées sur l'azodicarbonamide 69

Tableau II-29 : Energies internes standard de combustion, enthalpies standard de combustion, enthalpies standard de formation en phases solide et gazeuse et enthalpies standard de sublimation des quinze composés solides $C_xH_yN_wO_z$ analysés 70

Tableau II-30 : Energies internes standard de combustion, enthalpies standard de combustion, enthalpies standard de vaporisation et enthalpies standard de formation en phases liquide et gazeuse des six azido-alcanes analysés 73

Tableau III-1 : Banque de données thermochimiques issues de la littérature concernant 283 molécules organiques - Comparaison des enthalpies standard de formation en phase gazeuse mesurées et calculées 89

Tableau III-2 : Détermination de la contribution à l'enthalpie standard de formation en phase gazeuse de dix nouveaux groupes, grâce à une étude bibliographique 89

Tableau III-3 : Détermination de la contribution à l'enthalpie standard de formation en phase gazeuse d'un nouveau groupe, grâce à l'analyse du 1,2,4-triazole 91

Tableau III-4 : Détermination de la contribution à l'enthalpie standard de formation en phase gazeuse de deux nouveaux groupes, grâce à l'analyse de plusieurs azido-alcanes 91

Tableau III-5 : Banque de données thermochimiques concernant les 145 molécules C_xH_y étudiées dans le cadre de la démarche indirecte 95

Tableau III-6 : Contributions de groupes de deuxième ordre C-H permettant de calculer des enthalpies standard de sublimation, à T = 298,15 K 97

Tableau III-7 : Corrections de structure C-H permettant de calculer des enthalpies standard de sublimation, à T = 298,15 K 98

Tableau III-8 : Interactions à longue distance permettant de calculer des enthalpies standard de sublimation, à T = 298,15 K 98

Tableau III-9 : Représentations des enthalpies standard de sublimation de 89 molécules C_xH_y, à T = 298,15 K 100

Tableau III-10 : Résidus moyens et moyennes quadratiques obtenus sur la représentation des enthalpies standard de sublimation de 89 molécules C_xH_y 101

Tableau III-11 : Ecarts extrêmes entre les enthalpies standard de sublimation mesurées et représentées 101

Tableau III-12 : Prévisions des enthalpies standard de formation en phase solide de 91 molécules C_xH_y, à T = 298,15 K, grâce à la méthode semi-prédictive 106

Tableau III-13 : Résidus moyens et moyennes quadratiques obtenus sur la représentation des enthalpies standard de sublimation de 87 molécules C_xH_y 107

Tableau III-14 : Résidus moyens et moyennes quadratiques obtenus sur la prévision des enthalpies standard de formation en phase solide de 91 molécules C_xH_y, après application de la méthode semi-prédictive 107

Tableau III-15 : Ecarts extrêmes entre les enthalpies standard de formation en phase solide mesurées et calculées, après application de la méthode semi-prédictive 107

Tableau III-16 : Prévisions des enthalpies standard de formation en phase solide de 122 molécules C_xH_y, à T = 298,15 K, grâce à la méthode entièrement prédictive 113

Tableau III-17 : Résidus moyens et moyennes quadratiques obtenus sur la prévision des enthalpies standard de formation en phase gazeuse de 94 molécules C_xH_y 114

Tableau III-18 : Résidus moyens et moyennes quadratiques obtenus sur la prévision des enthalpies standard de formation en phase solide de 122 molécules C_xH_y, après application de la méthode entièrement prédictive 114

Tableau III-19 : Ecarts extrêmes entre les enthalpies standard de formation en phase solide mesurées et calculées, après application de la méthode entièrement prédictive 114

Tableau III-20 : Résidus moyens et moyennes quadratiques obtenus sur la prévision de 167 enthalpies standard de formation en phase gazeuse de composés contenant les atomes C, H, O, N, S, F, Cl 117

Tableau IV-1 : Banque d'enthalpies standard de formation en phase solide concernant les 259 molécules $C_xH_yO_z$ étudiées dans le cadre de la démarche directe 125

Tableau IV-2 : Banque d'enthalpies standard de formation en phase solide concernant les 134 molécules $C_xH_yN_w$ étudiées dans le cadre de la démarche directe 127

Tableau IV-3 : Banque d'enthalpies standard de formation en phase solide concernant les 487 molécules $C_xH_yN_wO_z$ étudiées dans le cadre de la démarche directe 146

Tableau IV-4 : Détail du nombre de formules développées ayant permis de déterminer l'ensemble des contributions de groupes à l'enthalpie standard de formation en phase solide 147

Tableau IV-5 : Contributions de groupes de deuxième ordre C-H permettant de calculer des enthalpies standard de formation en phase solide, à T = 298,15 K 149

Tableau IV-6 : Corrections de structure C-H permettant de calculer des enthalpies standard de formation en phase solide, à T = 298,15 K 150

Tableau IV-7 : Contributions de groupes de deuxième ordre C-H-O permettant de calculer des enthalpies standard de formation en phase solide, à T = 298,15 K 152

Tableau IV-8 : Corrections de structure C-H-O permettant de calculer des enthalpies standard de formation en phase solide, à T = 298,15 K 152

Tableau IV-9 : Contributions de groupes de deuxième ordre C-H-N-O permettant de calculer des enthalpies standard de formation en phase solide, à T = 298,15 K 158

Tableau IV-10 : Corrections de structure C-H-N-O permettant de calculer des enthalpies standard de formation en phase solide, à T = 298,15 K 159

Tableau IV-11 : Interactions à longue distance C-H, C-H-O et C-H-N-O permettant de calculer des enthalpies standard de formation en phase solide, à T = 298,15 K 161

Tableau IV-12 : Détail du nombre de molécules contenues dans la banque d'enthalpies constituée et du nombre de molécules dont l'enthalpie standard de formation en phase solide a été représentée 161

Tableau IV-13 : Résidus moyens et moyennes quadratiques obtenus sur la représentation des enthalpies standard de formation en phase solide de 145 molécules C_xH_y 162

Tableau IV-14 : Ecarts extrêmes entre les enthalpies standard de formation en phase solide mesurées et représentées de 145 molécules C_xH_y 162

Tableau IV-15 : Résidus moyens et moyennes quadratiques obtenus sur la représentation des enthalpies standard de formation en phase solide de 256 molécules $C_xH_yO_z$ 163

Tableau IV-16 : Ecarts extrêmes entre les enthalpies standard de formation en phase solide mesurées et représentées de 256 molécules $C_xH_yO_z$ 163

Tableau IV-17 : Résidus moyens et moyennes quadratiques obtenus sur la représentation des enthalpies standard de formation en phase solide de 134 molécules C_xN_w et $C_xH_yN_w$ 164

Tableau IV-18 : Ecarts extrêmes entre les enthalpies standard de formation en phase solide mesurées et représentées de 134 molécules C_xN_w et $C_xH_yN_w$ 164

Tableau IV-19 : Résidus moyens et moyennes quadratiques obtenus sur la représentation des enthalpies standard de formation en phase solide de 482 molécules $C_xN_wO_z$ et $C_xH_yN_wO_z$ 165

Tableau IV-20 : Ecarts extrêmes entre les enthalpies standard de formation en phase solide mesurées et représentées de 482 molécules $C_xN_wO_z$ et $C_xH_yN_wO_z$ 165

Tableau IV-21 : Résidus moyens et moyennes quadratiques obtenus sur la représentation des enthalpies standard de formation en phase solide de 126 molécules C_xH_y 168

Tableau IV-22 : Résidus moyens et moyennes quadratiques obtenus sur la représentation des enthalpies standard de formation en phase solide de 244 molécules $C_xH_yO_z$ 169

Tableau IV-23 : Résidus moyens et moyennes quadratiques obtenus sur la représentation des enthalpies standard de formation en phase solide de 126 molécules C_xN_w et $C_xH_yN_w$ 170

Tableau IV-24 : Résidus moyens et moyennes quadratiques obtenus sur la représentation des enthalpies standard de formation en phase solide de 469 molécules $C_xN_wO_z$ et $C_xH_yN_wO_z$ 170

Tableau IV-25 : Résidus moyens et moyennes quadratiques obtenus sur la représentation des enthalpies standard de formation en phase solide des 1 017 molécules organiques étudiées 170

Tableau IV-26 : Ecarts extrêmes entre les enthalpies standard de formation en phase solide mesurées et représentées des 1 017 molécules organiques étudiées 171

Tableau IV-27 : Résidus moyens et moyennes quadratiques obtenus sur la représentation des enthalpies standard de formation en phase solide de 965 molécules organiques C_xH_y, $C_xH_yO_z$, C_xN_w, $C_xH_yN_w$, $C_xN_wO_z$ et $C_xH_yN_wO_z$ 171

Tableau IV-28 : Comparaison des enthalpies standard de formation en phase solide issues de la littérature avec les enthalpies calculées, concernant 127 molécules contenant carbone, hydrogène, oxygène et azote 174

Tableau IV-29 : Résidus moyens et moyennes quadratiques obtenus sur la prévision des enthalpies standard de formation en phase solide de 15 molécules C_xH_y 175

Tableau IV-30 : Ecarts extrêmes entre les enthalpies standard de formation en phase solide mesurées et calculées de 15 molécules C_xH_y 175

Tableau IV-31 : Résidus moyens et moyennes quadratiques obtenus sur la prévision des enthalpies standard de formation en phase solide de 14 molécules C_xH_y 175

Tableau IV-32 : Résidus moyens et moyennes quadratiques obtenus sur la prévision des enthalpies standard de formation en phase solide de 40 molécules $C_xH_yO_z$ 176

Tableau IV-33 : Ecarts extrêmes entre les enthalpies standard de formation en phase solide mesurées et calculées de 40 molécules $C_xH_yO_z$ 176

Tableau IV-34 : Résidus moyens et moyennes quadratiques obtenus sur la prévision des enthalpies standard de formation en phase solide de 7 molécules $C_xH_yN_w$ 176

Tableau IV-35 : Ecarts extrêmes entre les enthalpies standard de formation en phase solide mesurées et calculées de 7 molécules $C_xH_yN_w$ 177

Tableau IV-36 : Résidus moyens et moyennes quadratiques obtenus sur la prévision des enthalpies standard de formation en phase solide de 6 molécules $C_xH_yN_w$ 177

Tableau IV-37 : Résidus moyens et moyennes quadratiques obtenus sur la prévision des enthalpies standard de formation en phase solide de 21 molécules $C_xH_yN_wO_z$ 177

Tableau IV-38 : Ecarts extrêmes entre les enthalpies standard de formation en phase solide mesurées et calculées de 21 molécules $C_xH_yN_wO_z$ 178

Tableau IV-39 : Résidus moyens et moyennes quadratiques obtenus sur la prévision des enthalpies standard de formation en phase solide de 20 molécules $C_xH_yN_wO_z$ 178

Tableau IV-40 : Evaluation de la contribution à l'enthalpie standard de formation en phase solide de quatre nouveaux groupes 179

Tableau IV-41 : Résidus moyens et moyennes quadratiques obtenus sur la représentation des enthalpies standard de formation en phase solide de 134 molécules C_xN_w et $C_xH_yN_w$, après prise en compte de la correction N-phényl-benzaldéhyde-imine 179

Tableau IV-42 : Résidus moyens et moyennes quadratiques obtenus sur la représentation des enthalpies standard de formation en phase solide des 1 017 molécules organiques étudiées, après prise en compte de la correction N-phényl-benzaldéhyde-imine 179

Tableau IV-43 : Résidus moyens et moyennes quadratiques obtenus sur la prévision des enthalpies standard de formation en phase solide de 83 molécules C_xH_y, $C_xH_yO_z$, $C_xH_yN_w$ et $C_xH_yN_wO_z$ 180

Tableau IV-44 : Ecarts extrêmes entre les enthalpies standard de formation en phase solide mesurées et calculées de 83 molécules C_xH_y, $C_xH_yO_z$, $C_xH_yN_w$ et $C_xH_yN_wO_z$ 180

Tableau IV-45 : Résidus moyens et moyennes quadratiques obtenus sur la prévision des enthalpies standard de formation en phase solide de 80 molécules C_xH_y, $C_xH_yO_z$, $C_xH_yN_w$ et $C_xH_yN_wO_z$ 180

Tableau IV-46 : Enthalpies standard de formation en phase solide mesurées et calculées des 5 molécules C_xH_y analysées 182

Tableau IV-47 : Enthalpies standard de formation en phase solide mesurées et calculées des 5 molécules $C_xH_yO_z$ analysées 183

Tableau IV-48 : Enthalpies standard de formation en phase solide mesurées et calculées des 8 molécules $C_xH_yN_w$ analysées 184

Tableau IV-49 : Enthalpies standard de formation en phase solide mesurées et calculées des 7 molécules $C_xH_yN_wO_z$ analysées 185

Tableau IV-50 : Evaluation de la contribution à l'enthalpie standard de formation en phase solide de six nouveaux groupes 186

Tableau IV-51 : Contributions de groupes intervenant dans l'acide picolinique N-oxyde 187

Tableau IV-52 : Contributions de groupes intervenant dans le phtalhydrazide 187

Tableau IV-53 : Comparaison des enthalpies standard de formation en phase solide issues de la littérature avec les enthalpies représentées par la méthode développée et avec les enthalpies prévues par la méthode de Cohen, concernant 145 molécules contenant carbone et hydrogène 195

Tableau IV-54 : Comparaison des enthalpies standard de formation en phase solide issues de la littérature avec les enthalpies représentées par la méthode développée et avec les enthalpies prévues par la méthode de Cohen, concernant 256 molécules contenant carbone, hydrogène et oxygène 205

Tableau IV-55 : Comparaison avec la méthode de Cohen des résidus moyens et moyennes quadratiques obtenus sur le calcul des enthalpies standard de formation en phase solide de molécules C_xH_y 206

Tableau IV-56 : Ecarts extrêmes entre les enthalpies standard de formation en phase solide mesurées et prévues par la méthode de Cohen de 144 molécules C_xH_y 206

Tableau IV-57 : Comparaison avec la méthode de Cohen des résidus moyens et moyennes quadratiques obtenus sur le calcul des enthalpies standard de formation en phase solide de molécules $C_xH_yO_z$ 208

Tableau IV-58 : Ecarts extrêmes entre les enthalpies standard de formation en phase solide mesurées et prévues par la méthode de Cohen de 248 molécules $C_xH_yO_z$ 208

Tableau IV-59 : Comparaison avec la méthode de Cohen des résidus moyens et moyennes quadratiques obtenus sur le calcul des enthalpies standard de formation en phase solide de molécules C_xH_y et $C_xH_yO_z$ 209

Tableau IV-60 : Comparaison des enthalpies standard de formation en phase solide issues de la littérature avec les enthalpies représentées par la méthode développée et avec les enthalpies prévues par la méthode de Domalski *et al.*, concernant 145 molécules contenant carbone et hydrogène 216

Tableau IV-61 : Comparaison des enthalpies standard de formation en phase solide issues de la littérature avec les enthalpies représentées par la méthode développée et avec les enthalpies prévues par la méthode de Domalski *et al.*, concernant 256 molécules contenant carbone, hydrogène et oxygène 226

Tableau IV-62 : Comparaison des enthalpies standard de formation en phase solide issues de la littérature avec les enthalpies représentées par la méthode développée et avec les enthalpies prévues par la méthode de Domalski *et al.*, concernant 134 molécules contenant carbone, hydrogène et azote 231

Tableau IV-63 : Comparaison des enthalpies standard de formation en phase solide issues de la littérature avec les enthalpies représentées par la méthode développée et avec les enthalpies prévues par la méthode de Domalski *et al.*, concernant 482 molécules contenant carbone, hydrogène, oxygène et azote 245

Tableau IV-64 : Comparaison avec la méthode de Domalski *et al.* des résidus moyens et moyennes quadratiques obtenus sur le calcul des enthalpies standard de formation en phase solide de molécules C_xH_y 246

Tableau IV-65 : Ecarts extrêmes entre les enthalpies standard de formation en phase solide mesurées et prévues par la méthode de Domalski *et al.* de 142 molécules C_xH_y 246

Tableau IV-66 : Comparaison avec la méthode de Domalski *et al.* des résidus moyens et moyennes quadratiques obtenus sur le calcul des enthalpies standard de formation en phase solide de molécules $C_xH_yO_z$ 247

Tableau IV-67 : Ecarts extrêmes entre les enthalpies standard de formation en phase solide mesurées et prévues par la méthode de Domalski *et al.* de 217 molécules $C_xH_yO_z$ 248

Tableau IV-68 : Comparaison avec la méthode de Domalski *et al.* des résidus moyens et moyennes quadratiques obtenus sur le calcul des enthalpies standard de formation en phase solide de molécules $C_xH_yN_w$ 249

Tableau IV-69 : Ecarts extrêmes entre les enthalpies standard de formation en phase solide mesurées et prévues par la méthode de Domalski *et al.* de 42 molécules $C_xH_yN_w$ 249

Tableau IV-70 : Comparaison avec la méthode de Domalski *et al.* des résidus moyens et moyennes quadratiques obtenus sur le calcul des enthalpies standard de formation en phase solide de molécules $C_xH_yN_wO_z$ 250

Tableau IV-71 : Ecarts extrêmes entre les enthalpies standard de formation en phase solide mesurées et prévues par la méthode de Domalski *et al.* de 253 molécules $C_xH_yN_wO_z$ 250

Tableau IV-72 : Comparaison avec la méthode de Domalski *et al.* des résidus moyens et moyennes quadratiques obtenus sur le calcul des enthalpies standard de formation en phase solide de molécules C_xH_y, $C_xH_yO_z$, $C_xH_yN_w$ et $C_xH_yN_wO_z$ 251

Tableau IV-73 : Comparaison des enthalpies standard de formation en phase solide issues de la littérature avec les enthalpies prévues par la méthode développée et par la méthode de Politzer *et al.*, concernant 5 molécules énergétiques 253

Tableau IV-74 : Comparaison avec la méthode de Politzer *et al.* des résidus moyens et moyennes quadratiques obtenus sur le calcul des enthalpies standard de formation en phase solide de molécules énergétiques 253

Tableau IV-75 : Ecarts extrêmes entre les enthalpies standard de formation en phase solide mesurées et prévues par la méthode développée et par la méthode de Politzer *et al.* de molécules énergétiques 254

Tableau IV-76 : Comparaison des enthalpies standard de formation en phase solide issues de la littérature avec les enthalpies prévues par la méthode développée et par la méthode de Rice *et al.*, concernant 44 molécules énergétiques 259

Tableau IV-77 : Comparaison avec la méthode de Rice *et al.* des résidus moyens et moyennes quadratiques obtenus sur le calcul des enthalpies standard de formation en phase solide de molécules énergétiques 259

Tableau IV-78 : Ecarts extrêmes entre les enthalpies standard de formation en phase solide mesurées et prévues par la méthode développée et par la méthode de Rice *et al.* de molécules énergétiques 260

Tableau IV-79 : Comparaison des enthalpies standard de formation en phase solide issues de la littérature avec les enthalpies prévues par la méthode développée et par la méthode de Mathieu *et al.*, concernant 33 molécules énergétiques 263

Tableau IV-80 : Comparaison avec la méthode de Mathieu *et al.* des résidus moyens et moyennes quadratiques obtenus sur le calcul des enthalpies standard de formation en phase solide de molécules énergétiques 264

Tableau IV-81 : Ecarts extrêmes entre les enthalpies standard de formation en phase solide mesurées et prévues par la méthode développée et par la méthode de Mathieu *et al.* de molécules énergétiques 264

Tableau IV-82 : Comparaison du nombre de contributions de groupes déterminées dans la méthode développée, la méthode de Cohen et la méthode de Domalski *et al.* 270

Liste des photos

Photo II-1 : Calorimètre de combustion Parr 6200 [68] 43

Nomenclature

a_{kl}, a_{lk} : paramètres binaires d'interaction entre les groupes *k* et *l*
$c_P°$: capacité calorifique standard
$\delta\theta$: correction pour les échanges thermiques et l'énergie d'agitation
$\Delta_c H°$: enthalpie standard de combustion
$\Delta_c U°$: énergie interne standard de combustion
$\Delta_f G°$: enthalpie libre standard de formation
$\Delta_f H°$: enthalpie standard de formation
$\Delta_f H°_g$: enthalpie standard de formation en phase gazeuse
$\Delta_f H°_l$: enthalpie standard de formation en phase liquide
$\Delta_f H°_{s,m}$: enthalpie molaire standard de formation en phase solide
ΔH_{fus} : enthalpie de fusion
ΔH_{sub} : enthalpie de sublimation
$\Delta H°_{sub}$: enthalpie standard de sublimation
ΔH_{vap} : enthalpie de vaporisation
$\Delta H°_{vap}$: enthalpie standard de vaporisation
Δn : différence du nombre de moles de gaz entre produits et réactifs
$\Delta\theta_{corr}$: accroissement de température
E_{AI} : énergie *ab initio* de la molécule
E_i : énergie de la molécule *i*
E_j : énergie d'un atome *j* contenu dans la molécule *i*
EE : équivalent énergétique
EE_i : équivalent énergétique du système initial réel
ε_j : "équivalent atomique"
FBE : enthalpie formelle de liaison
FSE : enthalpie formelle stérique "brute"
FSE_0 : enthalpie formelle stérique du conformère de plus basse énergie
$FSE_{corrigée}$: enthalpie formelle stérique corrigée
Φ_i : fraction volumique
G^E : enthalpie libre d'excès
γ_i : coefficient d'activité
Γ_k : coefficient d'activité du groupe *k*
Γ_{ki} : coefficient d'activité du groupe *k* dans une solution de référence ne contenant que des molécules de type *i*
η_l : viscosité d'un liquide
i : réactif(s)
j : produit(s)
k : coefficient de refroidissement du calorimètre
$m_{éch.}$: masse de l'échantillon
M : masse molaire
M_j : nombre de groupes de deuxième ordre de type *j* dans la molécule
n_{kl}, m_{kl} : paramètres obtenus par régression de données d'équilibre liquide-vapeur
N_{atomes} : nombre d'atomes dans une molécule
N_k : nombre de groupes de premier ordre de type *k* dans une molécule

N_{oi} : nombre d'isomères optiques d'une molécule (*i.e.* énantiomères)
N_r : nombre de cycles dans une molécule
N_{ts} : nombre de symétrie total
P_c : pression critique
q_b : énergie de combustion du fil d'allumage
q_i : surface moléculaire
q_n : énergie de formation de l'acide nitrique
θ_f : température de l'eau contenue dans le seau calorimétrique à la fin de la période principale
θ_i : fraction surfacique
θ_i : température de l'eau contenue dans le seau calorimétrique au début de la période principale
θ_j : température de l'eau contenue dans l'enceinte externe
θ_m : température moyenne du système calorimétrique pendant la période principale
$\theta_{m,post}$: température moyenne du système calorimétrique pendant la postpériode
$\theta_{m,pré}$: température moyenne du système calorimétrique pendant la prépériode
θ_∞ : température atteinte pour un "temps infini"
R : constante des gaz parfaits
r_i : volume moléculaire de Van der Waals
S : surface moléculaire totale
$S°$: entropie standard
S_A : surface moléculaire des accepteurs de protons
S_e^0 : entropie absolue d'un élément contenu dans une molécule à T et 101 325 Pa
S_{el}^0 : entropie absolue des éléments formant une molécule à T et 101 325 Pa
S_H : surface moléculaire des protons labiles
S_s^0 : entropie standard de symétrie de la molécule
SA : surface de la molécule
SM : terme correctif tenant compte de la contribution à l'enthalpie des conformères autres que le conformère de plus basse énergie
σ_k : tension de surface
σ_{tot}^2 : variance totale
t_i : temps correspondant à la température θ_i
t_f : temps correspondant à la température θ_f
T : température absolue
T_c : température critique
T_{eb} : température d'ébullition
T_f : température de fusion
T_r : température réduite
u : constante représentant l'énergie d'agitation
υ : "paramètre d'équilibre"
$V(r_i)$: potentiel électrostatique $V(r)$ au point r_i
V_c : volume critique
$\overline{V_s}$: moyenne des potentiels électrostatiques $V(r_i)$
ν_i, ν_j : coefficients stoechiométriques
x_j : fraction molaire du composé j dans le mélange
ZPE : énergie au point zéro

a_{mn} : contribution de groupe-interaction

a_i, A_i, $A_{\omega k}$, b_i, B_i, c_{Ak}, c_{Bk}, c_{Ck}, c_{Dk}, c_i, c_{Pk}, d_i, $d_i^{'}$, $d_f g_k$, $d_f h_k$, dh_{fusk}, dh_{vapk}, η_{Ak}, η_{Bk}, p_{ck}, $P_j(A)$, $P_j(\alpha)$, Q_k, R_k, s_k, t_{ck}, t_{ebk}, t_{fk}, v_{ck}, $V_{\omega k}$, α_i, β_i : contributions de groupes

$d_f h_{1k}$, dh_{vap1k}, $d_f g_{1k}$, p_{c1k}, t_{c1k}, t_{eb1k}, t_{f1k}, v_{c1k}, Δp_{ck} , Δt_{ck} : contributions de groupes de premier ordre

$d_f h_{2j}$, dh_{vap2j}, $d_f g_{2j}$, p_{c2j}, t_{c2j}, t_{eb2j}, t_{f2j}, v_{c2j}, Δp_{cj}, Δt_{cj} : contributions de groupes de deuxième ordre

Introduction

Qu'ils soient à usage militaire ou civil, les matériaux énergétiques sont d'une importance capitale de nos jours. La conception de nouvelles molécules performantes est en effet devenue indispensable. Si l'éclatement de la seconde guerre mondiale puis la survenue de la guerre froide et de la course à l'espace ont généré une avancée considérable en matière d'autopropulsion, les exigences concernant les systèmes d'armes ont connu parallèlement une évolution importante à partir des années 80. Non seulement la performance des matériaux a alors été recherchée mais la protection des occupants des plate-formes de tir est également devenue une priorité.

Afin de synthétiser des molécules énergétiques conformes aux critères requis, plusieurs données relatives à ces matériaux sont indispensables, en particulier l'enthalpie de formation qui permet de caractériser la performance énergétique des composés en question. Plus cette enthalpie est élevée et plus l'énergie libérée au cours de la combustion du matériau énergétique est grande. L'un des objectifs des concepteurs de ces molécules est donc la synthèse de matériaux énergétiques dont l'enthalpie de formation est aussi élevée que possible. Pour cela, il est essentiel de favoriser l'introduction de groupements azotés dans les structures moléculaires à développer, ceux-ci présentant une enthalpie de formation importante (ex : $N\text{-}NO_2$, $C\text{-}N_3$).

Il a donc été proposé de prévoir les enthalpies de formation en question. Les techniques permettant d'estimer ces grandeurs thermochimiques pour la phase gazeuse sont multiples et bien connues mais elles sont nettement moins nombreuses en ce qui concerne la phase condensée. Or la majorité des composés intéressant le secteur industriel des matériaux énergétiques se trouvent sous la forme solide.

L'objet de ce travail est donc la prévision d'enthalpies standard de formation en phase solide de molécules organiques, au moyen d'une méthode basée sur l'additivité des contributions de groupes. Un intérêt tout particulier a été porté sur les composés contenant de l'azote. De plus, un important travail expérimental consistant à mesurer des valeurs d'enthalpies standard de formation à l'état solide a été réalisé.

Les travaux exposés ont été réalisés avec le soutien de la Délégation Générale pour l'Armement (DGA) et se sont déroulés au sein de l'Unité de Chimie et Procédés de l'Ecole Nationale Supérieure de Techniques Avancées (ENSTA).

Le présent mémoire comporte quatre chapitres. Le premier d'entre eux introduit le contexte industriel et scientifique de l'étude. Il contient également une description et une revue bibliographique des méthodes prédictives ainsi qu'une présentation des bases de la technique de mesure utilisée des enthalpies de formation : la calorimétrie de combustion. Puis, les deux démarches de détermination envisagées sont exposées.

Le deuxième chapitre est, quant à lui, consacré à la description du dispositif expérimental employé et à la présentation des résultats obtenus.

Le troisième chapitre présente la première démarche de détermination envisagée, *i.e.* la démarche indirecte consistant à évaluer les enthalpies standard de formation en phase solide à partir des enthalpies standard de sublimation et des enthalpies standard de formation en phase gazeuse des composés considérés.

La méthode retenue est finalement décrite en détail dans le quatrième et dernier chapitre. Les résultats prédictifs obtenus sont comparés à des valeurs expérimentales issues de la littérature, à des valeurs expérimentales mesurées au laboratoire et à des valeurs calculées grâce aux méthodes concurrentes. Enfin, la technique développée est appliquée à de

nombreux composés énergétiques et sa fiabilité est comparée à des méthodes prédictives semi-empiriques.

Chapitre I : Contexte de l'étude

1. Contexte industriel

1.1. Intérêt industriel

Les matériaux énergétiques peuvent être définis comme étant des matériaux, le plus souvent solides, constitués de molécules dont l'enthalpie de formation est aussi élevée que possible. Ils sont capables de restituer à la demande, de façon maîtrisée et en l'absence d'oxygène, l'énergie chimique emmagasinée dans les édifices moléculaires qui entrent dans leur composition [1].

La recherche de nouveaux constituants pour les matériaux énergétiques du futur passe par une méthode de "screening" permettant de sélectionner, avant même la mise en œuvre de toute synthèse, les structures susceptibles de répondre à différents critères, en matière de densité ou d'enthalpie de formation notamment. Cette dernière grandeur constitue une propriété importante, en particulier en ce qui concerne les matériaux énergétiques. En effet, elle joue un rôle crucial dans l'estimation quantitative de la performance potentielle de ces matériaux. Il est donc extrêmement utile de disposer d'outils permettant de prévoir ces propriétés, avec la meilleure précision possible, à partir des seules informations disponibles, en l'occurrence, la formule chimique développée de la molécule.

Les matériaux énergétiques peuvent se présenter sous des formes physiques variées : liquides, gels, mais surtout, solides. S'il existe de nombreux outils performants de calcul des enthalpies de formation en phase gazeuse pour une grande variété de composés, la situation est tout à fait différente concernant les états condensés. Il a donc été proposé, dans le cadre d'une convention DGA, de développer une méthode permettant d'estimer les enthalpies de formation en phase solide de composés organiques purs, en ciblant spécifiquement les types de molécules intervenant dans la constitution de matériaux énergétiques.

1.2. Types de composés étudiés

Trois facteurs essentiels influent sur la performance énergétique de substances susceptibles d'être employées dans des applications civiles (mines, carrières, travaux publics) ou militaires (grenades, obus, têtes de roquettes) : l'enthalpie de formation, la composition atomique et la densité des matériaux. Ces facteurs sont optimisés grâce à l'étude de la chimie des molécules proposées (présence de groupements chimiques spécifiques, structure moléculaire).

L'énergie libérée au cours de la combustion d'une substance dépend de l'enthalpie de formation de cette même substance, selon :

$$\Delta_c H^0 = \sum_j \nu_j \Delta_f H_j^0 - \sum_i \nu_i \Delta_f H_i^0 \qquad (1)$$

où $\Delta_c H^0$: enthalpie standard de combustion

$\Delta_f H^0$: enthalpie standard de formation

i : réactif(s)

j : produit(s)
ν_i et ν_j : coefficients stoechiométriques

Il est ainsi primordial de favoriser la synthèse de composés à enthalpie de formation élevée. Pour cela, il faut utiliser des structures moléculaires présentant des enthalpies de formation importantes, sachant que les contributions à cette même enthalpie sont classées comme suit :

$$\Delta_f H(\text{structure "cage"}) > \Delta_f H(\text{polycycle}) > \Delta_f H(\text{cycle}) > \Delta_f H(\text{chaîne linéaire})$$

Par ailleurs, l'emploi de groupements dont la contribution à l'enthalpie de formation est élevée, tels que ceux présentés dans le tableau ci-dessous, est indispensable :

Fonction	**Structure**	**$\Delta_f H$ (kJ.mol^{-1})**
Nitrate	O-NO_2	-81,2
Nitro	C-NO_2	-66,1 à -62,3
Difluoramine	NF_2	-32,6
Nitramine	N-NO_2	74,5
Azide	C-N_3	305,4 à 334,7

Tableau I-1 : Contributions de quelques fonctions énergétiques aux performances des molécules [2]**.**

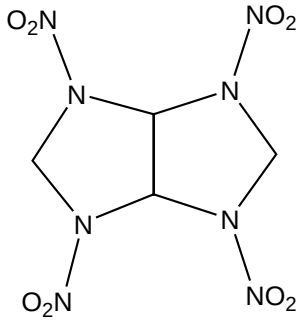
Les molécules énergétiques sont fondamentalement métastables. Elles sont le plus souvent constituées des éléments carbone, hydrogène, oxygène, azote et fluor. Elles comportent toutes une caractéristique commune : la présence de nombreux groupements azotés.

Les matériaux énergétiques ne requièrent pas l'apport d'oxygène externe pour leur fonctionnement car tous les composés nécessaires à cet apport, et donc, à la performance du matériau, sont présents et stockés dans le matériau lui-même. L'oxygène est dans la plupart des cas fourni par des groupements nitro -NO_2 présents au sein même de la molécule énergétique.

Différentes types de molécules intéressent particulièrement le secteur industriel des matériaux énergétiques :

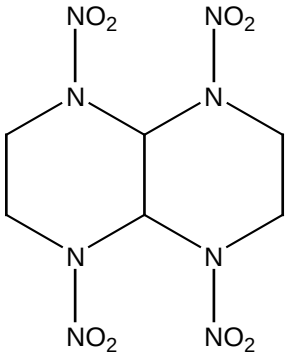
1.2.1. Polycycles azotés

Certains composés polycycliques nitraminés ont été synthétisés, comme par exemple :



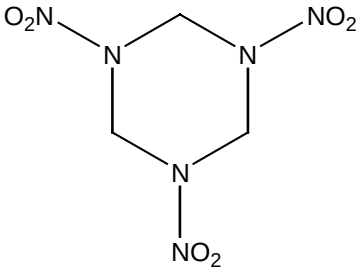
bicyclo-HMX

ou bien :

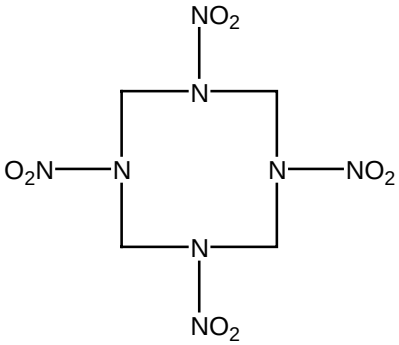


trans-1,4,5,8-tétranitro-1,4,5,8-tétraazadécaline (TNAD)
[135877-16-6]

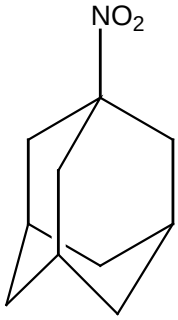
Les recherches effectuées sur ces molécules ont été restreintes depuis la découverte d'un nouveau composé. En effet, à partir de substances telles que le RDX ou le HMX, des nitramines cycliques bidimensionnelles ont été fabriquées (nitroadamantane ou nitroazaadamantane). Grâce à ces structures, une molécule cyclique nitraminée et tridimensionnelle a pu être synthétisée : le **CL-20** (également appelé hexanitrohexaazaisowurtzitane ou HNIW).



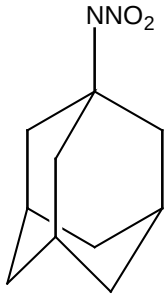
hexogène (RDX)
[121-82-4]



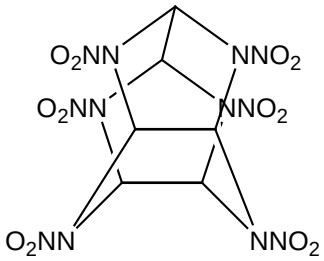
octogène (HMX)
[2691-41-0]



nitroadamantane
[7575-82-8]



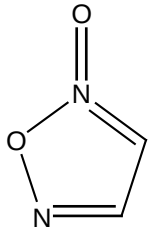
nitroazaadamantane



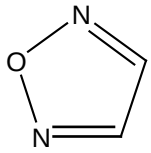
hexanitrohexaazaisowurtzitane (HNIW)
[135285-90-5]

1.2.2. Molécules oxydantes

Certaines molécules oxydantes de type furoxane sont également dignes d'intérêt [contribution à l'enthalpie de formation = 334,7 kJ.mol^{-1}] :

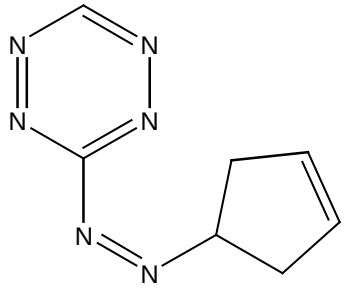


et, plus particulièrement, les molécules appartenant à la série des furazanes (pour des raisons de sensibilité) [contribution à l'enthalpie de formation = 387,0 kJ.mol^{-1}] :



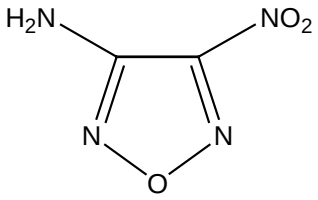
1.2.3. Molécules réductrices

Des recherches sur des molécules très azotées sont entreprises, telles que :

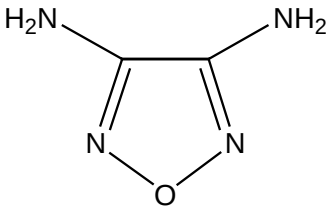


1.2.4. Exemples

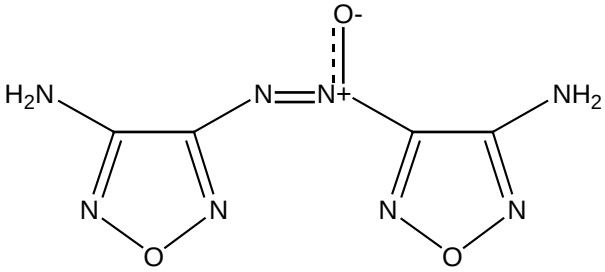
Voici quelques exemples de structures intéressant particulièrement le secteur industriel des matériaux énergétiques :



3-amino-4-nitrofurazane (ANF)



3,4-diaminofurazane (DAF)



3,3'-diamino-4,4'-azoxyfurazane (DAAF)

Plusieurs groupes typiques se retrouvent dans les molécules présentées ci-avant, tels que le C_I-(N)(C_I), le O-(N_I)$_2$, le N-(C_I)(H)$_2$, le N-(NO_2)(C)$_2$, le N_I-(O) ou bien encore le groupe NO_e-(O) (*cf.* définition des groupes de Benson aux paragraphes 2.2. et 2.4.2.). La contribution de ces groupes, particulièrement intéressants pour le secteur industriel des matériaux énergétiques, doit donc absolument être déterminée au cours de cette étude.

2. Méthodes de contribution de groupes

2.1. Principe de base

On rassemble sous le terme de "méthodes de contribution de groupes" l'ensemble des méthodes prédictives permettant d'évaluer une propriété quelconque en sommant des contributions relatives à des fragments de molécules.

Les méthodes de contribution de groupes sont régulièrement étudiées. Elles permettent un calcul rapide et simple de différentes grandeurs thermodynamiques de substances pures ou de mélanges.

En 1932, Parks et Huffmann ont démontré que certaines fonctions thermodynamiques de composés organiques pouvaient être raisonnablement calculées à partir de paramètres liés aux structures moléculaires [3]. Depuis, plusieurs auteurs ont cherché à mettre en place des méthodes prédictives, celles-ci étant le plus souvent appliquées au calcul des propriétés thermodynamiques en phase gazeuse, telles que les enthalpies de formation ($\Delta_f H°_g$), les capacités calorifiques ($c_{P,g}$) et les entropies ($S°_g$).

2.2. Hiérarchie des groupes

Benson et Buss [4] ont montré, en 1958, qu'il était possible d'établir un système hiérarchique en ce qui concerne les lois d'additivité permettant d'évaluer certaines propriétés moléculaires.

2.2.1. Groupe d'ordre 0 : contribution atomique

Le découpage en groupes d'ordre 0 correspond à la prise en compte de chacun des atomes présents dans une molécule donnée. Ainsi, chaque atome constitue un groupe du composé étudié. Tout élément appartenant au tableau de Mendeleïev peut donc être un groupe d'ordre 0.

La propriété recherchée concernant le composé étudié est ainsi considérée comme étant une somme de contributions atomiques.

2.2.2. Groupe d'ordre 1 : contribution des liaisons entre atomes

La molécule est, dans ce cas, découpée en différents éléments ne dépendant aucunement de leur environnement. En effet, si un même groupe est présent dans une molécule ou dans une autre, sa valeur de contribution reste identique quelque soit le groupe ou l'atome auquel il est lié. Par exemple, si dans une molécule, le groupe $-CH_3$ est lié au groupe $-CH_2-$, sa contribution est la même que si ce groupe est lié au groupe -OH. Les interactions à longue distance n'influent donc aucunement dans ce cas.

Alliant une relative simplicité à une précision satisfaisante (de l'ordre de 40 à 80 $kJ.mol^{-1}$ pour le calcul des enthalpies de formation [précision acceptable pour un certain nombre de composés dont l'enthalpie de formation est grande en valeur absolue]), les méthodes utilisant les contributions de groupes de premier ordre sont assez souvent employées. Cependant, il est indispensable de souligner que certaines de ces méthodes ne sont pas fiables. En effet, l'estimation des températures normales d'ébullition (grandeurs

indispensables dans les procédés de séparation) a souvent été remise en cause (Horvath [5]). De plus, l'évaluation de la température critique des composés par ces méthodes requiert la détermination expérimentale des températures normales d'ébullition. Or, celles-ci ne sont pas toujours disponibles dans la littérature. Par ailleurs, la représentation des structures moléculaires par des groupes d'ordre 1 est, dans certains cas, tellement simplifiée (de par la définition même des groupes) que les isomères ne peuvent être distingués.

Afin de pallier aux différents inconvénients présentés par ces techniques, Fedors [6] a proposé une méthode d'estimation de la température critique exclusivement basée sur la structure moléculaire des composés. Malgré sa précision peu satisfaisante, cette technique a souvent été recommandée en raison de son caractère purement prédictif (Daubert et Danner [7]).

Quant à Jalowka et Daubert [8] ainsi que Daubert et Bartakovits [9], ils ont employé une méthode de contribution de groupes d'un ordre supérieur, s'inspirant de la technique mise en œuvre par Benson *et al.* [4] qui a introduit la notion de groupements fonctionnels.

2.2.3. Groupe d'ordre 2 : contribution des groupements fonctionnels

Un groupe est constitué d'un atome central de valence strictement supérieure à 1, et de l'ensemble des liaisons qu'il forme avec ses voisins. Un groupe peut s'écrire de la manière suivante :

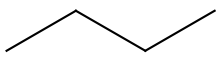
$$X\text{-}(A)_i(B)_j(C)_k(D)_l$$

où X représente l'atome central auquel sont liés *i* atome(s) A, *j* atome(s) B, *k* atome(s) C et *l* atome(s) D. On peut prendre pour exemple l'atome de carbone, C. Si ce dernier est un atome central, il peut former plusieurs groupes, tels que $C\text{-}(C)(H)_3$, $C\text{-}(C_B)(H)_3$, $C\text{-}(CO)(H)_3$, $C\text{-}(N)(H)_3$,… A noter qu'une description complète du formalisme de Benson est donnée au paragraphe 2.4.

Dans les méthodes de contribution de groupes de deuxième ordre, l'environnement complet de chaque atome central est pris en compte, contrairement aux techniques utilisant des groupes de premier ordre.

Ce type de contribution permet d'obtenir des résultats d'une précision tout à fait satisfaisante pour les calculs de grandeurs thermochimiques (de l'ordre de 4 $kJ.mol^{-1}$).

Afin d'illustrer les différents découpages évoqués plus haut (dans les paragraphes 2.2.1., 2.2.2. et 2.2.3.), prenons l'exemple d'une molécule "simple", la molécule de butane :



butane
[106-97-8]

Le tableau ci-dessous décrit le découpage à effectuer dans le cas de l'emploi d'une méthode de contribution de groupes d'ordre 0, 1 ou 2.

Méthode	Groupe	Nombre de groupes
Méthode d'ordre 0	C	4
	H	10
Méthode d'ordre 1	$-CH_3$	2
	$-CH_2-$	2
Méthode d'ordre 2	$C-(C)(H)_3$	2
	$C-(C)_2(H)_2$	2

Tableau I-2 : Découpage de la molécule de butane en groupes d'ordre 0, en groupes d'ordre 1 et en groupes d'ordre 2.

2.3. Revue des méthodes de contribution de groupes d'ordres 1 et 2

2.3.1. Prévision de propriétés de composés purs

Les différentes approches évoquées ci-dessous ont été sélectionnées en raison de l'étendue de leur domaine d'application et/ou de leur précision. La liste est loin d'être exhaustive mais permet de se familiariser avec quelques-unes des méthodes reconnues les plus importantes.

a. Méthode de Joback et al. [10,11]

Les propriétés critiques sont d'un grand intérêt car elles apparaissent dans de nombreuses équations d'état. Beaucoup d'auteurs ont donc tenté de mettre en place des méthodes permettant d'estimer ces valeurs (T_c, température critique, P_c, pression critique et V_c, volume critique), à commencer par Lydersen [12]. Une trentaine d'années plus tard, Joback a ré-évalué les contributions de groupes de premier ordre établies par Lydersen et a ajouté plusieurs groupes fonctionnels. De nouvelles valeurs de contributions de groupes ont ainsi été déterminées. Les relations suivantes ont alors été proposées [11] :

$$T_c = T_{eb}\left\{0{,}584 + 0{,}965\left[\sum_k N_k(t_{ck})\right] - \left[\sum_k N_k(t_{ck})\right]^2\right\}^{-1} \quad (2)$$

$$P_c = \left(0{,}113 + 0{,}0032.N_{atomes} - \sum_k N_k(p_{ck})\right)^{-2} \quad (3)$$

$$V_c = 17{,}5 + \sum_k N_k(v_{ck}) \quad (4)$$

où t_{ck}, p_{ck}, v_{ck} : contributions de groupes pour la détermination, respectivement, de T_c, P_c et V_c

N_k : nombre de groupes de type k dans la molécule

N_{atomes} : nombre d'atomes dans la molécule

Le point d'ébullition, T_{eb}, nécessaire à l'évaluation des températures critiques (*cf.* équation (2)) peut être une valeur expérimentale ou bien une valeur calculée.

Les relations établies par Joback et Reid permettant d'estimer les températures de fusion, T_f, et d'ébullition, T_{eb}, sont :

$$T_f = 122 + \sum_k N_k (t_{fk}) \tag{5}$$

$$T_{eb} = 198 + \sum_k N_k (t_{ebk}) \tag{6}$$

où t_{fk}, t_{ebk} : contributions de groupes

Cette méthode fut modifiée par Devotta et Pendyala [13] afin de traiter de façon plus précise le cas des températures d'ébullition des composés halogénés.

Plusieurs autres grandeurs sont évaluées par la méthode de Joback et Reid :

- l'enthalpie de formation en phase gazeuse, à $T = 298{,}15$ K

$$\Delta_f H_g^0 = 68{,}29 + \sum_k N_k (d_f h_k) \tag{7}$$

- l'enthalpie libre de formation en phase gazeuse, à $T = 298{,}15$ K

$$\Delta_f G_g^0 = 53{,}88 + \sum_k N_k (d_f g_k) \tag{8}$$

- la capacité calorifique

$$c_P^0 = \sum_k N_k (c_{Ak}) - 37{,}93 + \left[\sum_k N_k (c_{Bk}) + 0{,}210\right] T + \left[\sum_k N_k (c_{Ck}) - 3{,}91.10^{-4}\right] T^2 + \left[\sum_k N_k (c_{Dk}) + 2{,}06.10^{-7}\right] T^3 \tag{9}$$

- l'enthalpie de fusion

$$\Delta H_{fus} = -0{,}88 + \sum_k N_k (dh_{fusk}) \tag{10}$$

- l'enthalpie de vaporisation, à T_{eb}

$$\Delta H_{vap} (T_{eb}) = 15{,}30 + \sum_k N_k (dh_{vapk}) \tag{11}$$

- la viscosité d'un liquide

$$\eta_l = M \times \exp\left[\frac{\sum_k N_k (\eta_{Ak}) - 597{,}82}{T} + \sum_k N_k (\eta_{Bk}) - 11{,}202\right] \tag{12}$$

où $df h_k$, $df g_k$, c_{Ak}, c_{Bk}, c_{Ck}, c_{Dk}, dh_{fusk}, dh_{vapk}, η_{Ak}, η_{Bk} : contributions de groupes
M : masse molaire

Le nombre de composés employés afin d'établir les équations présentées ci-dessus, l'erreur absolue moyenne et la déviation standard pour pratiquement chacune des propriétés estimées sont rassemblés dans le tableau suivant :

Propriété	Nombre de données	Erreur absolue moyenne	Déviation standard
T_c	409	4,8 K	6,9 K
P_c	392	$2{,}1.10^5$ Pa	$3{,}2.10^5$ Pa
V_c	310	$7{,}5.10^{-6}$ $m^3.mol^{-1}$	$13{,}2.10^{-6}$ $m^3.mol^{-1}$
T_f	388	22,6 K	24,7 K
T_{eb}	438	12,9 K	17,9 K
$\Delta_f H°_g$	378	8,4 $kJ.mol^{-1}$	18,0 $kJ.mol^{-1}$
$\Delta_f G°_g$	328	8,4 $kJ.mol^{-1}$	18,3 $kJ.mol^{-1}$
ΔH_{fus}	155	2,0 $kJ.mol^{-1}$	2,8 $kJ.mol^{-1}$
ΔH_{vap} (T_{eb})	368	1,27 $kJ.mol^{-1}$	1,79 $kJ.mol^{-1}$

Tableau I-3 : Erreurs absolues moyennes et déviations standard obtenues grâce à la méthode de Joback et Reid [11]**.**

b. Méthode de Constantinou et Gani [14]

Souvent, les méthodes de contribution de groupes ne parviennent pas à distinguer les différentes formes isomériques de composés similaires, comme ont pu le remarquer Ourique et Silva Telles [15].

Constantinou et Gani ont donc proposé une alternative en développant une méthode basée sur les groupes UNIFAC (décrite au paragraphe 2.3.2. b.). Chaque propriété est définie par une fonction (détaillée ci-après) qui inclut des groupes de premier ordre et des groupes de deuxième ordre. Les auteurs ont ainsi démontré qu'en tenant compte d'un nombre plus important de données relatives à la structure moléculaire d'une substance, il est possible d'améliorer significativement la précision de certaines grandeurs thermodynamiques concernant des composés purs.

Les relations suivantes permettent d'évaluer les propriétés critiques T_c, P_c et V_c :

$$T_c = 181{,}128 \times \ln\left[\sum_k N_k (t_{c1k}) + \sum_j M_j (t_{c2j})\right] \tag{13}$$

$$P_c = \left[\sum_k N_k (p_{c1k}) + \sum_j M_j (p_{c2j}) + 0{,}10022\right]^{-2} + 1{,}3705 \tag{14}$$

$$V_c = -0{,}00435 + \left[\sum_k N_k (v_{c1k}) + \sum_j M_j (v_{c2j})\right] \tag{15}$$

où N_k : nombre de groupes de premier ordre de type k dans la molécule
M_j : nombre de groupes de deuxième ordre de type j dans la molécule

t_{c1k}, p_{c1k}, v_{c1k} : contributions de groupes de premier ordre
t_{c2j}, p_{c2j}, v_{c2j} : contributions de groupes de deuxième ordre

Les températures de fusion et d'ébullition sont calculées selon :

$$T_f = 102{,}425 \times \ln\left[\sum_k N_k (t_{f1k}) + \sum_j M_j (t_{f2j})\right] \tag{16}$$

$$T_{eb} = 204{,}359 \times \ln\left[\sum_k N_k (t_{eb1k}) + \sum_j M_j (t_{eb2j})\right] \tag{17}$$

où t_{f1k}, t_{eb1k} : contributions de groupes de premier ordre
t_{f2j}, t_{eb2j} : contributions de groupes de deuxième ordre

Par ailleurs, la méthode de Constantinou et Gani permet d'évaluer les enthalpies standard de formation en phase gazeuse, les enthalpies libres standard de formation en phase gazeuse et les enthalpies standard de vaporisation, à T = 298,15 K, comme en témoignent les relations suivantes :

$$\Delta_f H_g^0 = 10{,}835 + \left[\sum_k N_k (d_f h_{1k}) + \sum_j M_j (d_f h_{2j})\right] \tag{18}$$

$$\Delta_f G_g^0 = -14{,}828 + \left[\sum_k N_k (d_f g_{1k}) + \sum_j M_j (d_f g_{2j})\right] \tag{19}$$

$$\Delta H_{vap}^0 = 6{,}829 + \left[\sum_k N_k (dh_{vap1k}) + \sum_j M_j (dh_{vap2j})\right] \tag{20}$$

où d_fh_{1k}, d_fg_{1k}, dh_{vap1k} : contributions de groupes de premier ordre
d_fh_{2j}, d_fg_{2j}, dh_{vap2j} : contributions de groupes de deuxième ordre

Le tableau suivant rassemble le nombre de données utilisées dans les régressions ainsi que les erreurs absolues moyennes obtenues grâce à la méthode proposée, et ceci, sur l'ensemble des propriétés évoquées ci-dessus :

Propriété	Nombre de données	Erreur absolue moyenne
T_c	285	4,85 K
P_c	269	$1{,}13.10^5$ Pa
V_c	251	$6{,}00.10^{-6}$ $m^3.mol^{-1}$
T_f	312	14,03 K
T_{eb}	392	5,35 K
$\Delta_f H°_g$	373	3,71 $kJ.mol^{-1}$
$\Delta_f G°_g$	333	3,24 $kJ.mol^{-1}$
$\Delta H°_{vap}$	225	1,11 $kJ.mol^{-1}$

Tableau I-4 : Erreurs absolues moyennes obtenues grâce à la méthode de Constantinou et Gani [14]**.**

c. Méthode de Basařová et Svoboda [16]

L'objectif de la méthode de Basařová et Svoboda est d'évaluer des enthalpies de vaporisation à toute température, et ceci, pour un grand nombre de composés organiques. Pour cela, les relations suivantes sont utilisées :

$$\Delta H_{vap} = A(1-T_r)^{\alpha} \exp(-\alpha T_r) \text{, avec :} \qquad (21)$$

$$A = \sum_j \nu_j P_j(A) \text{ et } \alpha = \sum_j \nu_j P_j(\alpha)$$

où T_r : température réduite ($T_r = \frac{T}{T_c}$)

ν_j : nombre de groupes

$P_j(A)$, $P_j(\alpha)$: contributions de groupes

Une liste de 307 substances, contenant les éléments C, H, O, N, S et X (halogènes), a permis le calcul des paramètres de structure de l'équation (21). Un total de 73 contributions de groupes de premier ordre, permettant le calcul des paramètres A et α, a été déterminé.

Les résultats de cette méthode ont été comparés à 113 enthalpies de vaporisation mesurées par calorimétrie, à T = 298,15 K. L'erreur relative moyenne observée est de 1,9%.

d. Méthode de Tu et al. [17,18]

Tu [17] a proposé une nouvelle méthode de contribution de groupes permettant de calculer les températures critiques en se basant sur l'équation de Kurata-Isida [19] ainsi que sur les travaux de Teja *et al.* [20]. La relation établie, qui fait intervenir des groupes de premier ordre, est la suivante :

$$T_c = \left[6{,}26897.10^{-4} + 2{,}56086.10^{-3}\left(\frac{1}{2x} + \frac{1}{x^{1/2}}\right)\right]^{-1} \text{, avec :} \qquad (22)$$

$$x = -0{,}160864 + \sum_i b_i N_i$$

où b_i : contribution de groupes

N_i : nombre de groupes i dans la molécule

Un total de 40 contributions de groupes a été établi. Les résultats observés pour 532 composés organiques ont montré que l'erreur moyenne était de 12,5 K et la déviation standard de 16,3 K. Des comparaisons avec les méthodes de Fedors [6] et Joback [10] ont montré que la technique introduite par Tu [17] était la plus précise des trois.

En 1996, Tu et Liu [18] ont étendu la méthode de contribution de groupes de Tu à l'estimation des enthalpies de vaporisation de composés organiques liquides. Pour cela, ils ont tout d'abord comparé les résultats d'estimation obtenus par 14 relations différentes utilisant la température critique comme seule propriété physique nécessaire à l'évaluation. Il en a été

déduit que l'équation de Graue *et al.* [21] contenant trois constantes était celle qui permettait d'obtenir les résultats les plus satisfaisants :

$$\Delta H_{vap} = A(1-T_r)^{1/3} + B(1-T_r)^{2/3} + C(1-T_r) \tag{23}$$

où T_r : température réduite
A, B, C : constantes

Tu et Liu ont ensuite introduit la notion de contribution de groupes dans l'équation (23) en établissant la relation suivante (faisant intervenir des groupes de premier ordre) :

$$\Delta H_{vap} = \sum_{i=1}^{39} N_i \left[a_i \left(1-\frac{T}{T_c}\right)^{1/3} + b_i \left(1-\frac{T}{T_c}\right)^{2/3} + c_i \left(1-\frac{T}{T_c}\right) \right] \tag{24}$$

où N_i : nombre de groupes i dans la molécule
a_i, b_i, c_i : contributions de groupes

L'ensemble des 509 composés organiques liquides étudiés a permis de démontrer l'efficacité de la méthode développée. Les 39 valeurs de contributions de groupes déterminées ont abouti à l'obtention d'une erreur moyenne absolue de 0,74 kJ.mol^{-1} et d'une déviation standard de 1,08 kJ.mol^{-1}. Un travail comparatif a montré la supériorité de la technique décrite ci-dessus par rapport, notamment, à la méthode de Basařová et Svoboda [16].

e. Méthode de Wilson et Jasperson [22,23]

Wilson et Jasperson ont développé trois méthodes permettant d'évaluer les propriétés critiques T_c et P_c de molécules organiques et inorganiques. La méthode d'ordre nul mise en place, qui est une technique itérative, est moins précise que les méthodes d'ordre 1 et d'ordre 2 (d'un facteur 2 voire 3), en particulier en ce qui concerne l'estimation des pressions critiques. Quant aux méthodes de premier et deuxième ordres, elles utilisent les équations suivantes :

$$T_c = T_{eb} / \left[0{,}048271 - 0{,}019846 N_r + \sum_k N_k(\Delta t_{ck}) + \sum_j M_j(\Delta t_{cj}) \right]^{0,2} \tag{25}$$

$$P_c = \frac{0{,}0186233.T_c}{-0{,}96601 + \exp(Y)}, \text{ avec :} \tag{26}$$

$$Y = -0{,}00922295 - 0{,}0290403.N_r + 0{,}041 \left[\sum_k N_k(\Delta p_{ck}) + \sum_j M_j(\Delta p_{cj}) \right]$$

où N_r : nombre de cycles dans la molécule
N_k : nombre d'atomes de type k dans la molécule
M_j : nombre de groupes de deuxième ordre de type j dans la molécule
Δt_{ck}, Δp_{ck} : contributions de groupes de premier ordre
Δt_{cj}, Δp_{cj} : contributions de groupes de deuxième ordre

f. Méthode de Marrero et Pardillo [24]

Marrero-Marejón et Pardillo-Fontdevila ont décrit une nouvelle technique, appelée méthode de contribution de groupe-interaction, permettant d'estimer des propriétés critiques, selon :

$$T_c = T_{eb} / \left[0{,}5851 - 0{,}9286 \left(\sum_k N_k (t_{ck}) \right) - \left(\sum_k N_k (t_{ck}) \right)^2 \right] \tag{27}$$

$$P_c = \left(0{,}1285 - 0{,}0059 . N_{atomes} - \sum_k N_k (p_{ck}) \right)^{-2} \tag{28}$$

$$V_c = 25{,}1 + \sum_k N_k (v_{ck}) \tag{29}$$

où N_k : nombre d'atomes de type k dans la molécule
N_{atomes} : nombre d'atomes dans le composé
t_{ck}, p_{ck}, v_{ck} : contributions de groupes

Les auteurs considèrent ici, non plus des contributions de groupes, mais des contributions d'interactions entre des groupes liants. On peut distinguer deux types de groupes essentiels :

1. des paires d'atomes (ex : >C< & -O-) ;
2. des paires d'atomes liés à des atomes d'hydrogène (ex : -CH_2- & -OH)

A noter que Marrero et Pardillo ont proposé une méthode d'estimation de la température d'ébullition, T_{eb}, requise dans l'équation (27) :

$$T_{eb} = M^{-0{,}404} \sum_k N_k (t_{ebk}) + 156{,}00 \tag{30}$$

où M : masse molaire
t_{ebk} : contribution de groupes

Une liste de 507 molécules a permis de mettre en place cette méthode. Afin de tester l'efficacité de leur technique, les auteurs ont créé deux banques de données ; l'une destinée à ajuster les équations (27) à (29) et à déterminer les valeurs de contributions de groupes, et l'autre vouée au test d'estimation des propriétés à évaluer. Le nombre de composés utilisés pour l'évaluation des différentes grandeurs est rassemblé dans le tableau ci-dessous, ainsi que les erreurs absolues moyennes :

Propriété	*Première banque de données*		*Deuxième banque de données*	
	Nombre de données	**Erreur absolue moyenne**	**Nombre de données**	**Erreur absolue moyenne**
T_c	391	2,61 K	90	2,73 K
P_c	345	0,98 bar	87	1,00 bar
V_c	189	$4{,}33.10^{-6}$ $m^3.mol^{-1}$	83	$4{,}69.10^{-6}$ $m^3.mol^{-1}$
T_{eb}	407	4,87 K	98	5,22 K

Tableau I-5 : Erreurs absolues moyennes obtenues grâce à la méthode de Marrero et Pardillo pour les deux listes de composés étudiés [24]**.**

Ces travaux ont été comparés aux résultats d'estimation de températures d'ébullition obtenus grâce à la méthode de Constantinou et Gani [14], pour différents isomères du n-octane. La technique développée par Marrero et Pardillo obtient une erreur absolue moyenne de 2,7 K contre 3,3 K pour Constantinou et Gani. Il apparaît donc que la méthode créée par Marrero et Pardillo permet une meilleure distinction des isomères. Par ailleurs, elle est plus précise que les méthodes de contribution de groupes de premier ordre classiques.

g. Méthode de Dalmazzone et al. [25]

Le laboratoire a déjà développé une méthode de contribution de groupes de deuxième ordre permettant de calculer des enthalpies de vaporisation de différents composés organiques liquides (*cf.* travaux de Ducros *et al.* [26-29]). Celle-ci est très précise mais n'est applicable qu'à la température ambiante. Par ailleurs, la dépendance thermique non négligeable de l'enthalpie de vaporisation, en particulier près du point critique, n'est pas prise en compte. Ceci conduit à des erreurs importantes d'évaluation d'enthalpies de changement d'état pour des substances ayant une basse température critique.

L'objectif essentiel de Dalmazzone *et al.* [25] a donc été de pallier à ces lacunes en développant une méthode ne nécessitant qu'un seul et même découpage des molécules étudiées en groupes de deuxième ordre, afin de déterminer des températures critiques et des enthalpies de vaporisation. Les relations présentées ci-dessous permettent d'évaluer, respectivement, les températures critiques et les enthalpies de vaporisation de composés contenant des atomes de C, H, O, N, S, Cl et Br :

$$T_c = 5{,}926.A \times \left(0{,}5503.\ln B + 0{,}6.B^2\right)^{-1}, \text{ avec :} \qquad (31)$$

$$A = \sum_i N_i A_i \text{ et } B = \sum_i N_i B_i$$

$$\Delta H_{vap} = \alpha\left(1 - T_r\right)^{\sqrt{\beta - \beta.T_r + \beta.T_r^2}}, \text{ avec :} \qquad (32)$$

$$\alpha = \sum_i N_i \alpha_i \text{ et } \beta = \sum_i N_i \beta_i$$

où N_i : nombre de groupes *i* dans la molécule

A_i, B_i, α_i, β_i : contributions de groupes

L'étude d'une liste de 389 molécules organiques a permis de déterminer l'ensemble des contributions de groupes. Une comparaison des résultats obtenus sur les températures critiques a été réalisée avec les méthodes de Joback et Reid [11] et de Constantinou et Gani [14]. L'écart moyen entre les valeurs expérimentales et calculées par la méthode développée est de 5,63 K. De même, les enthalpies de vaporisation évaluées à 298,15 K et à T_{eb} ont été comparées aux travaux de Basařová et Svoboda [16]. La précision obtenue sur les résultats estimés par la nouvelle méthode est en moyenne multipliée par deux par rapport à la technique de Basařová et Svoboda.

Le tableau ci-dessous résume les informations essentielles à retenir concernant les méthodes de contribution de groupes évoquées plus haut.

Méthode	**Ordre**	**Propriété déterminée**	**Commentaire**
Joback *et al.* [10,11]	1	T_c, P_c, V_c, T_f, T_{eb}, $\Delta_f H°_g$, $\Delta_f G°_g$, $c_P°$, ΔH_{fus}, $\Delta H_{vap}(T_{eb})$, η_l	Prévision d'un grand nombre de propriétés
Constantinou et Gani [14]	1 et 2	T_c, P_c, V_c, T_f, T_{eb}, $\Delta_f H°_g$, $\Delta_f G°_g$, $\Delta H°_{vap}$	Précision globale deux fois meilleure que celle obtenue grâce à la méthode de Joback *et al.*
Basařová et Svoboda [16]	1	$\Delta H_{vap}(T)$	Prévision des enthalpies de vaporisation à toute température (et non pas seulement à T_{eb} ou à 298,15 K)
Tu *et al.* [17,18]	1	T_c, $\Delta H_{vap}(T)$	Méthode prédictive plus précise que celle de Joback *et al.* pour T_c Méthode prédictive plus précise que celle de Basařová et Svoboda pour $\Delta H_{vap}(T)$
Wilson et Jasperson [22,23]	1 et 2	T_c, P_c	Précision homogène obtenue sur les petites et grosses molécules (contrairement aux méthodes de Joback *et al.* et de Constantinou et Gani)
Marrero et Pardillo [24]	1	T_c, P_c, V_c, T_{eb}	Précision globale deux fois meilleure que celle obtenue grâce à la méthode de Joback *et al.*
Dalmazzone *et al.* [25]	2	T_c, $\Delta H_{vap}(T)$	Un seul et même découpage des molécules pour prévoir T_c et $\Delta H_{vap}(T)$ Précision deux fois meilleure que celle obtenue grâce à la méthode de Basařová et Svoboda

Tableau I-6 : Récapitulatif des méthodes estimant des propriétés de corps purs.

2.3.2. Prévision de propriétés de mélanges

L'extension du domaine d'application des méthodes de contribution de groupes a été suggérée par Langmuir [30]. Celui-ci a proposé d'utiliser le concept d'additivité de ces

contributions afin d'estimer des propriétés de mélanges. Quelques méthodes ont été développées afin d'évaluer des enthalpies de mélanges et des coefficients d'activité. Celles-ci se sont avérées fort utiles. En effet, le nombre de fluides purs utilisés dans l'industrie chimique est déjà très important. Le nombre de mélanges différents qui peuvent être formés à partir de corps purs est donc considérable.

Deux méthodes d'estimation des coefficients d'activité sont présentées dans ce qui suit : la méthode ASOG et la méthode UNIFAC. Ces dernières suivent toutes les deux les propositions et hypothèses énoncées par Wilson [31]. Celui-ci donne l'expression de l'enthalpie libre d'excès molaire partielle G^E à partir de laquelle on calcule le coefficient d'activité γ_i :

$$RT \ln \gamma_i = \mu_i^E = \left(\frac{\partial G^E}{\partial N_i} \right)_{T,P,N_j}$$

Le coefficient d'activité γ_i d'un composé *i* dans un mélange s'écrit comme étant la somme de deux contributions :

$$\ln \gamma_i = \ln \gamma_{i,combinatoire} + \ln \gamma_{i,résiduel} \tag{33}$$

La première de ces contributions est dite combinatoire. Celle-ci correspond aux différences de taille et de forme des constituants du mélange considéré. Quant à la seconde contribution, dite résiduelle, elle prend en compte les interactions entre groupes.

a. Méthode ASOG [32]

La méthode ASOG (Analytical Solution Of Groups) a été développée par plusieurs auteurs [31,33-37].

Dans le cas de cette méthode, la partie combinatoire de l'équation (33) est reprise de la théorie de Flory-Huggins [38] (théorie développée pour le calcul des propriétés thermodynamiques de solutions de polymères et qui tient compte des différences de taille des molécules) :

$$\ln \gamma_{i,combinatoire} = 1 - R_i + \ln R_i , \tag{34}$$

$$\text{avec } R_i = \frac{\nu_i}{\sum_{j=1}^{n} x_j \nu_j}$$

où ν_i : nombre d'atomes, autres que l'atome H, dans la molécule *i*

ν_j : nombre d'atomes, autres que l'atome H, dans la molécule *j*

x_j : fraction molaire du composé *j* dans le mélange

La partie résiduelle de l'équation (33) s'écrit :

$$\ln \gamma_{i,résiduel} = \sum_k \nu_{ki} \ln \Gamma_k - \sum_k \nu_{ki} \ln \Gamma_{ki} \tag{35}$$

où ν_{ki} : nombre de groupes *k* dans le constituant *i*

Γ_k : coefficient d'activité du groupe k

Γ_{ki} : coefficient d'activité du groupe k dans une solution de référence ne contenant que des molécules de type i

Le coefficient d'activité Γ_k est donné par l'équation de Wilson [35] (basée notamment sur la théorie de Flory-Huggins) :

$$\ln \Gamma_k = 1 - \ln\left(\sum_l X_l a_{kl} \right) - \sum_l \left(\frac{X_l a_{lk}}{\sum_m X_m a_{lm}} \right), \text{ avec :} \tag{36}$$

$$X_k = \frac{\sum_{i=1}^{n} x_i \nu_{ki}}{\sum_l \sum_{j=1}^{n} x_j \nu_{lj}} \; ; \; a_{kl} = \exp\left(m_{kl} + \frac{n_{kl}}{T} \right) \text{ et } a_{kl} \neq a_{lk}$$

où X_k : fraction molaire du groupe k dans le mélange

x_j : fraction molaire du composé j dans le mélange

ν_{lj} : nombre de groupes l dans le constituant j

a_{kl}, a_{lk} : paramètres binaires d'interaction entre les groupes k et l

m_{kl}, n_{kl} : paramètres obtenus par régression de données d'équilibre liquide-vapeur

Nombre de paramètres m_{kl} et n_{kl} ont été déterminés par Derr et Deal [36], ainsi que par Kojima et Tochigi [32,39].

b. Méthode UNIFAC [40]

Le modèle UNIFAC (*UNI*QUAC *F*unctional-group *A*ctivity *C*oefficients) est basé sur le modèle ASOG développé par Derr et Deal [36], et sur l'équation UNIQUAC (UNIversal QUAsi-Chemical) [41]. Abrams et Prausnitz ont montré que l'équation UNIQUAC permettait d'obtenir une bonne représentation des équilibres vapeur-liquide et liquide-liquide pour les mélanges binaires et multi-composés ne contenant pas d'électrolytes. Dans le cas d'un mélange multi-composés, les contributions combinatoire et résiduelle de l'équation UNIQUAC pour le coefficient d'activité d'une molécule i sont respectivement exprimées de la manière suivante :

$$\ln \gamma_{i,combinatoire} = \ln \frac{\Phi_i}{x_i} + \frac{z}{2} q_i \ln \frac{\theta_i}{\Phi_i} + l_i - \frac{\Phi_i}{x_i} \sum_j x_j l_j \tag{37}$$

$$\ln \gamma_{i,résiduel} = q_i \left[1 - \ln\left(\sum_j \theta_j \tau_{ji} \right) - \sum_j \left(\frac{\theta_j \tau_{ij}}{\sum_k \theta_k \tau_{kj}} \right) \right] \tag{38}$$

$$l_i = \frac{z}{2}(r_i - q_i) - (r_i - 1) \; ; \; z = 10 \; ; \; \theta_i = \frac{q_i x_i}{\sum_j q_j x_j} \; ; \; \Phi_i = \frac{r_i x_i}{\sum_j r_j x_j} \; ; \; \tau_{ji} = \exp - \left(\frac{u_{ji} - u_{ii}}{RT} \right)$$

où x_i : fraction molaire du composé i
θ_i : fraction surfacique
Φ_i : fraction volumique
r_i : volume moléculaire de Van der Waals
q_i : surface moléculaire

Les paramètres binaires ajustables τ_{ij} et τ_{ji} doivent être évalués à partir de données expérimentales d'équilibre de phase.

Dans la méthode UNIFAC, la partie combinatoire de l'équation UNIQUAC est utilisée telle quelle. Seule des propriétés de corps purs interviennent ici. Pour calculer les fractions θ_i et Φ_i, il faut connaître les paramètres moléculaires correspondants, r_i et q_i. Ceux-ci sont obtenus à l'aide des paramètres de volume et de surface de chaque groupe, R_k et Q_k, selon :

$$r_i = \sum_k v_{ki} R_k \text{ et } q_i = \sum_k v_{ki} Q_k \text{, avec :}$$

$$R_k = \frac{V_{\omega k}}{15{,}17} \text{ et } Q_k = \frac{A_{\omega k}}{2{,}5.10^9}$$

où v_{ki} : nombre de groupes de type k dans la molécule i
R_k : contribution de groupe au volume
Q_k : contribution de groupe à la surface

$V_{\omega k}$ et $A_{\omega k}$ sont respectivement des groupes de volume et de surface publiés par Bondi [42].

La partie résiduelle de la méthode UNIFAC s'écrit selon l'équation (35) et le coefficient d'activité Γ_k est calculé de la manière suivante :

$$\ln \Gamma_k = Q_k \left[1 - \ln\left(\sum_m \Theta_m \Psi_{mk}\right) - \sum_m \frac{\Theta_m \Psi_{km}}{\sum_n \Theta_n \Psi_{nm}} \right] \tag{39}$$

$$\Theta_m = \frac{Q_m X_m}{\sum_n Q_n X_n} \text{ et } \Psi_{mn} = \exp - \left[\frac{U_{mn} - U_{nn}}{RT} \right] = \exp - \left(\frac{a_{mn}}{T} \right)$$

où Θ_m : fraction surfacique du groupe m
X_m : fraction molaire du groupe m dans le mélange
U_{mn} : mesure de l'énergie d'interaction entre les groupes m et n
a_{mn} : contribution de groupe-interaction (doit être évaluée à partir de données expérimentales d'équilibre de phase)

L'équation (39) est également valable pour le calcul de Γ_{ki}.
Précisons que les paramètres R_k, Q_k et a_{mn} sont fournis par Hansen *et al.* [43].

Des comparaisons entre des valeurs expérimentales et des valeurs estimées par la méthode UNIFAC ont été effectuées et ont montré que, dans la plupart des cas, les erreurs relatives sont inférieures à 20%.

Depuis, le modèle a régulièrement été développé et la matrice des paramètres d'interaction s'est considérablement étendue. Outre ces extensions, plusieurs variantes de la méthode ont été proposées : Larsen *et al.* [44], Weidlich et Gmehling [45], Gmehling *et al.* [46] et Lohmann et Gmehling [47]. Ces derniers ont modifié le terme combinatoire et précisé la variation des paramètres avec la température grâce à la prise en compte de chaleurs de mélange.

Les méthodes ASOG et UNIFAC sont assez proches. Cependant, la technique la plus utilisée actuellement est UNIFAC en raison, notamment, de la publication d'un plus grand nombre de groupes.

2.4. Méthode de Benson

2.4.1. Définition

La **méthode de Benson** [48] utilise des contributions de groupes de deuxième ordre (*cf.* paragraphe 2.2.3.). Les relations suivantes permettent d'estimer des enthalpies standard de formation en phase gazeuse à 298,15 K, des capacités calorifiques, des entropies standard à 298,15 K et des enthalpies libres standard de formation en phase gazeuse à 298,15 K :

$$\Delta_f H_g^0 = \sum_k N_k (d_f h_k) \tag{40}$$

$$c_P^0(T) = \sum_k N_k (c_{Pk}) \tag{41}$$

$$S^0 = \sum_k N_k (s_k) + S_s^0 \text{ , avec :} \tag{42}$$

$$S_s^0 = R\ln(N_{oi}) - R\ln(N_{ts})$$

$$\Delta_f G_g^0 = \Delta_f H_g^0 - 298{,}15 \times \left(S^0 - S_{el}^0\right), \text{ avec :} \tag{43}$$

$$S_{el}^0 = \sum_e N_e (S_e^0)$$

où N_k : nombre de groupes de type k dans la molécule
d_fh_k, c_{Pk}, s_k : contributions de groupes
S_s^0 : entropie standard de symétrie de la molécule
N_{oi} : nombre d'isomères optiques de la molécule (*i.e.* énantiomères)
N_{ts} : nombre de symétrie total
S_{el}^0 : entropie absolue des éléments formant la molécule à T et 101 325 Pa
S_e^0 : entropie absolue d'un élément contenu dans la molécule à T et 101 325 Pa

La relation qui nous intéresse ici est l'équation (40), permettant d'évaluer des enthalpies standard de formation de composés à l'état de gaz parfait.

A noter que la méthode de Benson présente un domaine d'application assez étendu qui comprend, outre les éléments C, H, O, N, S et P, les halogènes (X), des métaux (Al, Ge, Pb,…), des métaux de transition (Ti, V, Cr, Fe,…) et des alcalins et alcalino-terreux (Na, K, Mg,…).

2.4.2. Définition des pseudo-éléments

Chaque élément constitutif d'un groupe est appelé pseudo-élément. Ainsi, dans le groupe C-(N)(CO)(C)(H), les atomes ou groupes d'atomes C, N, CO et H sont des pseudo-éléments du groupe de deuxième ordre précité.

La méthode de Benson différencie plusieurs types d'atomes de carbone, notamment suivant l'hybridation des orbitales atomiques :

Hybridation	Type de liaison	Appellation
$\mathbf{sp^3}$	liaison simple	C
$\mathbf{sp^2}$	liaison double	C_d
sp	liaison triple	C_t

Tableau I-7 : Appellations de l'atome de carbone suivant l'hybridation des orbitales atomiques.

Par ailleurs, C_B représente un atome de carbone appartenant à un noyau benzénique et C_{BF} un atome de carbone appartenant à un noyau benzénique, lui-même accolé à un autre noyau benzénique. C_A correspond à un atome de carbone allénique et C_I représente un atome de carbone dans un groupement imino.

De même, il existe différents atomes d'azote. A l'élément N viennent s'ajouter les atomes nommés N_I (N d'un groupement imino) et N_A (N d'un groupement azo).

Des pseudo-éléments polyatomiques se distinguent : CO (groupement carbonyle), CN (groupement cyano), NO (groupement nitroso) et NO_2 (groupement nitro). De plus, N_3 correspond à la fonction azidure.

2.4.3. Corrections de structure et interactions à longue distance

La technique de Benson présente quelques affinements notables par rapport aux autres méthodes d'ordre 2 puisqu'elle tient compte, notamment, de corrections de structure, telles que des corrections de cycle (ex : cyclohexane).

En effet, des interactions dues à la tension des cycles sont susceptibles d'intervenir dans le calcul des enthalpies de formation. La présence d'un cycle dans une molécule induit la prise en compte d'une énergie supplémentaire. On notera que plus les angles formés par les atomes de carbone dans un cycle plan sont aigus, plus le cycle considéré est tendu et plus la contribution de ce cycle à l'enthalpie de formation est élevée. Cela signifie que la présence d'un cylopropane dans une molécule (angles = 60°) influe de manière plus conséquente que celle d'un cyclobutane (angles = 90°), et ainsi de suite. Rappelons que l'angle formé par un groupe $C-(C)_2(H)_2$ est de 109,5°, et que celui-ci n'engendre pas d'énergie supplémentaire à considérer.

Par ailleurs, des interactions à longue distance sont également prises en compte, telles que les effets de deux atomes ou groupements placés en position ortho, méta ou para sur un cycle benzénique. L'une des interactions ayant son importance est "l'interaction gauche". Elle peut être définie de la manière suivante :

Le butane, de formule brute C_4H_{10}, présente quatre atomes de carbone que l'on nomme ici C1, C2, C3 et C4.

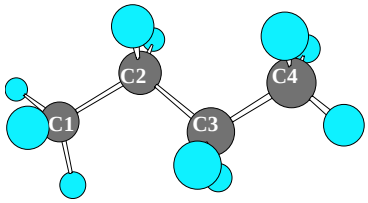


Figure I-1 : Molécule de butane dans sa conformation *antipériplanaire*, correspondant à l'énergie la plus basse de la molécule.

La rotation autour de la liaison formée par les atomes C2 et C3 n'est pas parfaitement libre. Quatre isomères de conformation existent. Ils peuvent être représentés grâce à l'utilisation de la projection de Newman (projection selon une des liaisons carbone-carbone de la chaîne linéaire principale de la molécule) :

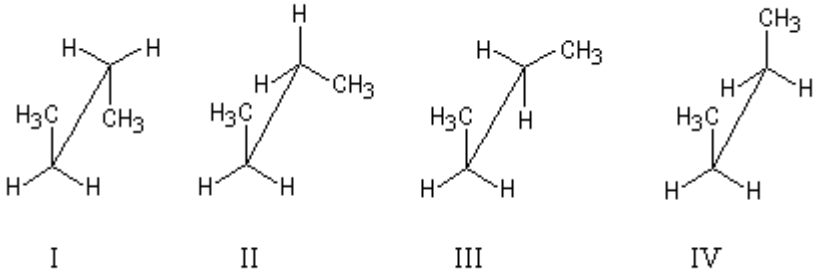


Figure I-2 : Les quatre isomères de conformation du butane.

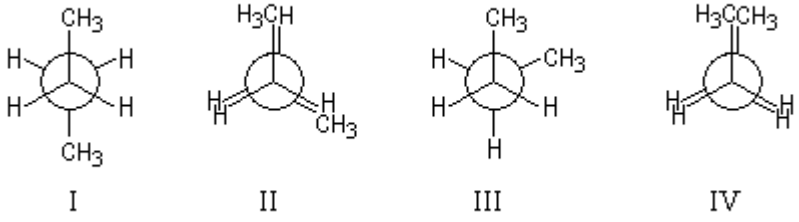


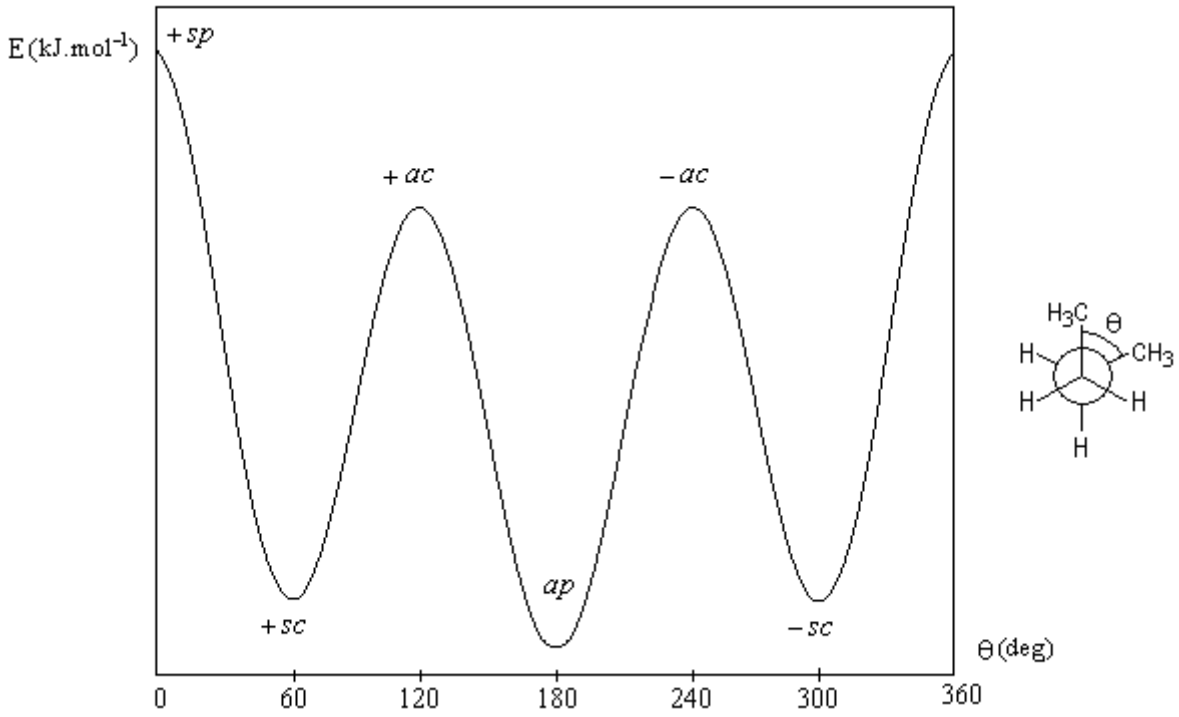
Figure I-3 : Projections de Newman des quatre isomères de conformation du butane.

Les différentes conformations du butane sont désignées par les stéréodescripteurs présentés ci-dessous, introduits par Klyne et Prelog [49] :

Nom	Angle dièdre θ (°)	Conformation
synpériplanaire	0	IV
synclinale	60	III
anticlinale	120	II
antipériplanaire	180	I

Tableau I-8 : Stéréodescripteurs désignant les différentes conformations d'une molécule.

La courbe présentant l'énergie potentielle de la molécule en fonction de l'angle dièdre θ entre les liaisons C-CH_3 a l'allure suivante :



Angle dièdre θ (°)	0	60	120	180
Energie potentielle (kJ.mol^{-1})	18,8	3,8	15,9	0,0

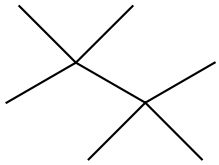
Figure I-4 : Représentation de l'évolution de l'énergie potentielle de la molécule de butane en fonction de l'angle dièdre θ [50]**.**

La différence d'énergie entre la conformation *antipériplanaire* et la conformation *anticlinale* est essentiellement due à l'énergie de torsion.

La différence d'énergie entre la conformation *antipériplanaire* et la conformation *synpériplanaire* est plus élevée car, à l'énergie de torsion, s'ajoute l'énergie de répulsion entre les deux groupes méthyles dont les rayons de Van der Waals (200 pm) sont très supérieurs à celui de l'atome d'hydrogène (120 pm [51]).

Enfin, la différence d'énergie de 3,8 $kJ.mol^{-1}$ entre les conformations *antipériplanaire* et *synclinale* est appelée interaction gauche. Cette dernière se retrouve dans de nombreuses structures organiques.

L'exemple du 2,2,3,3-tétraméthylbutane peut être cité comme molécule ayant un nombre non négligeable d'interactions gauche.



2,2,3,3-tétraméthylbutane
[594-82-1]

La technique de Benson est connue pour être la plus précise des méthodes de contribution de groupes utilisées en thermochimie. Elle permettait à l'origine l'estimation d'enthalpies standard de formation en phase gazeuse, d'entropies standard et de capacités calorifiques à différentes températures. Mais, telle que Benson l'a développée, elle ne s'appliquait qu'aux composés à l'état de gaz parfait. Or, c'est la phase condensée qui intervient dans les projets industriels.

2.5. Extension de la méthode de Benson à la phase liquide et à la phase solide

2.5.1. Méthode de Domalski et Hearing [52,53]

Domalski et Hearing ont publié, en 1993, une étude portant sur 1 512 molécules contenant les éléments carbone, hydrogène, oxygène, azote, soufre, halogènes, dans les trois états. La liste des composés étudiés ne prétend pas être exhaustive. L'objectif essentiel de cette étude est de démontrer l'applicabilité de la méthode de Benson à la phase condensée. Concernant la phase solide, 57 composés C_xH_y, 140 composés $C_xH_yO_z$ et 147 composés $C_xH_yN_wO_z$ ont permis d'établir l'ensemble des contributions de groupes de Benson C-H, C-H-O et C-H-O-N utiles à l'estimation d'enthalpies standard de formation, soit 344 molécules au total.

Une procédure systématique a été utilisée afin de déterminer les différentes contributions de groupes. Les auteurs se sont tout d'abord intéressés aux n-alcanes. Des contributions ne contenant que des atomes de carbone et d'hydrogène ont été calculées. Ces valeurs ont été fixées et ont ensuite permis de déterminer des contributions de groupes intervenant dans des alcanes substitués, puis, des alcènes, des alcynes, des composés aromatiques, *etc*…

La différence essentielle de cette technique par rapport à la méthode introduite par Benson est le traitement des interactions répulsives engendrées par les atomes d'hydrogène des groupes méthyles liés à des carbones tertiaires ou quaternaires. Une contribution de groupe est attribuée aux molécules présentant ces atomes de carbone. Par exemple, le 2-méthylbutane requiert 2 corrections de ce type tandis que le 3-éthylpentane n'en nécessite pas. Cette approche remplace celle de Benson vis-à-vis des interactions gauche.

L'étude comparative, dans les trois phases, des valeurs mesurées et calculées d'enthalpies de formation, de capacités calorifiques et d'entropies est présentée. Les

estimations effectuées sur les trois phases ont montré que 67% des écarts entre les enthalpies de formation issues de la littérature et celles qui ont été calculées étaient inférieurs à 4 kJ.mol^{-1}. 16% d'entre eux étaient compris entre 4 et 8 kJ.mol^{-1}, et les 17% restants étaient supérieurs à 8 kJ.mol^{-1}.

Il convient de souligner que les auteurs ne différencient pas les trois phases, mais donnent un résultat global. Les bilans pour chacune des trois phases, prises séparément, sont absents de l'étude publiée.

2.5.2. Méthode de Cohen [54]

En 1996, Cohen a entrepris une étude afin d'évaluer ou de réviser les valeurs de contributions de groupes nécessaires à l'estimation d'enthalpies standard de formation de molécules organiques hydrocarbonées et oxygénées, dans les états solide, liquide et vapeur. Une base de données relatives aux enthalpies de formation a été mise à jour par rapport à la banque de données de Domalski et Hearing. Comme la méthode d'évaluation est appliquée étape par étape, si les contributions de groupes relatives aux alcanes sont déterminées à partir d'une banque de données actualisée, ceci a des conséquences sur pratiquement toutes les autres valeurs de contributions. Ces dernières doivent, par conséquent, être ré-estimées.

On notera que l'auteur n'a pas utilisé le nouveau traitement préconisé par Domalski et Hearing quant aux alcanes substitués (*cf.* paragraphe 2.5.1.).

En ce qui concerne la phase solide, Cohen a étudié 143 molécules C_xH_y et 438 molécules $C_xH_yO_z$, soit 581 composés en tout. Il a été montré que l'erreur moyenne observée dans 92% des cas était de 9,1 kJ.mol^{-1}. De nombreuses valeurs de contributions de groupes ont pu être déterminées, mais cette étude ne s'intéresse pas aux composés contenant de l'azote.

2.6. Autres méthodes prédictives

2.6.1. Méthodes semi-empiriques

Les résultats d'estimation d'enthalpies de formation en phase solide de molécules énergétiques calculées par les méthodes semi-empiriques évoquées ci-dessous ont été utilisés afin de les comparer aux prévisions obtenues par la méthode développée dans ces travaux. Il nous a donc semblé nécessaire de présenter succinctement les techniques semi-empiriques utilisées dans le cadre de l'étude comparative détaillée au chapitre IV (*cf.* annexe 1). Toutefois, rappelons que ces méthodes ne font pas l'objet de la présente étude.

a. Méthode de Politzer et al. [55]

Politzer *et al.* ont calculé l'enthalpie standard de formation en phase solide de cinq composés. Pour cela, une démarche indirecte a été utilisée, *i.e.* les calculs d'enthalpie de formation en phase gazeuse et d'enthalpie de sublimation ont permis d'aboutir à l'enthalpie recherchée concernant la phase solide, selon la loi de Hess :

$$\Delta_f H_s(298\ \mathrm{K}) = \Delta_f H_g(298\ \mathrm{K}) - \Delta H_{sub}(298\ \mathrm{K}) \qquad (44)$$

L'enthalpie de formation en phase gazeuse des molécules a été obtenue grâce à la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT pour Density-Functional Theory). Cette théorie repose sur l'observation que seule la densité de charge de l'état fondamental (fonction de trois coordonnées spatiales) suffit à la détermination de toute propriété électronique du système. L'énergie, en particulier, est donc une fonctionnelle de la densité.

La première étape du calcul consiste à déterminer ΔE à 0 K pour la formation de chaque composé à partir de ses éléments. Pour cela, la méthode de calcul de l'échange utilisée est la fonctionnelle de Becke (B) et la méthode de la corrélation employée est celle de Perdew 86 (P86). ΔE(0 K) est ensuite convertie en ΔE(298 K) après la prise en compte des énergies de translation, de vibration et de rotation des réactifs et des produits. Ceux-ci sont assimilés à des gaz parfaits. L'enthalpie ΔH(298 K) est ensuite obtenue grâce à l'équation suivante :

$$\begin{aligned} \Delta H(298\text{ K}) &= \Delta E(298\text{ K}) + \Delta(PV) \\ &= \Delta E(298\text{ K}) + RT\Delta n \end{aligned} \tag{45}$$

où P : pression
V : volume
R : constante des gaz parfaits
T = 298,15 K
n : nombre de mole de gaz

La dernière étape consiste en l'addition de termes correctifs empiriques qui dépendent des nombres de coordination des atomes de carbone, d'oxygène et d'azote présents au sein de la molécule étudiée. Ces corrections sont déterminées à partir d'une base de données relative à des valeurs d'enthalpies de formation, à 298 K, de 54 composés différents.

Quant à l'enthalpie de sublimation, elle est exprimée en fonction de la surface de la molécule étudiée (SA) et du produit ($\upsilon\sigma_{tot}^2$) représentant la variance positive et négative du potentiel électrostatique de surface. L'équation suivante est alors utilisée :

$$\Delta H_{sub} = a(SA)^2 + b\sqrt{\upsilon\sigma_{tot}^2} + c \tag{46}$$

La variance totale σ_{tot}^2, somme des variances positives et négatives (σ_+^2 et σ_-^2), reflète l'étendue du potentiel électrostatique de surface. Le terme υ est un "paramètre d'équilibre" introduit afin de prendre en compte le poids des régions positives face aux régions négatives. Il est définit selon l'équation :

$$\upsilon = \frac{\sigma_+^2\sigma_-^2}{[\sigma_{tot}^2]^2} \tag{47}$$

sachant que $\sigma_+^2 = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}\left[V^+(r_i) - \overline{V_s^+}\right]^2$ et $\sigma_-^2 = \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n}\left[V^-(r_j) - \overline{V_s^-}\right]^2$.

$V(r_i)$ est la valeur du potentiel électrostatique $V(r)$ au point r_i et $\overline{V_s}$ est la moyenne des $V(r_i)$.

Les paramètres *a*, *b* et *c* de l'équation (46) sont ici respectivement égaux à $19{,}87.10^{-4}$ $kJ.mol^{-1}.Å^{-4}$, 8,8676 $kJ.mol^{-1}$ et -9,41 $kJ.mol^{-1}$. Ils sont déterminés à l'aide des enthalpies de sublimation mesurées expérimentalement de 34 composés différents. Les grandeurs explicitées plus haut (SA, σ_{tot}^2, υ) ont été obtenues, pour ces composés précisément, par des calculs *ab initio* (HF/STO-5G*//HF/STO-3G*).

La méthode de Politzer *et al.* a permis d'évaluer les enthalpies de formation en phase solide de 5 composés énergétiques. L'erreur moyenne observée est de 11,7 $kJ.mol^{-1}$.

b. Méthode de Rice et al. [56]

Dans le but d'estimer des enthalpies de formation en phase condensée, et notamment en phase solide, Rice *et al.* se sont inspirés de la méthode décrite ci-avant. La différence essentielle est le niveau de théorie employé et la liste de molécules utiles au paramétrage de l'équation (46).

La méthode des équivalents atomiques est utilisée afin de convertir les énergies mécaniques quantiques des molécules en chaleurs de formation. L'enthalpie de formation en phase gazeuse d'un composé est ainsi représentée par l'équation suivante :

$$\Delta H_i = E_i - \sum n_j \varepsilon_j \tag{48}$$

où E_i : énergie de la molécule *i*
n_j : nombre d'atomes *j* dans la molécule *i*
ε_j : "équivalent atomique", défini comme suit :

$$\varepsilon_j = E_j - x_j \tag{49}$$

où E_j : énergie d'un atome *j* contenu dans la molécule *i*
x_j : correction pour l'atome *j*

L'approximation du gradient généralisé (GGA), qui considère des fonctions d'échange-corrélation dépendant non seulement de la densité en chaque point mais aussi du gradient, a été employée avec la fonctionnelle hybride B3LYP/6-31G*. Les calculs ont été réalisés grâce à Gaussian 94 (G94).

Les équivalents atomiques pour le carbone, l'hydrogène, l'oxygène et l'azote (espèces atomiques présentes dans la plupart des matériaux énergétiques) ont été déterminés par ajustement au moindre carré de valeurs expérimentales de chaleurs de formation en phase gazeuse et d'énergies moléculaires calculées par B3LYP/6-31G* de 35 composés énergétiques, au moyen de l'équation (48).

Les enthalpies de sublimation ont été calculées grâce à l'équation de Politzer *et al.* (*i.e.* équation (46)). Les paramètres *a*, *b* et *c* sont, dans ce cas, respectivement égaux à $17{,}716324.10^{-4}$ $kJ.mol^{-1}.Å^{-4}$, 10,7921196 $kJ.mol^{-1}$ et -28,1731343 $kJ.mol^{-1}$. Ils ont été établis grâce à un ajustement au moindre carré portant sur une liste de 36 valeurs expérimentales d'enthalpies de sublimation.

Les enthalpies standard de formation en phase solide de 44 molécules énergétiques ont ainsi pu être estimées par Rice *et al.*, et être comparées à 75 valeurs expérimentales d'enthalpies de formation concernant ces mêmes 44 composés. Il apparaît que l'écart-type obtenu est de 37,7 kJ.mol^{-1} et le résidu maximum est égal à 148,1 kJ.mol^{-1}.

c. Méthode de Mathieu et al. [57]

En vue d'améliorer les méthodes précédemment décrites (*cf.* paragraphes 2.6.1. a. et 2.6.1. b.), Mathieu *et al.* envisagèrent une autre méthode visant à prévoir plus efficacement les enthalpies de sublimation.

Les modèles PIMM et P2 ont été utilisés afin d'estimer les enthalpies de formation en phase gazeuse, selon :

$$\Delta_f H_g^0 = E + \sum_k H_k \tag{50}$$

où l'indice k est attribuable à chacun des atomes constitutifs du système étudié.

Dans le cas du champ de force PIMM, H_k représente l'enthalpie standard de formation des atomes libres et E est ajusté de manière à ce que l'équation (50) révèle l'enthalpie de formation de la molécule étudiée.

Avec l'approche P2, E est l'énergie DFT totale et H_k inclut non seulement les enthalpies de formation des atomes libres mais également les effets thermiques, l'énergie du composé au point zéro, ainsi que les corrections empiriques appliquées à E qui visent à corriger les limitations de la fonctionnelle utilisée.

Le champ de force PM3 est également employé afin d'effectuer des comparaisons avec les résultats obtenus grâce aux deux autres approches citées plus haut.

En ce qui concerne les estimations d'enthalpies de sublimation, l'équation de Politzer *et al.* a été utilisée (*cf.* équation (46)) mais a légèrement été modifiée afin de la rendre applicable à des composés de tailles très différentes. Etant donné qu'aucune corrélation concluante n'a pu être trouvée à partir de l'équation (46) (après utilisation d'une liste de 245 molécules), les auteurs établirent la relation suivante :

$$\Delta H_{sub}^0 = \sum_k \sigma_k S_k + a\upsilon\sigma_{tot} + b\sqrt{\sum_{A,H} \frac{S_A S_H}{S}} \tag{51}$$

La contribution des interactions de Van der Waals est ici exprimée en terme de surface atomique S_k et de tension de surface σ_k.

La contribution de la liaison hydrogène est présente dans le dernier terme de l'équation. S représente la surface moléculaire totale, S_A se rapporte aux accepteurs de protons et S_H concerne les protons labiles.

Deux étapes furent nécessaires à l'ajustement des termes a et b. Tout d'abord, le paramètre électrostatique a et les tensions de surface atomique σ_k ont été étalonnés grâce à une liste de 128 composés ne présentant aucune liaison hydrogène. Puis, ce modèle a été appliqué à 64 molécules comportant des liaisons hydrogène et a permis de déterminer le terme b présent dans la relation (51). Seul le champ de force PIMM a été utilisé afin de déterminer les paramètres de l'équation (51).

Une sélection de 34 composés énergétiques, contenant les éléments C, H, O, N, et F, met en évidence les résultats obtenus grâce aux différentes méthodes utilisées (PIMM, P2 et PM3). Il apparaît que l'approche P2 est la meilleure (écart-type [P2] = 0,21 $kJ.g^{-1}$). Par ailleurs, il semblerait que la méthode utilisant le champ de force PM3 est la moins concluante (écart-type [PM3] = 0,37 $kJ.g^{-1}$ *vs* écart-type [PIMM] = 0,35 $kJ.g^{-1}$).

2.6.2. Méthode mixte

Une technique d'estimation des enthalpies standard de formation en phase gazeuse d'alcools et d'éthers ne comportant qu'un seul atome d'oxygène lié à n'importe quel atome de carbone présent dans un composé donné a été développée par DeTar [58,59]. Celle-ci combine une méthode de contribution de groupes et une méthode de calcul *ab initio* des énergies.

Les molécules étudiées sont tout d'abord découpées en groupes de deuxième ordre. Une valeur d'incrément est attribuée à chacune des contributions de groupes contenus dans le composé en question. Notons que ces valeurs de contributions ont été déterminées pour les alcanes, cycloalcanes, alcènes, alcools, éthers, aldéhydes, cétones, acides et esters, à partir d'une banque d'enthalpies standard de formation mesurées expérimentalement [60-63]. Une valeur d'énergie est ensuite calculée de la même manière que pour toutes les méthodes de contribution de groupes. Cette énergie est appelée enthalpie formelle de liaison (*FBE*).

Afin de prendre en compte les corrections de structure, les encombrements stériques et les interactions gauche, deux termes supplémentaires sont introduits dans l'équation, permettant ainsi de calculer l'enthalpie standard de formation recherchée : FSE_0 et *SM*. Les enthalpies standard de formation en phase gazeuse sont alors calculées de la manière suivante :

$$\Delta_f H_g^0 = FBE + FSE_0 + SM \text{ , avec :} \tag{52}$$

$$FBE = \sum_i n_i c_i \tag{53}$$

où *FBE* : enthalpie formelle de liaison
FSE_0 : enthalpie formelle stérique du conformère de plus basse énergie
SM : terme correctif tenant compte de la contribution à l'enthalpie des conformères autres que le conformère de plus basse énergie
n_i : nombre de groupe de type *i* dans la molécule
c_i : contribution du groupe de type *i*

Les valeurs d'enthalpie *FSE* sont obtenues grâce aux relations suivantes :

$$FSE = 627{,}5 \times (E_{AI} - \sum_i n_i d_i) \tag{54}$$

$$FSE_{corrigée} = 627{,}5 \times [E_{AI} + ZPE + (H_{298} - H_0) - \sum_i n_i d_i^{'}] \tag{55}$$

où *FSE* : enthalpie formelle stérique "brute"
$FSE_{corrigée}$: enthalpie formelle stérique corrigée
E_{AI} : énergie *ab initio* de la molécule
ZPE : énergie au point zéro

n_i : nombre de groupe de type *i* dans la molécule

d_i, $d_i^{'}$: contributions du groupe de type *i* (termes dépendant de la méthode de corrélation et de la base de données utilisée)

Au final, vingt-et-un alcools et éthers ont été étudiés. Les deux méthodes de corrélation/base de données ayant abouti aux meilleurs résultats sont MP2/6-31+G(d,p)//6-31G(d,p) et MP2/6-311+G(2df,2p)//6-31G(d,p). Toutes les deux tiennent compte de l'enthalpie formelle stérique corrigée $FSE_{corrigée}$ (et non pas de l'enthalpie *FSE*). Un calcul de l'écart entre l'enthalpie standard de formation mesurée et calculée a été effectué pour l'ensemble des méthodes testées. Les écart-types obtenus sur ces résidus ont été comparés à l'écart-type calculé à partir des erreurs observées sur les valeurs expérimentales d'enthalpie de formation. Les résultats sont les suivants :

Méthode	Ecart-type	Ecart maximum
Erreurs expérimentales	0,45	1,22
MP2/6-31+G(d,p)//6-31G(d,p)	0,57	1,35
MP2/6-311+G(2df,2p)//6-31G(d,p)	0,62	1,74

Tableau I-9 : Comparaison de l'écart-type calculé sur les erreurs expérimentales avec les écart-types calculés suite à l'application des deux méthodes les plus performantes.

A noter que les calculs effectués sur des composés contenant deux ou trois atomes d'oxygène liés à un même atome de carbone dans une molécule donnée (ex : acétals et orthoacides) sont médiocres.

Enfin, le problème majeur posé par les méthodes de type *ab initio* est le temps de calcul. En effet, en prenant pour exemple une molécule contenant treize atomes C, H et O, la méthode MP2/6-31+G(d,p)//6-31G(d,p) requiert un peu plus d'une heure par itération pour optimiser la géométrie des composés tandis que la méthode MP2/6-311+G(2df,2p)//6-31G(d,p) nécessite plusieurs jours.

3. Calorimétrie de combustion

Origines de la calorimétrie [64]

La calorimétrie est la mesure des transferts thermiques.

Elle est certainement l'une des plus anciennes techniques physico-chimiques. En effet, au début du XVIII^{ème} siècle, il n'existait pratiquement pas d'instruments permettant de mesurer des quantités de chaleur. Mais, cent ans plus tard, le calorimètre devint un appareil opérationnel.

Plusieurs scientifiques s'intéressèrent à la mesure des quantités de chaleurs.

Tout d'abord, nous pouvons rappeler que le changement de masse apparent observé dans une réaction de combustion ayant lieu au sein d'un système ouvert conduit Sthal, chimiste allemand, à la théorie du *phlogistique*. D'après lui, les corps combustibles renferment un principe particulier, appelé phlogistique, qui se transforme en "matière du feu" lorsqu'il est soumis à une élévation de température. Cette matière se dissipe avec flamme (phlox en grec), chaleur et lumière.

La technique calorimétrique à proprement parler, apparaît vers le milieu du XVIII^{ème} siècle. Black, physicien écossais, est vraisemblablement l'un des premiers constructeurs d'appareils destinés à mesurer des quantités de chaleur. Il fabrique l'un des premiers "calorimètres" : simple bloc de glace percé d'un trou.

Une vingtaine d'années plus tard, vers 1780, Lavoisier et Laplace développent un calorimètre à glace beaucoup plus élaboré permettant de mesurer les quantités de chaleur libérées par les réactions de combustion ainsi que par le phénomène de respiration. En 1784, ils publient un mémoire qui peut être considéré comme l'un des fondements de la méthode thermochimique.

Contemporain de Lavoisier, le physicien anglais Crawford construit l'un des premiers calorimètres à thermomètre.

Au début du XVIII^{ème} siècle, Dulong et Dalton (tous deux chimistes et physiciens, l'un français et l'autre britannique) mesurent des capacités calorifiques et des chaleurs de combustion. Afin de s'affranchir de toute correction tenant compte des fuites thermiques, le français utilise l'artifice proposé par Rumford : la température initiale du liquide calorimétrique est inférieure de quelques degrés à la température ambiante, alors que la température finale excède cette même température de la même quantité. Cavendish, Taylor (1723) et Black (1760) sont à l'origine de cette calorimétrie par repérage de l'élévation de température d'une certaine masse d'eau.

Favre et son collaborateur Silbermann peuvent également être cités en tant que pionniers dans le domaine de la technique calorimétrique. En effet, ils perfectionnent le simple calorimètre à eau de Crawford et de Dulong. Berthelot reconnut lui-même, en 1875, que leurs travaux « ont le mérite d'avoir ouvert la voie aux savants qui sont venus après ».

Quelques années plus tard, Person, professeur de physique, introduit un nouveau type d'instrument, nommé ultérieurement, calorimètre adiabatique. Ce-dernier ne connut pas un franc succès à l'époque mais, cinquante ans plus tard, Richards "redécouvrit" cette technique oubliée.

Dans les soixante premières années du XIX^{ème} siècle, des résultats fondamentaux furent obtenus. Hess (chimiste suisse) réalisa certainement les mesures thermochimiques les plus exactes à l'aide d'un calorimètre rotatif à eau.

A partir de 1840, Joule (élève de Dalton) réalise un ensemble de mesures particulièrement soignées de l'équivalent mécanique et électrique de la chaleur. Ses résultats sont à l'origine de l'étalonnage électrique des systèmes calorimétriques.

Le XVIII^{ème} siècle est donc marqué par la naissance de la calorimétrie chimique. Un certain nombre de perfectionnements ont ensuite permis de développer cette technique.

La calorimétrie de combustion à volume constant naquit avec les travaux de Berthelot. Ce dernier développa le calorimètre à jaquette "isotherme", pratiquement introduit par Favre et Silbermann. Il adapte à cet instrument un grand nombre de dispositifs permettant de mesurer les effets thermiques liés à la plupart des processus physico-chimiques. Il utilise un calorimètre dans lequel vase calorimétrique et jaquette "isotherme" sont séparés par de l'air. Par ailleurs, la contribution essentielle de Berthelot est certainement l'invention de la bombe calorimétrique. Cette dernière permet des combustions rapides et totales, en présence d'oxygène sous pression. Elle permit notamment l'étude de la chaleur de combustion des substances gazeuses. A noter que le nombre de substances étudiées par ce chimiste français est considérable.

En 1865, Thomsen débute ses recherches dans le domaine de la thermochimie. L'ensemble du travail réalisé est remarquable. Il mesure la chaleur de combustion de plus d'une centaine de substances, et cela, sans utiliser la bombe calorimétrique de Berthelot. Malgré la qualité des résultats obtenus, le calorimètre de Thomsen ne connut pas un engouement extraordinaire. Les dispositifs de calorimétrie de flamme, mis au point ultérieurement par Rossini, Prosen et Pilcher, l'ont largement remplacé.

Si l'on doit à Berthelot et à Thomsen le développement du calorimètre à enceinte isotherme, on doit associer les noms de Bunsen et de Richards à celui du calorimètre isotherme (Bunsen) et du calorimètre adiabatique (Richards).

L'appareil construit par Bunsen, contrairement à l'instrument de Lavoisier et de Laplace, est entièrement fermé mais fait intervenir le même changement de phase.

Quant à Richards, il "redécouvre" le principe du calorimètre adiabatique (1905) afin d'effectuer des mesures destinées à vérifier sa "théorie de l'atome compressible". Le but de ce prix Nobel américain, comme celui de Person, est de supprimer les corrections de refroidissement habituellement nécessaires.

En 1925, il construit à l'aide de Gucker un appareil jumelé, pouvant être rapproché de l'instrument créé par Joule. Celui-ci est employé pour l'étude de la thermodynamique des solutions d'électrolytes.

Richards est certainement l'un des pionniers de la calorimétrie de précision. Cependant, le calorimètre adiabatique ne connut pas, dans l'immédiat, le développement espéré. C'est l'appareil à enceinte isotherme qui devint le plus populaire grâce, entre autres, aux travaux de Dickinson.

Aucun des instruments cités plus haut n'est suffisamment sensible et stable dans le temps pour permettre l'étude de phénomènes lents et/ou de faible thermicité. Tian décide donc de mettre au point un microcalorimètre. Plus tard, Calvet perfectionna cet appareil en utilisant un nombre élevé de couples thermoélectriques ainsi que deux éléments reliés suivant le mode différentiel.

Ce type d'appareil, bien connu aujourd'hui, a permis le développement de la technique calorimétrique et de la calorimétrie de combustion en particulier.

Dans notre cas précis, la technique utilisée pour la mesure des énergies internes de combustion de plusieurs composés organiques est la calorimétrie de combustion en bombe statique.

3.1. Caractéristiques de la calorimétrie en bombe statique [65]

3.1.1. Généralités

Les énergies de combustion, déterminées grâce à des bombes calorimétriques à oxygène, sont mesurées indirectement. En effet, la chaleur issue de la combustion d'un échantillon étudié est comparée à la chaleur dégagée lors de la combustion d'une quantité similaire d'une substance étalon (en général : l'acide benzoïque) dont l'enthalpie de combustion est connue avec précision. Ces mesures sont obtenues en brûlant un échantillon représentatif, sous une haute pression d'oxygène, dans un récipient en métal capable de supporter de hautes pressions, appelé bombe calorimétrique. L'énergie dégagée par la réaction de combustion est absorbée par le système calorimétrique et le changement de température résultant est pris en compte. L'énergie de combustion de l'échantillon est ensuite calculée en multipliant la hausse de température ayant eu lieu au sein du système calorimétrique par l'équivalent énergétique déterminé lors de l'étalonnage de l'appareil. Des corrections sont ensuite nécessaires.

Tout calorimètre à bombe est constitué de quatre éléments essentiels :

- la **bombe calorimétrique**, dans laquelle l'échantillon brûle ;
- le **seau**, dans lequel la bombe calorimétrique est maintenue dans une quantité d'eau déterminée, auquel s'ajoute un détecteur thermique ainsi qu'un agitateur ;
- l'**enceinte**, protégeant le seau de toutes transitions thermiques ayant lieu pendant la combustion ;
- le **thermomètre**, détectant toutes variations de température dans l'enceinte du calorimètre.

3.1.2. Bombe calorimétrique

La bombe calorimétrique doit être constituée d'un métal épais et résistant car elle est soumise à de nombreuses contraintes. Le type de bombe à oxygène utilisé dans notre cas est fabriqué en columbium stabilisé par de l'acier inoxydable.

Etant donné qu'une pression supérieure à 1 500 psig (103 bar) peut être mise en œuvre au cours d'une réaction de combustion, la plupart des bombes calorimétriques sont conçues de manière à pouvoir supporter des pressions d'au moins 3 000 psig (207 bar).

Lorsque l'échantillon étudié contient de l'azote ou du soufre, il se forme, respectivement, de l'acide nitrique ou de l'acide sulfurique au cours de la réaction de combustion. Ces acides entraînent la formation d'une vapeur corrosive qui attaque les métaux ordinaires. Par conséquent, les matériaux constitutifs de la bombe doivent être capables de résister à toute attaque engendrée par ces produits secondaires issus de la combustion.

A noter qu'il existe des bombes calorimétriques spécialement conçues pour les échantillons fortement explosifs et dangereux. Elles sont faites en matériaux résistant à la corrosion. Elles sont particulièrement adaptées aux composés libérant des quantités importantes de chlore, de fluor ou d'autres produits de combustion corrosifs.

La bombe doit être munie d'une valve permettant le remplissage en oxygène sous pression. Cette valve sert également à éliminer la pression de gaz résiduelle, en fin de manipulation.

La présence d'électrodes est nécessaire à la conduction d'un courant d'allumage indispensable à la mise à feu.

3.1.3. Seau calorimétrique

Le seau calorimétrique doit être conçu de manière à pouvoir accueillir une bombe complètement immergée dans l'eau. Il doit également être d'une taille suffisante de façon à pouvoir supporter la présence d'un agitateur permettant d'assurer un équilibre thermique en son sein.

La quantité d'eau contenue dans le seau doit être suffisamment importante afin de pouvoir absorber la chaleur de la bombe. Ceci précisé, elle ne doit pas dépasser une certaine masse. En effet, la sensibilité du système calorimétrique en dépend.

Par ailleurs, l'agitateur et la géométrie du seau doivent être conçus de manière à ce que l'équilibre s'établisse rapidement, et ceci doit se faire tout en n'introduisant pas de chaleur supplémentaire excessive (sous la forme d'énergie mécanique).

Les seaux sont, en général, soigneusement polis car l'absorption et l'émission de la chaleur radiante doivent être minimales.

Dans notre cas, le seau calorimétrique est constitué de cuivre nickelé.

3.1.4. Enceinte calorimétrique

La bombe et le seau calorimétriques sont disposés au centre d'une enceinte calorimétrique servant de "bouclier" thermique. En effet, cette dernière contrôle tous les transferts de chaleur ayant lieu entre le seau et son milieu environnant. L'enceinte permet de minimiser les effets d'énergie radiante et les effets des changements de température survenant dans la pièce où les expériences ont lieu. Cependant, cette enceinte ne permet pas totalement d'éviter toute perte de chaleur. Il est donc nécessaire de disposer d'un moyen efficace permettant d'établir précisément la quantité de chaleur transférée au cours d'une expérience, ou bien, de contrôler le transfert de façon à ce qu'il ne varie pas d'une expérience à une autre.

3.1.5. Thermomètre

Afin d'obtenir la meilleure précision possible, la température de l'eau contenue dans l'enceinte du calorimètre doit être contrôlée. En général, cela suppose la présence d'un système permettant d'ajuster la température de l'eau au sein même de l'enceinte. Ce système peut consister soit en un chauffage immergé, soit en des injections d'eau froide ou d'eau chaude, selon le besoin. Avec ce type de système, le calorimètre peut aussi bien fonctionner en mode adiabatique qu'en mode isopéribole.

3.2. Choix du calorimètre [65]

Le choix du calorimètre à utiliser dépend essentiellement de la précision souhaitée sur la mesure et de la masse de produit employée. Le type d'échantillon étudié n'intervient donc pas dans le choix du calorimètre.

Que les échantillons soient liquides ou solides, ils sont brûlés dans le même type de calorimètres. Par contre, lorsque le produit étudié est un liquide volatil, des récipients spécifiques sont utilisés afin d'éviter des pertes par évaporation lors des opérations de pesées. De plus, il est possible d'employer des auxiliaires de combustion permettant d'obtenir une combustion complète des produits.

Malgré de rares exceptions, tous ces échantillons peuvent être analysés dans les mêmes systèmes calorimétriques.

Deux types de calorimètres existent :

3.2.1. Calorimètre adiabatique

Dans un système adiabatique, la température de l'eau de l'enceinte calorimétrique est constamment ajustée, de manière à toujours la maintenir égale à la température de l'eau contenue dans le seau. Ainsi, il n'y a pas de transfert de chaleur entre le seau et l'enceinte du calorimètre.

Par ailleurs, les différents calculs et corrections indispensables lors de l'utilisation d'un calorimètre isopéribole sont inutiles dans ce cas.

3.2.2. Calorimètre isopéribole

Dans les calorimètres ispériboles, la température de l'enceinte est contrôlée et est maintenue constante durant toute l'expérience, tandis que la température de l'eau contenue dans le seau augmente au cours de la mesure. Une correction est ensuite indispensable pour prendre en compte la perte de chaleur résultant de la différence de température entre l'eau du seau calorimétrique et celle de l'enceinte.

Au départ, cette méthode était réservée aux mesures requerrant une grande précision. Mais, l'apparition des microprocesseurs permettant de surveiller automatiquement les températures et d'appliquer les corrections nécessaires, a permis une utilisation plus massive des calorimètres isopériboles.

Enfin, on précisera que les calorimètres isopériboles sont plus précis que les calorimètres adiabatiques.

Le type de calorimètre utilisé dans notre cas est un calorimètre isopéribole.

3.3. Correction de Washburn

Les mesures effectuées au moyen d'un calorimètre de combustion (décrites au chapitre II) permettent l'obtention de l'énergie interne de combustion d'un échantillon, $\Delta_c U$. Or, il convient de corriger cette valeur afin de disposer de l'énergie interne standard de combustion, $\Delta_c U°$, correspondant à une réaction idéale.

En 1933, Washburn [66] a publié les calculs permettant de passer de l'énergie interne de combustion, $\Delta_c U$, à l'énergie interne standard de combustion, $\Delta_c U°$, pour les composés du type C_xH_y et $C_xH_yO_z$. Cette correction a, depuis, été étendue aux composés organiques contenant les atomes suivants : N (azote), S (soufre) et X (halogènes).

Le schéma suivant, donné à titre d'exemple, représente les différentes étapes permettant de passer de l'état initial de référence à l'état final de référence. Il concerne une molécule de type $C_aH_bO_c$.

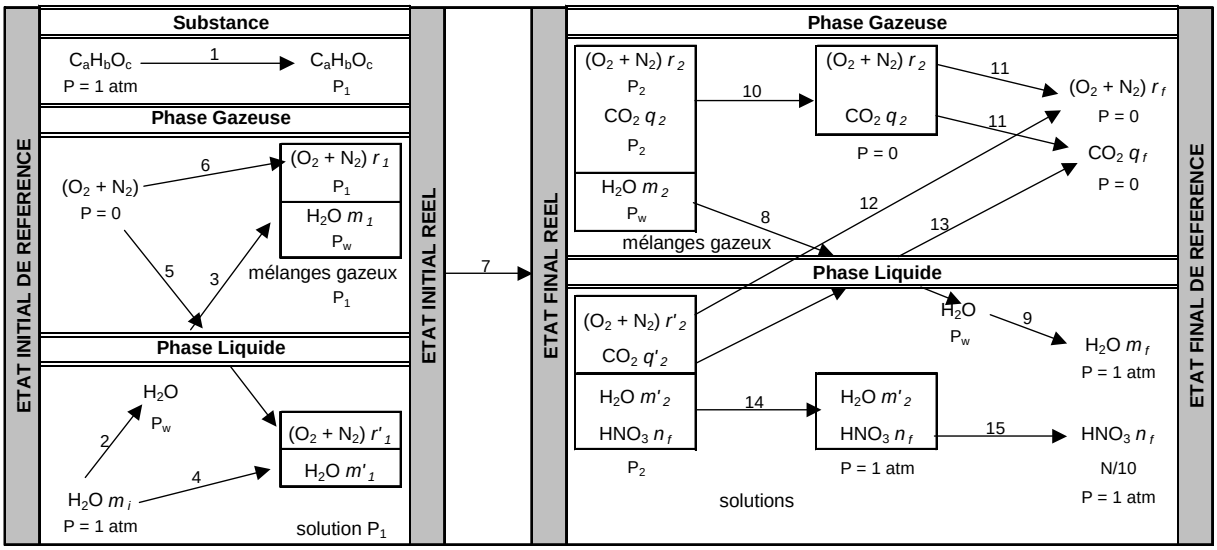


Figure I-5 : La correction de Washburn.

Voici le détail des étapes du diagramme présenté ci-avant [67] :

- Etape 1 : Compression de n_1 moles de substance solide ou liquide de 1 atm à la pression P_1 (variation d'énergie ΔE_1).
- Etape 2 : Décompression de m_1 moles d'eau liquide de P = 1 atm à P_w, qui est la tension de vapeur saturante de l'eau à la température $\theta_{f,corrigée}$ (variation d'énergie ΔE_2).
- Etape 3 : Vaporisation de m_1 moles d'eau sous la pression P_w à la température $\theta_{f,corrigée}$ (variation d'énergie ΔE_3).
- Etape 4 : Compression de m'_1 moles d'eau sous P = 1 atm à la pression P_1 (variation d'énergie ΔE_4).
- Etape 5 : Dissolution de r'_1 moles de $(O_2 + N_2)$ dans m'_1 moles d'eau liquide sous la pression P_1 (variation d'énergie ΔE_5).
- Etape 6 : Compression de r_1 moles de mélange $(O_2 + N_2)$ de P = 0 à P_1 (variation d'énergie ΔE_6).
- Etape 7 : Réaction de combustion dans la bombe (variation d'énergie $\Delta_c U$).

- Etape 8 : Condensation de m_2 moles d'eau sous la pression P_w à la température θ_r (variation d'énergie ΔE_8).

- Etape 9 : Compression de m_2 moles d'eau liquide de P_w à P = 1 atm (variation d'énergie ΔE_9).

- Etape 10 : Décompression d'un mélange gazeux contenant r_2 moles de (O_2 + N_2) et q_2 moles de CO_2, de la pression P_2 à P = 0 (variation d'énergie ΔE_{10}).

- Etape 11 : Séparation de r_2 moles de (O_2 + N_2) et de q_2 moles de CO_2, sous P = 0 (variation d'énergie nulle).

- Etape 12 : Passage en phase gazeuse de r'_2 moles de (O_2 + N_2) en solution sous la pression P_2 (variation d'énergie ΔE_{12}).

- Etape 13 : Passage en phase gazeuse de q'_2 moles de CO_2 en solution sous la pression P_2 (variation d'énergie ΔE_{13}).

- Etape 14 : Décompression de la solution contenant n_f moles de HNO_3 dans m'_2 moles d'eau, de la pression P_2 à P = 1 atm (variation d'énergie nulle).

- Etape 15 : Extraction de n_f moles de HNO_3 de la solution finale puis dissolution dans l'eau jusqu'à la concentration N/10.

Si ΔU_Σ est la somme des énergies correspondant aux étapes 1 à 15, alors :

$$\boxed{\Delta_c U^0 = -\frac{EE_i.\Delta\theta_{corr} - q_b - q_n - \Delta U_\Sigma}{m_{éch.}}} \qquad (56)$$

où $\Delta_c U°$: énergie de combustion dans les conditions de référence
EE_i : équivalent énergétique du système initial réel
$\Delta\theta_{corr}$: accroissement de température (explicité au chapitre II, paragraphe 1.3.2.)
q_b : énergie de combustion du fil d'allumage
q_n : énergie de formation de l'acide nitrique
$m_{éch.}$: masse de l'échantillon

Afin d'illustrer l'influence de la correction de Washburn sur les mesures réalisées, prenons un exemple de détermination expérimentale de $\Delta_c U$ effectuée sur l'acide picolinique N-oxyde. Sur un échantillon de masse égale à 0,50167 g, dans le cas précis considéré, la correction de Washburn vaut 91,6 J (sachant que l'énergie interne mesurée est de -9 677,7 J). La correction d'état standard en question représente donc pratiquement 1% de l'énergie de combustion ainsi mesurée.

4. Bilan et Démarches de détermination

4.1. Bilan de l'étude bibliographique et Objectif de l'étude

Etant donné que la grande majorité des molécules énergétiques sont des solides, l'objectif essentiel de cette étude est d'estimer le plus précisément possible les enthalpies standard de formation en phase solide de composés organiques purs, et notamment de substances contenant de l'azote.

La revue bibliographique présentée au paragraphe 2.6. a montré que les méthodes quantiques de type *ab initio* permettaient d'effectuer des prévisions d'enthalpies sur de nombreux composés. Cependant, ces méthodes présentent des inconvénients, notamment le long temps de calcul nécessaire à l'évaluation des enthalpies recherchées.

Il est donc proposé dans cette étude d'étendre le domaine d'application de la méthode de Benson qui est une méthode de contribution de groupes connue pour sa précision et son large domaine d'application. Conçue à l'origine pour le calcul des enthalpies standard de formation, des entropies standard et des capacités calorifiques de composés covalents à l'état de gaz parfait, cette méthode a fait l'objet, ces dernières années, de quelques tentatives d'extension à la phase condensée. Celles-ci présentent des résultats prometteurs tout en comportant un domaine d'application assez restreint (*cf.* paragraphe 2.5.).

Il est important de souligner que les propriétés des composés à l'état solide sont très différentes de celles des molécules en phase gazeuse. En effet, les composés solides peuvent se trouver sous trois formes : cristalline, amorphe et semi-cristalline. Lorsque les composés sont des solides cristallins, on remarque que la structure tridimensionnelle périodique des cristaux résulte d'interactions très spécifiques entre atomes, et également de contraintes liées à la taille de ces espèces. Les interactions intermoléculaires présentes dans les composés solides sont plus importantes que celles intervenant dans les molécules en phase gazeuse. D'autre part, la densité des composés solides est plus élevée que la densité de molécules à l'état gazeux. Il est donc tout à fait primordial d'étudier la faisabilité de la méthode envisagée. En effet, la méthode de Benson prend en compte des corrections dues à la structure moléculaire des composés et tient également compte de différentes interactions. Mais il est difficile de les définir toutes puis de leur attribuer une valeur de contribution, en particulier lorsqu'on étudie la phase solide.

En outre, l'un des buts majeurs de cette étude est de développer une méthode prédictive simple à mettre en œuvre. En effet, seules la connaissance de la formule développée d'une molécule donnée et la maîtrise de la méthode de découpage de la structure moléculaire sont nécessaires à l'évaluation de l'enthalpie de formation recherchée.

Enfin, sachant que le calcul des paramètres de détonation requiert la connaissance de valeurs d'enthalpies de formation à ± 500 J.g^{-1}, l'objectif de précision à atteindre pour la détermination de ces grandeurs est ainsi fixé.

4.2. Démarches de détermination

L'objectif essentiel étant d'évaluer des enthalpies standard de formation en phase solide de différents composés organiques purs, plusieurs démarches de détermination s'offrent à nous :

4.2.1. Démarche indirecte

La première démarche permettant d'évaluer les enthalpies recherchées consiste à utiliser une méthode de contribution de groupes déjà existante pour l'estimation des enthalpies de formation en phase gazeuse, et à développer une méthode nouvelle pour le calcul des enthalpies de changement d'état. Cette démarche comporte plusieurs étapes.

a. Etape 1 : Elargissement de la banque de données sur la phase gazeuse

Le laboratoire dispose d'ores et déjà d'une banque de données relatives aux contributions de groupes de Benson permettant l'évaluation d'enthalpies de formation de composés à l'état gazeux. Cette base de données constitue une extension significative de la banque de données d'origine fournie par Benson.

Une recherche bibliographique doit permettre de compléter la liste des contributions de groupes déjà disponible, en y incluant les résultats des publications les plus récentes.

b. Etape 2 : Etablissement d'une banque d'enthalpies de sublimation

La constitution d'une base de données concernant les enthalpies standard de sublimation conduit à l'établissement de contributions de groupes de Benson.

c. Etape 3 : Prévision des enthalpies de formation en phase solide et tests de validité

La combinaison des valeurs d'enthalpies standard de formation en phase gazeuse et d'enthalpies standard de sublimation mène à l'estimation des enthalpies de formation concernant l'état solide. Cette dernière étape a pour but de tester la validité et l'efficacité de la méthode indirecte.

4.2.2. Démarche directe

La seconde méthode envisageable consiste à déterminer des valeurs de contributions de groupes à partir des enthalpies standard de formation en phase solide d'une sélection de molécules organiques disponibles dans la littérature. Trois grandes étapes sont indispensables au bon déroulement du travail.

a. Etape 1 : Constitution d'une banque de données

A partir des différentes données expérimentales collectées dans la littérature, une base de données similaire à celle établie par Benson pour la phase gazeuse peut être constituée, dans notre cas, pour la phase solide. Afin d'opérer de la manière la plus logique possible, il est indispensable de commencer le travail sur les composés hydrocarbonés C_xH_y, puis de poursuivre sur les molécules oxygénés $C_xH_yO_z$, pour aboutir aux composés contenant de l'azote $C_xH_yN_w$ et $C_xH_yN_wO_z$.

b. Etape 2 : Détermination des contributions de groupes

Les données expérimentales recueillies à la première étape permettent d'évaluer des contributions à l'enthalpie de formation en phase solide de groupes contenant les éléments C, H, O et N. Une banque de données complète peut être établie grâce à l'étude approfondie de plusieurs centaines de structures moléculaires.

c. Etape 3 : Validation par des mesures expérimentales

Cette étape concerne la réalisation de mesures d'enthalpies standard de formation à l'état solide de différents composés organiques purs. Ce travail expérimental a pour but de tester la validité du modèle mis en place. La comparaison des valeurs mesurées et estimées grâce aux contributions de groupes déterminées à la deuxième étape doit permettre de mettre en exergue les écarts entre l'expérience et le calcul. Ceux-ci sont analysés. A l'issue de cette étape, les modifications nécessaires sont appliquées.

Chapitre II : Partie expérimentale

1. Mesures par calorimétrie de combustion

Les mesures d'énergies internes de combustion sont effectuées au moyen d'un calorimètre de combustion en bombe statique : Parr 6200 Automatic Isoperibol Calorimeter.



Photo II-1 : Calorimètre de combustion Parr 6200 [68]**.**

Cet appareil a été modifié au laboratoire. Tout d'abord une résistance y a été ajoutée afin d'amener l'eau contenue dans le seau calorimétrique à la température désirée (environ 22,5°C). Par ailleurs, l'énergie d'allumage est mesurée pour chacune des expériences réalisées, car cette valeur est prise en compte dans le calcul de l'énergie de combustion de l'échantillon mesurée au laboratoire. Pour cela, la tension aux bornes du condensateur du calorimètre est relevée avant et après la mise à feu de la substance présente au sein de la bombe calorimétrique. L'énergie d'allumage est ensuite calculée selon :

$$E_{allumage} = \frac{C}{2}\left(U_0^{\,2} - U_1^{\,2}\right) \qquad (1)$$

où C : capacité du condensateur (dans notre cas, C = 0,082 F)
U_0 : tension aux bornes du condensateur avant la mise à feu de l'échantillon
U_1 : tension aux bornes du condensateur après la mise à feu de l'échantillon

1.1. Etalonnage [65]

Avant que toute mesure ne soit effectuée sur un composé, il est essentiel de disposer de l'équivalent énergétique *EE*, aussi appelé capacité calorifique, du calorimètre. Cette valeur représente la somme des capacités calorifiques des composants du calorimètre, en particulier,

de la bombe métallique, du seau calorimétrique et de l'eau contenue dans ce seau. Il s'agit de l'expression de la quantité d'énergie nécessaire pour augmenter la température du calorimètre de un degré. Etant en relation directe avec la masse du calorimètre, l'équivalent énergétique change chaque fois que l'un des composants du calorimètre est modifié.

Etant donné que les quantités exactes de métal constituant la bombe et le seau calorimétrique sont difficiles à déterminer et, comme elles changent constamment au fur et à mesure de leur utilisation, l'équivalent énergétique d'un calorimètre est mesuré, à intervalles réguliers, en brûlant un échantillon d'une substance étalon, dont la chaleur de combustion est connue avec précision. L'acide benzoïque est la substance qui a été retenue internationalement comme étalon en thermochimie de combustion. En effet, cet acide brûle complètement dans l'oxygène. Il n'est pas hygroscopique et est directement utilisable sous une forme très pure.

La quantité de chaleur introduite dans le système par un étalon est déterminée en multipliant sa chaleur de combustion par la masse d'échantillon brûlé. Puis, en divisant cette valeur par la hausse de température ayant eu lieu au cours de la mesure, on obtient l'énergie équivalente résultante.

Plusieurs étalonnages ont été effectués au cours des différentes mesures d'enthalpies standard de formation. Le tableau II-1 rassemble le détail des valeurs expérimentales utiles au calcul du dernier équivalent énergétique employé. Dix mesures ont permis d'obtenir une valeur fiable de *EE* :

	1	**2**	**3**	**4**	**5**	**6**	**7**	**8**	**9**	**10**
$m_{acide\ benzoïque}$ (g)	1,04159	1,03810	1,04143	1,05374	1,04574	1,04401	1,05329	1,04678	1,03518	1,03741
m_{coton} (g)	0,00240	0,00239	0,00199	0,00233	0,00245	0,00239	0,00234	0,00239	0,00228	0,00225
θ_i (°C)	22,7306	22,7236	22,7214	22,7198	22,7458	22,7196	22,7282	22,7261	22,7214	22,7206
θ_f (°C)	25,6067	25,5914	25,5952	25,6247	25,6309	25,6013	25,6338	25,6145	25,5805	25,5852
$\Delta\theta_{corr}$ (°C)	2,7347	2,7263	2,7336	2,7677	2,7467	2,7413	2,7650	2,7481	2,7186	2,7241
V_{NaOH} (mL)	7,10	7,45	7,20	7,15	7,15	7,10	7,25	7,15	7,10	7,20
EE ($J.°C^{-1}$)	10098,2	10096,5	10098,7	10093,8	10094,4	10097,5	10099,6	10099,3	10095,3	10096,5
<EE> ($J.°C^{-1}$)	10097,0 $\pm$ 2,0									

Tableau II-1 : Détail de la mesure d'un équivalent énergétique du calorimètre Parr 6200.

L'incertitude apparaissant dans le tableau ci-dessus correspond à l'écart-type obtenu pour la valeur moyenne de *EE* calculée. Selon les conventions adoptées par les thermochimistes, l'incertitude à considérer est égale à la déviation standard de la moyenne (soit $\frac{écart-type}{\sqrt{n}}$). On obtient donc : $\underline{EE} = (10\ 097{,}0 \pm 0{,}6)\ kJ.mol^{-1}$.

1.2. Corrections [65]

Plusieurs facteurs interviennent au cours de la réaction de combustion. Des corrections au calcul de l'énergie interne de combustion des échantillons analysés sont donc indispensables à l'obtention de résultats justes et reproductibles.

1.2.1. Fil fusible

La combustion du fil fusible génère une certaine quantité de chaleur dont il faut tenir compte (*cf.* équation (56) du chapitre I). Dans notre cas, le fil fusible est en platine pur. Il ne brûle donc pas. Seule une énergie de fusion est alors prise en compte.

1.2.2. Mèche de coton

L'énergie de combustion de la mèche de coton utilisée, de formule brute $CH_{1,77}O_{0,89}$, a été mesurée puisqu'elle doit être retranchée de l'énergie interne de combustion mesurée. Elle est égale à -475,0 $kJ.mol^{-1}$, soit -16 945,2 $J.g^{-1}$.

1.2.3. Auxiliaire de combustion

L'utilisation d'un auxiliaire de combustion, permettant une combustion complète d'un échantillon, engendre le dégagement d'une quantité de chaleur supplémentaire au cours d'une expérience. Cette énergie doit donc être soustraite de l'énergie interne de combustion mesurée. Dans tous les cas où l'addition d'un auxiliaire de combustion a été jugée indispensable, l'huile de paraffine (Prolabo, ρ = (0,8666 ± 0,0018) $g.cm^{-3}$) a été utilisée au cours des expériences réalisées. Son énergie de combustion a été mesurée et vaut : $\Delta_c U°_m$ = -(646,6 ± 0,1) $kJ.mol^{-1}$ ou $\Delta_c U°_{mas.}$ = -(46 093,8 ± 4,9) $J.g^{-1}$. Selon l'habitude de la communauté thermochimiste, les incertitudes mentionnées correspondent au double de la déviation standard de la moyenne pour $\Delta_c U°_m$ et à la déviation standard de la moyenne pour $\Delta_c U°_{mas.}$.

1.2.4. Réactions secondaires

Etant donné que la réaction de combustion se déroule, sous hautes pression et température, dans une bombe remplie d'une atmosphère pratiquement pure en oxygène, plusieurs réactions ont lieu. Or, ces dernières ne prendraient pas place si la combustion de l'échantillon se déroulait dans des conditions atmosphériques normales. Ces réactions secondaires sont importantes car elles engendrent un dégagement de chaleur non négligeable qui doit être pris en compte.

Les échantillons contenant de l'azote sont particulièrement sensibles à l'atmosphère régnant au sein de la bombe calorimétrique. En effet, lorsque le combustible contenant de l'azote est brûlé dans une bombe sous pression d'oxygène, des molécules d'azote sont oxydées et se combinent à la vapeur d'eau pour conduire à la formation d'acide nitrique.

On notera que les éléments en platine de la bombe ainsi que la surface interne du couvercle de la bombe sont rincés à l'eau distillée. De plus, l'eau s'étant condensée aux parois internes de la bombe est également rincée. Un dosage à la soude des eaux de lavage permet ensuite d'en déduire leur acidité, et donc, de connaître la correction nécessaire à appliquer lors du calcul final.

1.2.5. Correction de Washburn

Cette correction permet d'obtenir la valeur d'énergie interne standard de combustion d'une substance, à partir de l'énergie interne mesurée par calorimétrie de combustion. Les détails relatifs à cette correction ont été présentés au paragraphe 3.3. du chapitre I.

1.3. Exploitation des résultats

1.3.1. Phases de l'expérimentation

Au cours de la réaction de combustion, on mesure une différence de température correspondant à l'énergie libérée par la combustion du composé étudié. Afin de disposer de l'accroissement de température correspondant à une réaction ayant lieu dans un calorimètre adiabatique, on considère que l'expérimentation comprend trois phases :

- ✓ la **prépériode** : l'élévation de température résulte uniquement de l'agitation et des échanges thermiques entre le système calorimétrique et l'enceinte externe. Cette variation, théoriquement exponentielle, est pratiquement linéaire (*cf.* paragraphe 1.3.2.).

- ✓ la **période principale** : aux deux effets précédents, se superpose l'augmentation de température due à la réaction.

- ✓ la **postpériode** : on retrouve les conditions de la prépériode.

Selon une procédure normalisée, chacune de ces phases dure dix minutes précisément (soit dix minutes avant la mise à feu pour la prépériode, dix minutes permettant un retour à un régime stationnaire pour la période principale et une durée de dix minutes fixée pour la postpériode).

Le diagramme ci-dessous représente l'évolution de la température du système calorimétrique en fonction du temps, au cours d'une mesure.

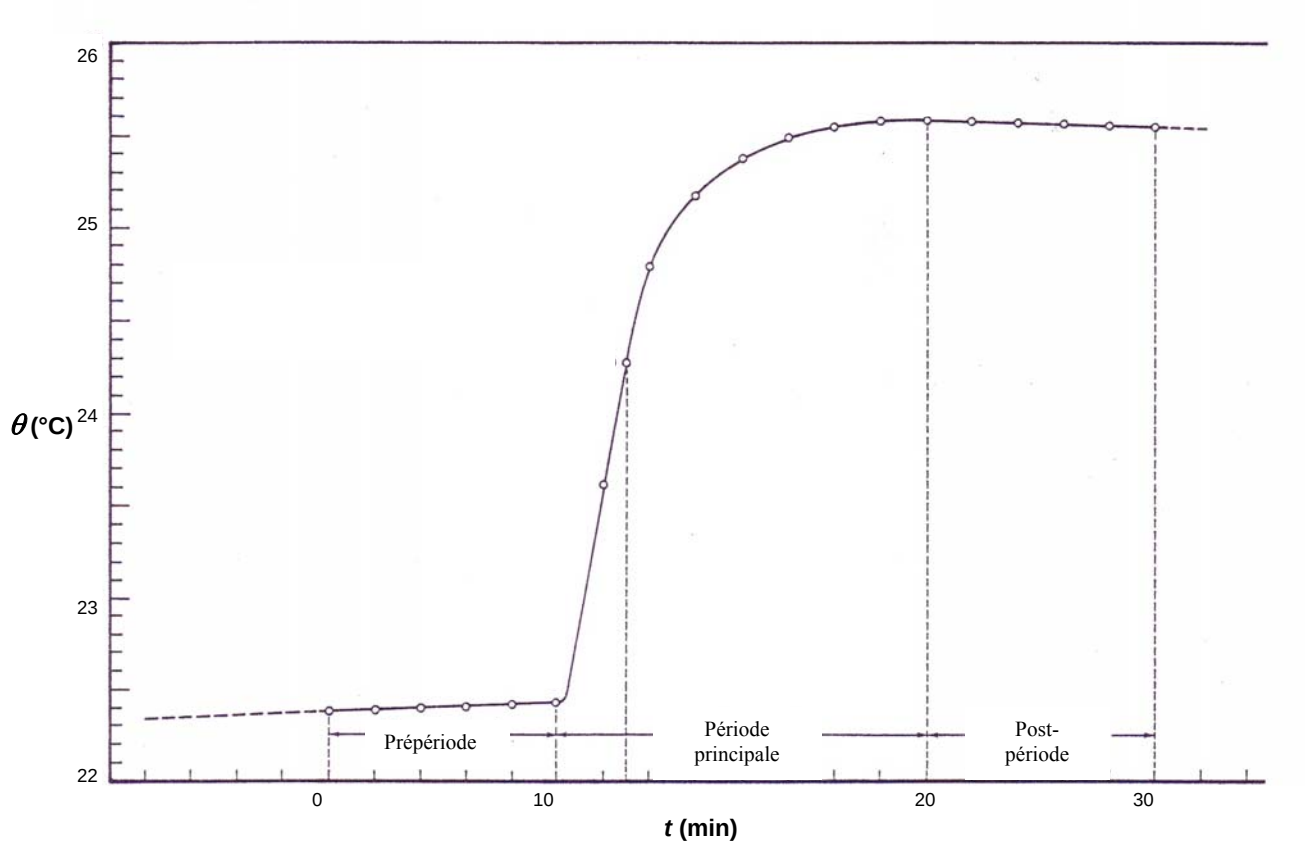


Figure II-1 : Evolution de la température du système calorimétrique en fonction du temps, au cours d'une mesure [69]**.**

Au cours de la réaction, il y a acquisition des températures. La résolution sur celles-ci est excellente puisqu'elle est de 10^{-4}. On notera qu'afin de déterminer une élévation de température, il n'est pas nécessaire de mesurer une température absolue à 10^{-4}°C près. Il faut simplement que les écarts de linéarité du capteur thermique soient suffisamment faibles dans l'intervalle de températures mesurées.

De plus, par souci de reproductibilité et de précision, il est important de toujours effectuer les expériences dans un même intervalle de température, soit approximativement [22°C ; 26°C]. En effet, l'appareil a été étalonné en travaillant dans cette gamme. Par ailleurs, on notera que le capteur thermique du calorimètre est prévu pour mesurer des températures allant de 20°C à 40°C. En dehors de cet intervalle, la linéarité de la mesure n'est plus assurée.

1.3.2. Correction de l'accroissement de température

On a vu précédemment (au paragraphe 3.3. du chapitre I) que l'expression de l'énergie de combustion dans les conditions de référence est :

$$\Delta_c U^0 = -\frac{EE_i.\Delta\theta_{corr} - q_b - q_n - \Delta U_\Sigma}{m_{éch.}}$$

Dans le cas d'un calorimètre isopéribole (*i.e.* notre cas), les échanges thermiques dus à la différence de température entre le système calorimétrique et l'enceinte externe doivent être pris en compte. Il est également indispensable de prendre en considération l'énergie parasite apportée par l'agitation de l'eau dans le seau calorimétrique.

Il convient donc de corriger l'accroissement de température mesuré. Deux méthodes générales de calcul de cette élévation ($\Delta\theta_{corr}$) existent : la méthode de Dickinson et la méthode de Regnault-Pfaundler [70]. L'essentiel de ces méthodes est résumé dans ce qui suit.

Compte tenu des effets thermiques parasites, un accroissement de température, dû à la réaction seule, est défini selon :

$$\boxed{\Delta\theta_{corr} = \theta_f - \theta_i - \delta\theta} \tag{2}$$

où θ_i : température de l'eau contenue dans le seau calorimétrique au début de la période principale

θ_f : température de l'eau contenue dans le seau calorimétrique à la fin de la période principale

$\delta\theta$: correction pour les échanges thermiques et l'énergie d'agitation (correction de l'ordre de 0,01°C à 0,15°C)

Afin d'évaluer la correction $\delta\theta$, on admet que le taux de l'accroissement de température résultant de l'agitation et des échanges thermiques, $\frac{d\theta}{dt}$, peut être mis sous la forme d'une somme de deux termes :

$$\frac{d\theta}{dt} = u + k(\theta_j - \theta) \tag{3}$$

où u : constante représentant l'énergie d'agitation

k : coefficient de refroidissement du calorimètre

θ_j : température de l'eau contenue dans l'enceinte externe

Dans cette expression, u représente la contribution, supposée constante, de l'énergie d'agitation du liquide calorimétrique, et $k(\theta_j - \theta)$ représente la contribution des échanges thermiques.

Les limites de validité d'une telle relation, dont l'expression et le mode d'exploitation ne sont pas rigoureusement exacts, ont été décrites [71]. En effet, ce n'est pas la température θ indiquée par le thermomètre placé dans le seau calorimétrique qu'il faut considérer, mais celle de la paroi du récipient. Par ailleurs, on peut se demander s'il est légitime d'admettre que la constante k n'est pas influencée par l'élévation de température du liquide calorimétrique (qui est de l'ordre de 2 à 3°C). Or certains travaux ont montré qu'il était juste de convenir de l'indépendance de k vis-à-vis de cette augmentation thermique [72-74].

De l'équation (3), il résulte que la correction $\delta\theta$ peut se mettre sous la forme :

$$\delta\theta = \int_{t_i}^{t_f} \frac{d\theta}{dt} dt = \int_{t_i}^{t_f} [u + k(\theta_j - \theta)] dt \tag{4}$$

où t_i : temps correspondant à la température θ_i
t_f : temps correspondant à la température θ_f

La relation (3) conduit à une solution exponentielle puisque :

$$\frac{d\theta}{dt} = k(\theta_\infty - \theta) \tag{5}$$

où θ_∞ : température atteinte pour un "temps infini"

Cependant, on admet que les graphes θ = f(t) sont linéaires, pendant les périodes initiale et finale (*cf.* figure II-1). Cette approximation peut être faite car la constante de temps est très grande devant la durée de la prépériode et de la postpériode.

Si θ_m représente la valeur moyenne de la température du système calorimétrique pendant la période principale, on obtient :

$$\delta\theta = [u + k(\theta_j - \theta_m)](t_f - t_i) \tag{6}$$

A ce stade, il reste à déterminer θ_m ainsi que les constantes u et k.

La température θ_m peut être calculée par intégration graphique ou numérique.
La méthode de Dickinson est fondée sur une intégration graphique qui permet d'obtenir des résultats exacts [70]. Mais la mise en oeuvre de cette méthode est quelque peu fastidieuse. Dans notre cas, la méthode de Regnault-Pfaundler est préférée [70]. Celle-ci fait appel à une intégration numérique.
Considérant que l'on fait n relevés de la température θ_r à des intervalles de temps réguliers Δt, au cours de la période principale, on a :

$$\theta_m = \left(\sum_{r=2}^{n-1}\theta_r + \frac{\theta_i + \theta_f}{2}\right) \times \frac{\Delta t}{t_f - t_i} = \left(\sum_{r=2}^{n-1}\theta_r + \frac{\theta_i + \theta_f}{2}\right) \times \frac{1}{n-1} \tag{7}$$

Les températures θ_i et θ_f peuvent être, soit déterminées graphiquement, soit calculées par la méthode des moindres carrés.

En ce qui concerne les constantes u et k, on écrit les relations suivantes :

$$\left(\overline{\frac{d\theta}{dt}}\right)_{pré} = u + k(\theta_j - \theta_{m,pré}) \tag{8}$$

$$\left(\overline{\frac{d\theta}{dt}}\right)_{post} = u + k(\theta_j - \theta_{m,post}) \tag{9}$$

où $\theta_{m,pré}$: température moyenne du système calorimétrique pendant la prépériode (température de l'ordre de 22,5°C)
$\theta_{m,post}$: température moyenne du système calorimétrique pendant la postpériode (température de l'ordre de 25,5°C)

1.3.3. Calcul de l'enthalpie standard de formation

D'après l'accroissement de température $\Delta\theta$ mesuré au cours de la réaction, la valeur de l'énergie interne de combustion de l'échantillon est calculée selon $m_{éch.}.\Delta_c U = EE.\Delta\theta$. La précision obtenue sur l'énergie de combustion du composé étudié est de l'ordre de 0,1 J. Le calcul des différentes corrections évoquées plus haut (*cf.* paragraphe 1.2.) ayant été programmé, l'énergie interne standard de combustion du produit analysé est ensuite obtenue suivant l'équation (56) du chapitre I. A partir de cette dernière valeur, il est possible de calculer l'enthalpie standard de formation ($\Delta_f H°$) de la molécule considérée. En effet, on sait que l'enthalpie standard d'une réaction, $\Delta_r H°$, s'écrit de la manière suivante :

$$\boxed{\Delta_r H^0 = \sum_j \nu_j \Delta_f H_j^0 - \sum_i \nu_i \Delta_f H_i^0} \qquad (10)$$

où i : réactif(s)
j : produit(s)
ν_i et ν_j : coefficients stoechiométriques

Prenons l'exemple de l'acide picolinique N-oxyde. Sa réaction de combustion s'écrit comme suit :

$$C_6H_5NO_{3,s} + \frac{23}{4}O_{2,g} \rightarrow 6CO_{2,g} + \frac{5}{2}H_2O_{,l} + \frac{1}{2}N_{2,g}$$

Dans ce cas, $\Delta_c H_m^0 = 6.\Delta_f H_m^0(CO_{2,g}) + \frac{5}{2}.\Delta_f H_m^0(H_2O_{,l}) - \Delta_f H_m^0(C_6H_5NO_{3,s})$.

Or, on sait qu'au cours d'une transformation, la variation d'enthalpie ΔH est :

$$\Delta H = \Delta U + (P.V_{produits} - P.V_{réactifs}) \qquad (11)$$

où ΔU : variation d'énergie interne

S'il n'y a pas de variation de volume du système, alors : $\Delta H = \Delta U$.
Si la réaction fait intervenir des gaz parfaits, alors :

$$\boxed{\Delta(PV) = RT\Delta n} \qquad (12)$$

où $\Delta n = n_{gaz\ produit(s)} - n_{gaz\ réactif(s)}$

De ce fait, on écrit, dans notre cas :

$$\Delta_c H_m^0 = \Delta_c U_m^0 + RT\Delta n \qquad (13)$$

On en déduit donc :

$$\Delta_f H_m^0(C_6H_5NO_{3,s}) = 6.\Delta_f H_m^0(CO_{2,g}) + \frac{5}{2}.\Delta_f H_m^0(H_2O_{,l}) - \Delta_c U_m^0 - RT\Delta n$$

où $\Delta n = 6 + \frac{1}{2} - \frac{23}{4} = \frac{3}{4}$

Afin d'obtenir une valeur exacte et précise de l'enthalpie standard de formation d'un composé, on prévoit d'effectuer une dizaine de mesures pour chaque molécule analysée. L'objectif étant d'obtenir des mesures tout à fait reproductibles, la réalisation d'une demi-douzaine d'expériences peut suffire. Mais plus les composés sont difficiles à analyser, *i.e.* plus la réaction de combustion est vive, plus il faut multiplier les expériences afin d'obtenir des résultats reproductibles. Ceci est mis en évidence dans les tableaux de la partie 3. de ce chapitre. En effet, on remarquera que les molécules ayant nécessité le plus grand nombre d'expériences ont été analysées en présence d'un auxiliaire de combustion permettant de flegmatiser la combustion. Par ailleurs, la présence d'un auxiliaire de combustion augmente l'incertitude, donc entraîne la multiplication du nombre de mesures nécessaires à l'obtention d'une bonne reproductibilité des résultats expérimentaux.

2. Mesures de masses volumiques

Il est indispensable de mesurer la masse volumique des composés analysés et de l'auxiliaire de combustion éventuellement employé ($\rho_{éch.}$) afin de déterminer les masses réelles des échantillons. En effet, la simple pesée sur une balance ne fournit que la masse apparente des composés étudiés.

Les pesées sont, dans notre cas, effectuées sur une balance précise au centième de milligramme (la masse de l'échantillon étant de l'ordre du gramme). Un tel degré de précision impose la prise en compte de la poussée d'Archimède, δm. La masse apparente d'un échantillon (composé analysé ou auxiliaire de combustion) est égale à la masse réelle de cet échantillon à laquelle on soustrait δm. On obtient donc :

$$\boxed{m_{apparente} = m_{réelle} - \delta m} \tag{14}$$

Or, $\delta m = V_{éch.} \times \rho_{air} = \dfrac{m_{éch.}}{\rho_{éch.}} \times \rho_{air}$

où $V_{éch.}$: volume de l'échantillon
$m_{éch.}$: masse de l'échantillon
ρ_{air} : masse volumique de l'air
$\rho_{éch.}$: masse volumique de l'échantillon

Et, d'après le modèle des gaz parfaits, on peut écrire :

$$\rho_{air} = \frac{P_{air} M_{air}}{R T_{air}} \tag{15}$$

où P_{air} : pression de l'air
M_{air} : masse molaire de l'air
T_{air} : température de l'air
R : constante des gaz parfaits

En ne tenant pas compte du principe d'Archimède, on peut considérer que sur un échantillon de 1 mL, on commet une erreur de l'ordre du milligramme. La balance utilisée dans le cadre de cette étude étant précise au centième de milligramme, l'erreur effectuée serait ainsi multipliée par 100 !

La masse volumique des molécules étudiées et du produit auxiliaire éventuellement employé sont donc des données indispensables au calcul des énergies internes standard de combustion. Cette grandeur est mesurée avec une précision de $\pm 10^{-4}$ g.cm^{-3} au moyen d'un pycnomètre à gaz ACCUPYC 1330 (micromeritics), pour ce qui concerne les échantillons analysés. Quant à l'auxiliaire de combustion (huile de paraffine) employé afin d'éviter, dans tous les cas le nécessitant, la présence de résidus imbrûlés au sein de la bombe calorimétrique, sa masse volumique est mesurée à l'aide du densimètre à tube vibrant DMA 4500 (Anton Paar), dont la précision est de $\pm 10^{-5}$ g.cm^{-3}.

3. Mesures d'enthalpies standard de formation en phase solide

Les composés analysés ont été choisis afin :

1. de valider les valeurs de contributions de groupes déterminées (*cf.* chapitre IV) ;
2. de satisfaire aux objectifs de l'étude, en sélectionnant des molécules fortement azotées ;
3. d'effectuer des comparaisons avec les deux méthodes concurrentes existantes (méthode de Domalski et Hearing et méthode Cohen) ;
4. et, éventuellement, de déterminer de nouvelles valeurs de contributions de groupes.

L'ensemble des structures moléculaires étudiées est présenté en annexe 2.

Les tableaux II-2 à II-6, II-8 à II-12 et II-14 à II-28 rassemblent les différentes valeurs expérimentales utiles à l'obtention des énergies internes standard de combustion ainsi qu'au calcul des enthalpies standard de formation en phase solide des composés étudiés. Ces tableaux présentent dans l'ordre la masse apparente de la substance, la masse apparente de l'auxiliaire de combustion (huile de paraffine) et la masse de la mèche de coton utilisée. Viennent s'ajouter à cela les températures initiale et finale θ_i et θ_f, l'accroissement de température $\Delta\theta_{corr}$, le volume de soude permettant de doser l'acidité des eaux de lavage V_{NaOH} et la correction de Washburn ΔU_Σ. Enfin, sont présentées l'énergie interne standard de combustion $\Delta_c U°$, l'enthalpie standard de combustion $\Delta_c H°$ et l'enthalpie standard de formation en phase solide $\Delta_f H°_s$ de chaque composé analysé, à T = 298,15 K.

De plus, on utilise P_{air} = 760 mmHg et T_{air} = 298,15 K afin de calculer la masse réelle des échantillons. En ce qui concerne la capacité calorifique des produits analysés, indispensable au calcul de la correction de Washburn, les valeurs de c_P publiées dans la littérature sont utilisées [75]. Si aucune mesure de c_P n'a été publiée, une valeur de 1,7 $J.g^{-1}.°C^{-1}$ est employée. Celle-ci convient aux molécules en phase solide. Par ailleurs, en considérant 1 g de composé et en admettant une erreur de 10% sur la valeur de c_P considérée, l'utilisation d'un c_P égal à 1,7 $J.g^{-1}.°C^{-1}$ ne peut entraîner qu'une erreur de 0,4 J sur l'énergie interne de combustion.

On remarquera que les énergies sont à la fois exprimées en joules par gramme et en kilojoules par mole. En effet, les mesures d'enthalpies ne sont habituellement exprimées qu'en kilojoules par mole (ou en kilocalories par mole), mais l'industrie des matériaux énergétiques préfère se rapporter à la masse des molécules étudiées.

A noter que les incertitudes apparaissant dans les tableaux II-2 à II-6, II-8 à II-12 et II-14 à II-28 correspondent aux écart-types obtenus pour chacune des valeurs moyennes calculées (grandeurs signalées par $<\Delta_c U°>$, $<\Delta_c H°>$ et $<\Delta_f H°_s>$, dans les tableaux correspondants).

Par ailleurs, les tableaux II-7, II-13 et II-29 résument les informations essentielles pour chaque composé analysé, *i.e.* sa formule brute accompagnée de son numéro CAS (si celui-ci est connu), son énergie interne standard de combustion $\Delta_c U°$, son enthalpie standard de combustion $\Delta_c H°$ et son enthalpie standard de formation en phase solide $\Delta_f H°_s$, à T = 298,15 K. Ont également été ajoutées l'enthalpie de formation à l'état condensé, l'enthalpie de sublimation et l'enthalpie de formation à l'état gazeux qui ont été publiées dans la littérature, et ceci, pour chacune des molécules étudiées. Les incertitudes associées aux grandeurs expérimentales présentées dans ces tableaux sont les incertitudes admises par la communauté thermochimiste. Autrement dit, les incertitudes des énergies internes standard de combustion et des enthalpies standard de combustion sont égales à deux fois la déviation standard de la

moyenne. Quant à l'incertitude associée aux enthalpies standard de formation, elle correspond au calcul d'incertitude préconisé par Rossini [70]. Ce dernier tient compte des incertitudes sur les enthalpies standard de formation de $CO_{2,g}$ et de $H_2O_{,l}$, soit $\Delta_f H°_{s,m}(CO_{2,g})$ = -(393,51 ± 0,13) kJ.mol^{-1} et $\Delta_f H°_{s,m}(H_2O_{,l})$ = -(285,83 ± 0,04) kJ.mol^{-1} [76].

3.1. Composés C_xH_y

Cinq molécules de formule générale C_xH_y ont été analysées : pentaméthylbenzène, nonadécane, docosane, tricosane et tétracosane. L'ensemble des valeurs expérimentales obtenues et utilisées afin de calculer les enthalpies standard de formation en phase solide est présenté dans les cinq tableaux ci-dessous :

	1	2	3	4	5	6	7	8	9
$m_{composé}$ (g)	0,40109	0,44284	0,45314	0,44126	0,44348	0,44132	0,44311	0,44338	0,44178
$m_{huile\ de\ paraffine}$ (g)	0,25856	0,21189	0,20437	0,20032	0,20239	0,21271	0,20003	0,19733	0,20116
m_{coton} (g)	0,00224	0,00233	0,00211	0,00226	0,00223	0,00219	0,00226	0,00221	0,00211
θ_i (°C)	22,7192	22,7226	22,7232	22,7217	22,7215	22,7158	22,7214	22,7244	22,7189
θ_f (°C)	25,7749	25,7450	25,7520	25,6863	25,7056	25,7357	25,6911	25,6860	25,6891
$\Delta\theta_{corr}$ (°C)	2,9205	2,8880	2,8979	2,8283	2,8465	2,8838	2,8335	2,8233	2,8327
V_{NaOH} (mL)	8,60	8,65	8,95	8,65	8,80	8,60	8,25	8,65	8,15
ΔU_Σ (J)	66,36	66,69	68,53	66,36	67,36	66,36	64,06	66,32	63,43
$\Delta_c U°_{mas.}$ (J.g^{-1})	-43592,8	-43598,7	-43595,3	-43594,2	-43578,9	-43572,7	-43566,5	-43587,1	-43573,3
$<\Delta_c U°_{mas.}>$ (J.g^{-1})	-43584,4 ± 11,8								
$\Delta_c U°_m$ (kJ.mol^{-1})	-6462,4	-6463,3	-6462,8	-6462,6	-6460,3	-6459,4	-6458,5	-6461,6	-6459,5
$<\Delta_c U°_m>$ (kJ.mol^{-1})	-6461,2 ± 1,7								
$\Delta_c H°_{mas.}$ (J.g^{-1})	-43659,6	-43665,6	-43662,2	-43661,1	-43645,8	-43639,6	-43633,4	-43654,0	-43640,2
$<\Delta_c H°_{mas.}>$ (J.g^{-1})	-43651,3 ± 11,8								
$\Delta_c H°_m$ (kJ.mol^{-1})	-6472,3	-6473,2	-6472,7	-6472,5	-6470,3	-6469,3	-6468,4	-6471,5	-6469,4
$<\Delta_c H°_m>$ (kJ.mol^{-1})	-6471,1 ± 1,7								
$\Delta_f H°_{s,mas.}$ (J.g^{-1})	-964,2	-958,3	-961,7	-962,8	-978,0	-984,2	-990,4	-969,8	-983,7
$<\Delta_f H°_{s,mas.}>$ (J.g^{-1})	-972,6 ± 11,8								
$\Delta_f H°_{s,m}$ (kJ.mol^{-1})	-142,9	-142,1	-142,6	-142,7	-145,0	-145,9	-146,8	-143,8	-145,8
$<\Delta_f H°_{s,m}>$ (kJ.mol^{-1})	-144,2 ± 1,7								

Tableau II-2 : Détail des mesures effectuées sur le pentaméthylbenzène.

	1	2	3	4	5	6
$m_{composé}$ (g)	0,64103	0,63749	0,64292	0,64515	0,64413	0,63856
m_{coton} (g)	0,00431	0,00423	0,00375	0,00449	0,00373	0,00395
θ_i (°C)	22,5901	22,5775	22,5894	22,5784	22,5716	22,5811
θ_f (°C)	25,5658	25,5413	25,5777	25,5728	25,5616	25,5492
$\Delta\theta_{corr}$ (°C)	2,9911	2,9758	2,9990	3,0115	3,0051	2,9790
V_{NaOH} (mL)	10,00	10,60	10,11	10,71	10,55	10,00
ΔU_{Σ} (J)	73,64	77,11	74,31	77,99	77,03	73,60
$\Delta_c U°_{mas.}$ ($J.g^{-1}$)	-46888,9	-46903,3	-46889,4	-46897,8	-46893,6	-46888,0
$<\Delta_c U°_{mas.}>$ ($J.g^{-1}$)	-46893,5 ± 6,0					
$\Delta_c U°_m$ ($kJ.mol^{-1}$)	-12590,7	-12594,5	-12590,8	-12593,0	-12591,9	-12590,4
$<\Delta_c U°_m>$ ($kJ.mol^{-1}$)	-12591,9 ± 1,6					
$\Delta_c H°_{mas.}$ ($J.g^{-1}$)	-46981,3	-46995,6	-46981,7	-46990,1	-46985,9	-46980,3
$<\Delta_c H°_{mas.}>$ ($J.g^{-1}$)	-46985,8 ± 6,0					
$\Delta_c H°_m$ ($kJ.mol^{-1}$)	-12615,4	-12619,3	-12615,6	-12617,8	-12616,7	-12615,2
$<\Delta_c H°_m>$ ($kJ.mol^{-1}$)	-12616,7 ± 1,6					
$\Delta_f H°_{s,mas.}$ ($J.g^{-1}$)	-2151,9	-2137,6	-2151,5	-2143,1	-2147,3	-2152,9
$<\Delta_f H°_{s,mas.}>$ ($J.g^{-1}$)	-2147,4 ± 6,0					
$\Delta_f H°_{s,m}$ ($kJ.mol^{-1}$)	-577,8	-574,0	-577,7	-575,5	-576,6	-578,1
$<\Delta_f H°_{s,m}>$ ($kJ.mol^{-1}$)	-576,6 ± 1,6					

Tableau II-3 : Détail des mesures effectuées sur le nonadécane.

	1	2	3	4	5	6	7	8
$m_{composé}$ (g)	0,98632	0,68636	0,69616	0,68050	0,69582	0,69440	0,69035	0,69180
m_{coton} (g)	0,00482	0,00488	0,00485	0,00474	0,00452	0,00466	0,00431	0,00437
θ_i (°C)	22,5980	22,6029	22,6399	22,6003	22,5802	22,5633	22,5921	22,5822
θ_f (°C)	27,1186	25,7727	25,8522	25,7441	25,7924	25,7703	25,7791	25,7755
$\Delta\theta_{corr}$ (°C)	4,5852	3,1934	3,2386	3,1668	3,2373	3,2308	3,2113	3,2179
V_{NaOH} (mL)	14,49	10,20	10,55	10,33	11,04	10,54	10,98	10,61
ΔU_{Σ} (J)	109,54	75,98	78,20	76,61	81,25	78,32	80,71	78,62
$\Delta_c U°_{mas.}$ ($J.g^{-1}$)	-46761,4	-46755,6	-46751,2	-46766,3	-46758,1	-46760,2	-46755,2	-46754,3
$<\Delta_c U°_{mas.}>$ ($J.g^{-1}$)	-46757,8 ± 4,8							
$\Delta_c U°_m$ ($kJ.mol^{-1}$)	-14524,1	-14522,3	-14520,9	-14525,6	-14523,1	-14523,8	-14522,2	-14521,9
$<\Delta_c U°_m>$ ($kJ.mol^{-1}$)	-14523,0 ± 1,5							
$\Delta_c H°_{mas.}$ ($J.g^{-1}$)	-46853,2	-46847,4	-46843,0	-46858,1	-46849,8	-46852,0	-46847,0	-46846,1
$<\Delta_c H°_{mas.}>$ ($J.g^{-1}$)	-46849,6 ± 4,8							
$\Delta_c H°_m$ ($kJ.mol^{-1}$)	-14552,6	-14550,8	-14549,5	-14554,1	-14551,6	-14552,3	-14550,7	-14550,4
$<\Delta_c H°_m>$ ($kJ.mol^{-1}$)	-14551,5 ± 1,5							
$\Delta_f H°_{s,mas.}$ ($J.g^{-1}$)	-2185,0	-2190,8	-2195,3	-2180,2	-2188,4	-2186,2	-2191,2	-2192,2
$<\Delta_f H°_{s,mas.}>$ ($J.g^{-1}$)	-2188,7 ± 4,7							
$\Delta_f H°_{s,m}$ ($kJ.mol^{-1}$)	-678,7	-680,5	-681,9	-677,2	-679,7	-679,1	-680,6	-680,9
$<\Delta_f H°_{s,m}>$ ($kJ.mol^{-1}$)	-679,8 ± 1,5							

Tableau II-4 : Détail des mesures effectuées sur le docosane.

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$m_{composé}$ (g)	0,32104	0,29609	0,29746	0,29642	0,29883	0,30088	0,29961	0,29965	0,30038	0,30093
$m_{huile\ de\ paraffine}$ (g)	0,31415	0,31459	0,31889	0,31131	0,31309	0,30915	0,30691	0,31153	0,30795	0,30829
m_{coton} (g)	0,00112	0,00148	0,00150	0,00163	0,00151	0,00142	0,00136	0,00151	0,00181	0,00173
θ_i (°C)	22,7304	22,7182	22,7341	22,7234	22,7200	22,7306	22,7353	22,7165	22,7293	22,7248
θ_f (°C)	25,7889	25,6686	25,7099	25,6599	25,6756	25,6792	25,6668	25,6712	25,6702	25,6701
$\Delta\theta_{corr}$ (°C)	2,9236	2,8115	2,8368	2,7981	2,8176	2,8084	2,7920	2,8131	2,8011	2,8062
V_{NaOH} (mL)	8,55	8,75	8,55	8,95	8,35	8,60	8,60	8,35	8,25	8,60
ΔU_Σ (J)	64,43	65,02	63,93	66,11	62,68	64,10	64,02	62,68	62,01	64,10
$\Delta_c U°_{mas.}$ ($J.g^{-1}$)	-46640,3	-46652,7	-46636,0	-46641,1	-46669,2	-46642,0	-46638,0	-46628,4	-46650,4	-46674,5
$<\Delta_c U°_{mas.}>$ ($J.g^{-1}$)	-46647,3 ± 14,7									
$\Delta_c U°_m$ ($kJ.mol^{-1}$)	-15140,7	-15144,7	-15139,3	-15141,0	-15150,1	-15141,3	-15140,0	-15136,8	-15144,0	-15151,8
$<\Delta_c U°_m>$ ($kJ.mol^{-1}$)	-15143,0 ± 4,8									
$\Delta_c H°_{mas.}$ ($J.g^{-1}$)	-46732,0	-46744,4	-46727,6	-46732,8	-46760,8	-46733,7	-46729,7	-46720,0	-46742,0	-46766,1
$<\Delta_c H°_{mas.}>$ ($J.g^{-1}$)	-46738,9 ± 14,7									
$\Delta_c H°_m$ ($kJ.mol^{-1}$)	-15170,5	-15174,5	-15169,0	-15170,7	-15179,8	-15171,0	-15169,7	-15166,6	-15173,7	-15181,6
$<\Delta_c H°_m>$ ($kJ.mol^{-1}$)	-15172,7 ± 4,8									
$\Delta_f H°_{s,mas.}$ ($J.g^{-1}$)	-2280,1	-2267,7	-2284,5	-2279,3	-2251,2	-2278,4	-2282,4	-2292,1	-2270,0	-2245,9
$<\Delta_f H°_{s,mas.}>$ ($J.g^{-1}$)	-2273,2 ± 14,7									
$\Delta_f H°_{s,m}$ ($kJ.mol^{-1}$)	-740,2	-736,2	-741,6	-739,9	-730,8	-739,6	-740,9	-744,1	-736,9	-729,1
$<\Delta_f H°_{s,m}>$ ($kJ.mol^{-1}$)	-737,9 ± 4,8									

Tableau II-5 : Détail des mesures effectuées sur le tricosane.

	1	2	3	4	5	6
$m_{composé}$ (g)	0,49057	0,59814	0,59945	0,60092	0,60677	0,61362
m_{coton} (g)	0,00385	0,00459	0,00381	0,00394	0,00457	0,00430
θ_i (°C)	22,5565	22,5651	22,5942	22,5580	22,5737	22,5979
θ_f (°C)	24,8456	25,3347	25,3691	25,3438	25,3857	25,4459
$\Delta\theta_{corr}$ (°C)	2,2830	2,7821	2,7875	2,7952	2,8221	2,8535
V_{NaOH} (mL)	7,94	9,13	9,42	9,23	9,28	9,46
ΔU_Σ (J)	57,32	66,90	68,58	67,57	67,99	69,16
$\Delta_c U°_{mas.}$ ($J.g^{-1}$)	-46742,7	-46728,3	-46735,6	-46749,1	-46727,5	-46728,7
$<\Delta_c U°_{mas.}>$ ($J.g^{-1}$)	-46735,3 ± 8,9					
$\Delta_c U°_m$ ($kJ.mol^{-1}$)	-15829,6	-15824,7	-15827,2	-15831,8	-15824,4	-15824,9
$<\Delta_c U°_m>$ ($kJ.mol^{-1}$)	-15827,1 ± 3,0					
$\Delta_c H°_{mas.}$ ($J.g^{-1}$)	-46834,2	-46819,8	-46827,1	-46840,6	-46819,0	-46820,2
$<\Delta_c H°_{mas.}>$ ($J.g^{-1}$)	-46826,8 ± 8,9					
$\Delta_c H°_m$ ($kJ.mol^{-1}$)	-15860,6	-15855,7	-15858,2	-15862,7	-15855,4	-15855,8
$<\Delta_c H°_m>$ ($kJ.mol^{-1}$)	-15858,1 ± 3,0					
$\Delta_f H°_{s,mas.}$ ($J.g^{-1}$)	-2153,9	-2168,2	-2160,9	-2147,5	-2169,1	-2167,9
$<\Delta_f H°_{s,mas.}>$ ($J.g^{-1}$)	-2161,2 ± 8,9					
$\Delta_f H°_{s,m}$ ($kJ.mol^{-1}$)	-729,4	-734,3	-731,8	-727,2	-734,6	-734,2
$<\Delta_f H°_{s,m}>$ ($kJ.mol^{-1}$)	-731,9 ± 3,0					

Tableau II-6 : Détail des mesures effectuées sur le tétracosane.

Le tableau II-7 rassemble les mesures à retenir pour les cinq molécules C_xH_y analysées.

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_cU°_m$	$\Delta_cH°_m$	$\Delta_fH°_{s,m}$		$\Delta H°_{sub}$ (litt.) [75]	$\Delta_fH°_{g,m}$ (litt.) [75]
					Ce travail	Littérature		
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
pentaméthylbenzène	$C_{11}H_{16}$	700-12-9	-6461,2 ± 1,2	-6471,1 ± 1,2	-144,2 ± 1,9	-144,6 ± 2,2 [75]	71,6 ± 0,1	-67,2 ± 2,2
nonadécane	$C_{19}H_{40}$	629-92-5	-12591,9 ± 1,3	-12616,7 ± 1,3	-576,6 ± 2,9	-	143,6	-435,1 ± 2,9
docosane	$C_{22}H_{46}$	629-97-0	-14523,0 ± 1,0	-14551,5 ± 1,0	-679,8 ± 3,2	-	-	-
tricosane	$C_{23}H_{48}$	638-67-5	-15143,0 ± 3,0	-15172,7 ± 3,0	-737,9 ± 4,4	-	-	-
tétracosane	$C_{24}H_{50}$	646-31-1	-15827,1 ± 2,5	-15858,1 ± 2,5	-731,9 ± 4,1	-713,37 [77]	162,0 ± 12,0	-

Tableau II-7 : Energies internes standard de combustion, enthalpies standard de combustion, enthalpies standard de formation en phases solide et gazeuse et enthalpies standard de sublimation des cinq composés solides C_xH_y analysés.

On notera l'excellent accord entre les mesures et la valeur d'enthalpie de formation en phase solide issue de la littérature concernant le pentaméthylbenzène. En revanche, le même constat ne peut être fait pour ce qui est du tétracosane. En effet, ce composé peut cristalliser sous plusieurs formes, ce qui pourrait expliquer la différence observée sur les mesures d'enthalpie de formation. Une valeur d'enthalpie de transition de phase à 321,1 K a été publiée pour cette molécule [78] : ΔH_{trs} (CI, CII) = 31,5 kJ.mol^{-1} [CI et CII correspondent aux phases cristallines I et II du composé].

3.2. Composés $C_xH_yO_z$

Les données expérimentales concernant l'ensemble des cinq composés de formule générale $C_xH_yO_z$ (2-adamantanone, acide 2-méthylbenzoïque, acide salicylique, acide pentanedioïque et acide hexanedioïque) sont présentées dans les tableaux suivants :

	1	2	3	4	5	6	7
$m_{composé}$ (g)	0,37790	0,37742	0,37505	0,37604	0,37614	0,37567	0,37772
$m_{huile\ de\ paraffine}$ (g)	0,31932	0,30931	0,30767	0,31256	0,31499	0,30465	0,30778
m_{coton} (g)	0,00148	0,00134	0,00152	0,00132	0,00120	0,00124	0,00136
θ_i (°C)	22,7274	22,7287	22,7458	22,7254	22,7224	22,7306	22,7310
θ_f (°C)	25,7311	25,6841	25,6853	25,6928	25,6995	25,6600	25,6798
$\Delta\theta_{corr}$ (°C)	2,8636	2,8147	2,7990	2,8252	2,8365	2,7870	2,8090
V_{NaOH} (mL)	8,50	8,25	8,35	8,25	8,35	8,20	8,25
ΔU_{Σ} (J)	65,73	64,02	64,48	64,06	64,68	63,55	63,97
$\Delta_c U°_{mas.}$ ($J.g^{-1}$)	-37374,2	-37346,6	-37351,1	-37370,0	-37367,2	-37352,2	-37352,2
$<\Delta_c U°_{mas.}>$ ($J.g^{-1}$)	-37359,1 ± 11,0						
$\Delta_c U°_m$ ($kJ.mol^{-1}$)	-5614,3	-5610,1	-5610,8	-5613,6	-5613,2	-5611,0	-5611,0
$<\Delta_c U°_m>$ ($kJ.mol^{-1}$)	-5612,0 ± 1,7						
$\Delta_c H°_{mas.}$ ($J.g^{-1}$)	-37423,7	-37396,1	-37400,6	-37419,5	-37416,7	-37401,7	-37401,7
$<\Delta_c H°_{mas.}>$ ($J.g^{-1}$)	-37408,6 ± 11,0						
$\Delta_c H°_m$ ($kJ.mol^{-1}$)	-5621,7	-5617,6	-5618,2	-5621,1	-5620,6	-5618,4	-5618,4
$<\Delta_c H°_m>$ ($kJ.mol^{-1}$)	-5619,4 ± 1,7						
$\Delta_f H°_{s,mas.}$ ($J.g^{-1}$)	-2091,7	-2119,3	-2114,8	-2095,9	-2098,7	-2113,7	-2113,7
$<\Delta_f H°_{s,mas.}>$ ($J.g^{-1}$)	-2106,8 ± 11,0						
$\Delta_f H°_{s,m}$ ($kJ.mol^{-1}$)	-314,2	-318,4	-317,7	-314,8	-315,3	-317,5	-317,5
$<\Delta_f H°_{s,m}>$ ($kJ.mol^{-1}$)	-316,5 ± 1,7						

Tableau II-8 : Détail des mesures effectuées sur le 2-adamantanone.

	1	2	3	4	5	6	7
$m_{composé}$ (g)	0,50502	0,50417	0,50411	0,50476	0,50281	0,50207	0,50301
$m_{huile\ de\ paraffine}$ (g)	0,29652	0,29748	0,29974	0,30008	0,29538	0,30110	0,30273
m_{coton} (g)	0,00249	0,00252	0,00241	0,00251	0,00241	0,00228	0,00218
θ_i (°C)	22,7211	22,7247	22,7231	22,7242	22,7291	22,7203	22,7201
θ_f (°C)	25,6432	25,6481	25,6573	25,6594	25,6406	25,6539	25,6624
$\Delta\theta_{corr}$ (°C)	2,7825	2,7844	2,7945	2,7977	2,7708	2,7942	2,8055
V_{NaOH} (mL)	8,05	8,30	8,05	7,65	8,25	8,05	8,25
ΔU_{Σ} (J)	65,61	67,07	65,65	63,35	66,69	65,65	66,86
$\Delta_c U°_{mas.}$ ($J.g^{-1}$)	-28398,5	-28392,6	-28400,3	-28395,7	-28395,4	-28384,6	-28408,3
$<\Delta_c U°_{mas.}>$ ($J.g^{-1}$)	-28396,5 ± 7,2						
$\Delta_c U°_m$ ($kJ.mol^{-1}$)	-3866,4	-3865,6	-3866,6	-3866,0	-3866,0	-3864,5	-3867,7
$<\Delta_c U°_m>$ ($kJ.mol^{-1}$)	-3866,1 ± 1,0						
$\Delta_c H°_{mas.}$ ($J.g^{-1}$)	-28416,7	-28410,8	-28418,5	-28413,9	-28413,6	-28402,8	-28426,5
$<\Delta_c H°_{mas.}>$ ($J.g^{-1}$)	-28414,7 ± 7,2						
$\Delta_c H°_m$ ($kJ.mol^{-1}$)	-3868,9	-3868,1	-3869,1	-3868,5	-3868,5	-3867,0	-3870,2
$<\Delta_c H°_m>$ ($kJ.mol^{-1}$)	-3868,6 ± 1,0						
$\Delta_f H°_{s,mas.}$ ($J.g^{-1}$)	-3103,5	-3109,3	-3101,6	-3106,2	-3106,5	-3117,3	-3093,6
$<\Delta_f H°_{s,mas.}>$ ($J.g^{-1}$)	-3105,4 ± 7,2						
$\Delta_f H°_{s,m}$ ($kJ.mol^{-1}$)	-422,5	-423,3	-422,3	-422,9	-422,9	-424,4	-421,2
$<\Delta_f H°_{s,m}>$ ($kJ.mol^{-1}$)	-422,8 ± 1,0						

Tableau II-9 : Détail des mesures effectuées sur l'acide 2-méthylbenzoïque.

	1	2	3	4	5	6	7	8
$m_{composé}$ (g)	0,50279	0,50198	0,49767	0,49679	0,50117	0,50034	0,50237	0,50082
$m_{huile\ de\ paraffine}$ (g)	0,50630	0,41451	0,39624	0,37846	0,38557	0,39473	0,39361	0,38619
m_{coton} (g)	0,00288	0,00264	0,00277	0,00249	0,00195	0,00216	0,00213	0,00217
θ_i (°C)	22,7371	22,7264	22,7289	22,7428	22,7189	22,7205	22,7236	22,7208
θ_f (°C)	26,2663	25,8460	25,7566	25,6897	25,7072	25,7483	25,7494	25,7102
$\Delta\theta_{corr}$ (°C)	3,4077	2,9870	2,8925	2,8103	2,8501	2,8900	2,8914	2,8519
V_{NaOH} (mL)	11,25	9,60	9,55	9,10	8,80	8,85	9,10	8,75
ΔU_{Σ} (J)	88,99	76,86	75,98	72,84	71,38	71,88	73,39	71,09
$\Delta_c U°_{mas.}$ ($J.g^{-1}$)	-21801,4	-21825,9	-21784,4	-21816,2	-21793,8	-21781,1	-21822,0	-21779,0
$<\Delta_c U°_{mas.}>$ ($J.g^{-1}$)	-21800,5 ± 18,9							
$\Delta_c U°_m$ ($kJ.mol^{-1}$)	-3011,2	-3014,6	-3008,9	-3013,3	-3010,2	-3008,4	-3014,1	-3008,1
$<\Delta_c U°_m>$ ($kJ.mol^{-1}$)	-3011,1 ± 2,6							
$\Delta_c H°_{mas.}$ ($J.g^{-1}$)	-21801,4	-21825,9	-21784,4	-21816,2	-21793,8	-21781,1	-21822,0	-21779,0
$<\Delta_c H°_{mas.}>$ ($J.g^{-1}$)	-21800,5 ± 18,9							
$\Delta_c H°_m$ ($kJ.mol^{-1}$)	-3011,2	-3014,6	-3008,9	-3013,3	-3010,2	-3008,4	-3014,1	-3008,1
$<\Delta_c H°_m>$ ($kJ.mol^{-1}$)	-3011,1 ± 2,6							
$\Delta_f H°_{s,mas.}$ ($J.g^{-1}$)	-4350,1	-4325,5	-4367,0	-4335,2	-4357,6	-4370,4	-4329,5	-4372,5
$<\Delta_f H°_{s,mas.}>$ ($J.g^{-1}$)	-4351,0 ± 18,9							
$\Delta_f H°_{s,m}$ ($kJ.mol^{-1}$)	-600,8	-597,4	-603,2	-598,8	-601,9	-603,6	-598,0	-603,9
$<\Delta_f H°_{s,m}>$ ($kJ.mol^{-1}$)	-601,0 ± 2,6							

Tableau II-10 : Détail des mesures effectuées sur l'acide salicylique.

	1	2	3	4	5	6	7	8
$m_{composé}$ (g)	0,50050	0,50110	0,50196	0,49835	0,49972	0,50168	0,50072	0,50165
$m_{huile\ de\ paraffine}$ (g)	0,50640	0,29963	0,40982	0,40905	0,40274	0,40060	0,40520	0,40098
m_{coton} (g)	0,00221	0,00245	0,00255	0,00233	0,00291	0,00235	0,00223	0,00246
θ_i (°C)	22,7212	22,7194	22,7256	22,7238	22,7189	22,7219	22,7244	22,7215
θ_f (°C)	25,9734	25,0526	25,5520	25,5406	25,5115	25,5060	25,5284	25,5076
$\Delta\theta_{corr}$ (°C)	3,1230	2,1792	2,6850	2,6751	2,6491	2,6409	2,6612	2,6433
V_{NaOH} (mL)	9,40	6,15	8,60	8,00	7,90	7,30	8,40	7,85
ΔU_{Σ} (J)	75,52	51,17	68,37	64,73	64,02	60,46	67,03	63,72
$\Delta_c U°_{mas.}$ ($J.g^{-1}$)	-16191,3	-16197,4	-16194,2	-16198,3	-16192,0	-16185,9	-16194,5	-16190,4
$<\Delta_c U°_{mas.}>$ ($J.g^{-1}$)	-16193,0 ± 4,0							
$\Delta_c U°_m$ ($kJ.mol^{-1}$)	-2139,1	-2139,9	-2139,5	-2140,0	-2139,2	-2138,4	-2139,5	-2139,0
$<\Delta_c U°_m>$ ($kJ.mol^{-1}$)	-2139,3 ± 0,5							
$\Delta_c H°_{mas.}$ ($J.g^{-1}$)	-16191,3	-16197,4	-16194,2	-16198,3	-16192,0	-16185,9	-16194,5	-16190,4
$<\Delta_c H°_{mas.}>$ ($J.g^{-1}$)	-16193,0 ± 4,0							
$\Delta_c H°_m$ ($kJ.mol^{-1}$)	-2139,1	-2139,9	-2139,5	-2140,0	-2139,2	-2138,4	-2139,5	-2139,0
$<\Delta_c H°_m>$ ($kJ.mol^{-1}$)	-2139,3 ± 0,5							
$\Delta_f H°_{s,mas.}$ ($J.g^{-1}$)	-7355,4	-7349,4	-7352,6	-7348,5	-7354,8	-7360,8	-7352,3	-7356,4
$<\Delta_f H°_{s,mas.}>$ ($J.g^{-1}$)	-7353,7 ± 4,0							
$\Delta_f H°_{s,m}$ ($kJ.mol^{-1}$)	-971,8	-971,0	-971,4	-970,8	-971,7	-972,5	-971,3	-971,9
$<\Delta_f H°_{s,m}>$ ($kJ.mol^{-1}$)	-971,5 ± 0,5							

<u>Tableau II-11</u> : Détail des mesures effectuées sur l'acide pentanedioïque.

	1	2	3	4	5	6	7
$m_{composé}$ (g)	0,70089	0,70102	0,70034	0,70194	0,70065	0,70203	0,70246
$m_{huile\ de\ paraffine}$ (g)	0,29427	0,29393	0,29432	0,29723	0,29519	0,30620	0,29728
m_{coton} (g)	0,00247	0,00255	0,00280	0,00224	0,00205	0,00236	0,00259
θ_i (°C)	22,7224	22,7203	22,7223	22,7257	22,7209	22,7239	22,7210
θ_f (°C)	25,5381	25,5374	25,5394	25,5588	25,5407	25,5957	25,5550
$\Delta\theta_{corr}$ (°C)	2,6753	2,6765	2,6767	2,6927	2,6804	2,7314	2,6928
V_{NaOH} (mL)	7,85	8,50	8,10	8,50	8,15	7,80	8,10
ΔU_{Σ} (J)	65,35	69,16	66,82	69,25	67,11	65,35	66,94
$\Delta_c U°_{mas.}$ ($J.g^{-1}$)	-19068,3	-19097,0	-19090,1	-19097,3	-19095,5	-19064,3	-19074,9
$<\Delta_c U°_{mas.}>$ ($J.g^{-1}$)	-19083,9 $\pm$ 14,3						
$\Delta_c U°_m$ ($kJ.mol^{-1}$)	-2786,7	-2790,9	-2789,8	-2790,9	-2790,6	-2786,1	-2787,6
$<\Delta_c U°_m>$ ($kJ.mol^{-1}$)	-2788,9 $\pm$ 2,1						
$\Delta_c H°_{mas.}$ ($J.g^{-1}$)	-19076,8	-19105,4	-19098,6	-19105,7	-19104,0	-19072,8	-19083,4
$<\Delta_c H°_{mas.}>$ ($J.g^{-1}$)	-19092,4 $\pm$ 14,3						
$\Delta_c H°_m$ ($kJ.mol^{-1}$)	-2787,9	-2792,1	-2791,1	-2792,1	-2791,9	-2787,3	-2788,9
$<\Delta_c H°_m>$ ($kJ.mol^{-1}$)	-2790,2 $\pm$ 2,1						
$\Delta_f H°_{s,mas.}$ ($J.g^{-1}$)	-6858,4	-6829,8	-6836,7	-6829,5	-6831,2	-6862,5	-6851,9
$<\Delta_f H°_{s,mas.}>$ ($J.g^{-1}$)	-6842,9 $\pm$ 14,3						
$\Delta_f H°_{s,m}$ ($kJ.mol^{-1}$)	-1002,3	-998,1	-999,1	-998,1	-998,3	-1002,9	-1001,3
$<\Delta_f H°_{s,m}>$ ($kJ.mol^{-1}$)	-1000,0 $\pm$ 2,1						

Tableau II-12 : Détail des mesures effectuées sur l'acide hexanedioïque.

Les grandeurs thermochimiques utiles au calcul des enthalpies de formation en phase solide des cinq molécules oxygénées analysées sont présentées dans le tableau II-13. Les valeurs d'enthalpies associées à ces composés qui sont disponibles dans la littérature sont également indiquées.

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_c U°_m$	$\Delta_c H°_m$	$\Delta_f H°_{s,m}$		$\Delta H°_{sub}$ (litt.) [75]	$\Delta_f H°_{g,m}$ (litt.) [75]
					Ce travail	Littérature		
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
2-adamantanone	$C_{10}H_{14}O$	700-58-3	-5612,0 ± 1,3	-5619,4 ± 1,3	-316,5 ± 1,8	-319,70 [77]	80,3 ± 2,5	-231,0 ± 4,6
acide 2-méthylbenzoïque	$C_8H_8O_2$	118-90-1	-3866,1 ± 0,7	-3868,6 ± 0,7	-422,8 ± 1,3	-416,5 ± 1,5 [75]	95,9 ± 0,1	-320,6 ± 1,5
acide salicylique	$C_7H_6O_3$	69-72-7	-3011,1 ± 1,8	-3011,1 ± 1,8	-601,0 ± 2,1	-592,04 [77]	-	-
acide pentanedioïque	$C_5H_8O_4$	110-94-1	-2139,3 ± 0,4	-2139,3 ± 0,4	-971,5 ± 0,8	-960,5 ± 1,1 [75]	-	-
acide hexanedioïque	$C_6H_{10}O_4$	124-04-9	-2788,9 ± 1,6	-2790,2 ± 1,6	-1000,0 ± 1,8	-1021,32 [75]	129,0 ± 1,0	-

Tableau II-13 : Energies internes standard de combustion, enthalpies standard de combustion, enthalpies standard de formation en phases solide et gazeuse et enthalpies standard de sublimation des cinq composés solides $C_xH_yO_z$ analysés.

Les valeurs d'enthalpies de formation à l'état solide issues de la littérature sont globalement en bon accord avec les enthalpies mesurées au laboratoire. On remarquera seulement un écart un peu élevé dans le cas de l'acide pentanedioïque et surtout de l'acide hexanedioïque.

3.3. Composés $C_xH_yN_wO_z$

Les quinze tableaux ci-dessous rassemblent les valeurs expérimentales nécessaires au calcul des enthalpies standard de formation en phase solide des molécules de formule générale $C_xH_yN_wO_z$ étudiées (diphénylamine, 2-aminopyridine, phtalonitrile, 5,6-diméthylbenzimidazole, 1,2,4-triazole, benzotriazole, 4-amino-1,2,4-triazole, mélamine, acide picolinique N-oxyde, uracile, phtalhydrazide, 4-nitro-imidazole, 2-méthyl-5-nitro-imidazole, 5-nitro-uracile et azodicarbonamide).

	1	2	3	4	5	6	7	8	9
$m_{composé}$ (g)	0,43648	0,45766	0,45666	0,45631	0,45395	0,45509	0,45632	0,45664	0,45829
$m_{huile\ de\ paraffine}$ (g)	0,24780	0,24479	0,24756	0,24993	0,24477	0,24867	0,24558	0,24187	0,24584
m_{coton} (g)	0,00224	0,00189	0,00215	0,00218	0,00265	0,00217	0,00228	0,00169	0,00149
θ_i (°C)	22,7151	22,7209	22,7197	22,7290	22,7185	22,7197	22,7191	22,7254	22,7205
θ_f (°C)	25,6283	25,6978	25,7063	25,7253	25,6848	25,7087	25,6954	25,6874	25,7066
$\Delta\theta_{corr}$ (°C)	2,7742	2,8407	2,8494	2,8596	2,8285	2,8505	2,8402	2,8234	2,8477
V_{NaOH} (mL)	9,15	10,15	10,15	10,55	10,30	10,50	9,15	10,15	10,55
ΔU_{Σ} (J)	70,04	76,44	76,44	78,87	77,24	78,53	70,50	76,32	78,83
$\Delta_c U°_{mas.}$ ($J.g^{-1}$)	-37804,3	-37823,8	-37810,0	-37820,9	-37833,2	-37847,1	-37840,4	-37828,0	-37830,5
$<\Delta_c U°_{mas.}>$ ($J.g^{-1}$)	-37826,5 ± 13,6								
$\Delta_c U°_m$ ($kJ.mol^{-1}$)	-6402,9	-6406,2	-6403,9	-6405,7	-6407,8	-6410,2	-6409,0	-6406,9	-6407,3
$<\Delta_c U°_m>$ ($kJ.mol^{-1}$)	-6406,7 ± 2,3								
$\Delta_c H°_{mas.}$ ($J.g^{-1}$)	-37837,3	-37856,8	-37842,9	-37853,8	-37866,2	-37880,0	-37873,4	-37861,0	-37863,5
$<\Delta_c H°_{mas.}>$ ($J.g^{-1}$)	-37859,4 ± 13,6								
$\Delta_c H°_m$ ($kJ.mol^{-1}$)	-6402,9	-6406,2	-6403,9	-6405,7	-6407,8	-6410,2	-6409,0	-6406,9	-6407,3
$<\Delta_c H°_m>$ ($kJ.mol^{-1}$)	-6406,7 ± 2,3								
$\Delta_f H°_{s,mas.}$ ($J.g^{-1}$)	642,5	662,1	648,2	659,1	671,4	685,3	678,6	666,3	668,7
$<\Delta_f H°_{s,mas.}>$ ($J.g^{-1}$)	664,7 ± 13,6								
$\Delta_f H°_{s,m}$ ($kJ.mol^{-1}$)	108,7	112,0	109,7	111,5	113,6	116,0	114,8	112,7	113,2
$<\Delta_f H°_{s,m}>$ ($kJ.mol^{-1}$)	112,5 ± 2,3								

Tableau II-14 : Détail des mesures effectuées sur la diphénylamine.

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
$m_{composé}$ (g)	0,50421	0,50385	0,50365	0,50354	0,50494	0,50678	0,50544	0,50564	0,50294	0,50678	0,50531	0,50456	0,50628
$m_{huile\ de\ paraffine}$ (g)	0,26133	0,26208	0,26367	0,26205	0,26506	0,25480	0,25852	0,25711	0,26654	0,26203	0,25732	0,26002	0,26519
m_{coton} (g)	0,00215	0,00171	0,00133	0,00169	0,00150	0,00147	0,00126	0,00145	0,00170	0,00148	0,00152	0,00149	0,00145
θ_i (°C)	22,7310	22,7149	22,7191	22,7374	22,7205	22,7202	22,7199	22,7336	22,7235	22,7326	22,7219	22,7154	22,7330
θ_f (°C)	25,5952	25,5808	25,5915	25,6017	25,6022	25,5625	25,5735	25,5825	25,6078	25,6064	25,5710	25,5741	25,6185
$\Delta\theta_{corr}$ (°C)	2,7229	2,7235	2,7312	2,7237	2,7407	2,7011	2,7117	2,7058	2,7434	2,7324	2,7073	2,7174	2,7466
V_{NaOH} (mL)	15,85	16,10	15,75	16,05	16,15	15,90	15,85	15,80	16,00	15,80	15,55	16,00	16,00
ΔU_{Σ} (J)	109,54	111,09	108,99	110,75	111,42	109,79	109,50	109,16	110,54	109,33	107,70	110,42	110,54
$\Delta_c U°_{mas.}$ ($J.g^{-1}$)	-30388,7	-30363,3	-30403,3	-30390,9	-30376,7	-30414,0	-30375,3	-30367,8	-30411,3	-30383,3	-30396,7	-30395,3	-30407,3
$<\Delta_c U°_{mas.}>$ ($J.g^{-1}$)	-30390,3 ± 16,4												
$\Delta_c U°_m$ ($kJ.mol^{-1}$)	-2860,0	-2857,6	-2861,4	-2860,2	-2858,9	-2862,4	-2858,8	-2858,0	-2862,1	-2859,5	-2860,8	-2860,6	-2861,8
$<\Delta_c U°_m>$ ($kJ.mol^{-1}$)	-2860,2 ± 1,5												
$\Delta_c H°_{mas.}$ ($J.g^{-1}$)	-30401,8	-30376,5	-30416,5	-30404,1	-30389,8	-30427,2	-30388,5	-30380,9	-30424,5	-30396,5	-30409,8	-30408,5	-30420,5
$<\Delta_c H°_{mas.}>$ ($J.g^{-1}$)	-30403,5 ± 16,4												
$\Delta_c H°_m$ ($kJ.mol^{-1}$)	-2861,3	-2858,9	-2862,6	-2861,5	-2860,1	-2863,6	-2860,0	-2859,3	-2863,4	-2860,8	-2862,0	-2861,9	-2863,0
$<\Delta_c H°_m>$ ($kJ.mol^{-1}$)	-2861,4 ± 1,5												
$\Delta_f H°_{s,mas.}$ ($J.g^{-1}$)	384,8	359,5	399,5	387,0	372,8	410,1	371,5	363,9	407,5	379,5	392,8	391,5	403,5
$<\Delta_f H°_{s,mas.}>$ ($J.g^{-1}$)	386,4 ± 16,4												
$\Delta_f H°_{s,m}$ ($kJ.mol^{-1}$)	36,2	33,8	37,6	36,4	35,1	38,6	35,0	34,2	38,3	35,7	37,0	36,8	38,0
$<\Delta_f H°_{s,m}>$ ($kJ.mol^{-1}$)	36,4 ± 1,5												

Tableau II-15 : Détail des mesures effectuées sur la 2-aminopyridine.

	1	2	3	4	5	6	7	8	9
$m_{composé}$ (g)	0,30470	0,30466	0,30456	0,30454	0,30436	0,30387	0,30437	0,30421	0,30389
$m_{huile\ de\ paraffine}$ (g)	0,40396	0,39749	0,39728	0,40211	0,39891	0,39686	0,39761	0,40157	0,39661
m_{coton} (g)	0,00133	0,00133	0,00153	0,00133	0,00139	0,00164	0,00146	0,00149	0,00148
θ_i (°C)	22,7266	22,7322	22,7358	22,7170	22,7350	22,7445	22,7322	22,7214	22,7309
θ_f (°C)	25,6620	25,6364	25,6399	25,6425	25,6447	25,6430	25,6357	25,6437	25,6288
$\Delta\theta_{corr}$ (°C)	2,7924	2,7622	2,7608	2,7837	2,7680	2,7576	2,7617	2,7802	2,7558
V_{NaOH} (mL)	11,80	11,75	11,80	11,85	11,65	11,60	11,85	12,05	11,85
ΔU_{Σ} (J)	85,73	85,27	85,56	85,98	84,68	84,35	85,86	87,15	85,81
$\Delta_c U°_{mas.}$ ($J.g^{-1}$)	-31121,7	-31104,0	-31090,3	-31131,2	-31114,2	-31113,2	-31089,7	-31118,1	-31096,5
$<\Delta_c U°_{mas.}>$ ($J.g^{-1}$)	-31108,8 ± 14,5								
$\Delta_c U°_m$ ($kJ.mol^{-1}$)	-3987,6	-3985,4	-3983,6	-3988,9	-3986,7	-3986,6	-3983,5	-3987,2	-3984,4
$<\Delta_c U°_m>$ ($kJ.mol^{-1}$)	-3986,0 ± 1,9								
$\Delta_c H°_{mas.}$ ($J.g^{-1}$)	-31121,7	-31104,0	-31090,3	-31131,2	-31114,2	-31113,2	-31089,7	-31118,1	-31096,5
$<\Delta_c H°_{mas.}>$ ($J.g^{-1}$)	-31108,8 ± 14,5								
$\Delta_c H°_m$ ($kJ.mol^{-1}$)	-3987,6	-3985,4	-3983,6	-3988,9	-3986,7	-3986,6	-3983,5	-3987,2	-3984,4
$<\Delta_c H°_m>$ ($kJ.mol^{-1}$)	-3986,0 ± 1,9								
$\Delta_f H°_{s,mas.}$ ($J.g^{-1}$)	2090,9	2073,2	2059,5	2100,3	2083,4	2082,4	2058,9	2087,3	2065,7
$<\Delta_f H°_{s,mas.}>$ ($J.g^{-1}$)	2077,9 ± 14,5								
$\Delta_f H°_{s,m}$ ($kJ.mol^{-1}$)	267,9	265,6	263,9	269,1	266,9	266,8	263,8	267,4	264,7
$<\Delta_f H°_{s,m}>$ ($kJ.mol^{-1}$)	266,2 ± 1,9								

Tableau II-16 : Détail des mesures effectuées sur le phtalonitrile.

	1	2	3	4	5	6	7	8	9
$m_{composé}$ (g)	0,27070	0,27300	0,27388	0,27307	0,27406	0,27440	0,27481	0,27445	0,27456
$m_{huile\ de\ paraffine}$ (g)	0,43640	0,40512	0,40011	0,40234	0,39842	0,40200	0,40247	0,39748	0,39870
m_{coton} (g)	0,00166	0,00182	0,00170	0,00162	0,00147	0,00186	0,00155	0,00175	0,00171
θ_i (°C)	22,7523	22,7373	22,7209	22,7355	22,7300	22,7189	22,7367	22,7208	22,7292
θ_f (°C)	25,8008	25,6546	25,6190	25,6401	25,6205	25,6271	25,6498	25,6091	25,6255
$\Delta\theta_{corr}$ (°C)	2,9103	2,7755	2,7553	2,7619	2,7473	2,7664	2,7703	2,7457	2,7522
V_{NaOH} (mL)	11,45	11,05	11,15	11,00	10,90	11,20	11,15	11,05	10,80
ΔU_{Σ} (J)	82,93	79,91	80,42	79,54	78,87	80,79	80,46	79,79	78,32
$\Delta_c U°_{mas.}$ ($J.g^{-1}$)	-33902,1	-33909,0	-33907,0	-33879,5	-33890,4	-33922,4	-33953,6	-33920,4	-33948,7
$<\Delta_c U°_{mas.}>$ ($J.g^{-1}$)	-33914,8 ± 22,2								
$\Delta_c U°_m$ ($kJ.mol^{-1}$)	-4956,1	-4957,1	-4956,8	-4952,8	-4954,4	-4959,1	-4963,6	-4958,8	-4962,9
$<\Delta_c U°_m>$ ($kJ.mol^{-1}$)	-4958,0 ± 3,3								
$\Delta_c H°_{mas.}$ ($J.g^{-1}$)	-33927,5	-33934,4	-33932,4	-33904,9	-33915,8	-33947,8	-33979,0	-33945,8	-33974,2
$<\Delta_c H°_{mas.}>$ ($J.g^{-1}$)	-33940,2 ± 22,2								
$\Delta_c H°_m$ ($kJ.mol^{-1}$)	-4959,8	-4960,8	-4960,5	-4956,5	-4958,1	-4962,8	-4967,4	-4962,5	-4966,7
$<\Delta_c H°_m>$ ($kJ.mol^{-1}$)	-4961,7 ± 3,3								
$\Delta_f H°_{s,mas.}$ ($J.g^{-1}$)	-74,6	-67,7	-69,7	-97,2	-86,3	-54,3	-23,1	-56,3	-28,0
$<\Delta_f H°_{s,mas.}>$ ($J.g^{-1}$)	-61,9 ± 22,2								
$\Delta_f H°_{s,m}$ ($kJ.mol^{-1}$)	-10,9	-9,9	-10,2	-14,2	-12,6	-7,9	-3,4	-8,2	-4,1
$<\Delta_f H°_{s,m}>$ ($kJ.mol^{-1}$)	-9,1 ± 3,3								

Tableau II-17 : Détail des mesures effectuées sur le 5,6-diméthylbenzimidazole.

	1	2	3	4	5	6	7
$m_{composé}$ (g)	0,39890	0,40038	0,39946	0,39908	0,39976	0,40222	0,39930
$m_{huile\ de\ paraffine}$ (g)	0,48044	0,46551	0,47824	0,46669	0,46931	0,46410	0,46975
m_{coton} (g)	0,00348	0,00337	0,00301	0,00343	0,00288	0,00314	0,00304
θ_i (°C)	22,6272	22,6431	22,6158	22,6136	22,6178	22,6291	22,6268
θ_f (°C)	25,6156	25,5696	25,5916	25,5389	25,5583	25,5511	25,5708
$\Delta\theta_{corr}$ (°C)	2,9635	2,8972	2,9542	2,9006	2,9142	2,8940	2,9149
V_{NaOH} (mL)	18,00	16,61	17,93	17,92	17,60	18,21	18,00
ΔU_{Σ} (J)	123,60	114,98	123,14	122,80	120,96	124,43	123,30
$\Delta_c U°_{mas.}$ ($J.g^{-1}$)	-19045,9	-19048,9	-19058,6	-19038,0	-19076,1	-19028,3	-19051,9
$<\Delta_c U°_{mas.}>$ ($J.g^{-1}$)	-19049,7 ± 15,2						
$\Delta_c U°_m$ ($kJ.mol^{-1}$)	-1315,4	-1315,6	-1316,3	-1314,9	-1317,5	-1314,2	-1315,8
$<\Delta_c U°_m>$ ($kJ.mol^{-1}$)	-1315,7 ± 1,1						
$\Delta_c H°_{mas.}$ ($J.g^{-1}$)	-19018,9	-19022,0	-19031,7	-19011,1	-19049,2	-19001,4	-19025,0
$<\Delta_c H°_{mas.}>$ ($J.g^{-1}$)	-19022,7 ± 15,2						
$\Delta_c H°_m$ ($kJ.mol^{-1}$)	-1313,5	-1313,8	-1314,4	-1313,0	-1315,6	-1312,3	-1314,0
$<\Delta_c H°_m>$ ($kJ.mol^{-1}$)	-1313,8 ± 1,1						
$\Delta_f H°_{s,mas.}$ ($J.g^{-1}$)	1415,8	1418,8	1428,5	1407,9	1446,1	1398,2	1421,9
$<\Delta_f H°_{s,mas.}>$ ($J.g^{-1}$)	1419,6 ± 15,2						
$\Delta_f H°_{s,m}$ ($kJ.mol^{-1}$)	97,8	98,0	98,7	97,2	99,9	96,6	98,2
$<\Delta_f H°_{s,m}>$ ($kJ.mol^{-1}$)	98,0 ± 1,1						

Tableau II-18 : Détail des mesures effectuées sur le 1,2,4-triazole.

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
$m_{composé}$ (g)	0,20424	0,20338	0,20388	0,20296	0,20389	0,20459	0,20289	0,20291	0,20343	0,20260	0,20301
$m_{huile\ de\ paraffine}$ (g)	0,46513	0,47010	0,46749	0,47443	0,46224	0,46950	0,46559	0,46611	0,46313	0,46712	0,47326
m_{coton} (g)	0,00133	0,00161	0,00146	0,00163	0,00176	0,00149	0,00178	0,00200	0,00152	0,00205	0,00144
θ_i (°C)	22,7294	22,7305	22,7293	22,7329	22,7286	22,7201	22,7213	22,7251	22,7325	22,7228	22,7353
θ_f (°C)	25,5626	25,5847	25,5728	25,6054	25,5484	25,5743	25,5542	25,5612	25,5571	25,5639	25,6018
$\Delta\theta_{corr}$ (°C)	2,6906	2,7118	2,7011	2,7304	2,6771	2,7117	2,6896	2,6930	2,6796	2,6971	2,7245
V_{NaOH} (mL)	11,65	11,90	12,00	12,05	11,55	12,15	12,05	11,95	11,85	12,30	11,85
ΔU_{Σ} (J)	82,84	84,39	84,98	85,40	82,17	85,90	85,19	84,60	83,97	86,69	84,18
$\Delta_c U°_{mas.}$ ($J.g^{-1}$)	-27609,5	-27618,7	-27618,7	-27615,2	-27603,6	-27587,4	-27585,0	-27616,9	-27599,4	-27615,2	-27597,9
$<\Delta_c U°_{mas.}>$ ($J.g^{-1}$)	-27606,1 ± 12,3										
$\Delta_c U°_m$ ($kJ.mol^{-1}$)	-3289,0	-3290,0	-3290,0	-3289,6	-3288,2	-3286,3	-3286,0	-3289,8	-3287,7	-3289,6	-3287,6
$<\Delta_c U°_m>$ ($kJ.mol^{-1}$)	-3288,6 ± 1,5										
$\Delta_c H°_{mas.}$ ($J.g^{-1}$)	-27604,3	-27613,5	-27613,5	-27610,0	-27598,4	-27582,2	-27579,8	-27611,7	-27594,2	-27610,0	-27592,7
$<\Delta_c H°_{mas.}>$ ($J.g^{-1}$)	-27600,9 ± 12,3										
$\Delta_c H°_m$ ($kJ.mol^{-1}$)	-3288,3	-3289,4	-3289,4	-3289,0	-3287,6	-3285,7	-3285,4	-3289,2	-3287,1	-3289,0	-3287,0
$<\Delta_c H°_m>$ ($kJ.mol^{-1}$)	-3287,9 ± 1,5										
$\Delta_f H°_{s,mas.}$ ($J.g^{-1}$)	1785,6	1794,7	1794,7	1791,2	1779,6	1763,4	1761,0	1792,9	1775,4	1791,2	1774,0
$<\Delta_f H°_{s,mas.}>$ ($J.g^{-1}$)	1782,1 ± 12,3										
$\Delta_f H°_{s,m}$ ($kJ.mol^{-1}$)	212,7	213,8	213,8	213,4	212,0	210,1	209,8	213,6	211,5	213,4	211,3
$<\Delta_f H°_{s,m}>$ ($kJ.mol^{-1}$)	212,3 ± 1,5										

Tableau II-19 : Détail des mesures effectuées sur le benzotriazole.

	1	2	3	4	5	6	7	8
$m_{composé}$ (g)	0,39646	0,40266	0,40330	0,40513	0,40485	0,40638	0,40420	0,40536
$m_{huile\ de\ paraffine}$ (g)	0,35676	0,42783	0,43267	0,42907	0,42460	0,42838	0,43468	0,42690
m_{coton} (g)	0,00138	0,00146	0,00158	0,00140	0,00159	0,00136	0,00146	0,00144
θ_i (°C)	22,7240	22,7406	22,7195	22,7246	22,7253	22,7285	22,7178	22,7247
θ_f (°C)	25,2563	25,6007	25,6031	25,5954	25,5750	25,5963	25,6103	25,5854
$\Delta\theta_{corr}$ (°C)	2,3801	2,7172	2,7409	2,7291	2,7083	2,7264	2,7533	2,7187
V_{NaOH} (mL)	18,15	19,95	19,85	19,80	19,90	19,10	20,00	20,05
ΔU_{Σ} (J)	120,33	132,67	132,21	131,88	132,34	127,74	133,18	133,30
$\Delta_c U°_{mas.}$ ($J.g^{-1}$)	-19277,8	-19279,3	-19286,4	-19328,8	-19319,6	-19290,5	-19328,8	-19299,2
$<\Delta_c U°_{mas.}>$ ($J.g^{-1}$)	-19301,3 ± 21,5							
$\Delta_c U°_{m}$ ($kJ.mol^{-1}$)	-1582,0	-1582,1	-1582,7	-1586,2	-1585,4	-1583,1	-1586,2	-1583,8
$<\Delta_c U°_{m}>$ ($kJ.mol^{-1}$)	-1583,9 ± 1,8							
$\Delta_c H°_{mas.}$ ($J.g^{-1}$)	-19247,6	-19249,1	-19256,2	-19298,5	-19289,4	-19260,3	-19298,5	-19269,0
$<\Delta_c H°_{mas.}>$ ($J.g^{-1}$)	-19271,1 ± 21,5							
$\Delta_c H°_{m}$ ($kJ.mol^{-1}$)	-1579,5	-1579,7	-1580,2	-1583,7	-1583,0	-1580,6	-1583,7	-1581,3
$<\Delta_c H°_{m}>$ ($kJ.mol^{-1}$)	-1581,5 ± 1,8							
$\Delta_f H°_{s,mas.}$ ($J.g^{-1}$)	2691,2	2692,8	2699,9	2742,2	2733,0	2704,0	2742,2	2712,6
$<\Delta_f H°_{s,mas.}>$ ($J.g^{-1}$)	2714,7 ± 21,4							
$\Delta_f H°_{s,m}$ ($kJ.mol^{-1}$)	220,9	221,0	221,6	225,0	224,3	221,9	225,0	222,6
$<\Delta_f H°_{s,m}>$ ($kJ.mol^{-1}$)	222,8 ± 1,8							

Tableau II-20 : Détail des mesures effectuées sur le 4-amino-1,2,4-triazole.

	1	2	3	4	5	6	7	8	9
$m_{composé}$ (g)	0,45610	0,45569	0,45561	0,45517	0,45621	0,45673	0,45699	0,45598	0,45610
$m_{huile\ de\ paraffine}$ (g)	0,40537	0,41061	0,40836	0,40926	0,40887	0,41140	0,40820	0,41751	0,40709
m_{coton} (g)	0,00139	0,00162	0,00161	0,00152	0,00169	0,00161	0,00153	0,00165	0,00173
θ_i (°C)	22,7449	22,7362	22,7265	22,7345	22,7285	22,7380	22,7314	22,7216	22,7360
θ_f (°C)	25,4563	25,4694	25,4493	25,4616	25,4527	25,4782	25,4554	25,4873	25,4547
$\Delta\theta_{corr}$ (°C)	2,5649	2,5899	2,5788	2,5816	2,5809	2,5947	2,5797	2,6207	2,5737
V_{NaOH} (mL)	17,35	17,50	17,75	17,90	17,75	17,95	17,85	17,35	17,65
ΔU_{Σ} (J)	118,07	119,12	120,54	121,42	120,58	121,80	121,13	118,41	119,91
$\Delta_c U°_{mas.}$ ($J.g^{-1}$)	-15542,0	-15570,2	-15553,3	-15538,4	-15524,8	-15555,3	-15542,7	-15548,0	-15547,0
$<\Delta_c U°_{mas.}>$ ($J.g^{-1}$)	-15546,9 ± 12,6								
$\Delta_c U°_{m}$ ($kJ.mol^{-1}$)	-1960,2	-1963,7	-1961,6	-1959,7	-1958,0	-1961,8	-1960,2	-1960,9	-1960,8
$<\Delta_c U°_{m}>$ ($kJ.mol^{-1}$)	-1960,8 ± 1,6								
$\Delta_c H°_{mas.}$ ($J.g^{-1}$)	-15512,6	-15540,8	-15523,8	-15508,9	-15495,3	-15525,8	-15513,2	-15518,5	-15517,5
$<\Delta_c H°_{mas.}>$ ($J.g^{-1}$)	-15517,4 ± 12,6								
$\Delta_c H°_{m}$ ($kJ.mol^{-1}$)	-1956,4	-1960,0	-1957,9	-1956,0	-1954,3	-1958,1	-1956,5	-1957,2	-1957,1
$<\Delta_c H°_{m}>$ ($kJ.mol^{-1}$)	-1957,1 ± 1,6								
$\Delta_f H°_{s,mas.}$ ($J.g^{-1}$)	-646,8	-618,6	-635,5	-650,5	-664,1	-633,5	-646,2	-640,8	-641,8
$<\Delta_f H°_{s,mas.}>$ ($J.g^{-1}$)	-642,0 ± 12,5								
$\Delta_f H°_{s,m}$ ($kJ.mol^{-1}$)	-81,6	-78,0	-80,2	-82,0	-83,8	-79,9	-81,5	-80,8	-80,9
$<\Delta_f H°_{s,m}>$ ($kJ.mol^{-1}$)	-81,0 ± 1,6								

Tableau II-21 : Détail des mesures effectuées sur la mélamine.

	1	2	3	4	5	6	7	8
$m_{composé}$ (g)	0,49990	0,50369	0,50370	0,50148	0,50348	0,50167	0,50301	0,50232
$m_{huile\ de\ paraffine}$ (g)	0,39367	0,44130	0,41399	0,43678	0,43092	0,43335	0,42811	0,43274
m_{coton} (g)	0,00344	0,00329	0,00367	0,00358	0,00350	0,00394	0,00400	0,00356
θ_i (°C)	22,5714	22,5888	22,5850	22,5936	22,5853	22,5639	22,5771	22,5740
θ_f (°C)	25,3266	25,5629	25,4402	25,5474	25,5156	25,5015	25,4931	25,5125
$\Delta\theta_{corr}$ (°C)	2,7638	2,9897	2,8651	2,9653	2,9413	2,9515	2,9283	2,9486
V_{NaOH} (mL)	12,01	12,27	11,93	12,23	12,15	12,24	11,73	12,04
ΔU_{Σ} (J)	89,20	92,01	89,29	91,59	91,04	91,63	88,49	90,42
$\Delta_c U°_{mas.}$ ($J.g^{-1}$)	-19236,5	-19262,0	-19253,9	-19261,1	-19243,7	-19279,2	-19246,4	-19267,1
$<\Delta_c U°_{mas.}>$ ($J.g^{-1}$)	-19256,2 ± 13,9							
$\Delta_c U°_m$ ($kJ.mol^{-1}$)	-2676,0	-2679,5	-2678,4	-2679,4	-2677,0	-2681,9	-2677,3	-2680,2
$<\Delta_c U°_m>$ ($kJ.mol^{-1}$)	-2678,7 ± 1,9							
$\Delta_c H°_{mas.}$ ($J.g^{-1}$)	-19223,1	-19248,7	-19240,5	-19247,8	-19230,3	-19265,8	-19233,0	-19253,8
$<\Delta_c H°_{mas.}>$ ($J.g^{-1}$)	-19242,9 ± 13,9							
$\Delta_c H°_m$ ($kJ.mol^{-1}$)	-2674,1	-2677,7	-2676,5	-2677,5	-2675,1	-2680,0	-2675,5	-2678,4
$<\Delta_c H°_m>$ ($kJ.mol^{-1}$)	-2676,9 ± 1,9							
$\Delta_f H°_{s,mas.}$ ($J.g^{-1}$)	-2886,5	-2860,9	-2869,0	-2861,8	-2879,3	-2843,8	-2876,5	-2855,8
$<\Delta_f H°_{s,mas.}>$ ($J.g^{-1}$)	-2866,7 ± 13,9							
$\Delta_f H°_{s,m}$ ($kJ.mol^{-1}$)	-401,5	-398,0	-399,1	-398,1	-400,5	-395,6	-400,2	-397,3
$<\Delta_f H°_{s,m}>$ ($kJ.mol^{-1}$)	-398,8 ± 1,9							

Tableau II-22 : Détail des mesures effectuées sur l'acide picolinique N-oxyde.

	1	2	3	4	5	6
$m_{composé}$ (g)	0,25098	0,25087	0,25259	0,24768	0,24930	0,25355
$m_{huile\ de\ paraffine}$ (g)	0,53150	0,53892	0,53070	0,54679	0,55985	0,53597
m_{coton} (g)	0,00353	0,00350	0,00311	0,00392	0,00382	0,00354
θ_i (°C)	22,6014	22,5947	22,5938	22,5911	22,5956	22,5960
θ_f (°C)	25,4485	25,4721	25,4355	25,5009	25,5639	25,4643
$\Delta\theta_{corr}$ (°C)	2,8173	2,8508	2,8144	2,8820	2,9448	2,8410
V_{NaOH} (mL)	11,09	11,27	11,37	11,31	11,82	11,53
ΔU_{Σ} (J)	81,71	82,97	83,39	83,35	86,73	84,47
$\Delta_c U°_{mas.}$ ($J.g^{-1}$)	-15169,1	-15154,9	-15123,5	-15127,6	-15151,9	-15131,7
$<\Delta_c U°_{mas.}>$ ($J.g^{-1}$)	-15143,1 ± 18,1					
$\Delta_c U°_m$ ($kJ.mol^{-1}$)	-1700,3	-1698,7	-1695,1	-1695,6	-1698,3	-1696,1
$<\Delta_c U°_m>$ ($kJ.mol^{-1}$)	-1697,3 ± 2,0					
$\Delta_c H°_{mas.}$ ($J.g^{-1}$)	-15147,0	-15132,8	-15101,4	-15105,5	-15129,8	-15109,6
$<\Delta_c H°_{mas.}>$ ($J.g^{-1}$)	-15121,0 ± 18,1					
$\Delta_c H°_m$ ($kJ.mol^{-1}$)	-1697,8	-1696,2	-1692,7	-1693,1	-1695,8	-1693,6
$<\Delta_c H°_m>$ ($kJ.mol^{-1}$)	-1694,9 ± 2,0					
$\Delta_f H°_{s,mas.}$ ($J.g^{-1}$)	-3996,3	-4010,4	-4041,8	-4037,7	-4013,4	-4033,6
$<\Delta_f H°_{s,mas.}>$ ($J.g^{-1}$)	-4022,2 ± 18,1					
$\Delta_f H°_{s,m}$ ($kJ.mol^{-1}$)	-447,9	-449,5	-453,0	-452,6	-449,9	-452,1
$<\Delta_f H°_{s,m}>$ ($kJ.mol^{-1}$)	-450,8 ± 2,0					

Tableau II-23 : Détail des mesures effectuées sur l'uracile.

	1	2	3	4	5	6	7
$m_{composé}$ (g)	0,25013	0,25094	0,25134	0,24895	0,24958	0,25146	0,25002
$m_{huile\ de\ paraffine}$ (g)	0,56539	0,53925	0,52622	0,52461	0,52255	0,51683	0,51345
m_{coton} (g)	0,00354	0,00330	0,00320	0,00338	0,00350	0,00321	0,00385
θ_i (°C)	22,6150	22,6030	22,6012	22,6026	22,6178	22,5995	22,6067
θ_f (°C)	25,7997	25,6690	25,6112	25,6009	25,6117	25,5661	25,5577
$\Delta\theta_{corr}$ (°C)	3,1613	3,0447	2,9845	2,9719	2,9646	2,9431	2,9255
V_{NaOH} (mL)	11,50	11,67	11,40	11,33	11,22	11,27	10,99
ΔU_Σ (J)	85,56	85,94	84,06	83,51	82,84	83,05	81,25
$\Delta_c U°_{mas.}$ ($J.g^{-1}$)	-22849,2	-22898,7	-22846,1	-22844,0	-22867,0	-22896,9	-22906,2
$<\Delta_c U°_{mas.}>$ ($J.g^{-1}$)	-22872,6 ± 27,4						
$\Delta_c U°_m$ ($kJ.mol^{-1}$)	-3704,9	-3712,9	-3704,4	-3704,1	-3707,8	-3712,6	-3714,1
$<\Delta_c U°_m>$ ($kJ.mol^{-1}$)	-3708,7 ± 4,4						
$\Delta_c H°_{mas.}$ ($J.g^{-1}$)	-22841,5	-22891,1	-22838,4	-22836,4	-22859,3	-22889,3	-22898,6
$<\Delta_c H°_{mas.}>$ ($J.g^{-1}$)	-22864,9 ± 27,4						
$\Delta_c H°_m$ ($kJ.mol^{-1}$)	-3703,7	-3711,7	-3703,1	-3702,8	-3706,5	-3711,4	-3712,9
$<\Delta_c H°_m>$ ($kJ.mol^{-1}$)	-3707,4 ± 4,4						
$\Delta_f H°_{s,mas.}$ ($J.g^{-1}$)	-1862,0	-1812,5	-1865,1	-1867,2	-1844,2	-1814,3	-1805,0
$<\Delta_f H°_{s,mas.}>$ ($J.g^{-1}$)	-1838,6 ± 27,4						
$\Delta_f H°_{s,m}$ ($kJ.mol^{-1}$)	-301,9	-293,9	-302,4	-302,8	-299,0	-294,2	-292,7
$<\Delta_f H°_{s,m}>$ ($kJ.mol^{-1}$)	-298,1 ± 4,4						

Tableau II-24 : Détail des mesures effectuées sur le phtalhydrazide.

	1	2	3	4	5	6	7
$m_{composé}$ (g)	0,29036	0,29821	0,29594	0,29634	0,29482	0,29643	0,29687
$m_{huile\ de\ paraffine}$ (g)	0,53310	0,56946	0,55939	0,56657	0,57802	0,57515	0,55727
m_{coton} (g)	0,00427	0,00323	0,00341	0,00402	0,00345	0,00388	0,00323
θ_i (°C)	22,5735	22,6236	22,5817	22,5867	22,5914	22,5833	22,5679
θ_f (°C)	25,4141	25,6334	25,5471	25,5873	25,6371	25,6195	25,5292
$\Delta\theta_{corr}$ (°C)	2,8545	3,0292	2,9798	3,0144	3,0647	3,0534	2,9723
V_{NaOH} (mL)	14,34	14,46	14,59	14,55	14,73	15,07	14,90
ΔU_Σ (J)	100,67	102,26	102,84	102,76	104,06	106,06	104,64
$\Delta_c U°_{mas.}$ ($J.g^{-1}$)	-14052,3	-14033,4	-14009,0	-14019,3	-14054,1	-14007,9	-14043,4
$<\Delta_c U°_{mas.}>$ ($J.g^{-1}$)	-14031,3 ± 19,6						
$\Delta_c U°_m$ ($kJ.mol^{-1}$)	-1589,0	-1586,8	-1584,1	-1585,2	-1589,2	-1583,9	-1588,0
$<\Delta_c U°_m>$ ($kJ.mol^{-1}$)	-1586,6 ± 2,2						
$\Delta_c H°_{mas.}$ ($J.g^{-1}$)	-14013,9	-13995,0	-13970,6	-13981,0	-14015,8	-13969,5	-14005,0
$<\Delta_c H°_{mas.}>$ ($J.g^{-1}$)	-13993,0 ± 19,6						
$\Delta_c H°_m$ ($kJ.mol^{-1}$)	-1584,6	-1582,5	-1579,7	-1580,9	-1584,8	-1579,6	-1583,6
$<\Delta_c H°_m>$ ($kJ.mol^{-1}$)	-1582,3 ± 2,2						
$\Delta_f H°_{s,mas.}$ ($J.g^{-1}$)	-218,0	-236,9	-261,3	-251,0	-216,2	-262,4	-226,9
$<\Delta_f H°_{s,mas.}>$ ($J.g^{-1}$)	-239,0 ± 19,6						
$\Delta_f H°_{s,m}$ ($kJ.mol^{-1}$)	-24,7	-26,8	-29,6	-28,4	-24,4	-29,7	-25,7
$<\Delta_f H°_{s,m}>$ ($kJ.mol^{-1}$)	-27,0 ± 2,2						

Tableau II-25 : Détail des mesures effectuées sur le 4-nitro-imidazole.

	1	2	3	4	5	6	7	8	9
$m_{composé}$ (g)	0,35444	0,35351	0,35395	0,35520	0,35483	0,35442	0,35296	0,35359	0,35456
$m_{huile\ de\ paraffine}$ (g)	0,39807	0,45284	0,45009	0,44892	0,45643	0,46085	0,45341	0,45104	0,44823
m_{coton} (g)	0,00142	0,00137	0,00164	0,00149	0,00121	0,00140	0,00125	0,00162	0,00171
θ_i (°C)	22,7291	22,7215	22,7211	22,8128	22,7287	22,7192	22,7257	22,7368	22,7318
θ_f (°C)	25,3186	25,5524	25,5432	25,6408	25,5801	25,5892	25,5587	22,5618	25,5453
$\Delta\theta_{corr}$ (°C)	2,4418	2,6892	2,6796	2,6886	2,7090	2,7276	2,6914	2,6817	2,6705
V_{NaOH} (mL)	13,60	14,25	14,50	14,20	14,20	14,55	14,25	13,75	14,30
ΔU_{Σ} (J)	94,35	99,50	100,92	98,24	99,29	101,46	99,50	96,48	99,70
$\Delta_c U°_{mas.}$ ($J.g^{-1}$)	-17501,8	-17463,3	-17511,7	-17483,1	-17509,4	-17467,6	-17488,0	-17476,8	-17464,0
$<\Delta_c U°_{mas.}>$ ($J.g^{-1}$)	-17485,1 ± 19,0								
$\Delta_c U°_m$ ($kJ.mol^{-1}$)	-2224,5	-2219,6	-2225,8	-2222,1	-2225,5	-2220,2	-2222,8	-2221,3	-2219,7
$<\Delta_c U°_m>$ ($kJ.mol^{-1}$)	-2222,4 ± 2,4								
$\Delta_c H°_{mas.}$ ($J.g^{-1}$)	-17477,5	-17438,9	-17487,3	-17458,7	-17485,0	-17443,2	-17463,6	-17452,4	-17439,6
$<\Delta_c H°_{mas.}>$ ($J.g^{-1}$)	-17460,7 ± 19,0								
$\Delta_c H°_m$ ($kJ.mol^{-1}$)	-2221,4	-2216,5	-2222,7	-2219,0	-2222,4	-2217,1	-2219,7	-2218,2	-2216,6
$<\Delta_c H°_m>$ ($kJ.mol^{-1}$)	-2219,3 ± 2,4								
$\Delta_f H°_{s,mas.}$ ($J.g^{-1}$)	-528,8	-567,3	-518,9	-547,5	-521,2	-563,0	-542,6	-553,8	-566,6
$<\Delta_f H°_{s,mas.}>$ ($J.g^{-1}$)	-545,5 ± 19,0								
$\Delta_f H°_{s,m}$ ($kJ.mol^{-1}$)	-67,2	-72,1	-66,0	-69,6	-66,2	-71,6	-69,0	-70,4	-72,0
$<\Delta_f H°_{s,m}>$ ($kJ.mol^{-1}$)	-69,3 ± 2,4								

Tableau II-26 : Détail des mesures effectuées sur le 2-méthyl-5-nitro-imidazole.

	1	2	3	4	5	6	7
$m_{composé}$ (g)	0,29897	0,30261	0,30142	0,30274	0,30013	0,29948	0,30107
$m_{huile\ de\ paraffine}$ (g)	0,56173	0,57682	0,57115	0,59160	0,61110	0,59037	0,57488
m_{coton} (g)	0,00331	0,00294	0,00276	0,00347	0,00374	0,00322	0,00317
θ_i (°C)	22,6047	22,5663	22,5930	22,5770	22,5714	22,5984	22,7917
θ_f (°C)	25,4591	25,4911	25,4944	25,5735	25,6485	25,5802	25,7398
$\Delta\theta_{corr}$ (°C)	2,8690	2,9404	2,9140	3,0096	3,0977	2,9997	2,9299
V_{NaOH} (mL)	10,72	13,04	12,95	13,11	13,63	12,93	12,98
ΔU_{Σ} (J)	80,25	94,43	93,68	95,23	98,74	94,01	93,55
$\Delta_c U°_{mas.}$ ($J.g^{-1}$)	-9833,8	-9774,7	-9809,5	-9798,1	-9827,4	-9777,3	-9761,6
$<\Delta_c U°_{mas.}>$ ($J.g^{-1}$)	-9797,5 ± 27,6						
$\Delta_c U°_m$ ($kJ.mol^{-1}$)	-1544,7	-1535,4	-1540,9	-1539,1	-1543,7	-1535,9	-1533,4
$<\Delta_c U°_m>$ ($kJ.mol^{-1}$)	-1539,0 ± 4,3						
$\Delta_c H°_{mas.}$ ($J.g^{-1}$)	-9790,4	-9731,3	-9766,1	-9754,7	-9784,0	-9733,9	-9718,2
$<\Delta_c H°_{mas.}>$ ($J.g^{-1}$)	-9754,1 ± 27,6						
$\Delta_c H°_m$ ($kJ.mol^{-1}$)	-1537,9	-1528,6	-1534,1	-1532,3	-1536,9	-1529,0	-1526,6
$<\Delta_c H°_m>$ ($kJ.mol^{-1}$)	-1532,2 ± 4,3						
$\Delta_f H°_{s,mas.}$ ($J.g^{-1}$)	-2959,4	-3018,5	-2983,6	-2995,1	-2965,8	-3015,8	-3031,5
$<\Delta_f H°_{s,mas.}>$ ($J.g^{-1}$)	-2995,7 ± 27,6						
$\Delta_f H°_{s,m}$ ($kJ.mol^{-1}$)	-464,9	-474,2	-468,7	-470,5	-465,9	-473,7	-476,2
$<\Delta_f H°_{s,m}>$ ($kJ.mol^{-1}$)	-470,6 ± 4,3						

Tableau II-27 : Détail des mesures effectuées sur le 5-nitro-uracile.

	1	2	3	4	5	6
$m_{composé}$ (g)	0,39502	0,40030	0,39837	0,39835	0,39858	0,39537
$m_{huile\ de\ paraffine}$ (g)	0,62769	0,59467	0,59631	0,60767	0,58986	0,58925
m_{coton} (g)	0,00446	0,00409	0,00404	0,00370	0,00336	0,00485
θ_i (°C)	22,6099	22,5654	22,8141	22,5795	22,5819	22,5819
θ_f (°C)	25,8319	25,6368	25,8845	25,7081	25,6280	25,6272
$\Delta\theta_{corr}$ (°C)	3,2348	3,0886	3,0947	3,1477	3,0648	3,0616
V_{NaOH} (mL)	18,01	17,43	17,93	17,73	17,80	17,32
ΔU_{Σ} (J)	125,39	121,29	123,72	123,34	123,30	120,46
$\Delta_c U°_{mas.}$ ($J.g^{-1}$)	-8945,9	-8967,5	-8973,3	-9016,5	-8984,8	-8990,6
$<\Delta_c U°_{mas.}>$ ($J.g^{-1}$)	-8979,8 $\pm$ 23,8					
$\Delta_c U°_m$ ($kJ.mol^{-1}$)	-1038,4	-1040,9	-1041,6	-1046,6	-1042,9	-1043,6
$<\Delta_c U°_m>$ ($kJ.mol^{-1}$)	-1042,4 $\pm$ 2,8					
$\Delta_c H°_{mas.}$ ($J.g^{-1}$)	-8903,2	-8924,8	-8930,6	-8973,8	-8942,1	-8947,9
$<\Delta_c H°_{mas.}>$ ($J.g^{-1}$)	-8937,1 $\pm$ 23,8					
$\Delta_c H°_m$ ($kJ.mol^{-1}$)	-1033,5	-1036,0	-1036,6	-1041,7	-1038,0	-1038,7
$<\Delta_c H°_m>$ ($kJ.mol^{-1}$)	-1037,4 $\pm$ 2,8					
$\Delta_f H°_{s,mas.}$ ($J.g^{-1}$)	-2801,6	-2780,0	-2774,2	-2731,0	-2762,7	-2756,9
$<\Delta_f H°_{s,mas.}>$ ($J.g^{-1}$)	-2767,8 $\pm$ 23,8					
$\Delta_f H°_{s,m}$ ($kJ.mol^{-1}$)	-325,2	-322,7	-322,0	-317,0	-320,7	-320,0
$<\Delta_f H°_{s,m}>$ ($kJ.mol^{-1}$)	-321,3 $\pm$ 2,8					

Tableau II-28 : Détail des mesures effectuées sur l'azodicarbonamide.

L'ensemble des grandeurs thermochimiques essentielles concernant les quinze composés de formule brute $C_xH_yN_wO_z$ analysés est regroupé dans le tableau suivant :

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_cU°_m$	$\Delta_cH°_m$	$\Delta_fH°_{s,m}$		$\Delta H°_{sub}$ (litt.) [75]	$\Delta_fH°_{g,m}$ (litt.) [75]
					Ce travail	Littérature		
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
diphénylamine	$C_{12}H_{11}N$	122-39-4	-6401,1 ± 1,5	-6406,7 ± 1,5	112,5 ± 2,2	130,00 [77]	-	-
2-aminopyridine	$C_5H_6N_2$	504-29-0	-2860,2 ± 0,9	-2861,4 ± 0,9	36,4 ± 1,1	39,4 ± 0,8 [75]	78,7 ± 0,8	118,1 ± 1,1
phtalonitrile	$C_8H_4N_2$	91-15-6	-3986,0 ± 1,2	-3986,0 ± 1,2	266,2 ± 1,6	281,4 ± 1,9 [75]	86,9 ± 1,5	367,5 ± 1,9
5,6-diméthylbenzimidazole	$C_9H_{10}N_2$	582-60-5	-4958,0 ± 2,2	-4961,7 ± 2,2	-9,1 ± 2,5	-	-	-
1,2,4-triazole	$C_2H_3N_3$	288-88-0	-1315,7 ± 0,8	-1313,8 ± 0,8	98,0 ± 0,8	108,7 ± 0,4 [75]	84,0 ± 0,7	192,7 ± 0,8
benzotriazole	$C_6H_5N_3$	95-14-7	-3288,6 ± 0,9	-3287,9 ± 0,9	212,3 ± 1,2	236,5 ± 1,2 [75]	99,0 ± 0,5	335,5 ± 1,3
4-amino-1,2,4-triazole	$C_2H_2N_4$	584-13-4	-1583,9 ± 1,2	-1581,5 ± 1,2	222,8 ± 1,3	317,98 [77]	-	-
mélamine	$C_3H_6N_6$	108-78-1	-1960,8 ± 1,1	-1957,1 ± 1,1	-81,0 ± 1,1	-75,19 [77]	120,0 ± 4,0	-
acide picolinique N-oxyde	$C_6H_5NO_3$	824-40-8	-2678,7 ± 1,4	-2676,9 ± 1,4	-398,8 ± 1,6	-364,09 [77]	-	-
uracile	$C_4H_4N_2O_2$	66-22-8	-1697,3 ± 1,7	-1694,9 ± 1,7	-450,8 ± 1,7	-424,4 ± 2,5 [75]	126,5 ± 2,2	-303,1 ± 2,3
phtalhydrazide	$C_8H_6N_2O_2$		-3708,7 ± 3,4	-3707,4 ± 3,4	-298,1 ± 3,5	-	-	-
4-nitro-imidazole	$C_3H_3N_3O_2$	3034-38-6	-1586,6 ± 1,7	-1582,3 ± 1,7	-27,0 ± 1,7	17,15 [77]	-	-
2-méthyl-5-nitro-imidazole	$C_4H_5N_3O_2$	88054-22-2	-2222,4 ± 1,6	-2219,3 ± 1,6	-69,3 ± 1,7	-	-	-
5-nitro-uracile	$C_4H_3N_3O_4$	611-08-5	-1539,0 ± 3,3	-1532,2 ± 3,3	-470,6 ± 3,3	-	-	-
azodicarbonamide	$C_2H_4N_4O_2$	123-77-3	-1042,4 ± 2,3	-1037,4 ± 2,3	-321,3 ± 2,3	-486,18 [77]	-	-

Tableau II-29 : Energies internes standard de combustion, enthalpies standard de combustion, enthalpies standard de formation en phases solide et gazeuse et enthalpies standard de sublimation des quinze composés solides $C_xH_yN_wO_z$ analysés.

En comparant les valeurs mesurées et les valeurs issues de la littérature des enthalpies de formation en phase solide, on s'aperçoit que, souvent, les écarts sont élevés, tels que pour le 4-amino-1,2,4-triazole ou l'azodicarbonamide par exemple. Une explication possible de ce constat pourrait être le polymorphisme de certaines molécules à l'état solide (*cf.* paragraphe 1.3.2. du chapitre IV).

4. Mesures d'enthalpies standard de formation en phase liquide

Les enthalpies de formation en phase liquide et les enthalpies de vaporisation de six azido-alcanes ont été mesurées au laboratoire, il y a quelques années de cela [79]. L'exploitation de ces données permet de connaître l'enthalpie de formation en phase vapeur des composés étudiés (selon la loi de Hess : $\Delta_f H_g = \Delta_f H_l + \Delta H_{vap}$) et donc de déduire de nouvelles contributions de groupes concernant la phase gazeuse (*cf.* Chapitre III).

Les enthalpies standard de formation à l'état liquide ont été mesurées au moyen d'un calorimètre adiabatique Parr 1231. Son principe de fonctionnement est le même que celui du calorimètre employé pour obtenir les enthalpies de formation en phase solide (*cf.* paragraphe 1.) Les enthalpies standard de vaporisation des molécules étudiées ont, quant à elles, été obtenues grâce à un calorimètre différentiel programmable C80 (SETARAM).

L'emploi d'un auxiliaire de combustion a été indispensable dans les cas de l'azidohexane et de l'azidobutane car la combustion de ces composés s'est avérée très vive. Quelques granulés de polyéthylène ont ainsi été ajoutés à chaque échantillon d'azidohexane analysé. Quant à l'azidobutane, une dilution dans deux volumes d'huile de paraffine a permis d'obtenir les meilleurs résultats. A noter que les échantillons liquides volatils ont été scellés dans des sachets de polyéthylène téréphtalate avant analyse.

Le tableau II-30 rassemble les données suivantes pour chaque azido-alcane et azido-cycloalcane analysé : la formule brute, le numéro CAS (si celui-ci est connu), l'énergie interne standard de combustion $\Delta_c U°$, l'enthalpie standard de combustion $\Delta_c H°$, l'enthalpie standard de formation en phase liquide $\Delta_f H°_l$, l'enthalpie standard de vaporisation $\Delta H°_{vap}$ et l'enthalpie standard de formation en phase gazeuse $\Delta_f H°_g$, à T = 298,15 K. Toutes les valeurs présentées dans ce tableau sont issues de mesures effectuées au laboratoire, excepté les données concernant les enthalpies standard de vaporisation de l'azidocyclopentane et de l'azidocyclohexane [80].

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_c U°_m$	$\Delta_c H°_m$	$\Delta_f H°_{l,m}$	$\Delta H°_{vap}$	$\Delta_f H°_{g,m}$
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
azidobutane	$C_4H_9N_3$		-3050,8 ± 4,4	-3052,6 ± 4,4	192,3 ± 4,4	36,6 ± 0,2	229,0 ± 4,4
azidopentane	$C_5H_{11}N_3$	26330-06-3	-3699,5 ± 0,4	-3702,6 ± 0,4	163,0 ± 0,8	-	-
azidohexane	$C_6H_{13}N_3$	6926-45-0	-4354,8 ± 0,4	-4359,2 ± 0,4	140,2 ± 0,9	46,4 ± 0,0	186,6 ± 0,9
azidoheptane	$C_7H_{15}N_3$	44961-22-0	-5005,6 ± 0,9	-5011,2 ± 0,9	112,9 ± 1,3	-	-
azidocyclopentane	$C_5H_9N_3$	33670-50-7	-3476,0 ± 1,9	-3477,9 ± 1,9	224,1 ± 2,1	41,8 [80]	265,9
azidocyclohexane	$C_6H_{11}N_3$	19573-22-9	-4099,1 ± 1,2	-4102,2 ± 1,2	169,1 ± 1,4	45,9 ± 0,4 [80]	215,0 ± 1,5

Tableau II-30 : Energies internes standard de combustion, enthalpies standard de combustion, enthalpies standard de vaporisation et enthalpies standard de formation en phases liquide et gazeuse des six azido-alcanes analysés.

On notera l'excellent alignement des points expérimentaux concernant les azido-alcanes étudiés, comme le montre la figure II-2 (coefficient de corrélation $r^2 = 0{,}9979$). En effet, les valeurs d'enthalpie de formation en phase condensée, $\Delta_f H°_l$, diminuent proportionnellement au nombre d'atomes de carbone, n_C, présents dans la molécule. Ceci est d'ailleurs un bon exemple démontrant la validité du principe d'additivité des valeurs de contributions de groupes. Plus on ajoute de groupements $-CH_2-$ dans un composé, plus l'enthalpie de formation diminue ; et ceci, proportionnellement au nombre de groupements présents.

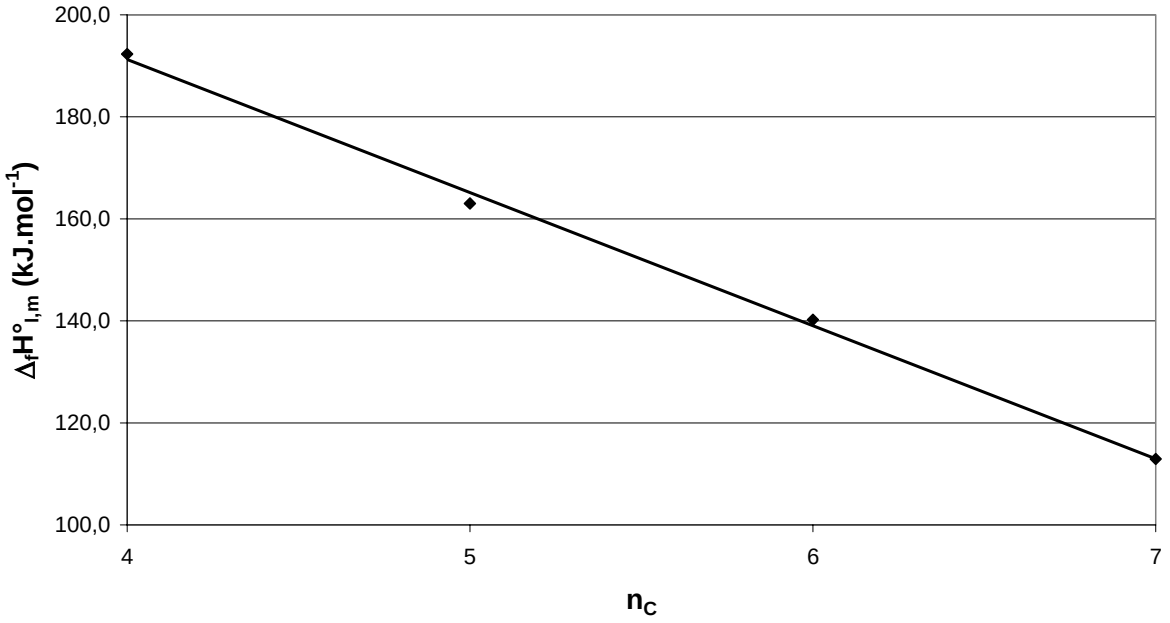


Figure II-2 : Evolution de l'enthalpie standard de formation en phase condensée de quatre azido-alcanes en fonction du nombre d'atomes de carbone.

5. Conclusion

La méthode utilisée afin de mesurer les enthalpies standard de formation est la calorimétrie de combustion en bombe statique, sous oxygène. Cette technique a permis d'obtenir les enthalpies de formation en phase solide de vingt-cinq composés contenant les éléments carbone, hydrogène, oxygène et azote. Après comparaison de ces mesures avec les valeurs contenues dans la littérature, on a pu remarquer des écarts notables dans le cas de certaines molécules. On rappellera que les enthalpies de formation des vingt-cinq composés analysés ont été obtenues expérimentalement après de nombreuses mesures reproductibles. Il est donc possible de trouver une explication de ces écarts dans le fait que certaines substances solides étudiées au laboratoire sont polymorphes (*cf.* paragraphe 1.3.2. du chapitre IV).

Les valeurs mesurées d'enthalpies de formation en phase solide ont été employées afin d'effectuer des comparaisons avec les valeurs estimées par les différentes méthodes de contribution de groupes étudiées (*cf.* paragraphe 2.2. du chapitre IV). Ces mesures ont également permis de déterminer de nouvelles valeurs de contributions de groupes relatives à la phase gazeuse et à la phase solide (*cf.* paragraphe 1.3.2. du chapitre III et paragraphe 2.2.2. du chapitre IV, respectivement).

Quant aux mesures d'enthalpies de formation à l'état liquide, elles ont été utilisées afin de calculer de nouvelles valeurs de contributions à l'enthalpie de formation en phase gazeuse (*cf.* paragraphe 1.3.2. du chapitre III).

Chapitre III : Démarche indirecte

On rappelle que la démarche indirecte permettant d'évaluer les enthalpies de formation à l'état solide consiste à :

1. développer une nouvelle méthode de contribution de groupes pour calculer des enthalpies de sublimation ;
2. combiner les enthalpies de sublimation obtenues avec les valeurs d'enthalpies de formation en phase gazeuse des composés étudiés.

1. Extension de la banque de contributions de groupes concernant la phase gazeuse

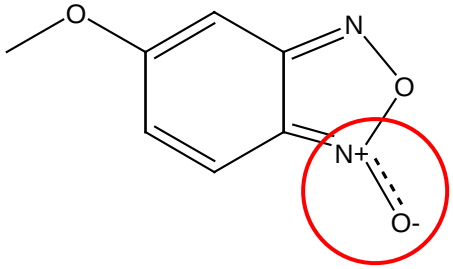
1.1. Etat des lieux sur la banque de données existante

Le laboratoire dispose d'une banque de données constituée des contributions à l'enthalpie standard de formation en phase vapeur d'un nombre conséquent de groupes de deuxième ordre. Cette base de données constitue une extension significative de la banque de contributions d'origine (relative à l'état gazeux) fournie par Benson.

Afin de remplir les objectifs de la démarche indirecte, une compilation conséquente de valeurs expérimentales d'enthalpies issues de la revue *The Journal of Chemical Thermodynamics* a été effectuée. Le principal objectif de celle-ci était de compléter encore un peu plus la base de données du laboratoire grâce à la détermination de nouvelles valeurs de contributions de groupes concernant la phase gazeuse. En effet, la méthode indirecte permettant de déterminer les enthalpies de formation en phase solide en utilisant les enthalpies de formation à l'état gazeux, nous avons décidé d'étendre la banque de contributions de groupes du laboratoire ; et ceci, dans le but d'appliquer la méthode aux matériaux énergétiques.

1.2. Création d'un nouveau pseudo-élément

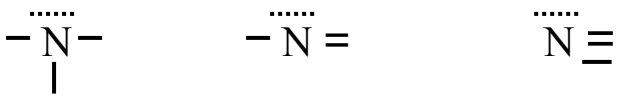
Un certain type de liaison, formée par les électrons des atomes d'azote et d'oxygène, apparaît dans quelques molécules énergétiques. Il est donc essentiel de mettre en place des groupes tenant compte de ces liaisons (*cf.* l'exemple de la molécule ci-dessous).



5-méthoxybenzofurazan-1-oxyde [81]
[7791-49-3]

La formation de ces liaisons peut s'expliquer grâce aux structures de Lewis.

L'atome d'azote ayant un numéro atomique Z = 7, sa formule électronique s'écrit $(K)^2(L)^5$. Et, d'après la règle de l'octet, l'azote possède trois liaisons covalentes (8-5). Les différentes représentations de l'azote accompagné de ses doublets liants (traits pleins) et non liants (traits en pointillés) sont donc les suivantes :



Par le même raisonnement que précédemment, on en déduit les deux représentations de Lewis pour l'oxygène :



Dans le 5-méthoxybenzofurazan-1-oxyde, c'est le doublet non liant de l'azote qui permet de créer la liaison $^{+}N\!\!=\!\!-O^{-}$. Cette liaison, entre un donneur d'électrons (l'azote) et un accepteur d'électrons (l'oxygène), est appelée liaison de coordination.

Un nouveau pseudo-élément a donc été créé afin de définir l'atome d'azote formant la liaison de coordination en question : NO_e.

1.3. Détermination de nouvelles contributions de groupes

1.3.1. Exploitation de la banque de données bibliographiques constituée

De nombreuses données thermochimiques ont été relevées au cours de l'étude bibliographique réalisée, notamment les enthalpies standard de formation à l'état solide et à l'état gazeux ainsi que les enthalpies standard de sublimation de plusieurs composés organiques. L'ensemble de ces valeurs est présenté dans le tableau III-1. Celui-ci contient des données sur deux cent quatre-vingt-trois molécules issues de quatre-vingt-deux publications [81-162] parues entre 1996 et 2006 dans *The Journal of Chemical Thermodynamics*, revue considérée comme une référence en ce qui concerne les valeurs mesurées d'enthalpies. A noter que neuf des molécules étudiées dans ces publications apparaissent deux fois dans le tableau III-1 car des résultats expérimentaux différents ont été obtenus et publiés. Par ailleurs, l'annexe 3 regroupe l'ensemble de ces résultats convertis en joules par gramme.

Les valeurs d'enthalpie standard de formation en phase vapeur ont été calculées (quand cela était possible) pour chacun des composés présentés dans le tableau III-1, à l'aide des contributions de groupes de Benson établies par le laboratoire (*cf.* annexe 4). Lorsque la contribution à l'enthalpie standard de formation pour un groupe manquait, une évaluation de celle-ci a été réalisée. Malheureusement, il est souvent arrivé que plusieurs groupes d'une même molécule n'aient jamais été étudiés jusqu'alors. L'estimation de la contribution de chacun des groupes concernant la phase vapeur est donc impossible dans ces conditions.

Cependant, une estimation de la valeur de la contribution à l'enthalpie standard de formation à l'état gazeux de quelques groupes a pu être obtenue à partir des valeurs expérimentales d'enthalpies de formation contenues dans le tableau III-1. Ces groupes sont présentés au tableau III-2.

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	$\Delta H°_{sub}$ (litt.)	$\Delta_f H°_{g,m}$ (litt.)	$\Delta_f H°_{g,m}$ (calc.)	Résidu
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
1,3,5-triméthyluracile [82]	$C_7H_{10}N_2O_2$		-	103,5 ± 1,5	-	-313,0	-
1,3-diméthyl-5-éthyluracile [82]	$C_8H_{12}N_2O_2$	31703-08-9	-	98,7 ± 1,7	-	-332,9	-
1,3-diméthyl-5-propyluracile [82]	$C_9H_{14}N_2O_2$		-	111,0 ± 1,6	-	-353,5	-
1,3-diméthyl-5-butyluracile [82]	$C_{10}H_{16}N_2O_2$		-	106,3 ± 1,3	-	-374,2	-
1,3-diméthyl-5-isopropyluracile [82]	$C_9H_{14}N_2O_2$		-	102,9 ± 1,6	-	-361,9	-
acide p-bromobenzoïque [83]	$C_7H_5O_2Br$	586-76-5	-379,0 ± 1,3	-	-	-289,1	-
2-chlorodibenzo-p-dioxine [84]	$C_{12}H_7O_2Cl$	39227-54-8	-171,3 ± 3,2	97,24 ± 0,55	-74,1 ± 3,3	-92,3	18,2
5-méthoxybenzofurazane [81]	$C_7H_6N_2O_2$	4413-48-3	57,9 ± 1,7	89,2 ± 0,7	147,1 ± 1,8	135,1	12,0
5-méthoxybenzofurazan-1-oxyde [81]	$C_7H_6N_2O_3$	7791-49-3	52,3 ± 3,3	96,0 ± 1,6	148,3 ± 3,7	-	-
5-méthylbenzofurazan-1-oxyde [81]	$C_7H_6N_2O_2$	19164-41-1	175,2 ± 1,8	92,2 ± 1,2	267,4 ± 2,2	-	-
5-chlorobenzofurazan-1-oxyde [81]	$C_6H_3N_2O_2Cl$	17348-69-5	193,5 ± 1,8	81,2 ± 1,8	274,7 ± 2,5	-	-
4-nitrobenzofurazan-1-oxyde [81]	$C_6H_3N_3O_4$		202,6 ± 2,1	97,3 ± 1,6	299,9 ± 2,6	-	-
cyclododécanone [85]	$C_{12}H_{22}O$	830-13-7	-442,5 ± 3,1	83,2 ± 0,3	-359,3 ± 3,1	-348,0	-11,3
1,1,1-trifluoropentan-2,4-dione [86]	$C_5H_5O_2F_3$	367-57-7	-	-	-997,3 ± 2,3	-969,0	-28,3
1,1,1-trifluorohexan-2,4-dione [86]	$C_6H_7O_2F_3$	400-54-4	-	-	-1009,0 ± 5,5	-990,8	-18,2
1,1,1-trifluoro-5-méthylhexan-2,4-dione [86]	$C_7H_9O_2F_3$	30984-28-2	-	-	-1053,3 ± 5,5	-1018,8	-34,5
1,1,1-trifluoro-5,5-diméthylhexan-2,4-dione [86]	$C_8H_{11}O_2F_3$	22767-90-4	-	-	-1074,1 ± 5,6	-1048,5	-25,6
1,1,1-trifluoro-5-méthylheptan-2,4-dione [86]	$C_8H_{11}O_2F_3$		-	-	-1060,3 ± 5,7	-1036,1	-24,2
1,1,1,5,5,5-hexafluoropentan-2,4-dione [86]	$C_5H_2O_2F_6$	1522-22-1	-	-	-1592,4 ± 4,3	-1558,1	-34,3
1,1,1,2,2,3,3-heptafluoro-7,7-diméthyloctan-4,6-dione [86]	$C_{10}H_{11}O_2F_7$	17587-22-3	-	-	-1943 ± 7	-	-
4,4,4-trifluoro-1-(2-furanyl)-butan-1,3-dione [86]	$C_8H_5O_3F_3$		-1050,8 ± 2,6	70 ± 10	-981 ± 10	-938,6	-42,4
4,4,4-trifluoro-1-(2-naphtyl)-butan-1,3-dione [86]	$C_{14}H_9O_2F_3$		-901,0 ± 3,1	108,7 ± 0,6	-792,3 ± 3,2	-771,9	-20,4
5-nitroquinoline [87]	$C_9H_6N_2O_2$	607-34-1	109,2 ± 2,5	94,2 ± 0,7	203,4 ± 2,6	-	-
6-nitroquinoline [87]	$C_9H_6N_2O_2$	613-50-3	88,4 ± 2,2	103,8 ± 1,0	192,2 ± 2,4	-	-
8-nitroquinoline [87]	$C_9H_6N_2O_2$	607-35-2	100,2 ± 2,4	106,7 ± 0,9	206,9 ± 2,6	-	-
8-nitroquinaldine [87]	$C_{10}H_8N_2O_2$	881-07-2	55,4 ± 2,3	111,0 ± 0,8	166,4 ± 2,4	-	-
benzothiazino-benzothiazine [88]	$C_{14}H_{12}N_2S_2$		165,2 ± 6,3	123,3 ± 1,2	288,5 ± 6,4	-	-
benzoxazino-benzoxazine [88]	$C_{14}H_{12}N_2O_2$		-180,9 ± 6,3	129,0 ± 1,3	-51,9 ± 6,4	-	-
1,1,1-trifluoro-4-(2-thiényl)-4-hydroxy-3-butèn-2-one [89]	$C_8H_5O_2SF_3$		-948,6 ± 4,1	86,18 ± 0,64	-	-	-

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	$\Delta H°_{sub}$ (litt.)	$\Delta_f H°_{g,m}$ (litt.)	$\Delta_f H°_{g,m}$ (calc.)	Résidu
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
1,1,1-trifluoro-4-(2-thiényl)-4-mercapto-3-butèn-2-one [89]	$C_8H_5OS_2F_3$		-725,4 ± 3,9	95,1 ± 3,7	-	-	-
N,N-diméthyloctylamine [90]	$C_{10}H_{23}N$	7378-99-6	-	-	-178,87 ± 0,99	-177,3	-1,6
2,4-diméthylaniline [90]	$C_8H_{11}N$	95-68-1	-	-	23,2 ± 1,0	21,6	1,6
2,5-diméthylaniline [90]	$C_8H_{11}N$	1300-73-8	-	-	23,86 ± 0,88	21,6	2,3
N-éthylaniline [90]	$C_8H_{11}N$	103-69-5	-	-	66,5 ± 1,1	59,0	7,5
N-benzylaniline [90]	$C_{13}H_{13}N$	103-32-2	101,4 ± 1,1	104,4 ± 1,6	205,8 ± 1,9	168,9	36,9
N,N-diméthylaniline [90]	$C_8H_{11}N$	121-69-7	-	-	100,0 ± 1,0	91,2	8,8
tert-butylméthylamine [90]	$C_5H_{13}N$	110-68-9	-	-	-110,0 ± 4,1	-119,7	9,7
tert-butylisopropylamine [90]	$C_7H_{17}N$	39099-23-5	-	-	-168,1 ± 3,2	-184,1	16,0
2,2,6,6-tétraméthylpipéridine [90]	$C_9H_{19}N$	768-66-1	-	-	-162,4 ± 2,1	-190,7	28,3
2,4,6-triméthylpyridine [91]	$C_8H_{11}N$	108-75-8	-	-	19,3 ± 2,4	36,9	-17,6
di-n-propylamine [92]	$C_6H_{15}N$	142-84-7	-	-	-116,5 ± 1,6	-117,4	0,9
diisopropylamine [92]	$C_6H_{15}N$	108-18-9	-	-	-136,3 ± 2,6	-149,8	13,5
diisobutylamine [92]	$C_8H_{19}N$	110-96-3	-	-	-180,8 ± 2,7	-164,0	-16,8
di-sec-butylamine [92]	$C_8H_{19}N$	626-23-3	-	-	-183,6 ± 3,0	-184,3	0,7
2-phénylquinoline [93]	$C_{15}H_{11}N$	612-96-4	181,8 ± 3,9	105,4 ± 0,9	287,2 ± 4,0	-	-
2,2'-biquinoline [93]	$C_8H_{12}N_2$	119-91-5	265,1 ± 3,7	134,7 ± 1,3	399,8 ± 3,9	-	-
benzophénone-imine [94]	$C_{13}H_{11}N$	1013-88-3	-	-	248,4 ± 1,3	-	-
N-méthyl-benzaldéhyde-imine [94]	C_8H_9N	622-29-7	-	-	157,07 ± 0,85	164,3	-7,2
N-benzyl-benzaldéhyde-imine [94]	$C_{14}H_{13}N$	780-25-6	-	-	268,8 ± 1,4	246,6	22,2
N-benzyl-pivalophénone-imine [94]	$C_{18}H_{21}N$		46,74 ± 0,98	109,7 ± 3,3	156,4 ± 3,4	-	-
N-cyclohexyl-(2,4,6-triméthyl)-benzaldéhyde-imine [94]	$C_{16}H_{23}N$		-128,0 ± 2,0	104,85 ± 0,83	-23,2 ± 2,2	-16,5	-6,7
N-phényl-benzaldéhyde-imine [94]	$C_{13}H_{11}N$	538-51-2	181,6 ± 1,4	98,1 ± 1,2	279,7 ± 1,8	301,2	-21,5
N-phényl-4-nitrobenzaldéhyde-imine [94]	$C_{13}H_{10}N_2O_2$		137,50 ± 0,74	126,0 ± 1,3	263,5 ± 1,5	289,1	-25,6
N-phényl-benzophénone-imine [94]	$C_{19}H_{15}N$		252,5 ± 1,4	119,7 ± 1,8	372,2 ± 2,3	-	-
cyclopentadécanone [95]	$C_{15}H_{28}O$	502-72-7	-501,4 ± 5,5	86,0 ± 0,6	-415,4 ± 5,5	-413,6	-1,8
o-terphényle [96]	$C_{18}H_{14}$	84-15-1	178,3 ± 1,2	101,23 ± 0,48	279,5 ± 1,3	279,4	0,1
p-terphényle [96]	$C_{18}H_{14}$	92-94-4	152,47 ± 0,91	120,4 ± 2,4	272,9 ± 2,6	276,3	-3,4
m-terphényle [96]	$C_{18}H_{14}$	92-06-8	161,8 ± 1,2	118,1 ± 1,6	279,9 ± 2,0	276,3	3,6

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	$\Delta H°_{sub}$ (litt.)	$\Delta_f H°_{g,m}$ (litt.)	$\Delta_f H°_{g,m}$ (calc.)	Résidu
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
1,3,5-triphénylbenzène [96]	$C_{24}H_{18}$	612-71-5	222,0 ± 1,2	150,26 ± 0,86	372,3 ± 1,5	373,0	-0,7
2-phénylphénol [97]	$C_{12}H_{10}O$	90-43-7	-88,3 ± 0,6	88,54 ± 0,90	0,2 ± 1,1	4,9	-4,7
4-phénylphénol [97]	$C_{12}H_{10}O$	92-69-3	-106,2 ± 0,7	109,8 ± 1,0	3,6 ± 1,2	3,4	0,2
2,6-diphénylphénol [97]	$C_{18}H_{14}O$	2432-11-3	-14,5 ± 1,6	119,1 ± 1,1	104,6 ± 1,9	103,0	1,6
2,2'-dihydroxybiphényle [97]	$C_{12}H_{10}O_2$	1806-29-7	-293,9 ± 0,6	114,4 ± 1,2	-179,5 ± 1,3	-169,9	-9,6
4,4'-dihydroxybiphényle [97]	$C_{12}H_{10}O_2$	92-88-6	-320,3 ± 1,6	143,0 ± 2,0	-177,3 ± 2,6	-172,7	-4,6
2,3-dichlorodibenzo-p-dioxine [98]	$C_{12}H_6O_2Cl_2$	29446-15-9	-220,5 ± 6,8	108,6 ± 1,0	-111,9 ± 6,9	-122,0	10,1
(4R,5R)-3,4-diméthyl-5-phényl-1,3-oxazolidine [99]	$C_{11}H_{15}NO$		-	-	-75,7 ± 2,3	-71,0	-4,7
(4S,5R)-3,4-diméthyl-5-phényl-1,3-oxazolidine [99]	$C_{11}H_{15}NO$	123618-06-4	-	-	-67,9 ± 2,5	-71,0	3,1
(4R,5R)-2,2,3,4-tétraméthyl-5-phényl-oxazolidine [99]	$C_{13}H_{19}NO$	141271-51-4	-	-	-174,6 ± 3,0	-	-
5-amino-6-nitroquinoline [100]	$C_9H_7N_3O_2$	35975-00-9	59,9 ± 2,7	136,4 ± 0,8	196,3 ± 2,8	-	-
4-aminoquinaldine [100]	$C_{10}H_{10}N_2$	6628-04-2	34,2 ± 2,6	115,3 ± 0,8	149,5 ± 2,7	-	-
4-méthylpyridine N-oxyde [101]	C_6H_7NO	1003-67-4	5,6 ± 2,1	85,3 ± 2,6	90,9 ± 3,3	-	-
3-cyanopyridine N-oxyde [101]	$C_6H_4N_2O$		170,9 ± 1,4	101,9 ± 2,0	272,8 ± 2,4	-	-
4-cyanopyridine N-oxyde [101]	$C_6H_4N_2O$	14906-59-3	162,8 ± 1,4	104,4 ± 4,3	267,2 ± 4,5	-	-
3-hydroxypyridine N-oxyde [101]	$C_5H_5NO_2$	6602-28-4	-171,3 ± 1,0	121,8 ± 4,4	-49,5 ± 4,5	-	-
acide 2-pyridinecarboxylique N-oxyde [101]	$C_6H_5NO_3$	824-40-8	-364,1 ± 1,8	94,4 ± 4,0	-269,7 ± 4,4	-	-
acide 4-pyridinecarboxylique N-oxyde [101]	$C_6H_5NO_3$	13602-12-5	-381,2 ± 1,3	136,1 ± 1,2	-245,1 ± 1,8	-	-
3-méthyl-4-nitropyridine N-oxyde [101]	$C_6H_6N_2O_3$	1074-98-2	-19,5 ± 3,4	106,7 ± 2,0	87,2 ± 3,9	-	-
acide 2-pyridinecarboxylique [101]	$C_6H_5NO_2$	98-98-6	-341,0 ± 1,2	98,0 ± 2,3	-243,0 ± 2,6	-249,4	6,4
acide 4-pyridinecarboxylique [101]	$C_6H_5NO_2$	55-22-1	-348,7 ± 1,6	113,9 ± 4,4	-234,8 ± 4,7	-249,4	14,6
morpholine [102]	C_4H_9NO	110-91-8	-	-	-142,27 ± 0,87	-155,6	13,4
N-méthylmorpholine [102]	$C_5H_{11}NO$	109-02-4	-	-	-156,03 ± 0,99	-160,7	4,6
N-éthylmorpholine [102]	$C_6H_{13}NO$	100-74-3	-	-	-183,5 ± 1,5	-188,3	4,8
N,N'-diméthylpipérazine [102]	$C_6H_{14}N_2$	106-58-1	-	-	10,1 ± 1,2	22,2	-12,1
pipérazine [102]	$C_4H_{10}N_2$	110-85-0	-40,97 ± 0,60	72,1 ± 1,3	31,1 ± 1,4	32,2	-1,1
cis-bicyclo[2.1.0]pentane [103]	C_5H_8	185-94-4	-	-	158,7 ± 1,6	153,6	5,1
spiro{cyclopropane-1.6-tricyclo[3.2.1.0^{2,4}]}octane [103]	$C_{10}H_{14}$		-	-	170,4 ± 1,8	165,9	4,5
dispiro[3.0.2.1]octane [103]	C_8H_{12}		-	-	244,4 ± 5,0	255,7	-11,3

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	$\Delta H°_{sub}$ (litt.)	$\Delta_f H°_{g,m}$ (litt.)	$\Delta_f H°_{g,m}$ (calc.)	Résidu
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
cis-2-phénylcyclopropanecarboxylate éthyl ester [103]	$C_{12}H_{14}O_2$		-	-	-229,2 ± 2,0	-228,0	-1,2
trans-2-phénylcyclopropanecarboxylate éthyl ester [103]	$C_{12}H_{14}O_2$		-337,2 ± 1,9	96,9 ± 0,4	-240,3 ± 1,9	-228,0	-12,3
1-cyclopropylcyclobutène [103]	C_7H_{10}		-	-	201,3	230,7	-29,4
cis-7-méthylènebicyclo[4.1.0]heptène-2 [103]	C_8H_{10}		-	-	251,8	229,7	22,1
bicyclopropylidène [103]	C_6H_8		-	-	324,3	237,8	86,5
1-éthylimidazole [104]	$C_5H_8N_2$	7098-07-9	-	-	110,8 ± 4,3	117,1	-6,3
1-éthylpyrazole [104]	$C_5H_8N_2$		-	-	132,6 ± 3,3	-	-
pentacyclo[5.4.0.0^{2,6}.0^{3,10}.0^{5,9}]undécane-8,11-dione [105]	$C_{11}H_{10}O_2$	2958-72-7	-206,2 ± 3,2	92,6 ± 1,0	-113,6 ± 3,4	-137,8	24,2
2-tert-butylphénol [106]	$C_{10}H_{14}O$	88-18-6	-	63,19 ± 0,21	-191,6 ± 1,6	-198,9	7,3
2-tert-butyl-5-méthylphénol [106]	$C_{11}H_{16}O$	88-60-8	-	67,17 ± 0,33	-225,9 ± 1,7	-232,3	6,4
2-tert-butyl-4-méthylphénol [106]	$C_{11}H_{16}O$	2409-55-4	-306,9 ± 1,6	82,90 ± 0,53	-224,0 ± 1,7	-232,3	8,3
2,4-di-tert-butylphénol [106]	$C_{14}H_{22}O$	96-76-4	-383,4 ± 2,1	86,71 ± 0,29	-296,7 ± 1,7	-305,9	9,2
2-tert-amylphénol [106]	$C_{11}H_{16}O$	3279-27-4	-	65,25 ± 0,21	-206,3 ± 2,2	-212,8	6,5
2,4-di-tert-amylphénol [106]	$C_{16}H_{26}O$	120-95-6	-	75,50 ± 0,81	-328,2 ± 3,8	-333,8	5,6
2-tert-octylphénol [106]	$C_{14}H_{22}O$	3884-95-5	-	70,66 ± 0,25	-266,9 ± 2,8	-289,4	22,5
2,4-di-tert-octylphénol [106]	$C_{22}H_{38}O$		-	85,43 ± 0,47	-450,4 ± 6,4	-486,9	36,5
3-tert-butylphénol [106]	$C_{10}H_{14}O$	585-34-2	-286,5 ± 1,4	85,99 ± 0,49	-200,5 ± 1,5	-200,3	-0,2
4-tert-butylphénol [106]	$C_{10}H_{14}O$	98-54-4	-289,7 ± 1,5	85,88 ± 0,49	-203,8 ± 1,6	-200,3	-3,5
2-méthyl-4-tert-butylphénol [106]	$C_{11}H_{16}O$	98-27-1	-	72,12 ± 0,56	-233,6 ± 1,6	-232,3	-1,3
4-tert-amylphénol [106]	$C_{11}H_{16}O$	80-46-6	-304,7 ± 1,6	88,29 ± 0,49	-216,4 ± 1,7	-214,3	-2,1
4-tert-octylphénol [106]	$C_{14}H_{22}O$	140-66-9	-375,1 ± 2,0	97,87 ± 0,86	-277,2 ± 2,2	-290,8	13,6
thianthrène [107]	$C_{12}H_8S_2$	92-85-3	182,7 ± 3,4	-	-	297,1	-
1,3-dithiane [107]	$C_4H_8S_2$	505-23-7	-65,6 ± 2,2	62,9 ± 0,7	-2,7 ± 2,3	-	-
benzanthrone [108]	$C_{17}H_{10}O$	82-05-3	-4,1 ± 3,0	126,6 ± 0,6	-	142,8	-
acide malonique [109]	$C_3H_4O_4$	141-82-2	-891,1 ± 0,4	111,4 ± 0,7	-779,7 ± 0,8	-811,7	32,0
acide glutarique [109]	$C_5H_8O_4$	110-94-1	-960,0 ± 1,2	119,8 ± 1,2	-840,2 ± 1,7	-844,0	3,8
acide pimelique [109]	$C_7H_{12}O_4$	111-16-0	-1009,4 ± 1,2	139,9 ± 1,0	-869,5 ± 1,6	-885,3	15,8
acide azelaïque [109]	$C_9H_{16}O_4$	123-99-9	-1054,3 ± 2,1	159,9 ± 1,6	-894,4 ± 2,6	-926,5	32,1
acide undécanedioïque [109]	$C_{11}H_{20}O_4$	1852-04-6	-1099,4 ± 2,6	162,5 ± 1,9	-936,9 ± 3,2	-967,8	30,9

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	$\Delta H°_{sub}$ (litt.)	$\Delta_f H°_{g,m}$ (litt.)	$\Delta_f H°_{g,m}$ (calc.)	Résidu
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
acide 2-méthylpropanoïque [110]	$C_4H_8O_2$	79-31-2	-	-	-478,7 ± 3,2	-482,4	3,7
acide 2,2-diméthylpropanoïque [110]	$C_5H_{10}O_2$	75-98-9	-567,9 ± 1,1	73,2 ± 3,0	-494,7 ± 3,2	-512,1	17,4
acide 3-méthylbutanoïque [110]	$C_5H_{10}O_2$	503-74-2	-	-	-505,7 ± 3,1	-501,7	-4,0
1-phénylimidazole [111]	$C_9H_8N_2$	7164-98-9	-	-	264,7 ± 4,3	-	-
1-phénylpyrazole [111]	$C_9H_8N_2$	1126-00-7	-	-	291,4 ± 4,5	-	-
2-méthylaniline [112]	C_7H_9N	95-53-4	-	-	53,2 ± 0,5	55,0	-1,8
2-éthylaniline [112]	$C_8H_{11}N$	578-54-1	-	-	35,8 ± 2,0	34,7	1,1
2-isopropylaniline [112]	$C_9H_{13}N$	643-28-7	-	-	8,2 ± 2,3	8,2	0,0
2-phénylaniline [112]	$C_{12}H_{11}N$	90-41-5	-	-	184,4 ± 0,5	185,2	-0,8
2-tertbutylaniline [112]	$C_{10}H_{15}N$	6310-21-0	-	-	-1,5 ± 2,1	-18,6	17,1
2,4-diméthylaniline [112]	$C_8H_{11}N$	95-68-1	-	-	23,2 ± 1,1	21,6	1,6
2,5-diméthylaniline [112]	$C_8H_{11}N$	1300-73-8	-	-	23,9 ± 0,9	21,6	2,3
2,6-diméthylaniline [112]	$C_8H_{11}N$	87-62-7	-	-	18,6 ± 1,5	23,0	-4,4
2,6-diéthylaniline [112]	$C_{10}H_{15}N$	579-66-8	-	-	-18,8 ± 1,9	-17,7	-1,1
2,6-diisopropylaniline [112]	$C_{12}H_{19}N$	24544-04-5	-	-	-70,2 ± 2,4	-70,5	0,3
2,4,6-tri-tert-butylaniline [112]	$C_{18}H_{31}N$	961-38-6	-286,8 ± 4,2	92,5 ± 1,1	-194,3 ± 4,3	-231,2	36,9
4-méthylaniline [112]	C_7H_9N	106-49-0	-	-	44,6	53,6	-9,0
N,N-diméthyl-4-toluidine [112]	$C_9H_{13}N$	99-97-8	-	-	68,9 ± 7,4	57,8	11,1
3-méthylaniline [112]	C_7H_9N	108-44-1	-	-	52,0	53,6	-1,6
N,N-diméthyl-3-toluidine [112]	$C_9H_{13}N$	121-72-2	-	-	72,6 ± 7,3	57,8	14,8
N-éthyl-3-toluidine [112]	$C_9H_{13}N$	102-27-2	-	-	30,5 ± 3,8	25,6	4,9
acide salicylique [113]	$C_7H_6O_3$	69-72-7	-588,4 ± 1,7	-	-	-477,8	-
acide acétylsalicylique [114]	$C_9H_8O_4$	50-78-2	-758,19 ± 0,52	-	-632,5 ± 2,1	-662,3	29,8
méthyl-α-D-glucopyranoside [115]	$C_7H_{14}O_6$	97-30-3	-1239,15 ± 0,88	-	-	-1091,3	-
méthyl-β-D-glucopyranoside [115]	$C_7H_{14}O_6$	709-50-2	-1241,27 ± 0,86	-	-	-1091,3	-
méthyl-α-D-galactopyranoside [115]	$C_7H_{14}O_6$	3396-99-4	-1237,18 ± 0,91	-	-	-1091,3	-
méthyl-β-D-galactopyranoside [115]	$C_7H_{14}O_6$	1824-94-8	-1249,63 ± 0,89	-	-	-1091,3	-
coronène [116]	$C_{24}H_{12}$	191-07-1	146,5 ± 4,8	-	302,0 ± 8,0	323,8	-21,8
thiourée [117]	CH_4N_2S	62-56-6	-	112,0 ± 2,0	-	-25,1	-

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	$\Delta H°_{sub}$ (litt.)	$\Delta_f H°_{g,m}$ (litt.)	$\Delta_f H°_{g,m}$ (calc.)	Résidu
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
1-méthyl-2-thiourée [117]	$C_2H_6N_2S$	598-52-7	-	112,9 ± 3,0	-	-	-
1-éthyl-2-thiourée [117]	$C_3H_8N_2S$		-	118,8 ± 5,0	-	-	-
1,3-diméthyl-2-thiourée [117]	$C_3H_8N_2S$	534-13-4	-	111,8 ± 3,0	-	-	-
1,3-diéthyl-2-thiourée [117]	$C_5H_{12}N_2S$	105-55-5	-	121,7 ± 3,0	-	-	-
1,3-di-n-propyl-2-thiourée [117]	$C_7H_{16}N_2S$	26536-60-7	-	134,9 ± 3,0	-	-	-
1,3-di-n-butyl-2-thiourée [117]	$C_9H_{20}N_2S$	109-46-6	-	141,0 ± 2,0	-	-	-
1,1,3,3-tétraméthyl-2-thiourée [117]	$C_5H_{12}N_2S$	2782-91-4	-	84,5 ± 3,0	-	-	-
D-valine [118]	$C_5H_{11}NO_2$	640-68-6	-612,9 ± 1,5	-	-	-438,6	-
L-valine [118]	$C_5H_{11}NO_2$	72-18-4	-614,7 ± 1,3	-	-	-438,6	-
DL-valine [118]	$C_5H_{11}NO_2$	7004-03-7	-617,1 ± 1,0	-	-	-438,6	-
acide 3-pyridinecarboxylique [119]	$C_6H_5NO_2$	59-67-6	-	123,9 ± 3,7	-	-243,1	-
N-benzoyl-N',N'-diéthylurée [120]	$C_{12}H_{16}N_2O_2$		-479,2 ± 4,8	132,2 ± 1,4	-347,0 ± 5,6	-400,9	53,9
N-benzoyl-N',N'-diisobutylurée [120]	$C_{16}H_{24}N_2O_2$		-582,8 ± 6,0	137,5 ± 2,9	-445,3 ± 7,4	-502,1	56,8
2-méthylnitrobenzène [121]	$C_7H_7NO_2$	88-72-2	-	-	37,3 ± 1,2	56,1	-18,8
2-éthylnitrobenzène [121]	$C_8H_9NO_2$	612-22-6	-	-	16,6 ± 2,3	35,8	-19,2
2-isopropylnitrobenzène [121]	$C_9H_{11}NO_2$	6526-72-3	-	-	-6,5 ± 2,4	9,3	-15,8
2-tert-butylnitrobenzène [121]	$C_{10}H_{13}NO_2$	3282-56-2	-	-	-14,0 ± 1,8	-17,5	3,5
2,6-diméthylnitrobenzène [121]	$C_8H_9NO_2$	81-20-9	-	-	7,6 ± 2,0	41,5	-33,9
2,6-di-isopropylnitrobenzène [121]	$C_{12}H_{17}NO_2$		-161,5 ± 2,8	80,6 ± 1,0	-80,9 ± 3,0	-52,0	-28,9
2,4,6-tri-tert-butylnitrobenzène [121]	$C_{18}H_{29}NO_2$	4074-25-3	-301,3 ± 4,2	96,43 ± 0,99	-204,9 ± 4,3	-212,7	7,8
acide 2-iodobenzoïque [122]	$C_7H_5IO_2$	88-67-5	-	112,8 ± 2,0	-	-229,3	-
acide 3-iodobenzoïque [122]	$C_7H_5IO_2$	618-51-9	-	111,1 ± 1,9	-	-229,3	-
acide 4-iodobenzoïque [122]	$C_7H_5IO_2$	619-58-9	-	112,9 ± 2,5	-	-229,3	-
acide 2-fluorobenzoïque [122]	$C_7H_5FO_2$	445-29-4	-	94,4 ± 0,8	-	-500,4	-
acide 3-fluorobenzoïque [122]	$C_7H_5FO_2$	455-38-9	-	93,6 ± 0,6	-	-510,4	-
acide benzoïque [123]	$C_7H_6O_2$	65-85-0	-	88,3 ± 0,5	-	-311,7	-
acide succinique [124]	$C_4H_6O_4$	110-15-6	-940,4 ± 0,2	123,2 ± 2,6	-817,2 ± 2,6	-823,4	6,2
acide méthylsuccinique [124]	$C_5H_8O_4$	498-21-5	-958,2 ± 1,1	121,7 ± 2,3	-836,5 ± 2,6	-848,1	11,6
acide 2,2-diméthylsuccinique [124]	$C_6H_{10}O_4$	597-43-3	-987,8 ± 1,4	122,7 ± 2,7	-865,1 ± 3,0	-874,5	9,4

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	$\Delta H°_{sub}$ (litt.)	$\Delta_f H°_{g,m}$ (litt.)	$\Delta_f H°_{g,m}$ (calc.)	Résidu
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
acide 2-méthylglutarique [124]	$C_6H_{10}O_4$	18069-17-5	-	126,5 ± 2,1	-	-868,7	-
acide 2,2-diméthylglutarique [124]	$C_7H_{12}O_4$	681-57-2	-	126,8 ± 2,1	-	-895,1	-
acide 2-méthyl-3-nitrobenzoïque [125]	$C_8H_7NO_4$		-	119,5 ± 2,3	-	-337,0	-
acide 2-méthyl-6-nitrobenzoïque [125]	$C_8H_7NO_4$	13506-76-8	-	120,0 ± 2,2	-	-355,8	-
acide 3-méthyl-2-nitrobenzoïque [125]	$C_8H_7NO_4$		-	124,4 ± 2,7	-	-338,4	-
acide 3-méthyl-4-nitrobenzoïque [125]	$C_8H_7NO_4$	3113-71-1	-	119,3 ± 2,5	-	-338,4	-
acide 4-méthyl-3-nitrobenzoïque [125]	$C_8H_7NO_4$		-	118,6 ± 2,5	-	-338,4	-
acide 5-méthyl-2-nitrobenzoïque [125]	$C_8H_7NO_4$		-	118,7 ± 2,2	-	-357,3	-
acide 2-amino-3-méthylbenzoïque [126]	$C_8H_9NO_2$	4389-45-1	-	107,3 ± 1,8	-	-329,5	-
acide 2-amino-5-méthylbenzoïque [126]	$C_8H_9NO_2$	2941-78-8	-	110,6 ± 1,9	-	-330,9	-
acide 2-amino-6-méthylbenzoïque [126]	$C_8H_9NO_2$		-	116,1 ± 2,0	-	-329,5	-
acide 3-amino-2-méthylbenzoïque [126]	$C_8H_9NO_2$		-	127,8 ± 2,6	-	-338,1	-
acide 3-amino-4-méthylbenzoïque [126]	$C_8H_9NO_2$	2458-12-0	-	119,4 ± 2,5	-	-339,5	-
acide 4-amino-3-méthylbenzoïque [126]	$C_8H_9NO_2$	2486-70-6	-	122,0 ± 2,6	-	-339,5	-
acide 3-phénylpropionique [127]	$C_9H_{10}O_2$	501-52-0	-	102,4 ± 0,8	-	-340,0	-
acide 3-(2-méthoxyphényl)propionique [127]	$C_{10}H_{12}O_3$	6342-77-4	-	117,8 ± 1,4	-	-495,0	-
acide 3-(4-méthoxyphenyl)propionique [127]	$C_{10}H_{12}O_3$	1929-29-9	-	124,5 ± 1,7	-	-496,4	-
acide 3-(3,4-diméthoxyphenyl)propionique [127]	$C_{11}H_{14}O_4$	2107-70-2	-	143,6 ± 2,2	-	-642,9	-
acide trans-2,3-diméthoxycinnamique [128]	$C_{11}H_{12}O_2$	7461-60-1	-660,4 ± 3,0	141,0 ± 0,9	-519,4 ± 3,1	-536,4	17,0
acide trans-2,4-diméthoxycinnamique [128]	$C_{11}H_{12}O_2$		-683,0 ± 2,5	149,2 ± 1,3	-533,8 ± 2,8	-546,4	12,6
acide trans-2,5-diméthoxycinnamique [128]	$C_{11}H_{12}O_2$		-665,2 ± 2,8	138,8 ± 1,1	-526,4 ± 3,0	-546,4	20,0
acide trans-3,4-diméthoxycinnamique [128]	$C_{11}H_{12}O_2$	2316-26-9	-664,0 ± 2,2	149,9 ± 0,8	-514,1 ± 2,3	-537,8	23,7
acide trans-3,5-diméthoxycinnamique [128]	$C_{11}H_{12}O_2$		-666,3 ± 2,2	141,4 ± 0,5	-524,9 ± 2,3	-547,9	23,0
adénosine [129]	$C_{10}H_{13}N_5O_4$	58-61-7	-653,6 ± 3,6	-	-	-	-
3,5-diméthylpyrazole [130]	$C_5H_8N_2$	67-51-6	18,9 ± 1,7	83,4 ± 2,4	102,3 ± 2,9	97,5	4,8
3,5-diméthyl-4-nitrosopyrazole [130]	$C_5H_7N_3O$		111,2 ± 2,9	102,9 ± 3,0	214,1 ± 4,2	-	-
1,3,5-triméthyl-4-nitrosopyrazole [130]	$C_6H_9N_3O$		111,9 ± 2,1	88,0 ± 2,0	199,9 ± 2,9	-	-
3,5-diméthyl-1-phényl-4-nitrosopyrazole [130]	$C_{11}H_{11}N_3O$		209,7 ± 2,1	100,4 ± 2,2	310,1 ± 3,0	-	-
picolinamide [131]	$C_6H_6N_2O$	1452-77-3	-156,4 ± 1,8	93,1 ± 3,3	-63,3 ± 3,8	-87,5	24,2

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	$\Delta H°_{sub}$ (litt.)	$\Delta_f H°_{g,m}$ (litt.)	$\Delta_f H°_{g,m}$ (calc.)	Résidu
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
nicotinamide [131]	$C_6H_6N_2O$	98-92-0	-150,1 ± 1,6	121,2 ± 3,3	-28,9 ± 3,7	-81,2	52,3
isonicotinamide [131]	$C_6H_6N_2O$	1453-82-3	-150,2 ± 1,4	116,1 ± 1,5	-34,1 ± 2,1	-87,5	53,4
nicotinamide N-oxyde [131]	$C_6H_6N_2O_2$		-199,2 ± 2,1	119,2 ± 2,3	-80,0 ± 3,1	-	-
isonicotinamide N-oxyde [131]	$C_6H_6N_2O_2$		-198,8 ± 2,1	125,3 ± 1,8	-73,5 ± 2,8	-	-
2,3,4-trichloroaniline [132]	$C_6H_4NCl_3$	634-67-3	-64,3 ± 2,4	92,4 ± 1,7	28,1 ± 2,9	13,8	14,3
2,4,5-trichloroaniline [132]	$C_6H_4NCl_3$	636-30-6	-61,4 ± 1,4	86,3 ± 2,5	24,9 ± 2,9	7,1	17,8
2,4,6-trichloroaniline [132]	$C_6H_4NCl_3$	634-93-5	-80,3 ± 1,8	85,3 ± 1,9	5,0 ± 2,6	5,4	-0,4
3,4,5-trichloroaniline [132]	$C_6H_4NCl_3$	634-91-3	-67,8 ± 2,0	92,9 ± 3,3	25,1 ± 3,9	13,8	11,3
N,N-diéthyl-N'-furoylthiourée [133]	$C_{10}H_{14}N_2O_2S$		-306,1 ± 3,3	132,0 ± 3,5	-174,1 ± 4,8	-	-
N,N-diisobutyl-N'-furoylthiourée [133]	$C_{10}H_{22}N_2O_2S$		-426,4 ± 3,8	141,7 ± 5,6	-284,7 ± 6,8	-	-
benzo[k]fluorantène [134]	$C_{20}H_{12}$	207-08-9	172,4 ± 4,3	124,2 ± 4,7	296,6 ± 6,4	354,1	-57,5
5,10,15,20-tétraphénylporphine [135]	$C_{44}H_{30}N_4$	917-23-7	655 ± 9	184 ± 2	839 ± 9	-	-
5,10,15,20-tétrakis(4-méthoxyphényl)porphine [135]	$C_{48}H_{38}N_4O_4$	22112-78-3	69 ± 9	226 ± 10	295 ± 14	-	-
phénantrène [136]	$C_{14}H_{10}$	85-01-8	110,4 ± 1,0	91,3 ± 2,7	201,7 ± 2,9	209,2	-7,5
naphtacène [136]	$C_{18}H_{12}$	92-24-0	206,9 ± 1,9	124,7 ± 4,0	331,6 ± 4,4	286,2	45,4
antracène [136]	$C_{14}H_{10}$	120-12-7	126,7 ± 1,1	103,4 ± 2,7	230,1 ± 2,9	218,4	11,7
dibenzo-p-dioxine [137]	$C_{12}H_8O_2$	262-12-4	-141,6 ± 2,1	91,45 ± 0,76	-50,1 ± 2,2	-62,6	12,5
acide trans-2-méthoxycinnamique [138]	$C_{10}H_{10}O_3$	6099-03-2	-505,6 ± 2,1	128,0 ± 2,6	-377,6 ± 3,3	-389,9	12,3
acide trans-3-méthoxycinnamique [138]	$C_{10}H_{10}O_3$		-504,4 ± 3,2	123,4 ± 2,2	-381,0 ± 3,9	-391,4	10,4
acide trans-4-méthoxycinnamique [138]	$C_{10}H_{10}O_3$	830-09-1	-512,6 ± 4,0	133,4 ± 2,8	-379,2 ± 4,9	-391,4	12,2
acide trans-2,3-diméthoxycinnamique [138]	$C_{11}H_{12}O_4$	7461-60-1	-	-	-519,1 ± 4,2	-536,4	17,3
acide trans-2,4-diméthoxycinnamique [138]	$C_{11}H_{12}O_4$		-	-	-533,5 ± 4,3	-546,4	12,9
acide trans-2,5-diméthoxycinnamique [138]	$C_{11}H_{12}O_4$		-	-	-526,2 ± 4,1	-546,4	20,2
acide trans-3,4-diméthoxycinnamique [138]	$C_{11}H_{12}O_4$	2316-26-9	-	-	-513,9 ± 4,0	-537,8	23,9
acide trans-3,5-diméthoxycinnamique [138]	$C_{11}H_{12}O_4$		-	-	-524,7 ± 3,8	-547,9	23,2
corannulène [139]	$C_{20}H_{10}$	5821-51-2	342,3 ± 5,6	118,3 ± 3,3	460,6 ± 6,5	295,0	165,6
coronène [139]	$C_{24}H_{12}$	191-07-1	152,5 ± 6,9	155,0 ± 7,0	307,5 ± 9,8	323,8	-16,3
pérylène [139]	$C_{20}H_{12}$	198-55-0	182,8 ± 0,8	138,1 ± 6,2	319,4 ± 2,2	280,3	39,1
exo-tétrahydrodicyclopentadiène [140]	$C_{10}H_{16}$	2825-82-3	-	-	-73,7 ± 2,7	-61,4	-12,3

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	$\Delta H°_{sub}$ (litt.)	$\Delta_f H°_{g,m}$ (litt.)	$\Delta_f H°_{g,m}$ (calc.)	Résidu
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
endo-tétrahydrodicyclopentadiène [140]	$C_{10}H_{16}$		-	51,2 ± 2,4	-61,9 ± 3,2	-61,4	-0,5
fullerène C_{70} [141]	C_{70}	115383-22-7	2452 ± 33	200 ± 6	2652 ± 34	439,3	2212,7
2-chloro-4-nitroaniline [142]	$C_6H_5N_2O_2Cl$	121-87-9	-74,9 ± 1,4	102,6 ± 1,5	27,7 ± 2,1	45,2	-17,5
2-chloro-5-nitroaniline [142]	$C_6H_5N_2O_2Cl$	6283-25-6	-71,0 ± 1,5	101,0 ± 1,6	30,0 ± 2,2	45,2	-15,2
2-chlorodibenzo-p-dioxine [143]	$C_{12}H_7O_2Cl$	39227-54-8	-187,9 ± 3,8	97,24 ± 0,55	-90,7 ± 3,8	-92,3	1,6
2-hydroxypyridine [144]	C_5H_5NO	72762-00-6	-	-	-79,7 ± 1,7	-67,2	-12,5
3-hydroxypyridine [144]	C_5H_5NO	109-00-2	-	-	-43,7 ± 1,7	-31,0	-12,7
4-hydroxypyridine [144]	C_5H_5NO	626-64-2	-	-	-40,8 ± 2,1	-28,2	-12,6
pyridine N-oxyde [144]	C_5H_5NO	694-59-7	-	-	124,7 ± 1,9	-	-
2-hydroxypyridine N-oxyde [144]	$C_5H_5NO_2$		-198,7 ± 1,7	89,4 ± 0,9	-109,3 ± 1,9	-	-
3-hydroxypyridine N-oxyde [144]	$C_5H_5NO_2$	6602-28-4	-	-	-49,5 ± 4,6	-	-
2-chloropyrazine [145]	$C_4H_3N_2Cl$		-	-	168,1 ± 1,9	184,1	-16,0
2,6-dichloropyrazine [145]	$C_4H_2N_2Cl_2$		74,5 ± 1,8	69,9 ± 2,0	144,4 ± 2,7	148,1	-3,7
2,3-dichloroquinoxaline [145]	$C_8H_4N_2Cl_2$		111,1 ± 1,7	91,8 ± 1,1	202,9 ± 2,0	-	-
2,3,6,7-tétrachloroquinoxaline [145]	$C_8H_2N_2Cl_4$		35,7 ± 1,7	105,9 ± 2,2	141,6 ± 2,8	-	-
acide benzoïque [146]	$C_7H_6O_2$	65-85-0	-	89,2 ± 0,8	-	-311,7	-
acide 4-méthylbenzoïque [146]	$C_8H_8O_2$	99-94-5	-	98,8 ± 0,3	-	-345,1	-
acide 4-éthylbenzoïque [146]	$C_9H_{10}O_2$	619-64-7	-	98,9 ± 0,2	-	-365,5	-
acide 4-pentylbenzoïque [146]	$C_{12}H_{16}O_2$	26311-45-5	-	118,2 ± 1,0	-	-386,1	-
acide 4-hexylbenzoïque [146]	$C_{13}H_{18}O_2$	21643-38-9	-	123,6 ± 1,0	-	-406,7	-
2-méthoxy-4-nitrophénol [147]	$C_7H_7NO_4$	3251-56-7	-377,0 ± 1,8	99,4 ± 2,0	-277,6 ± 2,7	-251,9	-25,7
2-méthoxy-5-nitrophénol [147]	$C_7H_7NO_4$	636-93-1	-374,1 ± 1,5	106,2 ± 2,2	-267,9 ± 2,7	-251,9	-16,0
4-méthoxy-2-nitrophénol [147]	$C_7H_7NO_4$	1568-70-3	-364,3 ± 1,4	90,8 ± 1,7	-273,5 ± 2,2	-261,9	-11,6
monothiodibenzoylméthane [148]	$C_{15}H_{12}OS$		-6,0 ± 2,8	125,5 ± 4,9	-	-	-
thianthrène [148]	$C_{12}H_8S_2$	92-85-3	182,1 ± 3,1	-	119,5 ± 5,6	297,1	-177,6
dibenzoylméthane [148]	$C_{15}H_{12}O_2$		-224,2 ± 1,8	113,3 ± 4,8	-110,9 ± 5,1	-	-
p-benzoquinone [149]	$C_6H_4O_2$	106-51-4	-186,02 ± 1,60	66,68 ± 1,59	-119,3 ± 2,3	-122,8	3,5
duroquinone [149]	$C_6H_4O_2$	527-17-3	-361,59 ± 4,27	93,15 ± 1,23	-268,4 ± 4,4	-251,6	-16,8
N-benzoylthiocarbamic-O-éthylester [150]	$C_{10}H_{11}NO_2S$		-324,5 ± 2,9	112,2 ± 1,3	-212,3 ± 3,2	-	-

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	$\Delta H°_{sub}$ (litt.)	$\Delta_f H°_{g,m}$ (litt.)	$\Delta_f H°_{g,m}$ (calc.)	Résidu
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
N-benzoylthiocarbamic-O-n-butylester [150]	$C_{12}H_{15}NO_2S$		-364,1 ± 3,0	120,7 ± 1,8	-243,4 ± 3,5	-	-
N-benzoylthiocarbamic-O-n-hexylester [150]	$C_{14}H_{19}NO_2S$		-411,2 ± 4,0	139,7 ± 2,4	-271,5 ± 4,7	-	-
fullerène C_{70} [151]	C_{70}	115383-22-7	2554,0 ± 57,6	200 ± 6	2754,0 ± 57,9	439,3	2314,7
2-propylbenzimidazole [152]	$C_{10}H_{12}N_2$		-46,2 ± 3,7	109,4 ± 1,2	63,2 ± 3,9	-	-
2-isopropylbenzimidazole [152]	$C_{11}H_{14}N_2$	5851-43-4	-31,6 ± 2,3	109,9 ± 2,7	78,3 ± 4,2	-	-
N-(diéthylaminothiocarbonyl)-benzamidine [153]	$C_{12}H_{17}N_3S$		-1,4 ± 3,8	126,0 ± 1,5	124,6 ± 4,1	-	-
N-(diéthylaminothiocarbonyl)-N',N'-diéthylbenzamidine [153]	$C_{16}H_{25}N_3S$		-36,2 ± 5,3	122,2 ± 2,0	86,0 ± 5,7	-	-
N-(diéthylaminothiocarbonyl)-N'-phénylbenzamidine [153]	$C_{18}H_{21}N_3S$		114,2 ± 5,5	159,4 ± 3,3	273,6 ± 6,4	-	-
D-galactono-1,4-lactone [154]	$C_6H_{10}O_6$		-1232,36 ± 0,65	-	-	-1127,3	-
L-galactono-1,4-lactone [154]	$C_6H_{10}O_6$		-1231,79 ± 0,65	-	-	-1127,3	-
D-gulono-1,4-lactone [154]	$C_6H_{10}O_6$		-1230,13 ± 0,65	-	-	-1127,3	-
L-gulono-1,4-lactone [154]	$C_6H_{10}O_6$		-1230,54 ± 0,62	-	-	-1127,3	-
L-mannono-1,4-lactone [154]	$C_6H_{10}O_6$		-1228,02 ± 0,65	-	-	-1127,3	-
pyrazinecarbonitrile [155]	$C_5H_3N_3$	19847-12-2	-	-	356,8 ± 2,0	361,9	-5,1
acide pyrazinecarboxylique [155]	$C_5H_4N_2O_2$	98-97-5	-271,2 ± 1,1	103,6 ± 2,9	-167,6 ± 3,1	-180,7	13,1
pyrazinamide [155]	$C_5H_5N_3O$	98-96-4	-93,5 ± 1,5	102,0 ± 2,1	8,5 ± 2,6	-18,9	27,4
2-phénylbenzimidazole [156]	$C_{13}H_{10}N_2$	716-79-0	135,0 ± 1,9	123,0 ± 1,7	258,0 ± 2,5	-	-
2-benzylbenzimidazole [156]	$C_{14}H_{12}N_2$	621-72-7	103,0 ± 4,4	136,2 ± 0,5	239,2 ± 4,4	-	-
inosine [157]	$C_{10}H_{12}N_4O_5$	58-63-9	-847,9 ± 4,7	-	-	-	-
1-hydroxyisoquinoline [158]	C_9H_7NO	491-30-5	-146,8 ± 1,9	113,6 ± 2,2	-33,2 ± 2,9	0,6	-33,8
5-hydroxyisoquinoline [158]	C_9H_7NO	2439-04-5	-86,8 ± 2,2	109,6 ± 2,1	22,8 ± 3,0	43,1	-20,3
1,5-dihydroxyisoquinoline [158]	$C_9H_7NO_2$	5154-02-9	-347,9 ± 2,5	123,6 ± 2,2	-224,3 ± 3,3	-175,5	-48,8
2-chloroquinoline [159]	C_9H_6NCl		69,8 ± 2,0	84,3 ± 2,6	154,1 ± 3,3	-	-
4-chloroquinoline [159]	C_9H_6NCl		85,7 ± 2,0	78,6 ± 1,7	164,3 ± 2,6	-	-
6-chloroquinoline [159]	C_9H_6NCl		85,5 ± 2,0	80,8 ± 1,9	166,3 ± 2,8	-	-
4,7-dichloroquinoline [159]	$C_9H_5NCl_2$		49,9 ± 1,8	89,5 ± 2,3	139,4 ± 2,9	-	-
9-méthylantracène [160]	$C_{15}H_{12}$	779-02-2	97,1 ± 3,9	101,8 ± 1,0	198,9 ± 4,0	185,0	13,9
2-éthylantracène [160]	$C_{16}H_{14}$	52251-71-5	60,3 ± 3,8	107,6 ± 0,6	167,9 ± 3,8	164,6	3,3
9,10-diméthylantracène [160]	$C_{16}H_{14}$	781-43-1	70,2 ± 4,4	113,0 ± 1,7	183,2 ± 4,7	151,5	31,7

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	$\Delta H°_{sub}$ (litt.)	$\Delta_f H°_{g,m}$ (litt.)	$\Delta_f H°_{g,m}$ (calc.)	Résidu
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
2,3-dihydroxypyridine [161]	$C_5H_5NO_2$	16867-04-2	-373,0 ± 1,5	109,1 ± 4,3	-263,9 ± 4,6	-249,6	-14,3
2,3-dicyanopyrazine [162]	$C_6H_2N_4$		429,6 ± 2,1	89,1 ± 2,7	518,7 ± 3,4	509,6	9,1

Tableau III-1 : Banque de données thermochimiques issues de la littérature concernant 283 molécules organiques - Comparaison des enthalpies standard de formation en phase gazeuse mesurées et calculées.

Groupe de Benson	Contribution à $\Delta_f H°_{g,m}$ (kJ.mol^{-1})
C-(N)(O)(C)(H)	-41,4 [88]
C-(N)(O)(C)$_2$	-61,4 [99]
C-(S)(N)(C)(H)	-43,9 [88]
C-(S)$_2$(H)$_2$	-125,7 [107]
C_I-(C_B)$_2$	-16,2 ou 11,4 [94][(1)]
CO-(C_B)(C_d)	-189,2 [148]
N-(C_B)(C_d)$_2$	255,3 [111]
N-(N_I)(C_B)(C_d)	132,7 [111]
N-(N_I)(C_d)(C)	111,2 [104]
NO_e-(C_B)	62,5 ± 4,8 [101,144]

(1) Deux valeurs de contributions à l'enthalpie standard de formation en phase gazeuse ont été déterminées pour le groupe C_I-(C_B)$_2$ car deux composés permettent son évaluation : la benzophénone-imine et la N-phényl-benzophénone-imine. Une moyenne des deux valeurs n'a pas été effectuée car elles sont jugées trop différentes.
N.B. : Les numéros entre crochets correspondent aux références ayant permis l'estimation des contributions de groupes.

Tableau III-2 : Détermination de la contribution à l'enthalpie standard de formation en phase gazeuse de dix nouveaux groupes, grâce à une étude bibliographique.

Il est important de souligner que chacune de ces contributions de groupes (excepté celle du groupe NO_e-(C_B)) n'a pu être déterminée qu'à partir d'un seul composé. Des mesures supplémentaires sur des molécules comprenant les groupes présents dans le tableau III-2 pourraient venir confirmer ou infirmer ces résultats. On notera par ailleurs que si ces contributions n'avaient pas été déterminées auparavant, c'est parce que les groupes correspondants sont rarement présents au sein des différents composés organiques rencontrés.

Quant au groupe NO_e-(C_B), sa contribution a été estimée grâce à plusieurs valeurs d'enthalpies standard de formation en phase gazeuse de substances organiques. L'incertitude associée à la contribution de groupe déterminée correspond à l'écart-type calculé sur la valeur moyenne obtenue.

N'ayant pas nous-même constitué la banque de contributions de groupes relative à la phase gazeuse, il nous est difficile d'expliquer les résidus obtenus dans le tableau III-1 concernant la prévision des enthalpies de formation à l'état gazeux. Cependant, il est possible d'effectuer quelques remarques sur les valeurs calculées. Tout d'abord, notons que plusieurs valeurs de contributions manquent afin d'évaluer le plus grand nombre d'enthalpies de formation en phase vapeur. Par ailleurs, il est évident que la connaissance des valeurs de contributions de certaines corrections de structure et d'interactions à longue distance fait défaut. On peut citer l'exemple du fullerène [115383-22-7] (ensemble de cycles aromatiques accolés entre eux) dont le résidu dépasse les 2 000 $kJ.mol^{-1}$. La prise en compte d'une correction de structure serait dans ce cas indispensable. Mais il faut également noter que l'enthalpie de formation en phase gazeuse de ce composé est déterminée avec une grande incertitude.

Finalement, le calcul des écarts entre les enthalpies de formation issues de la littérature et estimées montre que les contributions de groupes déterminées au laboratoire permettent d'obtenir des résultats corrects mais pas excellents. Ce constat engendre la conclusion suivante : le développement de deux méthodes indirectes sera indispensable. La première démarche, appelée méthode semi-prédictive (ou méthode A), consistera à évaluer uniquement les enthalpies de sublimation et à utiliser les enthalpies de formation en phase gazeuse de la littérature afin d'obtenir les estimations recherchées des enthalpies de formation à l'état solide. Quant à la seconde démarche indirecte envisagée permettant d'évaluer les enthalpies de formation en phase solide, elle est appelée méthode entièrement prédictive (ou méthode B). Cette dernière consiste à prévoir non seulement les enthalpies de sublimation mais également les enthalpies de formation en phase vapeur. Le détail de ces méthodes est fourni au paragraphe 3. de ce chapitre.

1.3.2. Exploitation des mesures d'enthalpie standard de formation en phases solide et liquide

Les grandeurs rassemblées dans le tableau II-29 permettent de calculer une nouvelle valeur de contribution à l'enthalpie standard de formation à l'état gazeux (groupe N-(N_I)(C_I)(H)). En effet, l'enthalpie de formation en phase vapeur du 1,2,4-triazole ayant été publiée, il est possible d'estimer la contribution du groupe de Benson suivant :

Groupe de Benson	Contribution à $\Delta_f H°_{g,m}$ ($kJ.mol^{-1}$)
$N-(N_I)(C_I)(H)$	0,8

Tableau III-3 : Détermination de la contribution à l'enthalpie standard de formation en phase gazeuse d'un nouveau groupe, grâce à l'analyse du 1,2,4-triazole.

En outre, les données expérimentales présentées au paragraphe 4. du chapitre II ont permis de déterminer deux nouvelles valeurs de contributions de groupes pour la phase gazeuse. Deux groupes et deux corrections de cycle connus interviennent dans la constitution des azido-alcanes présentés ci-avant : $C-(C)(H)_3$, $C-(C)_2(H)_2$, cyclopentane et cyclohexane. Il manque donc la contribution à l'enthalpie de formation à l'état gazeux du groupe $C-(N_3)(C)(H)_2$ qui peut être obtenue grâce aux enthalpies mesurées pour l'azidobutane et l'azidohexane, ainsi que la contribution du groupe $C-(N_3)(C)_2(H)$ qui peut, quant à elle, être évaluée au moyen des enthalpies de formation des deux azido-cycloalcanes étudiés.

Les valeurs présentées dans le tableau ci-dessous sont calculées grâce aux enthalpies de formation mentionnées au chapitre II et aux contributions de groupe établies au laboratoire (*cf.* annexe 4). L'incertitude associée à chaque contribution de groupe déterminée correspond à l'écart-type calculé sur la valeur moyenne obtenue.

Groupe de Benson	Contribution à $\Delta_f H°_{g,m}$ ($kJ.mol^{-1}$)
$C-(N_3)(C)(H)_2$	$312,4 \pm 0,8$
$C-(N_3)(C)_2(H)$	$320,8 \pm 1,7$

Tableau III-4 : Détermination de la contribution à l'enthalpie standard de formation en phase gazeuse de deux nouveaux groupes, grâce à l'analyse de plusieurs azido-alcanes.

2. Etablissement d'une banque d'enthalpies standard de sublimation et Détermination de contributions de groupes

2.1. Constitution d'une base de données

L'objectif de la démarche indirecte est d'évaluer des enthalpies de formation à l'état solide grâce à la détermination d'enthalpies de formation en phase gazeuse et d'enthalpies de changement d'état. Il est donc indispensable d'établir une banque tout à fait fiable de molécules pour lesquelles ces trois grandeurs sont connues (les enthalpies de formation à l'état solide devant être connue afin de vérifier les prévisions obtenues). La liste des composés ayant servi de base à la détermination des contributions de groupes à l'enthalpie de formation à l'état solide (*cf.* démarche directe, chapitre IV) a été employée pour ce travail.

Les enthalpies standard de formation en phases gazeuse et solide des molécules contenues dans la base de données constituée proviennent, pour la plupart, de l'ouvrage suivant :

Thermochemical Data of Organic Compounds
J.B. Pedley, R.D. Naylor et S.P. Kirby [163].

Ce recueil, très complet et faisant référence, comprend exclusivement des valeurs issues de données thermochimiques expérimentales de substances prises dans leur état standard, à T = 298,15 K. Pour ce qui est des solides, l'état standard correspond à l'état de la substance pure sous P = 101 325 Pa.

Les valeurs d'enthalpies standard de sublimation ont, quant à elles, été relevées dans la banque de données suivantes :

NIST (National Institute of Standards and Technology) **Chemistry WebBook** [75].

Par ailleurs, quelques enthalpies standard de formation en phase gazeuse proviennent également de cette source ou du CD-rom référencé comme suit :

NIST Standard Reference Database 85
NIST/TRC Table Database
WinTable, Version 2003 [164].

La base de données ainsi constituée est présentée dans le tableau ci-dessous. Elle contient la formule brute et le numéro CAS (si celui-ci est connu) de chacun des composés étudiés, l'enthalpie standard de sublimation et l'enthalpie standard de formation dans les phases gazeuse et solide. La liste complète contient des grandeurs thermochimiques sur cent quarante-cinq substances organiques. Sont présentés dans cette base de données quatre-vingt-quatorze enthalpies standard de formation à l'état gazeux, quatre-vingt-neuf enthalpies standard de sublimation ainsi que cent quarante-cinq enthalpies standard de formation en phase solide.

Un tableau similaire est présenté en annexe 5 dans lequel toutes les données sont exprimées en joules par gramme.

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{g,m}$ (litt.)	$\Delta H°_{sub}$ (litt.)	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
2-norbornène	C_7H_{10}	498-66-8	90,0 ± 3,2	38,0 ± 3,0	52,9 ± 3,2
norbornane	C_7H_{12}	279-23-2	-54,9 ± 1,1	40,1 ± 0,6	-95,1 ± 4,6
cubane	C_8H_8	277-10-1	622,1 ± 3,7	-	541,8 ± 3,3
bicyclo[2.2.2]oct-2-ène	C_8H_{12}	931-64-6	20,5 ± 0,9	43,8 ± 0,4	-23,3 ± 0,8
bicyclo[2.2.2]octane	C_8H_{14}	280-33-1	-99,0 ± 1,1	48,0 ± 2,0	-146,9 ± 0,9
2,2,3,3-tétraméthylbutane	C_8H_{18}	594-82-1	-225,6 ± 1,4	43,37 ± 0,21	-268,9 ± 1,4
7,7-diméthyl-bicyclo[2.2.1]heptane	C_9H_{16}	2034-53-9	-	-	-148,2 ± 1,6
bicyclo[3.3.1]nonane	C_9H_{16}	280-65-9	-127,5 ± 2,3	51,0 ± 2,0	-178,2 ± 0,9
azulène	$C_{10}H_8$	275-51-4	308	84,0 ± 20,0	212,3 ± 3,4
naphtalène	$C_{10}H_8$	91-20-3	150,3 ± 1,5	71,0 ± 5,0	77,9 ± 1,2
1,2,4,5-tétraméthylbenzène	$C_{10}H_{14}$	95-93-2	-47,1 ± 1,9	71,7 ± 0,3	-119,9 ± 1,3
3a,4,5,6,7,7a-hexahydro-4,7-méthanoindène	$C_{10}H_{14}$	4488-57-7	-	-	-23,9 ± 5,9
octahydro-4,7-méthano-1H-indène	$C_{10}H_{16}$	6004-38-2	-60,0 ± 2,8	53,0 ± 1,0	-112,9 ± 2,6
adamantane	$C_{10}H_{16}$	281-23-2	-134,6 ± 2,3	59,0 ± 3,0	-194,1 ± 2,2
protoadamantane	$C_{10}H_{16}$	53130-19-1	-85,9 ± 2,5	64,85	-150,8 ± 1,8
camphène	$C_{10}H_{16}$	79-92-5	-28,6 ± 2,2	46,86 ± 0,54	-75,4 ± 2,1
bicyclo[3.3.2]décane	$C_{10}H_{18}$	283-50-1	-106,1 ± 7,4	58,0 ± 2,0	-164,2 ± 7,1
2-méthylnaphtalène	$C_{11}H_{10}$	91-57-6	106,7 ± 1,8	65,69 ± 0,84	44,9 ± 1,5
pentaméthylbenzène	$C_{11}H_{16}$	700-12-9	-67,2 ± 2,2	71,6 ± 0,1	-133,6 ± 1,1
1-méthyladamantane	$C_{11}H_{18}$	768-91-2	-171,6 ± 2,8	67,57	-239,3 ± 2,6
2-méthyladamantane	$C_{11}H_{18}$	700-56-1	-151,7 ± 4,2	67,53	-219,6 ± 3,8
bicyclo[3.3.3]undécane	$C_{11}H_{20}$	29415-95-0	-89,0 ± 1,9	63,60 ± 0,84	-152,5 ± 1,7
biphénylène	$C_{12}H_8$	259-79-0	420,4 ± 1,9	90,0 ± 30,0	334,0 ± 3,3
acénaphtylène	$C_{12}H_8$	208-96-8	259,7 ± 4,6	73,0 ± 0,4	186,7 ± 4,6
biphényle	$C_{12}H_{10}$	92-52-4	182,0 ± 0,7	81,0 ± 3,0	99,4 ± 1,8
acénaphtène	$C_{12}H_{10}$	83-32-9	156,0 ± 3,1	83,2	70,3 ± 2,6
1,8-diméthylnaphtalène	$C_{12}H_{12}$	569-41-5	108,7 ± 1,5	82,7 ± 0,3	25,9 ± 1,5
2,3-diméthylnaphtalène	$C_{12}H_{12}$	581-40-8	76,1 ± 2,0	82,2 ± 0,4	-2,3 ± 1,0
2,6-diméthylnaphtalène	$C_{12}H_{12}$	581-42-0	-	-	-5,7 ± 1,7
2,7-diméthylnaphtalène	$C_{12}H_{12}$	582-16-1	79,5 ± 0,6	-	-5,4 ± 1,0
hexacyclo[6.2.1.1^{3,6}.0^{2,7}.0^{4,10}.0^{5,9}]dodécane	$C_{12}H_{14}$	704-02-9	-	-	51,1 ± 1,3
hexaméthylbenzène	$C_{12}H_{18}$	87-85-4	-77,4 ± 2,5	80,0 ± 8,0	-161,5 ± 1,5
(E,E,E)-1,5,9-cyclododécatriène	$C_{12}H_{18}$	676-22-2	101,3 ± 4,3	74,68	26,6 ± 4,2
2,2,7,7-tétraméthylocta-3,5-diyne	$C_{12}H_{18}$	6130-98-9	-	-	156,1 ± 1,8
2,2-diméthyladamantane	$C_{12}H_{20}$	19740-34-2	-182,7 ± 2,8	74,0 ± 1,0	-256,3 ± 2,6
1,3-diméthyladamantane	$C_{12}H_{20}$	702-79-4	-218,7 ± 2,8	68,0 ± 1,0	-286,4 ± 2,6
cyclododécane	$C_{12}H_{24}$	294-62-2	-230,2 ± 2,2	76,4 ± 1,7	-306,6 ± 1,4
4-méthyl-1,1'-biphényle	$C_{13}H_{12}$	644-08-6	138,2 ± 2,9	80,2 ± 1,4	55,4 ± 7,1
diphénylméthane	$C_{13}H_{12}$	101-81-5	164,8 ± 1,6	82,0 ± 8,0	71,5 ± 1,8
1,3,5-triméthyladamantane	$C_{13}H_{22}$	707-35-7	-254,5 ± 4,4	78,0 ± 1,0	-332,3 ± 4,2
diphényléthyne	$C_{14}H_{10}$	501-65-5	385,0 ± 2,7	-	312,4 ± 1,1
anthracène	$C_{14}H_{10}$	120-12-7	230,9 ± 2,2	98,0 ± 10,0	129,2 ± 1,8
phénantrène	$C_{14}H_{10}$	85-01-8	201,2 ± 4,7	91,0 ± 3,0	116,2 ± 1,3
9,10-dihydro-anthracène	$C_{14}H_{12}$	613-31-0	159,7 ± 4,4	93,9	66,4 ± 1,3
(E)-stilbène	$C_{14}H_{12}$	103-30-0	236,1 ± 1,3	100,7 ± 0,4	136,9 ± 1,2
4,4'-diméthylbiphényle	$C_{14}H_{14}$	613-33-2	111,3 ± 3,6	95,1 ± 2,0	14,1 ± 7,5
bibenzyle	$C_{14}H_{14}$	103-29-7	142,9 ± 1,3	91,38 ± 0,46	51,5 ± 1,2
1,4,5,8-tétraméthylnaphtalène	$C_{14}H_{16}$	2717-39-7	81,6 ± 3,2	99,8 ± 1,4	-18,2 ± 2,8
1,2,3,4,5,6,7,8-octahydro-anthracène	$C_{14}H_{18}$	1079-71-6	-37,2 ± 3,2	82,0 ± 1,0	-119,5 ± 2,9
1,8-cyclotétradécadiyne	$C_{14}H_{20}$	1540-80-3	313,8 ± 3,6	-	147,8 ± 1,8
diadamantane	$C_{14}H_{20}$	2292-79-7	-145,9 ± 2,4	95,94	-241,8 ± 2,6
1,1,4,6,7-pentaméthylindane	$C_{14}H_{20}$	6682-67-3	-	-	-175,1 ± 2,1
trans-anti-trans-tétradécahydro-anthracène	$C_{14}H_{24}$	28071-99-0	-220,6 ± 4,0	72,7 ± 3,3	-293,3 ± 2,3
1,3,5,7-tétraméthyladamantane	$C_{14}H_{24}$	1687-36-1	-283,4 ± 6,9	81,13	-365,8 ± 6,9
cyclotétradécane	$C_{14}H_{28}$	295-17-0	-239,2 ± 2,3	80,75	-374,0 ± 1,8
cis-1,4-Di-tert-butyl-cyclohexane	$C_{14}H_{28}$	4789-34-8	-	-	-374,1 ± 1,6
trans-1,4-Di-tert-butyl-cyclohexane	$C_{14}H_{28}$	4789-35-9	-	-	-401,8 ± 1,0
1,4-diméthyl-7-(1-méthyléthyl)-azulène	$C_{15}H_{18}$	489-84-9	-	-	61,1 ± 3,8
4-méthyldiadamantane	$C_{15}H_{22}$	30545-28-9	-182,1 ± 1,3	79,41	-261,5 ± 0,9
3-méthyldiadamantane	$C_{15}H_{22}$	28375-86-2	-157,3 ± 2,3	103,1	-260,4 ± 2,1
1-méthyldiadamantane	$C_{15}H_{22}$	26460-76-4	-166,7 ± 3,3	80,63	-247,4 ± 3,3

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{g,m}$ (litt.)	$\Delta H°_{sub}$ (litt.)	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
cyclopentadécane	$C_{15}H_{30}$	295-48-7	-301,4 ± 1,7	74,6 ± 0,4	-376,1 ± 1,7
1,1'-(1,3-butadiyne-1,4-diyl)bis-benzène	$C_{16}H_{10}$	886-66-8	-	-	518,4 ± 1,1
fluoranthène	$C_{16}H_{10}$	206-44-0	289,0 ± 1,0	98,3	189,9 ± 0,6
pyrène	$C_{16}H_{10}$	129-00-0	225,7 ± 1,2	97,9	125,5 ± 1,1
bis-(2-méthylphényl)-acétylène	$C_{16}H_{14}$	5294-03-1	-	-	234,8 ± 2,1
Di-p-tolylacétylène	$C_{16}H_{14}$	2789-88-0	-	-	225,8 ± 2,1
(Z,Z)-1,4-diphénylbutadiène	$C_{16}H_{14}$	5807-76-1	-	-	198,8 ± 2,1
(E,E)-1,4-diphénylbutadiène	$C_{16}H_{14}$	538-81-8	-	-	178,8 ± 1,1
2,7-diméthylphénantrène	$C_{16}H_{14}$	1576-69-8	143,1 ± 2,0	106,7 ± 0,8	36,4 ± 1,8
4,5-diméthylphénantrène	$C_{16}H_{14}$	3674-69-9	193,6 ± 6,0	85,7	89,0 ± 5,9
9,10-diméthylphénantrène	$C_{16}H_{14}$	604-83-1	167,1 ± 8,5	119,5 ± 1,3	47,6 ± 8,4
1,1-Di-o-tolyléthylène	$C_{16}H_{16}$	2919-19-9	-	-	89,0 ± 2,1
cis-1,2-Di-o-tolyléthène	$C_{16}H_{16}$	10311-74-7	-	-	85,9 ± 2,1
trans-1,2-Di-o-tolyléthène	$C_{16}H_{16}$	36888-18-3	-	-	74,9 ± 2,1
1,1-Di-p-tolyléthylène	$C_{16}H_{16}$	2919-20-2	-	-	85,9 ± 2,1
(Z)-1,2-bis(4-méthylphényl)éthène	$C_{16}H_{16}$	2510-76-1	-	-	97,9 ± 2,1
(E)-1,2-bis(4-méthylphényl)éthène	$C_{16}H_{16}$	18869-29-9	-	-	57,9 ± 2,1
[2.2]métacyclophane	$C_{16}H_{16}$	2319-97-3	170,5 ± 6,5	92,0 ± 2,0	78,5 ± 6,3
[2.2]paracyclophane	$C_{16}H_{16}$	1633-22-3	244,7 ± 2,1	96,2 ± 4,2	145,1 ± 1,0
[2.2]métaparacyclophane	$C_{16}H_{16}$	5385-36-4	218,4 ± 1,7	87,5 ± 0,9	130,9 ± 1,4
[16]annulène	$C_{16}H_{16}$	3332-38-5	-	-	547,5 ± 11,7
1,2-Di-o-tolyléthane	$C_{16}H_{18}$	952-80-7	-	-	-40,0 ± 2,1
1,2-Di-p-tolyléthane	$C_{16}H_{18}$	538-39-6	-	-	-42,1 ± 2,1
1,4-diphénylbutane	$C_{16}H_{18}$	1083-56-3	-	-	-9,9 ± 2,1
tricyclo[8.2.2.2^{4,7}]hexadécane	$C_{16}H_{28}$	283-68-1	-152,4 ± 13,0	92,0 ± 2,0	-244,1 ± 13,0
cyclohexadécane	$C_{16}H_{32}$	295-65-8	-321,7 ± 2,0	81,8 ± 0,4	-403,4 ± 2,0
cycloheptadécane	$C_{17}H_{34}$	295-97-6	-364,3 ± 2,2	66,1 ± 0,6	-430,4 ± 2,1
triphénylène	$C_{18}H_{12}$	217-59-4	274,2 ± 4,3	114,5	151,8 ± 1,3
chrysène	$C_{18}H_{12}$	218-01-9	269,8 ± 6,7	118,8	145,3 ± 2,1
benzo[c]phénantrène	$C_{18}H_{12}$	195-19-7	291,2 ± 4,6	106,0	184,9 ± 2,0
benzo[a]anthracène	$C_{18}H_{12}$	56-55-3	293,0 ± 4,3	115,5	170,8 ± 2,4
naphtacène	$C_{18}H_{12}$	92-24-0	291,4 ± 9,4	127,0 ± 20,0	158,8 ± 1,5
5,12-dihydro-naphtacène	$C_{18}H_{14}$	959-02-4	222,3 ± 4,4	116,0	106,4 ± 1,5
[18]annulène	$C_{18}H_{18}$	2040-73-5	280,0 ± 25,0	120,0 ± 8,0	163,4 ± 16,7
3,4,5,6-tétraméthylphénantrène	$C_{18}H_{18}$	7343-06-8	160,0 ± 4,6	133,5 ± 3,8	23,4 ± 4,9
2,4,5,7-tétraméthylphénantrène	$C_{18}H_{18}$	7396-38-5	130,0 ± 4,0	114,2 ± 1,7	12,2 ± 6,2
[3.3]paracyclophane	$C_{18}H_{20}$	2913-24-8	129,6 ± 2,1	103,3 ± 1,0	26,3 ± 1,9
1,2,3,4,5,6,7,8,9,10,11,12-dodécahydro-triphénylène	$C_{18}H_{24}$	1610-39-5	-	-	-193,9 ± 1,5
1,2,4-Tri-tert-butylbenzène	$C_{18}H_{30}$	1459-11-6	-	-	-251,6 ± 3,4
1,3,5-Tri-tert-butylbenzène	$C_{18}H_{30}$	1460-02-2	-	79,7 ± 0,4	-321,9 ± 3,8
octadécane	$C_{18}H_{38}$	593-45-3	-414,6 ± 2,7	152,7	-567,4 ± 4,8
triphénylméthane	$C_{19}H_{16}$	519-73-3	271,2 ± 1,4	105,0 ± 0,8	171,2 ± 1,4
2,2',4,4',5,5'-hexaméthyldiphénylméthane	$C_{19}H_{24}$	4957-16-8	-	-	-154,4 ± 1,8
pérylène	$C_{20}H_{12}$	198-55-0	324,0	123,2	182,8 ± 0,8
9,10-dihydro-9,10[1',2']benzénoanthracène	$C_{20}H_{14}$	477-75-8	321,7 ± 12,6	105,0 ± 13,0	217,1 ± 1,3
triphényléthylène	$C_{20}H_{16}$	58-72-0	-	-	233,4 ± 1,8
5,8-diméthylbenzo[c]phénantrène	$C_{20}H_{16}$	54986-63-9	-	-	108,2 ± 5,4
1,12-diméthylbenzo[c]phénantrène	$C_{20}H_{16}$	4076-43-1	-	-	154,5 ± 3,4
3,9-diméthylbenz[a]anthracène	$C_{20}H_{16}$	316-51-8	189,0 ± 3,0	113,0 ± 2,0	76,2 ± 2,1
1,12-diméthylbenz[a]anthracène	$C_{20}H_{16}$	313-74-6	251,5 ± 3,9	112,5 ± 3,3	139,0 ± 2,1
9,10-diméthyl-1,2-benzanthracène	$C_{20}H_{16}$	57-97-6	277,7 ± 4,4	134,0	143,8 ± 4,2
5,6-diméthylchrysène	$C_{20}H_{16}$	3697-27-6	262,4 ± 6,4	130,0 ± 1,3	132,5 ± 6,3
1,1,1-triphényléthane	$C_{20}H_{18}$	5271-39-6	251,3	-	157,2 ± 2,1
1,1,2-triphényléthane	$C_{20}H_{18}$	1520-42-9	255,3	-	130,2 ± 2,1
1-(2-naphtalénylméthyl)naphtalène	$C_{21}H_{16}$	611-48-3	-	-	162,0 ± 1,8
1',2',3',4'-tétrahydro-1,2-dinaphtylméthane	$C_{21}H_{20}$	56818-06-5	-	-	44,1 ± 1,7
[1.8]paracyclophane	$C_{21}H_{26}$	6169-94-4	29,0 ± 7,4	110,9 ± 2,1	-81,9 ± 7,2
1,2,4,5-Tétra-tert-butylbenzène	$C_{22}H_{38}$	796-97-4	-	-	-297,9 ± 9,7
tris(2-méthylphényl)éthylène	$C_{23}H_{22}$	62155-47-9	-	-	125,2 ± 3,1
tris(4-méthylphényl)éthylène	$C_{23}H_{22}$	6629-83-0	-	-	121,2 ± 3,1
1,1,2-Tri-o-tolyléthane	$C_{23}H_{24}$		-	-	24,4 ± 3,1

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{g,m}$ (litt.)	$\Delta H°_{sub}$ (litt.)	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
1,1,2-Tri-p-tolyléthane	$C_{23}H_{24}$	27497-47-8	-	-	16,4 ± 3,1
1,3,5-triphénylbenzène	$C_{24}H_{18}$	612-71-5	367,5 ± 6,8	152,0 ± 0,3	224,6 ± 5,4
[6.6]paracyclophane	$C_{24}H_{32}$	4384-23-0	-77,7 ± 9,9	115,1 ± 2,1	-192,7 ± 9,7
tétraphénylméthane	$C_{25}H_{20}$	630-76-2	397,8 ± 4,9	151,0 ± 4,2	247,1 ± 2,6
1,3,6-triphénylcycloheptatriène	$C_{25}H_{20}$	17760-68-8	-	-	273,9 ± 3,0
9,10-diphénylanthracène	$C_{26}H_{18}$	1499-10-1	465,6 ± 5,1	137,5	308,7 ± 3,0
tétraphényléthylène	$C_{26}H_{20}$	632-51-9	-	-	311,5 ± 1,4
1,1,1,2-tétraphényléthane	$C_{26}H_{22}$	2294-94-2	365,0 ± 3,0	132,6 ± 2,1	223,0 ± 1,4
1,1,2,2-tétraphényléthane	$C_{26}H_{22}$	632-50-8	357,0 ± 5,4	136,8 ± 2,9	216,0 ± 1,4
3-phényléicosane	$C_{26}H_{46}$	2400-02-4	-	-	-548,8 ± 6,3
9,9'-bianthracène	$C_{28}H_{18}$	1055-23-8	454,3 ± 5,3	128,4 ± 0,2	326,2 ± 3,2
9,9'-biphénanthryl	$C_{28}H_{18}$	20532-03-0	-	151,5	212,8 ± 2,8
1,1,4,4-tétraphényl-1,3-butadiène	$C_{28}H_{22}$	1450-63-1	-	-	329,9 ± 3,1
1,2,3,4-tétraphényl-1,3-butadiène	$C_{28}H_{22}$	806-71-3	-	-	358,9 ± 3,1
1,1,4,4-tétraphénylbutane	$C_{28}H_{26}$	1483-64-3	-	-	163,3 ± 4,1
tétra-p-tolyléthène	$C_{30}H_{28}$	5831-43-6	-	-	171,5 ± 4,1
1,1,2,2-Tétra-p-tolyléthane	$C_{30}H_{30}$	40673-57-2	-	-	73,6 ± 3,1
cyclotriacontane	$C_{30}H_{60}$	297-35-8	-	-	-895,7 ± 28,9
13-phénylpentacosane	$C_{31}H_{56}$	6006-90-2	-	-	-687,0 ± 7,6
pentaphényléthane	$C_{32}H_{26}$	19112-42-6	-	-	381,2 ± 3,1
dotriacontane	$C_{32}H_{66}$	544-85-4	-696,6 ± 9,2	271,1 ± 2,5	-968,3 ± 9,3
hexaphényléthane	$C_{38}H_{30}$	17854-07-8	-	-	511,8 ± 3,7
5,6,11,12-tétraphénylnaphtacène	$C_{42}H_{28}$	517-51-1	780,9 ± 21,8	-	620,3 ± 21,3

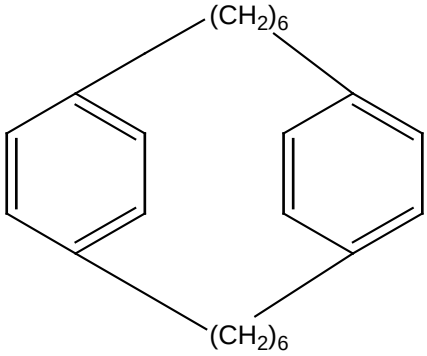
Tableau III-5 : Banque de données thermochimiques concernant les 145 molécules C_xH_y étudiées dans le cadre de la démarche indirecte.

2.2. Détermination des contributions de groupes à l'enthalpie standard de sublimation

2.2.1. Procédure

Une fois que le répertoire de molécules a été établi, chaque composé a été découpé en groupes de deuxième ordre. Les valeurs de contributions de groupes relatives à la sublimation étant inconnues, chaque groupe s'est vu attribuer une valeur de contribution initiale, égale à l'unité. Le calcul des contributions de groupes a ensuite été réalisé par minimisation de l'écart résiduel moyen. Rappelons que le résidu est égal à la valeur d'enthalpie issue de la littérature moins celle qui a été calculée.

Les molécules pour lesquelles un résidu non négligeable apparaissait ont tout particulièrement été étudiées. Une correction de structure ou une interaction à longue distance ont alors été recherchées. Dans le cas de l'évaluation des contributions de groupes à l'enthalpie standard de sublimation, seule l'addition d'une correction a été jugée nécessaire ; il s'agit du [6.6]paracyclophane :



[6.6]paracyclophane
[4384-23-0]

Toutes les molécules dont l'enthalpie standard de sublimation est connue et présentée dans le tableau III-5 ont été utilisées afin d'évaluer les contributions de groupes correspondantes, soit quatre-vingt-neuf composés au total.

2.2.2. Résultats

La banque de données constituée a permis de déterminer cinquante-neuf contributions de groupes à partir des quatre-vingt-neuf valeurs d'enthalpies standard de sublimation de molécules ayant une formule générale C_xH_y. Les tableaux III-6 à III-8 présentent l'ensemble des valeurs de contributions de groupes calculées (vingt-huit groupes de deuxième ordre, vingt-six corrections de structure et cinq interactions à longue distance) ainsi que le nombre de molécules ayant été utilisées afin de déterminer les contributions ci-dessous. A noter que si ces dernières sont évaluées grâce à un nombre inférieur à trois composés, ces contributions sont moins précises que les autres en raison d'une détermination moins fiable.

Groupe	**Contribution** ($kJ.mol^{-1}$)	**Nombre de composés**
$C-(C)(H)_3$	19,7	14
$C-(C)_2(H)_2$	7,3	34
$C-(C)_3(H)$	1,8	20
$C-(C)_4$	-13,8	9
$C-(C_d)(C)(H)_2$	4,2	1
$C-(C_d)(C)_2(H)$	-1,2	3
$C-(C_d)(C)_3$	-5,0	1
$C-(C_B)(H)_3$	24,3	18
$C-(C_B)(C)(H)_2$	14,1	10
$C-(C_B)(C)_3$	-31,4	1
$C-(C_B)_2(H)_2$	18,4	4
$C-(C_B)_2(C)(H)$	-1,5	1
$C-(C_B)_3(H)$	-5,5	2
$C-(C_B)_3(C)$	-21,3	1
$C-(C_B)_4$	11,3	1
$C_d-(H)_2$	-5,0	1

Groupe	Contribution ($kJ.mol^{-1}$)	Nombre de composés
C_d-(C)(H)	8,0	3
C_d-$(C)_2$	-5,0	1
C_d-(C_d)(H)	6,7	2
C_d-$(C_d)_2$	1,4	1
C_d-(C_B)(H)	3,4	2
C_B-(H)	9,0	54
C_B-(C)	-10,2	36
C_B-(C_d)	3,4	2
C_B-(C_B)	-4,4	9
C_{BF}-$(C_{BF})(C_B)_2$	-0,6	29
C_{BF}-$(C_{BF})_2(C_B)$	2,1	16
C_{BF}-$(C_{BF})_3$	4,4	3

Tableau III-6 : Contributions de groupes de deuxième ordre C-H permettant de calculer des enthalpies standard de sublimation, à T = 298,15 K.

Correction de structure	Contribution ($kJ.mol^{-1}$)	Nombre de composés
cyclopentane	1,9	2
cyclopentadiène	26,6	2
cyclohexane	3,4	14
cyclohexène	9,5	1
1,4-cyclohexadiène	23,9	3
cycloheptane	5,2	2
1,3,5-cycloheptatriène	1,2	1
cyclooctane	-14,3	1
cyclododécane	-11,0	1
1,5,9-cyclododécatriène	1,5	1
cyclotétradécane	-21,2	1
cyclopentadécane	-34,6	1
cyclohexadécane	-34,7	1
cycloheptadécane	-57,7	1
bicyclo[2.2.1]heptane	0,0	3
bicyclo[2.2.1]hept-2-ène	2,7	1
bicyclo[2.2.2]octane	0,6	1
bicyclo[2.2.2]octène	1,2	1
bicyclo[3.3.3]undécane	-5,6	1
biphénylène	35,2	1
[2.2]métacyclophane	4,0	1
[2.2]métaparacyclophane	-0,5	1
[6.6]paracyclophane	-31,2	1
acénaphtène	22,2	1
acénaphtylène	6,4	1

Correction de structure	Contribution ($kJ.mol^{-1}$)	Nombre de composés
benzo[c]phénantrène	-9,2	1

Tableau III-7 : Corrections de structure C-H permettant de calculer des enthalpies standard de sublimation, à T = 298,15 K.

Interaction à longue distance	Contribution ($kJ.mol^{-1}$)	Nombre de composés
interaction gauche	-7,9	1
structure but-2-ène	-3,1	1
interaction ortho (non polaire/non polaire)	-0,2	7
phényl symétrique	1,9	3
interaction 1,8-diméthylnaphtalène	3,5	2

Tableau III-8 : Interactions à longue distance permettant de calculer des enthalpies standard de sublimation, à T = 298,15 K.

Les représentations (*i.e.* calculs des enthalpies de sublimation des composés ayant été utilisés pour la détermination des valeurs de contributions de groupes) des quatre-vingt-neuf enthalpies standard de sublimation sont toutes rassemblées dans le tableau ci-dessous. Ce dernier contient la formule brute ainsi que le numéro CAS de chacun des composés étudiés, les enthalpies standard de sublimation mesurée et représentée et enfin, l'écart entre ces deux dernières valeurs. L'annexe 6 présente un tableau similaire où les résultats sont tous exprimés en joules par gramme.

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta H°_{sub}$ (litt.)	$\Delta H°_{sub}$ (calc.)	Résidu
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
2-norbornène	C_7H_{10}	498-66-8	38,0	38,0	0,0
norbornane	C_7H_{12}	279-23-2	40,1	40,1	0,0
bicyclo[2.2.2]oct-2-ène	C_8H_{12}	931-64-6	43,8	43,8	0,0
bicyclo[2.2.2]octane	C_8H_{14}	280-33-1	48,0	48,0	0,0
2,2,3,3-tétraméthylbutane	C_8H_{18}	594-82-1	43,4	43,4	0,0
bicyclo[3.3.1]nonane	C_9H_{16}	280-65-9	51,0	54,7	-3,7
azulène	$C_{10}H_8$	275-51-4	84,0	84,0	0,0
naphtalène	$C_{10}H_8$	91-20-3	71,0	71,1	-0,1
1,2,4,5-tétraméthylbenzène	$C_{10}H_{14}$	95-93-2	71,7	76,2	-4,5
octahydro-4,7-méthano-1H-indène	$C_{10}H_{16}$	6004-38-2	53,0	53,0	0,0
adamantane	$C_{10}H_{16}$	281-23-2	59,0	64,6	-5,6
protoadamantane	$C_{10}H_{16}$	53130-19-1	64,9	64,9	0,0
camphène	$C_{10}H_{16}$	79-92-5	46,9	46,9	0,0
bicyclo[3.3.2]décane	$C_{10}H_{18}$	283-50-1	58,0	58,0	0,0
2-méthylnaphtalène	$C_{11}H_{10}$	91-57-6	65,7	76,2	-10,5
pentaméthylbenzène	$C_{11}H_{16}$	700-12-9	71,6	79,1	-7,5
1-méthyladamantane	$C_{11}H_{18}$	768-91-2	67,6	68,6	-1,1
2-méthyladamantane	$C_{11}H_{18}$	700-56-1	67,5	78,8	-11,3
bicyclo[3.3.3]undécane	$C_{11}H_{20}$	29415-95-0	63,6	63,6	0,0
biphénylène	$C_{12}H_8$	259-79-0	90,0	90,0	0,0
acénaphtylène	$C_{12}H_8$	208-96-8	73,0	73,0	0,0
biphényle	$C_{12}H_{10}$	92-52-4	81,0	81,5	-0,5
acénaphtène	$C_{12}H_{10}$	83-32-9	83,2	83,2	0,0
1,8-diméthylnaphtalène	$C_{12}H_{12}$	569-41-5	82,7	84,9	-2,2
2,3-diméthylnaphtalène	$C_{12}H_{12}$	581-40-8	82,2	81,2	1,0
hexaméthylbenzène	$C_{12}H_{18}$	87-85-4	80,0	83,8	-3,8
(E,E,E)-1,5,9-cyclododécatriène	$C_{12}H_{18}$	676-22-2	74,7	74,7	0,0
2,2-diméthyladamantane	$C_{12}H_{20}$	19740-34-2	74,0	82,9	-8,9
1,3-diméthyladamantane	$C_{12}H_{20}$	702-79-4	68,0	72,7	-4,7
cyclododécane	$C_{12}H_{24}$	294-62-2	76,4	76,4	0,0
4-méthyl-1,1'-biphényle	$C_{13}H_{12}$	644-08-6	80,2	86,7	-6,5
diphénylméthane	$C_{13}H_{12}$	101-81-5	82,0	88,3	-6,3
1,3,5-triméthyladamantane	$C_{13}H_{22}$	707-35-7	78,0	76,8	1,2
anthracène	$C_{14}H_{10}$	120-12-7	98,0	88,0	10,0
phénantrène	$C_{14}H_{10}$	85-01-8	91,0	93,2	-2,2
9,10-dihydro-anthracène	$C_{14}H_{12}$	613-31-0	93,9	92,2	1,7
(E)-stilbène	$C_{14}H_{12}$	103-30-0	100,7	100,7	0,0
4,4'-diméthylbiphényle	$C_{14}H_{14}$	613-33-2	95,1	91,8	3,3
bibenzyle	$C_{14}H_{14}$	103-29-7	91,4	98,2	-6,8
1,4,5,8-tétraméthylnaphtalène	$C_{14}H_{16}$	2717-39-7	99,8	98,7	1,1
1,2,3,4,5,6,7,8-octahydro-anthracène	$C_{14}H_{18}$	1079-71-6	82,0	82,0	0,0
diadamantane	$C_{14}H_{20}$	2292-79-7	95,9	78,7	17,2
trans-anti-trans-tétradécahydro-anthracène	$C_{14}H_{24}$	28071-99-0	72,7	90,3	-17,6
1,3,5,7-tétraméthyladamantane	$C_{14}H_{24}$	1687-36-1	81,1	80,9	0,3
cyclotétradécane	$C_{14}H_{28}$	295-17-0	80,8	80,8	0,0
4-méthyldiadamantane	$C_{15}H_{22}$	30545-28-9	79,4	82,8	-3,4
3-méthyldiadamantane	$C_{15}H_{22}$	28375-86-2	103,1	82,8	20,3
1-méthyldiadamantane	$C_{15}H_{22}$	26460-76-4	80,6	82,8	-2,1
cyclopentadécane	$C_{15}H_{30}$	295-48-7	74,6	74,6	0,0
fluoranthène	$C_{16}H_{10}$	206-44-0	98,3	98,3	0,0
pyrène	$C_{16}H_{10}$	129-00-0	97,9	96,8	1,1

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta H°_{sub}$ (litt.)	$\Delta H°_{sub}$ (calc.)	Résidu
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
2,7-diméthylphénantrène	$C_{16}H_{14}$	1576-69-8	106,7	103,5	3,2
4,5-diméthylphénantrène	$C_{16}H_{14}$	3674-69-9	85,7	103,5	-17,8
9,10-diméthylphénantrène	$C_{16}H_{14}$	604-83-1	119,5	103,3	16,2
[2.2]métacyclophane	$C_{16}H_{16}$	2319-97-3	92,0	92,0	0,0
[2.2]paracyclophane	$C_{16}H_{16}$	1633-22-3	96,2	88,0	8,2
[2.2]métaparacyclophane	$C_{16}H_{16}$	5385-36-4	87,5	87,5	0,0
tricyclo[8.2.2.2^{4,7}]hexadécane	$C_{16}H_{28}$	283-68-1	92,0	101,5	-9,5
cyclohexadécane	$C_{16}H_{32}$	295-65-8	81,8	81,8	0,0
cycloheptadécane	$C_{17}H_{34}$	295-97-6	66,1	66,1	0,0
triphénylène	$C_{18}H_{12}$	217-59-4	114,5	120,7	-6,2
chrysène	$C_{18}H_{12}$	218-01-9	118,8	115,4	3,4
benzo[c]phénantrène	$C_{18}H_{12}$	195-19-7	106,0	106,0	0,0
benzo[a]anthracène	$C_{18}H_{12}$	56-55-3	115,5	110,2	5,3
naphtacène	$C_{18}H_{12}$	92-24-0	127,0	104,9	22,1
5,12-dihydro-naphtacène	$C_{18}H_{14}$	959-02-4	116,0	109,1	6,9
[18]annulène	$C_{18}H_{18}$	2040-73-5	120,0	120,0	0,0
3,4,5,6-tétraméthylphénantrène	$C_{18}H_{18}$	7343-06-8	133,5	113,4	20,1
2,4,5,7-tétraméthylphénantrène	$C_{18}H_{18}$	7396-38-5	114,2	113,8	0,4
[3.3]paracyclophane	$C_{18}H_{20}$	2913-24-8	103,3	102,6	0,7
1,3,5-Tri-tert-butylbenzène	$C_{18}H_{30}$	1460-02-2	79,7	79,7	0,0
octadécane	$C_{18}H_{38}$	593-45-3	152,7	155,9	-3,2
triphénylméthane	$C_{19}H_{16}$	519-73-3	105,0	99,3	5,7
pérylène	$C_{20}H_{12}$	198-55-0	123,2	124,3	-1,1
9,10-dihydro-9,10[1',2']benzénoanthracène	$C_{20}H_{14}$	477-75-8	105,0	107,9	-2,9
3,9-diméthylbenz[a]anthracène	$C_{20}H_{16}$	316-51-8	113,0	120,5	-7,5
1,12-diméthylbenz[a]anthracène	$C_{20}H_{16}$	313-74-6	112,5	120,5	-8,0
9,10-diméthyl-1,2-benzanthracène	$C_{20}H_{16}$	57-97-6	134,0	122,3	11,7
5,6-diméthylchrysène	$C_{20}H_{16}$	3697-27-6	130,0	125,5	4,5
[1.8]paracyclophane	$C_{21}H_{26}$	6169-94-4	110,9	121,8	-10,9
1,3,5-triphénylbenzène	$C_{24}H_{18}$	612-71-5	152,0	136,3	15,7
[6.6]paracyclophane	$C_{24}H_{32}$	4384-23-0	115,1	115,1	0,0
tétraphénylméthane	$C_{25}H_{20}$	630-76-2	151,0	151,0	0,0
9,10-diphénylanthracène	$C_{26}H_{18}$	1499-10-1	137,5	144,7	-7,2
1,1,1,2-tétraphényléthane	$C_{26}H_{22}$	2294-94-2	132,6	132,6	0,0
1,1,2,2-tétraphényléthane	$C_{26}H_{22}$	632-50-8	136,8	136,8	0,0
9,9'-bianthracène	$C_{28}H_{18}$	1055-23-8	128,4	149,3	-20,9
9,9'-biphénanthryl	$C_{28}H_{18}$	20532-03-0	151,5	159,7	-8,2
dotriacontane	$C_{32}H_{66}$	544-85-4	271,1	257,8	13,3

Tableau III-9 : Représentations des enthalpies standard de sublimation de 89 molécules C_xH_y, à T = 298,15 K.

Les résidus moyens et les moyennes quadratiques obtenus sont présentés dans le tableau III-10. Rappelons que le résidu moyen vaut $\frac{\sum_i \left|\left(x_i(litt.) - x_i(calc.)\right)\right|}{n_i}$; il s'agit donc de la moyenne de la valeur absolue des résidus. La moyenne quadratique est quant à elle obtenue de la manière suivante : $\sqrt{\frac{\sum_i \left(x_i(litt.) - x_i(calc.)\right)^2}{n_i}}$. Elle permet d'amplifier l'influence des écarts absolus les plus élevés par rapport à l'écart moyen calculé. Les écarts extrêmes

observés ainsi que les composés correspondant à ces écarts sont regroupés dans le tableau III-11. L'ensemble de ces résultats est à la fois exprimé en kilojoules par mole et en joules par gramme.

Unité	Résidu moyen	Moyenne quadratique
$kJ.mol^{-1}$	4,6	7,5
$J.g^{-1}$	21,6	34,9

Tableau III-10 : Résidus moyens et moyennes quadratiques obtenus sur la représentation des enthalpies standard de sublimation de 89 molécules C_xH_y.

Unité	Ecart négatif le plus élevé (composé)	Ecart positif le plus élevé (composé)
$kJ.mol^{-1}$	-20,9 (9,9'-bianthracène)	22,1 (naphtacène)
$J.g^{-1}$	-91,5 (trans-anti-trans-tétradécahydro-anthracène)	100,4 (3-méthyldiadamantane)

Tableau III-11 : Ecarts extrêmes entre les enthalpies standard de sublimation mesurées et représentées.

Le graphe ci-dessous présente une évaluation globale des résultats de représentation des enthalpies de changement d'état étudiées. A noter que les incertitudes concernant les valeurs expérimentales d'enthalpies correspondent aux incertitudes indiquées dans la littérature (*cf.* tableau III-5).

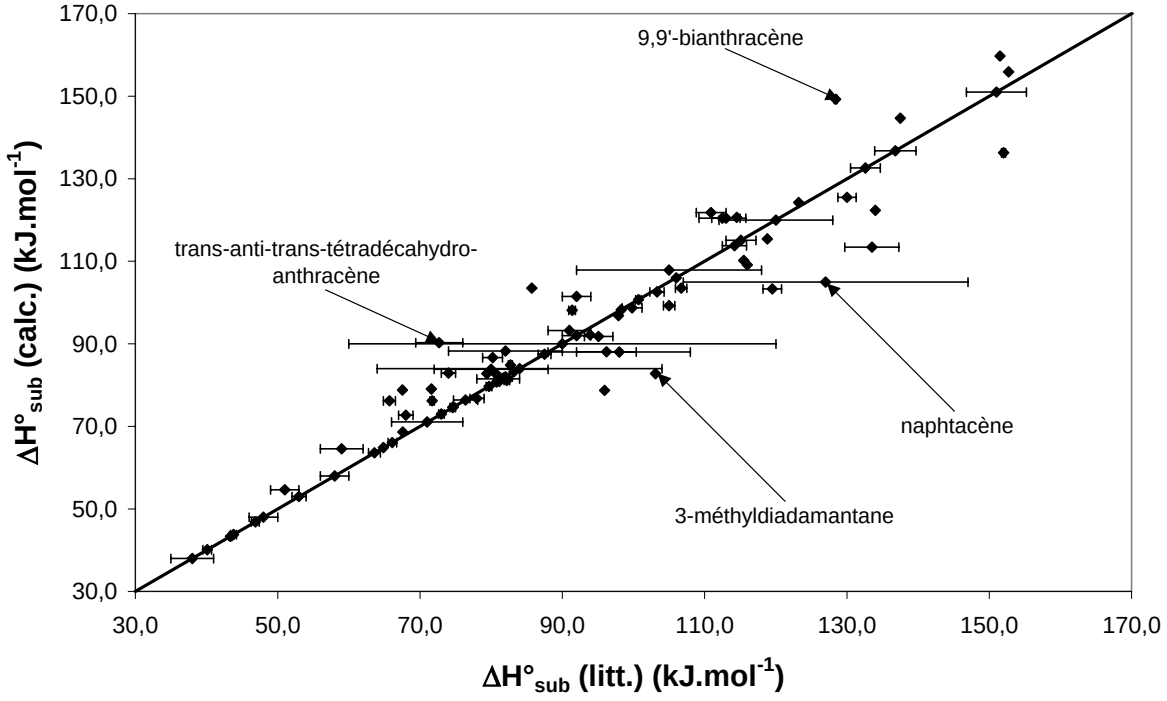


Figure III-1 : Evaluation globale des résultats de représentation des enthalpies standard de sublimation de 89 molécules C_xH_y.

La figure III-1 montre que la plupart des points éloignés de la première bissectrice correspondent soit aux enthalpies de changement d'état qui ont été déterminées avec une grande incertitude (ex : naphtacène [92-24-0]), soit aux valeurs expérimentales d'enthalpies de sublimation dont la précision sur la mesure n'a pas été publiée (ex : 3-méthyldiadamantane [28375-86-2]).

Enfin, on constate que les points sont bien centrés autour de la première bissectrice, ce qui indique l'absence d'une éventuelle erreur systématique concernant la détermination des valeurs de contributions de groupes à l'enthalpie standard de sublimation.

3. Prévision des enthalpies standard de formation en phase solide

Deux démarches, dites semi-prédictive (méthode A) et entièrement prédictive (méthode B), ont été menées en parallèle afin d'évaluer les enthalpies de formation recherchées. Ces deux approches sont explicitées ci-dessous.

Les travaux ne concernent que des molécules organiques de formule générale C_xH_y car l'approche directe d'évaluation des enthalpies standard de formation en phase solide a été jugée plus fiable (car elle cumule moins d'erreur) et a donc été beaucoup plus amplement développée (*cf.* chapitre IV).

3.1. Méthode A : méthode semi-prédictive

La démarche semi-prédictive permettant d'évaluer des enthalpies standard de formation à l'état solide consiste à combiner des valeurs d'enthalpies standard de formation en phase gazeuse disponibles dans la littérature avec des enthalpies standard de sublimation estimées au moyen de contributions de groupes déterminées au préalable.

A noter que l'enthalpie de sublimation s'écrit comme suit :

$$\begin{aligned} H_g^0 - H_s = H_g^0 - H_{gazréel}(P_{sat.},T) &\approx 0 \\ + H_{gazréel}(P_{sat.},T) - H_s(P_{sat.},T) &= \Delta H_{sub} \\ + H_s(P_{sat.},T) - H_s(P,T) &\approx 0 \end{aligned} \qquad (1)$$

où $H_g^0 = H_{gazparfait}(P^0,T)$

$P_{sat.}$: pression d'équilibre solide/vapeur à T

La première partie du terme de droite de l'équation (1) est, par hypothèse, nulle car on assimile le gaz réel à un gaz parfait et $P_{sat.}$ à $P°$ (les pressions de saturation aux températures de mesure étant faibles).

L'étude a été menée sur une banque de données composée de quatre-vingt-onze substances. A noter que quatre-vingt-sept molécules (sur les quatre-vingt-onze) contenue dans cette liste ont permis de déterminer les contributions de groupes C-H aux enthalpies de changement d'état. En effet, les enthalpies standard de sublimation n'ont pas été publiées dans les cas du 2,7-diméthylnaphtalène, du 1,1,1-triphénylléthane, du 1,1,2-triphénylléthane et du 5,6,11,12-tétraphénylnaphtacène. L'ensemble des grandeurs thermochimiques relevé provient des bases de données citées plus haut [75,163,164]. Les enthalpies standard de sublimation ont été représentées dans le cas des quatre-vingt-sept composés ayant permis la détermination des contributions et ont été estimées dans les autres cas, grâce aux valeurs de contributions de groupes présentées aux tableaux III-6, III-7 et III-8.

L'ensemble des résultats d'évaluation des enthalpies standard de formation des quatre-vingt-onze molécules en phase solide est regroupé dans le tableau III-12. Ce dernier rassemble les informations suivantes pour chacun des composés de la liste étudiée : formule brute accompagnée du numéro CAS, enthalpie standard de formation en phase gazeuse issue de la littérature, valeurs expérimentale et calculée des enthalpies standard de sublimation, valeurs expérimentale et calculée des enthalpies standard de formation en phase solide, écart entre l'enthalpie de formation à l'état solide mesurée et calculée. Un tableau similaire dans lequel tous les résultats sont exprimés en joules par gramme est présenté en annexe 7.

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{g,m}$ (litt.)	$\Delta H°_{sub}$ (litt.)	$\Delta H°_{sub}$ (calc.)	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
2-norbornène	C_7H_{10}	498-66-8	90,0	38,0	38,0	52,9	52,0	0,9
norbornane	C_7H_{12}	279-23-2	-54,9	40,1	40,1	-95,1	-95,0	-0,1
bicyclo[2.2.2]oct-2-ène	C_8H_{12}	931-64-6	20,5	43,8	43,8	-23,3	-23,3	0,0
bicyclo[2.2.2]octane	C_8H_{14}	280-33-1	-99,0	48,0	48,0	-146,9	-147,0	0,1
2,2,3,3-tétraméthylbutane	C_8H_{18}	594-82-1	-225,6	43,4	43,4	-268,9	-269,0	0,1
bicyclo[3.3.1]nonane	C_9H_{16}	280-65-9	-127,5	51,0	54,7	-178,2	-182,2	4,0
azulène	$C_{10}H_8$	275-51-4	308,0	84,0	84,0	212,3	224,0	-11,7
naphtalène	$C_{10}H_8$	91-20-3	150,3	71,0	71,1	77,9	79,2	-1,3
1,2,4,5-tétraméthylbenzène	$C_{10}H_{14}$	95-93-2	-47,1	71,7	76,2	-119,9	-123,3	3,4
octahydro-4,7-méthano-1H-indène	$C_{10}H_{16}$	6004-38-2	-60,0	53,0	53,0	-112,9	-113,0	0,1
adamantane	$C_{10}H_{16}$	281-23-2	-134,6	59,0	64,6	-194,1	-199,2	5,1
protoadamantane	$C_{10}H_{16}$	53130-19-1	-85,9	64,9	64,9	-150,8	-150,8	0,0
camphène	$C_{10}H_{16}$	79-92-5	-28,6	46,9	46,9	-75,4	-75,5	0,1
bicyclo[3.3.2]décane	$C_{10}H_{18}$	283-50-1	-106,1	58,0	58,0	-164,2	-164,1	-0,1
2-méthylnaphtalène	$C_{11}H_{10}$	91-57-6	106,7	65,7	76,2	44,9	30,5	14,4
pentaméthylbenzène	$C_{11}H_{16}$	700-12-9	-67,2	71,6	79,1	-133,6	-146,3	12,7
1-méthyladamantane	$C_{11}H_{18}$	768-91-2	-171,6	67,6	68,6	-239,3	-240,2	0,9
2-méthyladamantane	$C_{11}H_{18}$	700-56-1	-151,7	67,5	78,8	-219,6	-230,5	10,9
bicyclo[3.3.3]undécane	$C_{11}H_{20}$	29415-95-0	-89,0	63,6	63,6	-152,5	-152,6	0,1
biphénylène	$C_{12}H_8$	259-79-0	420,4	90,0	90,0	334,0	330,4	3,6
acénaphtylène	$C_{12}H_8$	208-96-8	259,7	73,0	73,0	186,7	186,7	0,0
biphényle	$C_{12}H_{10}$	92-52-4	182,0	81,0	81,5	99,4	100,5	-1,1
acénaphtène	$C_{12}H_{10}$	83-32-9	156,0	83,2	83,2	70,3	72,8	-2,5
1,8-diméthylnaphtalène	$C_{12}H_{12}$	569-41-5	108,7	82,7	84,9	25,9	23,8	2,1
2,3-diméthylnaphtalène	$C_{12}H_{12}$	581-40-8	76,1	82,2	81,2	-2,3	-5,1	2,8
2,7-diméthylnaphtalène[(1)]	$C_{12}H_{12}$	582-16-1	79,5	-	81,3	-5,4	-1,8	-3,6
hexaméthylbenzène	$C_{12}H_{18}$	87-85-4	-77,4	80,0	83,8	-161,5	-161,2	-0,3
(E,E,E)-1,5,9-cyclododécatriène	$C_{12}H_{18}$	676-22-2	101,3	74,7	74,7	26,6	26,6	0,0
2,2-diméthyladamantane	$C_{12}H_{20}$	19740-34-2	-182,7	74,0	82,9	-256,3	-265,6	9,3
1,3-diméthyladamantane	$C_{12}H_{20}$	702-79-4	-218,7	68,0	72,7	-286,4	-291,4	5,0
cyclododécane	$C_{12}H_{24}$	294-62-2	-230,2	76,4	76,4	-306,6	-306,6	0,0

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{g,m}$ (litt.)	$\Delta H°_{sub}$ (litt.)	$\Delta H°_{sub}$ (calc.)	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
4-méthyl-1,1'-biphényle	$C_{13}H_{12}$	644-08-6	138,2	80,2	86,7	55,4	51,5	3,9
diphénylméthane	$C_{13}H_{12}$	101-81-5	164,8	82,0	88,3	71,5	76,5	-5,0
1,3,5-triméthyladamantane	$C_{13}H_{22}$	707-35-7	-254,5	78,0	76,8	-332,3	-331,3	-1,0
anthracène	$C_{14}H_{10}$	120-12-7	230,9	98,0	88,0	129,2	142,9	-13,7
phénantrène	$C_{14}H_{10}$	85-01-8	201,2	91,0	93,2	116,2	108,0	8,2
9,10-dihydro-anthracène	$C_{14}H_{12}$	613-31-0	159,7	93,9	92,2	66,4	67,5	-1,1
(E)-stilbène	$C_{14}H_{12}$	103-30-0	236,1	100,7	100,7	136,9	135,4	1,5
4,4'-diméthylbiphényle	$C_{14}H_{14}$	613-33-2	111,3	95,1	91,8	14,1	19,5	-5,4
bibenzyle	$C_{14}H_{14}$	103-29-7	142,9	91,4	98,2	51,5	44,7	6,8
1,4,5,8-tétraméthylnaphtalène	$C_{14}H_{16}$	2717-39-7	81,6	99,8	98,7	-18,2	-17,1	-1,1
1,2,3,4,5,6,7,8-octahydro-anthracène	$C_{14}H_{18}$	1079-71-6	-37,2	82,0	82,0	-119,5	-119,2	-0,3
diadamantane	$C_{14}H_{20}$	2292-79-7	-145,9	95,9	78,7	-241,8	-224,6	-17,2
trans-anti-trans-tétradécahydro-anthracène	$C_{14}H_{24}$	28071-99-0	-220,6	72,7	90,3	-293,3	-310,9	17,6
1,3,5,7-tétraméthyladamantane	$C_{14}H_{24}$	1687-36-1	-283,4	81,1	80,9	-365,8	-364,3	-1,5
cyclotétradécane	$C_{14}H_{28}$	295-17-0	-239,2	80,8	80,8	-374,0	-320,0	-54,0
4-méthyldiadamantane	$C_{15}H_{22}$	30545-28-9	-182,1	79,4	82,8	-261,5	-264,9	3,4
3-méthyldiadamantane	$C_{15}H_{22}$	28375-86-2	-157,3	103,1	82,8	-260,4	-240,1	-20,3
1-méthyldiadamantane	$C_{15}H_{22}$	26460-76-4	-166,7	80,6	82,8	-247,4	-249,5	2,1
cyclopentadécane	$C_{15}H_{30}$	295-48-7	-301,4	74,6	74,6	-376,1	-376,0	-0,1
fluoranthène	$C_{16}H_{10}$	206-44-0	289,0	98,3	98,3	189,9	190,7	-0,8
pyrène	$C_{16}H_{10}$	129-00-0	225,7	97,9	96,8	125,5	128,9	-3,4
2,7-diméthylphénantrène	$C_{16}H_{14}$	1576-69-8	143,1	106,7	103,5	36,4	39,6	-3,2
4,5-diméthylphénantrène	$C_{16}H_{14}$	3674-69-9	193,6	85,7	103,5	89,0	90,1	-1,1
9,10-diméthylphénantrène	$C_{16}H_{14}$	604-83-1	167,1	119,5	103,3	47,6	63,8	-16,2
[2.2]métacyclophane	$C_{16}H_{16}$	2319-97-3	170,5	92,0	92,0	78,5	78,5	0,0
[2.2]paracyclophane	$C_{16}H_{16}$	1633-22-3	244,7	96,2	88,0	145,1	156,7	-11,6
[2.2]métaparacyclophane	$C_{16}H_{16}$	5385-36-4	218,4	87,5	87,5	130,9	130,9	0,0
tricyclo[8.2.2.2^{4,7}]hexadécane	$C_{16}H_{28}$	283-68-1	-152,4	92,0	101,5	-244,1	-253,9	9,8
cyclohexadécane	$C_{16}H_{32}$	295-65-8	-321,7	81,8	81,8	-403,4	-403,5	0,1
cycloheptadécane	$C_{17}H_{34}$	295-97-6	-364,3	66,1	66,1	-430,4	-430,4	0,0
triphénylène	$C_{18}H_{12}$	217-59-4	274,2	114,5	120,7	151,8	153,5	-1,7

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{g,m}$ (litt.)	$\Delta H°_{sub}$ (litt.)	$\Delta H°_{sub}$ (calc.)	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
chrysène	$C_{18}H_{12}$	218-01-9	269,8	118,8	115,4	145,3	154,4	-9,1
benzo[c]phénantrène	$C_{18}H_{12}$	195-19-7	291,2	106,0	106,0	184,9	185,2	-0,3
benzo[a]anthracène	$C_{18}H_{12}$	56-55-3	293,0	115,5	110,2	170,8	182,8	-12,0
naphtacène	$C_{18}H_{12}$	92-24-0	291,4	127,0	104,9	158,8	186,5	-27,7
5,12-dihydro-naphtacène	$C_{18}H_{14}$	959-02-4	222,3	116,0	109,1	106,4	113,2	-6,8
[18]annulène	$C_{18}H_{18}$	2040-73-5	280,0	120,0	120,0	163,4	160,0	3,4
3,4,5,6-tétraméthylphénantrène	$C_{18}H_{18}$	7343-06-8	160,0	133,5	113,4	23,4	46,6	-23,2
2,4,5,7-tétraméthylphénantrène	$C_{18}H_{18}$	7396-38-5	130,0	114,2	113,8	12,2	16,2	-4,0
[3.3]paracyclophane	$C_{18}H_{20}$	2913-24-8	129,6	103,3	102,6	26,3	27,0	-0,7
octadécane	$C_{18}H_{38}$	593-45-3	-414,6	152,7	155,9	-567,4	-570,5	3,1
triphénylméthane	$C_{19}H_{16}$	519-73-3	271,2	105,0	99,3	171,2	171,9	-0,7
pérylène	$C_{20}H_{12}$	198-55-0	324,0	123,2	124,3	182,8	199,7	-16,9
9,10-dihydro-9,10[1',2']benzénoanthracène	$C_{20}H_{14}$	477-75-8	321,7	105,0	107,9	217,1	213,8	3,3
3,9-diméthylbenz[a]anthracène	$C_{20}H_{16}$	316-51-8	189,0	113,0	120,5	76,2	68,5	7,7
1,12-diméthylbenz[a]anthracène	$C_{20}H_{16}$	313-74-6	251,5	112,5	120,5	139,0	131,0	8,0
9,10-diméthyl-1,2-benzanthracène	$C_{20}H_{16}$	57-97-6	277,7	134,0	122,3	143,8	155,4	-11,6
5,6-diméthylchrysène	$C_{20}H_{16}$	3697-27-6	262,4	130,0	125,5	132,5	136,9	-4,4
1,1,1-triphényléthane[(1)]	$C_{20}H_{18}$	5271-39-6	251,3	-	103,2	157,2	148,1	9,1
1,1,2-triphényléthane[(1)]	$C_{20}H_{18}$	1520-42-9	255,3	-	117,5	130,2	137,8	-7,6
[1.8]paracyclophane	$C_{21}H_{26}$	6169-94-4	29,0	110,9	121,8	-81,9	-92,8	10,9
1,3,5-triphénylbenzène	$C_{24}H_{18}$	612-71-5	367,5	152,0	136,3	224,6	231,2	-6,6
[6.6]paracyclophane	$C_{24}H_{32}$	4384-23-0	-77,7	115,1	115,1	-192,7	-192,8	0,1
tétraphénylméthane	$C_{25}H_{20}$	630-76-2	397,8	151,0	151,0	247,1	246,8	0,3
9,10-diphénylanthracène	$C_{26}H_{18}$	1499-10-1	465,6	137,5	144,7	308,7	320,9	-12,2
1,1,1,2-tétraphényléthane	$C_{26}H_{22}$	2294-94-2	365,0	132,6	132,6	223,0	232,4	-9,4
1,1,2,2-tétraphényléthane	$C_{26}H_{22}$	632-50-8	357,0	136,8	136,8	216,0	220,2	-4,2
9,9'-bianthracène	$C_{28}H_{18}$	1055-23-8	454,3	128,4	149,3	326,2	305,0	21,2
dotriacontane	$C_{32}H_{66}$	544-85-4	-696,6	271,1	257,8	-968,3	-954,4	-13,9
5,6,11,12-tétraphénylnaphtacène[(1)]	$C_{42}H_{28}$	517-51-1	780,9	-	221,6	620,3	559,3	61,0

[(1)] Composés n'ayant pas été utilisés dans la phase de détermination des contributions de groupes C-H à l'enthalpie standard de sublimation.

Tableau III-12 : Prévisions des enthalpies standard de formation en phase solide de 91 molécules C_xH_y, à T = 298,15 K, grâce à la méthode semi-prédictive.

Les résidus moyens et les moyennes quadratiques observés sur la prévision des enthalpies standard de sublimation et des enthalpies standard de formation en phase solide sont respectivement rassemblés dans les tableaux III-13 et III-14. Les écarts extrêmes obtenus ainsi que les composés correspondant à ces écarts sont présentés dans le tableau III-15. L'ensemble de ces résultats est à la fois exprimé en kilojoules par mole et en joules par gramme.

Unité	Résidu moyen	Moyenne quadratique
$kJ.mol^{-1}$	4,6	7,5
$J.g^{-1}$	21,9	35,0

Tableau III-13 : Résidus moyens et moyennes quadratiques obtenus sur la représentation des enthalpies standard de sublimation de 87 molécules C_xH_y.

Unité	Résidu moyen	Moyenne quadratique
$kJ.mol^{-1}$	6,7	11,9
$J.g^{-1}$	30,4	50,3

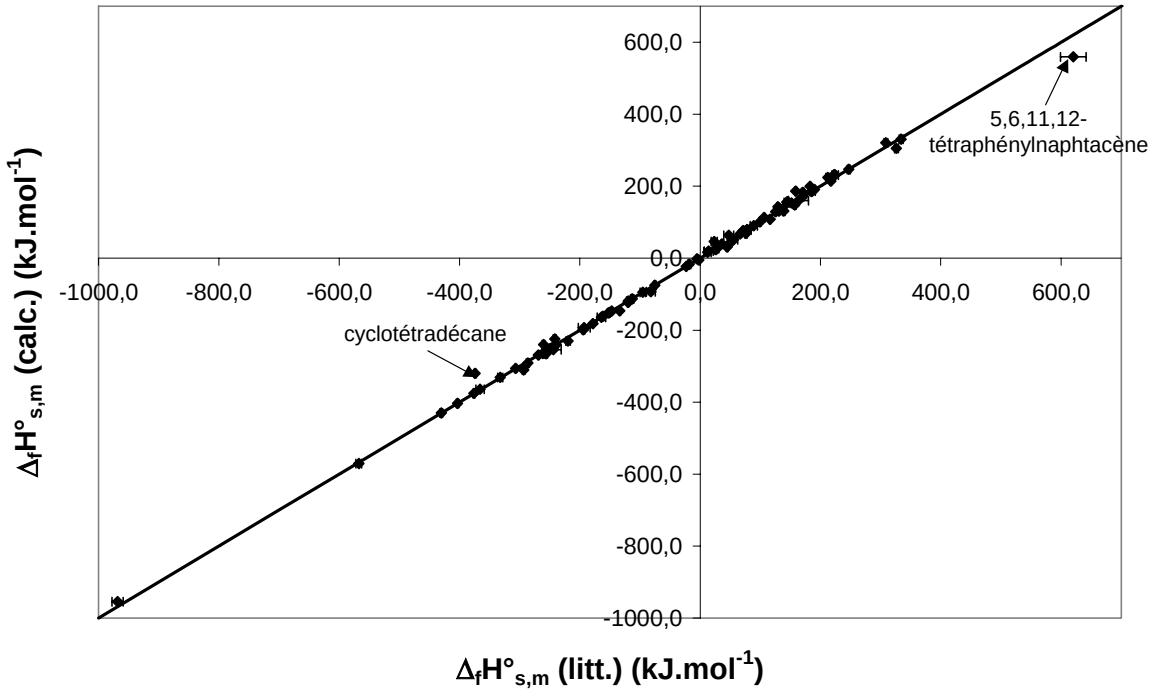
Tableau III-14 : Résidus moyens et moyennes quadratiques obtenus sur la prévision des enthalpies standard de formation en phase solide de 91 molécules C_xH_y, après application de la méthode semi-prédictive.

Unité	Ecart négatif le plus élevé (composé)	Ecart positif le plus élevé (composé)
$kJ.mol^{-1}$	-54,0 (cyclotétradécane)	61,0 (5,6,11,12-tétraphénylnaphtacène)
$J.g^{-1}$	-275,0 (cyclotétradécane)	114,5 (5,6,11,12-tétraphénylnaphtacène)

Tableau III-15 : Ecarts extrêmes entre les enthalpies standard de formation en phase solide mesurées et calculées, après application de la méthode semi-prédictive.

La figure ci-dessous représente la valeur calculée de l'enthalpie de formation en phase solide en fonction de la valeur issue de la littérature. L'enthalpie de formation estimée est obtenue grâce à l'enthalpie standard de formation en phase gazeuse publiée et à l'enthalpie standard de sublimation évaluée. On constate un très bon alignement des points autour de la première bissectrice.

A noter que les incertitudes présentées pour chaque point correspondent à la valeur publiée dans la littérature, *i.e.* à l'incertitude expérimentale.



<u>Figure III-2</u> : Evaluation globale des résultats de prévision des enthalpies standard de formation en phase solide de 91 composés C_xH_y, après application de la méthode semi-prédictive.

Les résultats mettent en évidence une estimation médiocre en ce qui concerne le cyclotétradécane [295-17-0]. Il semblerait que la valeur publiée d'enthalpie standard de sublimation pose problème. Comme toutes les autres valeurs relatives au changement d'état contenues dans le tableau III-12, l'enthalpie de sublimation du cyclotétradécane est issue de la banque de données NIST. Cette dernière indique que la valeur d'enthalpie de changement d'état, pour laquelle aucune incertitude n'est précisée, provient d'une publication de Wolf *et al.* datant de 1938 [165]. Par ailleurs, la méthode de mesure n'est pas indiquée. Il serait donc judicieux d'effectuer une nouvelle mesure d'enthalpie standard de sublimation pour ce composé afin d'infirmer ou de confirmer la valeur donnée. De plus, il semblerait que le cyclotétradécane présente un caractère mésomorphe à haute température. Un état mésomorphe est un état de la matière intermédiaire entre le solide et le liquide dans lequel les molécules sont réparties sans ordre (comme dans un liquide) mais en ayant des directions parallèles. Le cyclotétradécane est une substance ayant une mésophase avec un désordre d'orientation partiel et une grande mobilité conformationnelle [166].

En ce qui concerne le 5,6,11,12-tétraphénylnaphtacène [517-51-1] évoqué dans le tableau III-15, la valeur d'enthalpie standard de formation à l'état solide a été mesurée en 1938 par Enderlin [167]. De nouvelles mesures sur cette molécule pourraient être réalisées afin de vérifier les données publiées car l'enthalpie standard de formation en phase solide a été déterminée avec une incertitude très élevée : 21,3 kJ.mol^{-1}. Par ailleurs, il semblerait que l'enthalpie standard de formation publiée concernant l'état vapeur [163] ait été calculée à l'aide d'une valeur d'enthalpie de sublimation non standard. Celle-ci vaut ΔH_{sub} = (160,6 ± 4,2) kJ.mol^{-1} et est valable de 453 K à 523 K [168]. Enfin, l'incertitude sur l'enthalpie standard de formation en phase gazeuse est non négligeable (21,8 kJ.mol^{-1}).

3.2. Méthode B : méthode entièrement prédictive

L'approche dite entièrement prédictive consiste à calculer des valeurs d'enthalpies standard de formation en phase solide en combinant des enthalpies standard de sublimation évaluées au moyen de contributions de groupes établies au préalable avec des enthalpies standard de formation à l'état vapeur estimées grâce aux contributions de groupes présentes dans la banque de données du laboratoire (*cf.* annexe 4).

L'enthalpie standard de formation en phase condensée de cent vingt-deux molécules (sur les cent quarante-cinq contenues dans la banque de données complète présentée au tableau III-5) a été évaluée. Plusieurs enthalpies de formation à l'état solide n'ont pu être déterminées car les enthalpies de sublimation de la totalité des cent quarante-cinq composés étudiés n'ont pas été publiées. Ceci a empêché de déterminer l'ensemble des contributions de groupes nécessaire à la prévision de toutes les enthalpies de sublimation, conduisant donc à une estimation des enthalpies de formation en phase solide de cent vingt-deux molécules uniquement.

Le tableau III-16 rassemble la totalité des résultats prédictifs obtenus. Pour chacun des composés étudiés sont présentés : la formule brute, le numéro CAS (si celui-ci est connu), les enthalpies standard de formation à l'état gazeux issue de la littérature et estimée, les valeurs d'enthalpies standard de sublimation mesurée et calculée, les enthalpies standard de formation en phase solide publiée et évaluée, ainsi que le résidu obtenu sur les valeurs d'enthalpies standard de formation à l'état condensé.

L'annexe 8 présente un tableau similaire dans lequel toutes les grandeurs thermochimiques sont converties en joules par gramme.

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{g,m}$ (litt.)	$\Delta_f H°_{g,m}$ (calc.)	$\Delta H°_{sub}$ (litt.)	$\Delta H°_{sub}$ (calc.)	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
2-norbornène	C_7H_{10}	498-66-8	90,0	67,9	38,0	38,0	52,9	29,9	23,0
norbornane	C_7H_{12}	279-23-2	-54,9	-51,3	40,1	40,1	-95,1	-91,4	-3,7
bicyclo[2.2.2]oct-2-ène	C_8H_{12}	931-64-6	20,5	20,5	43,8	43,8	-23,3	-23,3	0,0
bicyclo[2.2.2]octane	C_8H_{14}	280-33-1	-99,0	-99,0	48,0	48,0	-146,9	-147,0	0,1
2,2,3,3-tétraméthylbutane	C_8H_{18}	594-82-1	-225,6	-231,8	43,4	43,4	-268,9	-275,2	6,3
7,7-diméthyl-bicyclo[2.2.1]heptane[(1)]	C_9H_{16}	2034-53-9	-	-87,1	-	-4,6	-148,2	-82,5	-65,7
bicyclo[3.3.1]nonane	C_9H_{16}	280-65-9	-127,5	-160,3	51,0	54,7	-178,2	-215,0	36,8
azulène	$C_{10}H_8$	275-51-4	308,0	310,2	84,0	84,0	212,3	226,2	-13,9
naphtalène	$C_{10}H_8$	91-20-3	150,3	150,6	71,0	71,1	77,9	79,5	-1,6
1,2,4,5-tétraméthylbenzène	$C_{10}H_{14}$	95-93-2	-47,1	-44,6	71,7	76,2	-119,9	-120,8	0,9
octahydro-4,7-méthano-1H-indène	$C_{10}H_{16}$	6004-38-2	-60,0	-61,4	53,0	53,0	-112,9	-114,4	1,5
adamantane	$C_{10}H_{16}$	281-23-2	-134,6	-161,6	59,0	64,6	-194,1	-226,2	32,1
protoadamantane	$C_{10}H_{16}$	53130-19-1	-85,9	-105,4	64,9	64,9	-150,8	-170,3	19,5
camphène	$C_{10}H_{16}$	79-92-5	-28,6	-17,1	46,9	46,9	-75,4	-64,0	-11,4
bicyclo[3.3.2]décane	$C_{10}H_{18}$	283-50-1	-106,1	-85,9	58,0	58,0	-164,2	-143,9	-20,3
2-méthylnaphtalène	$C_{11}H_{10}$	91-57-6	106,7	117,2	65,7	76,2	44,9	41,0	3,9
pentaméthylbenzène	$C_{11}H_{16}$	700-12-9	-67,2	-71,8	71,6	79,1	-133,6	-150,9	17,3
1-méthyladamantane	$C_{11}H_{18}$	768-91-2	-171,6	-194,2	67,6	68,6	-239,3	-262,8	23,5
2-méthyladamantane	$C_{11}H_{18}$	700-56-1	-151,7	-191,6	67,5	78,8	-219,6	-270,4	50,8
bicyclo[3.3.3]undécane	$C_{11}H_{20}$	29415-95-0	-89,0	-89,0	63,6	63,6	-152,5	-152,6	0,1
biphénylène	$C_{12}H_8$	259-79-0	420,4	439,5	90,0	90,0	334,0	349,5	-15,5
acénaphtylène	$C_{12}H_8$	208-96-8	259,7	257,7	73,0	73,0	186,7	184,7	2,0
biphényle	$C_{12}H_{10}$	92-52-4	182,0	179,6	81,0	81,5	99,4	98,1	1,3
acénaphtène	$C_{12}H_{10}$	83-32-9	156,0	156,5	83,2	83,2	70,3	73,3	-3,0
1,8-diméthylnaphtalène	$C_{12}H_{12}$	569-41-5	108,7	108,4	82,7	84,9	25,9	23,5	2,4
2,3-diméthylnaphtalène	$C_{12}H_{12}$	581-40-8	76,1	86,9	82,2	81,2	-2,3	5,7	-8,0
2,6-diméthylnaphtalène[(1)]	$C_{12}H_{12}$	581-42-0	-	83,8	-	81,3	-5,7	2,5	-8,2
2,7-diméthylnaphtalène[(1)]	$C_{12}H_{12}$	582-16-1	79,5	83,8	-	81,3	-5,4	2,5	-7,9
hexaméthylbenzène	$C_{12}H_{18}$	87-85-4	-77,4	-98,9	80,0	83,8	-161,5	-182,7	21,2
(E,E,E)-1,5,9-cyclododécatriène	$C_{12}H_{18}$	676-22-2	101,3	99,2	74,7	74,7	26,6	24,5	2,1
2,2-diméthyladamantane	$C_{12}H_{20}$	19740-34-2	-182,7	-224,2	74,0	82,9	-256,3	-307,1	50,8

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{g,m}$ (litt.)	$\Delta_f H°_{g,m}$ (calc.)	$\Delta H°_{sub}$ (litt.)	$\Delta H°_{sub}$ (calc.)	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
1,3-diméthyladamantane	$C_{12}H_{20}$	702-79-4	-218,7	-226,9	68,0	72,7	-286,4	-299,6	13,2
cyclododécane	$C_{12}H_{24}$	294-62-2	-230,2	-229,1	76,4	76,4	-306,6	-305,5	-1,1
4-méthyl-1,1'-biphényle	$C_{13}H_{12}$	644-08-6	138,2	146,1	80,2	86,7	55,4	59,4	-4,0
diphénylméthane	$C_{13}H_{12}$	101-81-5	164,8	153,9	82,0	88,3	71,5	65,6	5,9
1,3,5-triméthyladamantane	$C_{13}H_{22}$	707-35-7	-254,5	-259,5	78,0	76,8	-332,3	-336,3	4,0
anthracène	$C_{14}H_{10}$	120-12-7	230,9	218,4	98,0	88,0	129,2	130,4	-1,2
phénantrène	$C_{14}H_{10}$	85-01-8	201,2	209,2	91,0	93,2	116,2	116,0	0,2
9,10-dihydro-anthracène	$C_{14}H_{12}$	613-31-0	159,7	144,2	93,9	92,2	66,4	52,0	14,4
(E)-stilbène	$C_{14}H_{12}$	103-30-0	236,1	242,3	100,7	100,7	136,9	141,6	-4,7
4,4'-diméthylbiphényle	$C_{14}H_{14}$	613-33-2	111,3	112,7	95,1	91,8	14,1	20,9	-6,8
bibenzyle	$C_{14}H_{14}$	103-29-7	142,9	143,5	91,4	98,2	51,5	45,3	6,2
1,4,5,8-tétraméthylnaphtalène	$C_{14}H_{16}$	2717-39-7	81,6	66,1	99,8	98,7	-18,2	-32,6	14,4
1,2,3,4,5,6,7,8-octahydro-anthracène	$C_{14}H_{18}$	1079-71-6	-37,2	-32,3	82,0	82,0	-119,5	-114,3	-5,2
diadamantane	$C_{14}H_{20}$	2292-79-7	-145,9	-196,4	95,9	78,7	-241,8	-275,1	33,3
trans-anti-trans-tétradécahydro-anthracène	$C_{14}H_{24}$	28071-99-0	-220,6	-242,6	72,7	90,3	-293,3	-332,9	39,6
1,3,5,7-tétraméthyladamantane	$C_{14}H_{24}$	1687-36-1	-283,4	-292,1	81,1	80,9	-365,8	-373,0	7,2
cyclotétradécane	$C_{14}H_{28}$	295-17-0	-239,2	-239,3	80,8	80,8	-374,0	-320,1	-53,9
cis-1,4-Di-tert-butyl-cyclohexane[1]	$C_{14}H_{28}$	4789-34-8	-	-351,8	-	126,9	-374,1	-478,7	104,6
trans-1,4-Di-tert-butyl-cyclohexane[1]	$C_{14}H_{28}$	4789-35-9	-	-351,8	-	126,9	-401,8	-478,7	76,9
4-méthyldiadamantane	$C_{15}H_{22}$	30545-28-9	-182,1	-229,0	79,4	82,8	-261,5	-311,8	50,3
3-méthyldiadamantane	$C_{15}H_{22}$	28375-86-2	-157,3	-229,0	103,1	82,8	-260,4	-311,8	51,4
1-méthyldiadamantane	$C_{15}H_{22}$	26460-76-4	-166,7	-229,0	80,6	82,8	-247,4	-311,8	64,4
cyclopentadécane	$C_{15}H_{30}$	295-48-7	-301,4	-301,4	74,6	74,6	-376,1	-376,0	-0,1
fluoranthène	$C_{16}H_{10}$	206-44-0	289,0	286,4	98,3	98,3	189,9	188,1	1,8
pyrène	$C_{16}H_{10}$	129-00-0	225,7	231,0	97,9	96,8	125,5	134,2	-8,7
(Z,Z)-1,4-diphénylbutadiène[1]	$C_{16}H_{14}$	5807-76-1	-	299,1	-	117,2	198,8	181,9	16,9
(E,E)-1,4-diphénylbutadiène[1]	$C_{16}H_{14}$	538-81-8	-	299,1	-	110,9	178,8	188,2	-9,4
2,7-diméthylphénantrène	$C_{16}H_{14}$	1576-69-8	143,1	142,3	106,7	103,5	36,4	38,8	-2,4
4,5-diméthylphénantrène	$C_{16}H_{14}$	3674-69-9	193,6	142,3	85,7	103,5	89,0	38,8	50,2
9,10-diméthylphénantrène	$C_{16}H_{14}$	604-83-1	167,1	145,5	119,5	103,3	47,6	42,2	5,4
cis-1,2-Di-o-tolyléthène[1]	$C_{16}H_{16}$	10311-74-7	-	181,8	-	110,6	85,9	71,2	14,7

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{g,m}$ (litt.)	$\Delta_f H°_{g,m}$ (calc.)	$\Delta H°_{sub}$ (litt.)	$\Delta H°_{sub}$ (calc.)	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
trans-1,2-Di-o-tolyléthène[1]	$C_{16}H_{16}$	36888-18-3	-	181,8	-	110,6	74,9	71,2	3,7
(Z)-1,2-bis(4-méthylphényl)éthène[1]	$C_{16}H_{16}$	2510-76-1	-	175,5	-	111,0	97,9	64,5	33,4
(E)-1,2-bis(4-méthylphényl)éthène[1]	$C_{16}H_{16}$	18869-29-9	-	175,5	-	111,0	57,9	64,5	-6,6
[2.2]métacyclophane	$C_{16}H_{16}$	2319-97-3	170,5	170,7	92,0	92,0	78,5	78,7	-0,2
[2.2]paracyclophane	$C_{16}H_{16}$	1633-22-3	244,7	121,3	96,2	88,0	145,1	33,3	111,8
[2.2]métaparacyclophane	$C_{16}H_{16}$	5385-36-4	218,4	218,4	87,5	87,5	130,9	130,9	0,0
[16]annulène[1]	$C_{16}H_{16}$	3332-38-5	-	453,9	-	106,7	547,5	347,2	200,3
1,2-Di-o-tolyléthane[1]	$C_{16}H_{18}$	952-80-7	-	82,9	-	108,1	-40,0	-25,2	-14,8
1,2-Di-p-tolyléthane[1]	$C_{16}H_{18}$	538-39-6	-	76,7	-	108,4	-42,1	-31,7	-10,4
1,4-diphénylbutane[1]	$C_{16}H_{18}$	1083-56-3	-	102,3	-	112,7	-9,9	-10,4	0,5
tricyclo[8.2.2.2^{4,7}]hexadécane	$C_{16}H_{28}$	283-68-1	-152,4	-282,3	92,0	101,5	-244,1	-383,8	139,7
cyclohexadécane	$C_{16}H_{32}$	295-65-8	-321,7	-321,6	81,8	81,8	-403,4	-403,4	0,0
cycloheptadécane	$C_{17}H_{34}$	295-97-6	-364,3	-364,3	66,1	66,1	-430,4	-430,4	0,0
triphénylène	$C_{18}H_{12}$	217-59-4	274,2	258,6	114,5	120,7	151,8	137,9	13,9
chrysène	$C_{18}H_{12}$	218-01-9	269,8	267,8	118,8	115,4	145,3	152,4	-7,1
benzo[c]phénantrène	$C_{18}H_{12}$	195-19-7	291,2	280,7	106,0	106,0	184,9	174,7	10,2
benzo[a]anthracène	$C_{18}H_{12}$	56-55-3	293,0	277,0	115,5	110,2	170,8	166,8	4,0
naphtacène	$C_{18}H_{12}$	92-24-0	291,4	286,2	127,0	104,9	158,8	181,3	-22,5
5,12-dihydro-naphtacène	$C_{18}H_{14}$	959-02-4	222,3	212,0	116,0	109,1	106,4	102,9	3,5
[18]annulène	$C_{18}H_{18}$	2040-73-5	280,0	510,6	120,0	120,0	163,4	390,6	-227,2
3,4,5,6-tétraméthylphénantrène	$C_{18}H_{18}$	7343-06-8	160,0	81,8	133,5	113,4	23,4	-31,6	55,0
2,4,5,7-tétraméthylphénantrène	$C_{18}H_{18}$	7396-38-5	130,0	75,5	114,2	113,8	12,2	-38,3	50,5
[3.3]paracyclophane	$C_{18}H_{20}$	2913-24-8	129,6	80,1	103,3	102,6	26,3	-22,5	48,8
1,2,3,4,5,6,7,8,9,10,11,12-dodécahydro-triphénylène[1]	$C_{18}H_{24}$	1610-39-5	-	-89,9	-	95,9	-193,9	-185,8	-8,1
1,2,4-Tri-tert-butylbenzène[1]	$C_{18}H_{30}$	1459-11-6	-	-36,7	-	-32,3	-251,6	-4,4	-247,2
1,3,5-Tri-tert-butylbenzène	$C_{18}H_{30}$	1460-02-2	-	-238,2	79,7	79,7	-321,9	-317,9	-4,0
octadécane	$C_{18}H_{38}$	593-45-3	-414,6	-415,4	152,7	155,9	-567,4	-571,3	3,9
triphénylméthane	$C_{19}H_{16}$	519-73-3	271,2	271,2	105,0	99,3	171,2	171,9	-0,7
2,2',4,4',5,5'-hexaméthyldiphénylméthane[1]	$C_{19}H_{24}$	4957-16-8	-	-27,9	-	118,0	-154,4	-145,9	-8,5
pérylène	$C_{20}H_{12}$	198-55-0	324,0	280,3	123,2	124,3	182,8	156,0	26,8
9,10-dihydro-9,10[1',2']benzénoanthracène	$C_{20}H_{14}$	477-75-8	321,7	300,2	105,0	107,9	217,1	192,3	24,8

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{g,m}$ (litt.)	$\Delta_f H°_{g,m}$ (calc.)	$\Delta H°_{sub}$ (litt.)	$\Delta H°_{sub}$ (calc.)	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
5,8-diméthylbenzo[c]phénantrène(1)	$C_{20}H_{16}$	54986-63-9	-	196,3	-	125,4	108,2	70,9	37,3
1,12-diméthylbenzo[c]phénantrène(1)	$C_{20}H_{16}$	4076-43-1	-	196,3	-	125,4	154,5	70,9	83,6
3,9-diméthylbenz[a]anthracène	$C_{20}H_{16}$	316-51-8	189,0	210,1	113,0	120,5	76,2	89,6	-13,4
1,12-diméthylbenz[a]anthracène	$C_{20}H_{16}$	313-74-6	251,5	210,1	112,5	120,5	139,0	89,6	49,4
9,10-diméthyl-1,2-benzanthracène	$C_{20}H_{16}$	57-97-6	277,7	210,1	134,0	122,3	143,8	87,8	56,0
5,6-diméthylchrysène	$C_{20}H_{16}$	3697-27-6	262,4	204,1	130,0	125,5	132,5	78,6	53,9
1,1,1-triphényléthane(1)	$C_{20}H_{18}$	5271-39-6	251,3	259,1	-	103,2	157,2	155,9	1,3
1,1,2-triphényléthane(1)	$C_{20}H_{18}$	1520-42-9	255,3	252,6	-	117,5	130,2	135,1	-4,9
1-(2-naphtalénylméthyl)naphtalène(1)	$C_{21}H_{16}$	611-48-3	-	289,4	-	122,1	162,0	167,3	-5,3
1',2',3',4'-tétrahydro-1,2-dinaphtylméthane(1)	$C_{21}H_{20}$	56818-06-5	-	177,5	-	128,7	44,1	48,8	-4,7
[1.8]paracyclophane	$C_{21}H_{26}$	6169-94-4	29,0	7,9	110,9	121,8	-81,9	-113,9	32,0
1,2,4,5-Tétra-tert-butylbenzène(1)	$C_{22}H_{38}$	796-97-4	-	-339,0	-	87,9	-297,9	-426,9	129,0
1,1,2-Tri-o-tolyléthane(1)	$C_{23}H_{24}$		-	161,7	-	132,3	24,4	29,4	-5,0
1,1,2-Tri-p-tolyléthane(1)	$C_{23}H_{24}$	27497-47-8	-	152,3	-	132,9	16,4	19,4	-3,0
1,3,5-triphénylbenzène	$C_{24}H_{18}$	612-71-5	367,5	373,0	152,0	136,3	224,6	236,7	-12,1
[6.6]paracyclophane	$C_{24}H_{32}$	4384-23-0	-77,7	-43,7	115,1	115,1	-192,7	-158,8	-33,9
tétraphénylméthane	$C_{25}H_{20}$	630-76-2	397,8	397,8	151,0	151,0	247,1	246,8	0,3
9,10-diphénylanthracène	$C_{26}H_{18}$	1499-10-1	465,6	411,9	137,5	144,7	308,7	267,2	41,5
1,1,1,2-tétraphényléthane	$C_{26}H_{22}$	2294-94-2	365,0	373,5	132,6	132,6	223,0	240,9	-17,9
1,1,2,2-tétraphényléthane	$C_{26}H_{22}$	632-50-8	357,0	361,7	136,8	136,8	216,0	224,9	-8,9
9,9'-bianthracène	$C_{28}H_{18}$	1055-23-8	454,3	450,7	128,4	149,3	326,2	301,4	24,8
9,9'-biphénanthryl	$C_{28}H_{18}$	20532-03-0	-	432,3	151,5	159,7	212,8	272,6	-59,8
1,1,4,4-tétraphényl-1,3-butadiène(1)	$C_{28}H_{26}$	1483-64-3	-	378,1	-	111,7	163,3	266,4	-103,1
1,1,2,2-Tétra-p-tolyléthane(1)	$C_{30}H_{30}$	40673-57-2	-	285,7	-	117,7	73,6	168,0	-94,4
cyclotriacontane(1)	$C_{30}H_{60}$	297-35-8	-	-618,8	-	218,4	-895,7	-837,2	-58,5
pentaphényléthane(1)	$C_{32}H_{26}$	19112-42-6	-	482,6	-	151,9	381,2	330,7	50,5
dotriacontane	$C_{32}H_{66}$	544-85-4	-696,6	-704,2	271,1	257,8	-968,3	-962,0	-6,3
hexaphényléthane(1)	$C_{38}H_{30}$	17854-07-8	-	603,6	-	167,0	511,8	436,6	75,2
5,6,11,12-tétraphénylnaphtacène(1)	$C_{42}H_{28}$	517-51-1	780,9	722,3	-	221,6	620,3	500,7	119,6

(1) Composés n'ayant pas été utilisés dans la phase de détermination des contributions de groupes C-H à l'enthalpie standard de sublimation.

<u>Tableau III-16</u> : Prévisions des enthalpies standard de formation en phase solide de 122 molécules C_xH_y, à T = 298,15 K, grâce à la méthode entièrement prédictive.

Les tableaux III-17 et III-18 rassemblent les résidus moyens et les moyennes quadratiques obtenus sur la prévision des enthalpies standard de formation en phases gazeuse et solide. A noter que seules quatre-vingt-quatorze enthalpies standard de formation en phase vapeur ont été publiées (sur les cent quarante-cinq molécules C_xH_y présentées dans le tableau III-5). En ce qui concerne les résidus moyens et les moyennes quadratiques observés sur la prévision des enthalpies standard de sublimation, les résultats ont déjà été présentés dans le tableau III-10. Quant aux écarts extrêmes observés, ils sont présentés dans le tableau III-19, accompagnés des molécules auxquelles sont liés ces écarts. Les résultats sont exprimés en kilojoules par mole et en joules par gramme.

Unité	Résidu moyen	Moyenne quadratique
$kJ.mol^{-1}$	21,2	39,4
$J.g^{-1}$	103,6	181,5

Tableau III-17 : Résidus moyens et moyennes quadratiques obtenus sur la prévision des enthalpies standard de formation en phase gazeuse de 94 molécules C_xH_y.

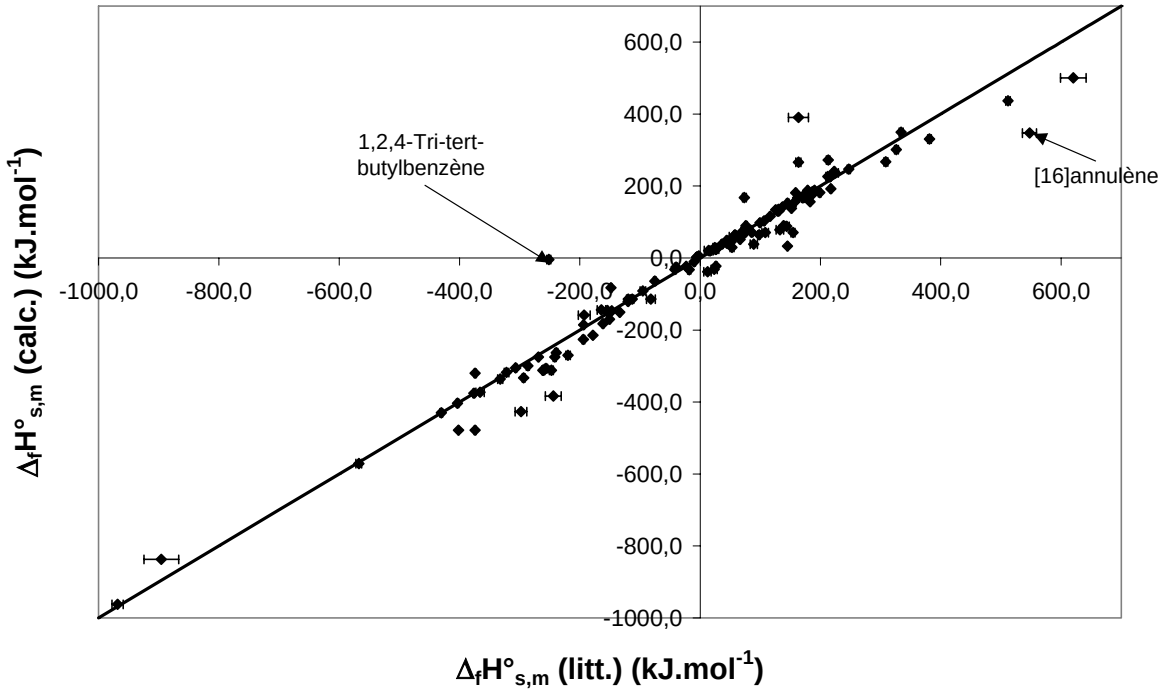
Unité	Résidu moyen	Moyenne quadratique
$kJ.mol^{-1}$	29,5	52,5
$J.g^{-1}$	130,8	227,2

Tableau III-18 : Résidus moyens et moyennes quadratiques obtenus sur la prévision des enthalpies standard de formation en phase solide de 122 molécules C_xH_y, après application de la méthode entièrement prédictive.

Unité	Ecart négatif le plus élevé (composé)	Ecart positif le plus élevé (composé)
$kJ.mol^{-1}$	-247,2 (1,2,4-Tri-tert-butylbenzène)	200,3 ([16]annulène)
$J.g^{-1}$	-1003,3 (1,2,4-Tri-tert-butylbenzène)	961,4 ([16]annulène)

Tableau III-19 : Ecarts extrêmes entre les enthalpies standard de formation en phase solide mesurées et calculées, après application de la méthode entièrement prédictive.

De même que pour la méthode semi-prédictive, la figure III-3 représente l'enthalpie standard de formation en phase solide calculée (à partir des valeurs estimées de l'enthalpie standard de formation à l'état vapeur et de l'enthalpie standard de sublimation) en fonction de l'enthalpie standard de formation en phase solide mesurée expérimentalement.



<u>Figure III-3</u> : Evaluation globale des résultats de prévision des enthalpies standard de formation en phase solide de 122 composés C_xH_y, après application de la méthode entièrement prédictive.

Il apparaît que l'enthalpie standard de formation en phase solide du 1,2,4-Tri-tert-butylbenzène [1459-11-6] est estimée de façon tout à fait médiocre par la méthode entièrement prédictive. A noter qu'aucune valeur d'enthalpie standard de formation à l'état gazeux ou d'enthalpie standard de changement d'état n'est présente dans les banques de données étudiées compilant des grandeurs thermochimiques mesurées expérimentalement. Seule l'enthalpie de formation en phase solide de cette molécule est connue. Elle a été mesurée en 1961 par Kruerke *et al.* [169]. Il serait intéressant de réaliser une étude expérimentale approfondie sur le 1,2,4-Tri-tert-butylbenzène afin d'être tout à fait sûr de la valeur d'enthalpie standard de formation en phase condensée déjà publiée.

De même que pour le composé précédemment évoqué, aucune valeur d'enthalpie de sublimation ou d'enthalpie de formation en phase vapeur n'est disponible dans la littérature pour le [16]annulène [3332-38-5]. Par ailleurs, la valeur d'enthalpie standard de formation à l'état solide utilisée a été mesurée par Stevenson *et al.* [170] avec une grande incertitude (11,7 kJ.mol^{-1}). Il semblerait, par conséquent, qu'une nouvelle mesure s'impose.

Enfin, il est possible que ces composés présentent un caractère polymorphe (*cf.* paragraphe 1.3.2. du chapitre IV), ce qui expliquerait les mauvais résultats obtenus sur l'estimation de leurs enthalpies standard de formation en phase solide.

4. Limites de la démarche indirecte

4.1. Méthode A : méthode semi-prédictive

La démarche semi-prédictive consistant à employer les valeurs d'enthalpies standard de formation en phase gazeuse issues de la littérature et les valeurs calculées d'enthalpies standard de sublimation a démontré son efficacité. En effet, les résidus moyens obtenus ainsi que les moyennes quadratiques calculées sur les enthalpies standard de formation en phase solide, que ces grandeurs soient exprimées en kilojoules par mole ou en joules par gramme, sont tout à fait acceptables (*cf.* tableau III-14). Sachant que le but ultime de ces évaluations est la synthèse de nouveaux matériaux énergétiques, il est important de calculer de façon fiable les paramètres de détonation de ces matériaux « du futur ». Pour cela, il est recommandé de disposer de valeurs d'enthalpies standard de formation en phase solide connues avec une erreur inférieure à 500 $J.g^{-1}$ [57]. Cet objectif est donc parfaitement rempli dans le cas de l'application de la méthode semi-prédictive puisque la moyenne quadratique obtenue est de 50,3 $J.g^{-1}$, soit une erreur dix fois moins élevée que la limite acceptable.

La difficulté majeure de cette approche réside en l'établissement d'une banque d'enthalpies standard de sublimation fiable. En effet, les valeurs rassemblées dans le tableau III-5 sur quatre-vingt-neuf molécules proviennent de la base de données de NIST. Or l'accès à cette dernière est fortement restreint, en particulier en ce qui concerne les composés contenant de l'azote. Par ailleurs, il n'existe pas nécessairement de valeur d'enthalpie de changement d'état publiée dans la littérature pour chacune des substances dont l'enthalpie standard de formation en phase solide a pu être collectée. Par exemple, sur les cent quarante-cinq molécules C_xH_y contenues dans le tableau III-5, seules quatre-vingt-neuf enthalpies standard de sublimation ont pu être rassemblées (soit 61% de la banque de données complète).

4.2. Méthode B : méthode entièrement prédictive

L'approche entièrement prédictive présente de nettement moins bons résultats que la méthode semi-prédictive (*cf.* tableau III-18). En effet les résidus moyens et les moyennes quadratiques calculés pour la prévision des enthalpies standard de formation à l'état solide sont approximativement 4,5 fois plus élevés que ceux obtenus avec la démarche semi-prédictive. Ceci précisé, ils restent toutefois acceptables en considérant les critères établis par les détoniciens.

En examinant de plus près les résultats, il s'avère que la méthode de calcul des enthalpies standard de formation en phase gazeuse constitue un frein non négligeable à la précision obtenue sur les enthalpies standard de formation en phase solide des molécules étudiées. En effet, les tableaux III-10, III-17 et III-18 le montrent clairement. Les résidus moyens obtenus sur l'estimation de quatre-vingt-quatorze enthalpies standard de formation à l'état gazeux de composés C_xH_y sont environ 4,7 fois plus élevés que ceux calculés sur l'évaluation des enthalpies standard de sublimation. Par ailleurs, les moyennes quadratiques observées sur la prévision des enthalpies standard de formation en phase vapeur sont multipliées par 5,2 fois comparées à celles obtenues sur l'estimation des quatre-vingt-neuf enthalpies standard de sublimation.

Une comparaison des résidus moyens et des moyennes quadratiques obtenus dans le cas de la méthode entièrement prédictive peut être effectuée avec ceux calculés durant l'exploitation de la banque de données bibliographiques établie précédemment (*cf.* tableau III-1). Au cours de cette dernière étude, les enthalpies standard de formation en phase gazeuse ont été calculées, quand cela était possible, grâce aux valeurs de contributions de groupes

déterminées par le laboratoire (*cf.* annexe 4). Au final, cent soixante-sept enthalpies standard de formation à l'état vapeur ont été déterminées et comparées aux valeurs expérimentales. Est exclu de ce travail comparatif le fullerène C_{70} [115383-22-7] dont l'enthalpie standard de formation en phase gazeuse a été publiée avec une incertitude très élevée. Les résidus moyens et moyennes quadratiques correspondants sont rassemblés dans le tableau suivant :

Unité	Résidu moyen	Moyenne quadratique
$kJ.mol^{-1}$	18,8	34,0
$J.g^{-1}$	118,4	220,2

Tableau III-20 : Résidus moyens et moyennes quadratiques obtenus sur la prévision de 167 enthalpies standard de formation en phase gazeuse de composés contenant les atomes C, H, O, N, S, F, Cl.

Ces valeurs sont tout à fait comparables à celles présentées dans le tableau III-17, *i.e.* aux résidus moyens et moyennes quadratiques calculés sur la prévision des enthalpies standard de formation à l'état gazeux des composés C_xH_y étudiés dans le cadre de la méthode entièrement prédictive. En effet, les mêmes ordres de grandeurs sont obtenus.

Notons qu'il paraît étonnant que ce soit la méthode de calcul des enthalpies de formation en phase gazeuse qui pose problème et non pas la technique relative à l'estimation des enthalpies de sublimation. En effet, un plus grand nombre de données expérimentales publiées dans la littérature existent pour l'état vapeur. Il serait donc logique que les contributions de groupes permettant de calculer les enthalpies de formation soient déterminées avec une plus grande précision. Ceci précisé, il est difficile d'expliquer les raisons pour lesquelles les résultats obtenus pour l'évaluation des enthalpies de formation en phase gazeuse ne sont pas très satisfaisants. En effet, nous rappelons ici que nous n'avons pas nous-mêmes constitué la banque de contributions de groupes concernant l'état vapeur.

Une amélioration de la méthode d'estimation des enthalpies standard de formation en phase gazeuse s'impose donc. Pour cela, une mise à jour des valeurs d'enthalpies ayant permis de déterminer les contributions de groupes de deuxième ordre correspondantes serait indispensable.

5. Conclusion

Deux approches indirectes ont été mises en œuvre et ont été comparées afin d'évaluer des enthalpies standard de formation en phase solide de composés C_xH_y.

La première, appelée méthode semi-prédictive (ou méthode A), consiste à utiliser directement les valeurs d'enthalpies standard de formation à l'état gazeux publiées dans la littérature des molécules en question et à n'estimer que les enthalpies standard de sublimation à l'aide de contributions de groupes prédéfinies. La combinaison de ces deux grandeurs permet ainsi de déduire une valeur d'enthalpie standard de formation en phase solide des substances étudiées. Les résultats prédictifs se sont avérés fort encourageants. Cependant, le manque de données expérimentales concernant les enthalpies standard de changement d'état (permettant d'établir les valeurs de contributions de groupes correspondantes) pose problème quant à l'extension de cette méthode aux composés contenant des atomes autres que le carbone et l'hydrogène.

La seconde démarche indirecte envisagée, dite méthode entièrement prédictive (ou méthode B), consiste à estimer non seulement les valeurs d'enthalpies standard de sublimation mais également les valeurs d'enthalpies standard de formation en phase gazeuse. Les résultats obtenus grâce à cette méthode se sont montrés beaucoup moins satisfaisants comparés à ceux établis à l'aide de la méthode A. Les calculs d'erreurs ont clairement démontré que la limite essentielle de l'approche entièrement prédictive réside en l'évaluation des enthalpies standard de formation en phase vapeur. On peut noter que Mathieu *et al.* [57] en sont arrivés à la même conclusion. Ces auteurs adoptent, de même, une démarche indirecte pour estimer des enthalpies standard de formation à l'état solide. La différence avec l'approche testée dans notre cas est qu'ils n'utilisent pas de méthode de contribution de groupes mais une méthode semi-empirique (*cf.* paragraphe 2.6.1. c. du chapitre I). Les auteurs ont ainsi mis en parallèle trois techniques d'évaluation. Celles-ci utilisent toutes la même méthode d'estimation des enthalpies standard de sublimation mais des approches différentes pour ce qui est de l'évaluation des enthalpies standard de formation en phase gazeuse. Au final, la moyenne quadratique calculée sur l'évaluation des enthalpies standard de formation à l'état solide est accrue d'environ 150 joules par gramme d'une technique à une autre. La prévision des enthalpies standard de formation en phase vapeur représente donc un frein majeur à l'estimation des enthalpies standard de formation à l'état solide.

La démarche indirecte ayant ainsi montré ses limites, une approche directe a été développée. La fiabilité et la précision obtenues grâce à cette dernière sont amplement démontrées dans le chapitre suivant.

Chapitre IV : Démarche directe

1. Etablissement d'une banque d'enthalpies standard de formation en phase solide et Détermination de contributions de groupes

1.1. Constitution d'une base de données

La banque de données thermochimiques ayant permis de rassembler de très nombreuses valeurs d'enthalpies standard de formation en phase solide est, de même que précédemment (*cf.* chapitre III) :

Thermochemical Data of Organic Compounds
J.B. Pedley, R.D. Naylor et S.P. Kirby [163].

Les deux autres sources d'information ont été les suivantes :

NIST Chemistry WebBook [75]

et

ICT Database of Thermochemical Values [77].

Ces dernières bases de données ont été utilisées afin de vérifier si des valeurs plus récentes et plus fiables d'enthalpies standard de formation à l'état solide avaient été publiées depuis l'édition du Pedley [163].

Les tableaux III-5 et IV-1 à IV-3 regroupent l'ensemble des données recueillies. Y sont présentés la formule brute, le numéro CAS (si celui-ci est connu) et l'enthalpie standard de formation en phase solide de chacune des mille vingt-cinq molécules étudiées. Les données concernant les cent quarante-cinq composés de formule générale C_xH_y ne sont pas répétées ci-dessous car elles ont déjà été présentées dans le tableau III-5. Le tableau IV-1 rassemble les enthalpies de formation de deux cent cinquante-neuf substances contenant des atomes de carbone, d'hydrogène et d'oxygène. Quant aux tableaux IV-2 et IV-3, ils présentent respectivement les enthalpies standard de formation de cent trente-quatre molécules $C_xH_yN_w$ et de quatre cent quatre-vingt-sept molécules $C_xH_yN_wO_z$.

L'ensemble des données recueillies est converti en joules par gramme dans les tableaux présentés en annexe 9.

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.) kJ.mol^{-1}
phénol	C_6H_6O	108-95-2	-165,1 ± 0,8
2-méthylphénol	C_7H_8O	95-48-7	-204,6 ± 1,0
4-méthylphénol	C_7H_8O	106-44-5	-199,3 ± 0,8
4-éthylphénol	$C_8H_{10}O$	123-07-9	-224,4 ± 1,0
2,3-diméthylphénol	$C_8H_{10}O$	526-75-0	-241,2 ± 1,0
2,5-diméthylphénol	$C_8H_{10}O$	95-87-4	-246,6 ± 0,9
2,6-diméthylphénol	$C_8H_{10}O$	576-26-1	-237,4 ± 1,1
3,4-diméthylphénol	$C_8H_{10}O$	95-65-8	-242,3 ± 1,2
3,5-diméthylphénol	$C_8H_{10}O$	108-68-9	-244,4 ± 1,2
2-isopropylphénol	$C_9H_{12}O$	88-69-7	-246,6 ± 12,6
3-isopropylphénol	$C_9H_{12}O$	618-45-1	-263,0 ± 12,6
4-isopropylphénol	$C_9H_{12}O$	99-89-8	-279,7 ± 12,6
1-naphtol	$C_{10}H_8O$	90-15-3	-121,0 ± 1,0
2-naphtol	$C_{10}H_8O$	135-19-3	-124,2 ± 1,0
1,2,3,4-tétrahydro-1-naphtol	$C_{10}H_{12}O$	529-33-9	-241,4 ± 25,1
5,6,7,8-tétrahydro-1-naphtol	$C_{10}H_{12}O$	529-35-1	-285,3 ± 5,4
2-isopropyl-5-méthylphénol	$C_{10}H_{14}O$	89-83-8	-280,33
1-adamantanol	$C_{10}H_{16}O$	768-95-6	-397,6 ± 2,6
2-adamantanol	$C_{10}H_{16}O$	700-57-2	-388,0 ± 3,8
exo-4-hydroxy-exo-exo-tétracyclo[6.2.1.1^{3,6}.0^{2,7}]dodécane	$C_{12}H_{18}O$	74007-11-7	-284,9 ± 3,9
exo-4-hydroxy-exo-endo-tétracyclo[6.2.1.1^{3,6}.0^{2,7}]dodécane	$C_{12}H_{18}O$	107133-43-7	-294,3 ± 4,6
exo-4-hydroxy-endo-endo-tétracyclo[6.2.1.1^{3,6}.0^{2,7}]dodécane	$C_{12}H_{18}O$	7273-98-5	-264,2 ± 3,6
(1,1'-biphényl)méthanol	$C_{13}H_{12}O$	41376-19-6	-104,8 ± 2,0
1-tridécanol	$C_{13}H_{28}O$	112-70-9	-599,4 ± 1,0
1-diamantanol	$C_{14}H_{20}O$	30545-19-8	-428,8 ± 1,1
3-diamantanol	$C_{14}H_{20}O$	30545-24-5	-413,8 ± 1,5
4-diamantanol	$C_{14}H_{20}O$	30651-03-7	-434,9 ± 1,7
1-tétradécanol	$C_{14}H_{30}O$	112-72-1	-629,6 ± 0,8
1-pentadécanol	$C_{15}H_{32}O$	629-76-5	-658,2 ± 0,8
1-hexadécanol	$C_{16}H_{34}O$	36653-82-4	-686,5 ± 1,2
α,α-diphényl-benzèneméthanol	$C_{19}H_{16}O$	76-84-6	-2,5 ± 2,3
alcool 4,4',4"-triméthyltrityl	$C_{22}H_{22}O$	3247-00-5	-67,4 ± 23,8
3',5'-diisopropyl-4,4-diméthyl-3-phényl-1,2-benzocyclobutèn-3-ol	$C_{22}H_{28}O$	33574-16-2	-218,8 ± 1,7
ergostérol	$C_{28}H_{44}O$	57-87-4	-789,8 ± 24,7
acide 3-butynoïque	$C_4H_4O_2$	2345-51-9	-241,8 ± 1,0
acide 3-pentynoïque	$C_5H_6O_2$	36781-65-4	-292,3 ± 3,8
cis-1,2-cyclopentanediol	$C_5H_{10}O_2$	5057-98-7	-485,1 ± 4,2
trans-1,2-cyclopentanediol	$C_5H_{10}O_2$	5057-99-8	-490,1 ± 2,9
2,2-diméthyl-1,3-propanediol	$C_5H_{12}O_2$	126-30-7	-551,2 ± 4,3
hydroquinone	$C_6H_6O_2$	123-31-9	-364,5 ± 1,6
résorcinol	$C_6H_6O_2$	108-46-3	-368,0 ± 0,5
1,6-hexanediol	$C_6H_{14}O_2$	629-11-8	-569,9 ± 4,8
acide benzoïque	$C_7H_6O_2$	65-85-0	-385,2 ± 0,5
2-hydroxy-2,4,6-cycloheptatrièn-1-one	$C_7H_6O_2$	533-75-5	-239,3 ± 1,4
1-(2-hydroxyphényl)éthanone	$C_8H_8O_2$	118-93-4	-357,6 ± 3,8
1-(3-hydroxyphényl)éthanone	$C_8H_8O_2$	121-71-1	-370,6 ± 4,2
1-(4-hydroxyphényl)éthanone	$C_8H_8O_2$	99-93-4	-364,3 ± 4,2
acide 2-méthylbenzoïque	$C_8H_8O_2$	118-90-1	-416,5 ± 0,8
acide 3-méthylbenzoïque	$C_8H_8O_2$	99-04-7	-426,1 ± 0,9
acide 4-méthylbenzoïque	$C_8H_8O_2$	99-94-5	-429,2 ± 1,0
1,4-benzènediméthanol	$C_8H_{10}O_2$	589-29-7	-393,9 ± 1,7

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.) kJ.mol^{-1}
2,5-diméthyl-3-hexyne-2,5-diol	$C_8H_{14}O_2$	142-30-3	-385,7 ± 1,4
2,5-diméthyl-2,5-hexanediol	$C_8H_{18}O_2$	110-03-2	-681,7 ± 1,7
acide (Z)-3-phényl-2-propénoïque	$C_9H_8O_2$	102-94-3	-312,1 ± 6,9
acide (E)-3-phényl-2-propénoïque	$C_9H_8O_2$	140-10-3	-336,9 ± 1,8
acide 2,3-diméthylbenzoïque	$C_9H_{10}O_2$	603-79-2	-450,4 ± 0,9
acide 2,4-diméthylbenzoïque	$C_9H_{10}O_2$	611-01-8	-458,5 ± 0,9
acide 2,5-diméthylbenzoïque	$C_9H_{10}O_2$	610-72-0	-456,1 ± 0,9
acide 2,6-diméthylbenzoïque	$C_9H_{10}O_2$	632-46-2	-440,7 ± 0,9
acide 3,4-diméthylbenzoïque	$C_9H_{10}O_2$	619-04-5	-468,8 ± 1,1
acide 3,5-diméthylbenzoïque	$C_9H_{10}O_2$	499-06-9	-466,4 ± 0,8
acide 2-éthylbenzoïque	$C_9H_{10}O_2$	612-19-1	-441,3 ± 1,0
acide 3-éthylbenzoïque	$C_9H_{10}O_2$	619-20-5	-445,8 ± 0,8
acide 4-éthylbenzoïque	$C_9H_{10}O_2$	619-64-7	-460,7 ± 0,9
2,6-diméthyl-2,6-heptanediol	$C_9H_{20}O_2$	6257-51-8	-761,1 ± 1,7
2,7-naphtalènediol	$C_{10}H_8O_2$	582-17-2	-326,1 ± 1,1
2,3-naphtalènediol	$C_{10}H_8O_2$	92-44-4	-316,4 ± 0,8
acide 2,4-diméthylphénylacétique	$C_{10}H_{12}O_2$	6331-04-0	-495,8 ± 6,3
acide 2,3,4-triméthylbenzoïque	$C_{10}H_{12}O_2$	1076-47-7	-486,6 ± 1,0
acide 2,3,5-triméthylbenzoïque	$C_{10}H_{12}O_2$	2437-66-3	-488,7 ± 0,9
acide 2,3,6-triméthylbenzoïque	$C_{10}H_{12}O_2$	2529-36-4	-475,7 ± 0,9
acide 2,4,5-triméthylbenzoïque	$C_{10}H_{12}O_2$	528-90-5	-495,7 ± 1,3
acide 2,4,6-triméthylbenzoïque	$C_{10}H_{12}O_2$	480-63-7	-477,9 ± 1,0
acide 3,4,5-triméthylbenzoïque	$C_{10}H_{12}O_2$	1076-88-6	-500,9 ± 1,0
2-hydroxy-4-isopropyl-2,4,6-cycloheptatrièn-1-one	$C_{10}H_{12}O_2$	499-44-5	-340,6 ± 3,8
acide décanoïque	$C_{10}H_{20}O_2$	334-48-5	-713,7 ± 1,0
1,10-décanediol	$C_{10}H_{22}O_2$	112-47-0	-693,5 ± 2,6
2,7-diméthyl-2,7-octanediol	$C_{10}H_{22}O_2$	19781-07-8	-730,0 ± 2,1
acide 1-naphtalènecarboxylique	$C_{11}H_8O_2$	86-55-5	-333,5 ± 1,0
acide 2-naphtalènecarboxylique	$C_{11}H_8O_2$	93-09-4	-346,1 ± 1,5
acide 2,3,4,5-tétraméthylbenzoïque	$C_{11}H_{14}O_2$	2529-39-7	-514,4 ± 1,4
acide 2,3,4,6-tétraméthylbenzoïque	$C_{11}H_{14}O_2$	2408-38-0	-507,7 ± 1,1
acide 2,3,5,6-tétraméthylbenzoïque	$C_{11}H_{14}O_2$	2604-45-7	-506,1 ± 1,1
acide 3,5-diéthylbenzoïque	$C_{11}H_{14}O_2$	3854-90-8	-511,9 ± 1,0
acide 2-tert-butylbenzoïque	$C_{11}H_{14}O_2$	1077-58-3	-476,2 ± 1,3
acide 3-tert-butylbenzoïque	$C_{11}H_{14}O_2$	7498-54-6	-504,3 ± 0,9
acide 4-tert-butylbenzoïque	$C_{11}H_{14}O_2$	98-73-7	-502,9 ± 1,0
acide adamantane-1-carboxylique	$C_{11}H_{16}O_2$	828-51-3	-643,1 ± 3,6
acide adamantane-2-carboxylique	$C_{11}H_{16}O_2$	15897-81-1	-627,2 ± 3,8
acide undécanoïque	$C_{11}H_{22}O_2$	112-37-8	-735,9 ± 1,0
1-naphtyl acétate	$C_{12}H_{10}O_2$	830-81-9	-305,0 ± 1,2
2-naphtyl acétate	$C_{12}H_{10}O_2$	1523-11-1	-309,6 ± 1,2
acide 1-naphtalèneacétique	$C_{12}H_{10}O_2$	86-87-3	-359,2 ± 0,9
acide 2-naphtalèneacétique	$C_{12}H_{10}O_2$	581-96-4	-371,9 ± 1,1
acide pentaméthylbenzoïque	$C_{12}H_{16}O_2$	2243-32-5	-536,1 ± 1,4
3,6-diéthyloct-4-yne-3,6-diol	$C_{12}H_{22}O_2$	2044-37-3	-481,5 ± 2,6
acide dodécanoïque	$C_{12}H_{24}O_2$	143-07-7	-774,6 ± 1,0
2,9-diméthyl-2,9-décanediol	$C_{12}H_{26}O_2$	22092-57-5	-789,6 ± 4,6
acide phényl ester benzoïque	$C_{13}H_{10}O_2$	93-99-2	-241,6 ± 2,1
acide 2-phénylbenzoïque	$C_{13}H_{10}O_2$	947-84-2	-349,1 ± 6,3
acide tridécanoïque	$C_{13}H_{26}O_2$	638-53-9	-806,6 ± 1,4
2,10-diméthyl-2,10-undécanediol	$C_{13}H_{28}O_2$	22092-58-6	-835,8 ± 2,6

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.) kJ.mol^{-1}
2-hydroxy-1,2-diphényléthanone	$C_{14}H_{12}O_2$	119-53-9	-247,7 ± 2,8
acide tétradécanoïque	$C_{14}H_{28}O_2$	544-63-8	-833,5 ± 1,5
2,11-diméthyl-2,11-dodécanediol	$C_{14}H_{30}O_2$	22092-59-7	-846,2 ± 3,8
2,2'-bis(4-hydroxyphényl)propane	$C_{15}H_{16}O_2$	80-05-7	-368,6 ± 1,8
acide 3,5-Di-tert-butylbenzoïque	$C_{15}H_{22}O_2$	16225-26-6	-624,6 ± 1,0
acide pentadécanoïque	$C_{15}H_{30}O_2$	1002-84-2	-861,7 ± 1,6
acide hexadécanoïque	$C_{16}H_{32}O_2$	57-10-3	-891,5 ± 1,7
acide 2-naphtyl ester benzoïque	$C_{17}H_{12}O_2$	93-44-7	-184,8 ± 3,4
acide heptadécanoïque	$C_{17}H_{34}O_2$	506-12-7	-924,4 ± 1,8
acide octadécanoïque	$C_{18}H_{36}O_2$	57-11-4	-947,7 ± 2,1
acide nonadécanoïque	$C_{19}H_{38}O_2$	646-30-0	-984,0 ± 2,4
acide éicosanoïque	$C_{20}H_{40}O_2$	506-30-9	-1011,9 ± 1,6
acide (E)-13-docosénoïque	$C_{22}H_{42}O_2$	506-33-2	-960,7 ± 2,8
acide (S)-2-hydroxypropanoïque	$C_3H_6O_3$	79-33-4	-694,0 ± 1,0
acide furancarboxylique	$C_5H_4O_3$	26447-28-9	-498,4 ± 1,1
2-(hydroxyméthyl)-2-méthyl-1,3-propanediol	$C_5H_{12}O_3$	77-85-0	-744,6 ± 2,9
2-éthyl-2-(hydroxyméthyl)-1,3-propanediol	$C_6H_{14}O_3$	77-99-6	-750,9 ± 3,6
acide perbenzoïque	$C_7H_6O_3$	93-59-4	-367,0 ± 12,8
acide salicylique	$C_7H_6O_3$	69-72-7	-589,9 ± 1,3
acide 3-(2-furanyl)-2-propénoïque	$C_7H_6O_3$	539-47-9	-459,0 ± 6,3
3-hydroxy-4-méthoxy-benzaldéhyde	$C_8H_8O_3$	621-59-0	-453,4 ± 5,9
2,4-dihydroxyacétophénone	$C_8H_8O_3$	89-84-9	-573,5 ± 3,8
acide (R,S)-α-hydroxybenzèneacétique	$C_8H_8O_3$	611-72-3	-579,4 ± 0,9
acide (S)-α-hydroxybenzèneacétique	$C_8H_8O_3$	17199-29-0	-580,6 ± 0,9
acide 2-méthoxybenzoïque	$C_8H_8O_3$	579-75-9	-538,5 ± 0,7
acide 3-méthoxybenzoïque	$C_8H_8O_3$	586-38-9	-553,5 ± 0,7
acide 4-méthoxybenzoïque	$C_8H_8O_3$	100-09-4	-561,7 ± 0,8
acide 3-hydroxy-2-naphtoïque	$C_{11}H_8O_3$	92-70-6	-547,8 ± 1,0
acide dodécanepéroxoïque	$C_{12}H_{24}O_3$	2388-12-7	-680,3 ± 8,4
phényl-2-hydroxybenzoate	$C_{13}H_{10}O_3$	118-55-8	-436,6 ± 4,6
diphényl carbonate	$C_{13}H_{10}O_3$	102-09-0	-401,2 ± 1,9
acide carbonique dicyclohexyl ester	$C_{13}H_{22}O_3$	4427-97-8	-830,2 ± 5,9
acide tétradécanepéroxoïque	$C_{14}H_{28}O_3$	19816-73-0	-749,9 ± 9,6
acide 2-méthylbenzoïque anhydride	$C_{16}H_{14}O_3$	607-86-3	-533,5 ± 7,9
acide 4-méthylbenzoïque anhydride	$C_{16}H_{14}O_3$	13222-85-0	-521,0 ± 7,9
acide 1-méthyl-1-phényléthyl ester benzènecarbopéroxoïque	$C_{16}H_{16}O_3$	7074-00-2	-231,5 ± 12,1
acide hexadécanepéroxoïque	$C_{16}H_{32}O_3$	7311-29-7	-801,9 ± 9,2
acide 3-phényl-2-propénoïque anhydride	$C_{18}H_{14}O_3$	538-56-7	-347,8 ± 8,4
acide octadécanepéroxoïque	$C_{18}H_{36}O_3$	5796-86-1	-857,3 ± 11,3
acide oxalique	$C_2H_2O_4$	144-62-7	-821,7 ± 4,4
dioxybisméthanol	$C_2H_6O_4$	17088-73-2	-665,8 ± 5,1
acide malonique	$C_3H_4O_4$	141-82-2	-891,0 ± 0,4
acide 2-butynedioïque	$C_4H_2O_4$	142-45-0	-577,4 ± 4,6
3,4-dihydroxy-3-cyclobutène-1,2-dione	$C_4H_2O_4$	2892-51-5	-598,2 ± 0,4
acide (Z)-2-butènedioïque	$C_4H_4O_4$	110-16-7	-789,4 ± 0,8
acide (E)-2-butènedioïque	$C_4H_4O_4$	110-17-8	-811,7 ± 0,8
acide butanedioïque	$C_4H_6O_4$	110-15-6	-940,5 ± 0,4
acide éthanedioïque diméthyl ester	$C_4H_6O_4$	553-90-2	-756,3 ± 0,7
2(R),3(S)-1,2,3,4-butanetétrol	$C_4H_{10}O_4$	149-32-6	-910,4 ± 1,3
acide (E)-2-méthyl-2-butènedioïque	$C_5H_6O_4$	498-24-8	-824,4 ± 1,5
acide méthylènebutanedioïque	$C_5H_6O_4$	97-65-4	-841,1 ± 0,6

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.) kJ.mol^{-1}
acide méthylbutanedioïque	$C_5H_8O_4$	498-21-5	-958,2 ± 1,1
acide pentanedioïque	$C_5H_8O_4$	110-94-1	-960,0 ± 1,2
2,2-bis(hydroxyméthyl)-1,3-propanediol	$C_5H_{12}O_4$	115-77-5	-920,6 ± 2,8
acide 2,2-diméthylbutanedioïque	$C_6H_{10}O_4$	597-43-3	-987,8 ± 1,4
acide méso-2,3-diméthylbutanedioïque	$C_6H_{10}O_4$	608-39-9	-977,5 ± 1,5
acide racémique-2,3-diméthylbutanedioïque	$C_6H_{10}O_4$	608-40-2	-983,8 ± 1,5
acide (-)-2,3-diméthylbutanedioïque	$C_6H_{10}O_4$	57694-62-9	-982,5 ± 1,5
acide 2-éthylbutanedioïque	$C_6H_{10}O_4$	636-48-6	-989,2 ± 1,5
acide hexanedioïque	$C_6H_{10}O_4$	124-04-9	-994,3 ± 0,8
5-(1α,2β,3β,4α)-1,2,3,4-cyclohexènetétrol	$C_6H_{10}O_4$	526-87-4	-836,3 ± 1,7
acide triméthylbutanedioïque	$C_7H_{12}O_4$	2103-16-4	-1000,8 ± 1,8
acide heptanedioïque	$C_7H_{12}O_4$	111-16-0	-1009,4 ± 1,1
acide 1,2-benzènedicarboxylique	$C_8H_6O_4$	88-99-3	-782,0 ± 0,9
acide 1,3-benzènedicarboxylique	$C_8H_6O_4$	121-91-5	-803,0 ± 0,8
acide 1,4-benzènedicarboxylique	$C_8H_6O_4$	100-21-0	-816,1 ± 0,7
acide cis-cyclohexane-1,2-dicarboxylique	$C_8H_{12}O_4$	610-09-3	-961,1 ± 7,5
acide trans-cyclohexane-1,2-dicarboxylique	$C_8H_{12}O_4$	2305-32-0	-970,7 ± 7,5
acide tétraméthylbutanedioïque	$C_8H_{14}O_4$	630-51-3	-1012,4 ± 2,1
acide 2,2-diéthylbutanedioïque	$C_8H_{14}O_4$	5692-97-7	-1032,7 ± 2,1
acide méso-2,3-diéthylbutanedioïque	$C_8H_{14}O_4$	35392-80-4	-1019,2 ± 2,1
acide racémique-2,3-diéthylbutanedioïque	$C_8H_{14}O_4$	35392-77-9	-1026,3 ± 2,1
acide octanedioïque	$C_8H_{14}O_4$	505-48-6	-1038,0 ± 1,3
acide 2-acétoxybenzoïque	$C_9H_8O_4$	50-78-2	-758,14
acide nonanedioïque	$C_9H_{16}O_4$	123-99-9	-1054,3 ± 1,9
acide phénylbutanedioïque	$C_{10}H_{10}O_4$	635-51-8	-841,0 ± 2,3
2,4-diacétyl-1,3-benzènediol	$C_{10}H_{10}O_4$	2163-12-4	-753,5 ± 6,3
4,6-diacétyl-1,3-benzènediol	$C_{10}H_{10}O_4$	2161-85-5	-776,5 ± 6,7
acide 1,3-benzènedicarboxylique diméthyl ester	$C_{10}H_{10}O_4$	1459-93-4	-730,9 ± 1,0
acide 1,4-benzènedicarboxylique diméthyl ester	$C_{10}H_{10}O_4$	120-61-6	-732,6 ± 1,0
1,2,3-propanetriol 1-benzoate	$C_{10}H_{12}O_4$	3376-59-8	-777,3 ± 1,2
1,2,3-propanetriol 2-benzoate	$C_{10}H_{12}O_4$		-772,8 ± 1,2
acide triéthylbutanedioïque	$C_{10}H_{18}O_4$	2103-18-6	-1066,3 ± 2,8
acide décanedioïque	$C_{10}H_{18}O_4$	111-20-6	-1082,6 ± 2,1
acide undécanedioïque	$C_{11}H_{20}O_4$	1852-04-6	-1099,4 ± 2,6
acide tétraéthylsuccinique	$C_{12}H_{22}O_4$	4111-60-8	-1096,5 ± 3,4
acide dodécanedioïque	$C_{12}H_{22}O_4$	693-23-2	-1130,0 ± 2,9
acide tridécanedioïque	$C_{13}H_{24}O_4$	505-52-2	-1148,3 ± 3,4
1,2,3-propanetriol 1-décanoate	$C_{13}H_{26}O_4$	2277-23-8	-1109,0 ± 1,3
1,2,3-propanetriol 2-décanoate	$C_{13}H_{26}O_4$	3376-48-5	-1095,7 ± 2,0
acide oxalique diphényl ester	$C_{14}H_{10}O_4$	3155-16-6	-539,7 ± 3,4
1,2,3-propanetriol 1-dodécanoate	$C_{15}H_{30}O_4$	142-18-7	-1160,9 ± 1,7
1,2,3-propanetriol 2-dodécanoate	$C_{15}H_{30}O_4$	1678-45-1	-1152,6 ± 1,7
acide méso-2,3-diphénylbutanedioïque	$C_{16}H_{14}O_4$	1225-13-4	-733,5 ± 3,8
acide racémique-2,3-diphénylbutanedioïque	$C_{16}H_{14}O_4$	7584-72-7	-740,1 ± 3,8
(-)α-desmotroposantonin acétate	$C_{17}H_{20}O_4$	14794-71-9	-870,6 ± 2,7
(+)β-desmotroposantonin acétate	$C_{17}H_{20}O_4$	14794-69-5	-879,2 ± 1,9
1,2,3-propanetriol 1-tétradécanoate	$C_{17}H_{34}O_4$	589-68-4	-1222,6 ± 1,9
1,2,3-propanetriol 2-tétradécanoate	$C_{17}H_{34}O_4$	3443-83-2	-1212,9 ± 1,9
1,2,3-propanetriol 1-hexadécanoyl ester	$C_{19}H_{38}O_4$	542-44-9	-1281,5 ± 2,2
1,2,3-propanetriol 2-hexadécanoyl ester	$C_{19}H_{38}O_4$	23470-00-0	-1268,7 ± 1,9
acide 1,2-benzènedicarboxylique diphényl ester	$C_{20}H_{14}O_4$	84-62-8	-489,2 ± 9,2

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.) kJ.mol^{-1}
acide 1,2-benzènedicarboxylique dicyclohexyl ester	$C_{20}H_{26}O_4$	84-61-7	-931,4 ± 10,9
1,2,3-propanetriol 1-octadécanoyl ester	$C_{21}H_{42}O_4$	123-94-4	-1337,4 ± 1,9
1,2,3-propanetriol 2-octadécanoyl ester	$C_{21}H_{42}O_4$	621-61-4	-1321,3 ± 2,4
acide (R)-hydroxybutanedioïque	$C_4H_6O_5$	636-61-3	-1105,7 ± 0,6
acide (S)-hydroxybutanedioïque	$C_4H_6O_5$	97-67-6	-1103,6 ± 4,2
acide 2-oxopentanedioïque	$C_5H_6O_5$	328-50-7	-1026,2 ± 0,9
α-D-xylose	$C_5H_{10}O_5$	31178-70-8	-1057,8 ± 0,9
D-ribose	$C_5H_{10}O_5$	50-69-1	-1051,1 ± 1,7
D-arabinose	$C_5H_{10}O_5$	10323-20-3	-1057,9 ± 1,6
xylitol	$C_5H_{12}O_5$	87-99-0	-1118,5 ± 0,7
1,2-anhydro-3,4,5,6-alloinositol	$C_6H_{10}O_5$	23559-36-6	-906,2 ± 1,7
2-(diacétoxyméthyl)furane	$C_9H_{10}O_5$	613-75-2	-882,1 ± 0,6
benzoylcarboxypéroxyde phényl ester	$C_{14}H_{10}O_5$	962-16-3	-484,9 ± 8,4
benzoyl(cyclohexyloxy)carbonylpéroxyde	$C_{14}H_{16}O_5$	20666-86-8	-741,5 ± 8,4
acide (E)-1-propène-1,2,3-tricarboxylique	$C_6H_6O_6$	4023-65-8	-1232,7 ± 2,5
acide (Z)-1-propène-1,2,3-tricarboxylique	$C_6H_6O_6$	585-84-2	-1224,4 ± 7,5
acide L-ascorbique	$C_6H_8O_6$	50-81-7	-1164,6 ± 1,0
α-D-glucose	$C_6H_{12}O_6$	26655-34-5	-1273,3 ± 1,1
L-sorbose	$C_6H_{12}O_6$	87-79-6	-1271,5 ± 0,5
β-D-fructose	$C_6H_{12}O_6$	57-48-7	-1265,6 ± 0,5
D-mannose	$C_6H_{12}O_6$	3458-28-4	-1263,0 ± 3,4
α-D-galactose	$C_6H_{12}O_6$	3646-73-9	-1286,3 ± 0,5
D-mannitol	$C_6H_{14}O_6$	69-65-8	-1337,1 ± 1,8
galactitol	$C_6H_{14}O_6$	608-66-2	-1346,7 ± 1,8
α-D-méthylglucopyranoside	$C_7H_{14}O_6$	97-30-3	-1233,3 ± 0,9
β-D-méthylglucopyranoside	$C_7H_{14}O_6$	709-50-2	-1237,5 ± 0,5
acide 1,2,3-benzènetricarboxylique	$C_9H_6O_6$	569-51-7	-1160,3 ± 0,9
acide 1,2,4-benzènetricarboxylique	$C_9H_6O_6$	528-44-9	-1179,1 ± 0,9
acide 1,3,5-benzènetricarboxylique	$C_9H_6O_6$	554-95-0	-1190,1 ± 1,0
4-hydroxy-2H-pyran-3,3,5,5,(4H,6H)-tétraméthanol	$C_9H_{18}O_6$	4744-47-2	-1267,7 ± 5,0
acide 1,3,5-benzènetricarboxylique triméthyl ester	$C_{12}H_{12}O_6$	2672-58-4	-1101,1 ± 1,1
acide péroxydicarbonique dicyclohexyl ester	$C_{14}H_{22}O_6$	1561-49-5	-1102,5 ± 13,3
acide 2-hydroxy-1,2,3-propanetricarboxylique	$C_6H_8O_7$	77-92-9	-1543,8 ± 4,6
acide D-glutarique 1,4-lactone	$C_6H_8O_7$	389-36-6	-1435,8 ± 4,2
acide D-glutarique 3,6-lactone	$C_6H_8O_7$	2782-04-9	-1437,5 ± 2,9
α-D-glucose hydrate	$C_6H_{14}O_7$	16824-90-1	-1572,2 ± 0,8
dipentaérythritol	$C_{10}H_{22}O_7$	126-58-9	-1572,3 ± 7,9
acide citrique monohydrate	$C_6H_{10}O_8$	5949-29-1	-1837,5 ± 0,5
acide 1,2,3,4-benzènetétracarboxylique	$C_{10}H_6O_8$	476-73-3	-1548,6 ± 0,9
acide 1,2,3,5-benzènetétracarboxylique	$C_{10}H_6O_8$	479-47-0	-1562,3 ± 1,0
acide 1,2,4,5-benzènetétracarboxylique	$C_{10}H_6O_8$	89-05-4	-1570,8 ± 1,0
acide 1,2,4,5-benzènetétracarboxylique diméthyl ester	$C_{12}H_{10}O_8$	39900-53-3	-1475,5 ± 2,6
acide 1,2,4,5-benzènetétracarboxylique tétraméthyl ester	$C_{14}H_{14}O_8$	635-10-9	-1432,5 ± 1,2
acide 1,2,4,5-benzènetétracarboxylique diéthyl ester	$C_{14}H_{14}O_8$	50853-29-7	-1589,8 ± 2,0
acide 1,2,4,5-benzènetétracarboxylique dipropyl ester	$C_{16}H_{18}O_8$	56941-72-1	-1644,2 ± 2,3
acide 1,2,4,5-benzènetétracarboxylique tétraéthyl ester	$C_{18}H_{22}O_8$	6634-01-1	-1579,6 ± 2,0
acide benzènepentacarboxylique	$C_{11}H_6O_{10}$	1585-40-6	-1929,7 ± 1,3
acide benzènepentacarboxylique pentaméthyl ester	$C_{16}H_{16}O_{10}$	3327-06-8	-1788,1 ± 1,5
D-sucrose	$C_{12}H_{22}O_{11}$	57-50-1	-2226,1 ± 3,0
β-lactose	$C_{12}H_{22}O_{11}$	5965-66-2	-2236,7 ± 0,7
α-D-glucose 2,3,4,5,6-pentaacétate	$C_{16}H_{22}O_{11}$	3891-59-6	-2249,4 ± 1,7

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.) kJ.mol^{-1}
acide benzènehexacarboxylique	$C_{12}H_6O_{12}$	517-60-2	-2298,7 ± 1,3
β-maltose monohydrate	$C_{12}H_{24}O_{12}$	6363-53-7	-2459,6 ± 0,7
α-lactose monohydrate	$C_{12}H_{24}O_{12}$	10639-26-6	-2484,1 ± 1,1
acide benzènehexacarboxylique hexaméthyl ester	$C_{18}H_{18}O_{12}$	6237-59-8	-2110,8 ± 1,8

Tableau IV-1 : Banque d'enthalpies standard de formation en phase solide concernant les 259 molécules $C_xH_yO_z$ étudiées dans le cadre de la démarche directe.

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.) kJ.mol^{-1}
méthanetétracarbonitrile	C_5N_4	24331-09-7	611,6 ± 1,7
éthènetétracarbonitrile	C_6N_4	670-54-2	623,8 ± 1,7
quinuclidine	$C_7H_{13}N$	100-76-5	-55,0 ± 1,2
indole	C_8H_7N	120-72-9	86,7 ± 0,7
endo-bicyclo[2.2.1]heptane-2-carbonitrile	$C_8H_{11}N$	3211-87-8	20,3 ± 1,5
3-azabicyclo[3.2.2]nonane	$C_8H_{15}N$	283-24-9	-101,5 ± 0,8
3-éthyl-2,4,5-triméthyl-1H-pyrrole	$C_9H_{15}N$	520-69-4	-89,2 ± 5,4
1-naphtylamine	$C_{10}H_9N$	134-32-7	67,7 ± 5,4
2-naphtylamine	$C_{10}H_9N$	91-59-8	59,7 ± 5,0
1-phényl-1H-pyrrole	$C_{10}H_9N$	635-90-5	154,3 ± 5,4
2-phényl-1H-pyrrole	$C_{10}H_9N$	3042-22-6	139,2 ± 5,4
2,3-diméthyl-1H-indole	$C_{10}H_{11}N$	91-55-4	4,2 ± 0,9
9H-carbazole	$C_{12}H_9N$	86-74-8	101,7 ± 2,8
2-aminobiphényle	$C_{12}H_{11}N$	90-41-5	93,8 ± 1,1
4-aminobiphényle	$C_{12}H_{11}N$	92-67-1	81,0 ± 6,3
diphénylamine	$C_{12}H_{11}N$	122-39-4	130,2 ± 1,7
acridine	$C_{13}H_9N$	260-94-6	179,41
biphényl-2-carbonitrile	$C_{13}H_9N$	24973-49-7	232,7 ± 6,7
6,7-benzoquinoline	$C_{13}H_9N$	260-36-6	148,9 ± 3,7
benzo[f]quinoline	$C_{13}H_9N$	85-02-9	150,6 ± 6,2
benzo[h]quinoline	$C_{13}H_9N$	230-27-3	160,2 ± 1,1
p-benzylidèneaniline	$C_{13}H_{11}N$	538-51-2	185,0 ± 2,0
9-méthyl-9H-carbazole	$C_{13}H_{11}N$	1484-12-4	105,5 ± 1,0
4-méthyldiphénylamine	$C_{13}H_{13}N$	620-84-8	48,9 ± 7,1
4,4'-diméthyldiphénylamine	$C_{14}H_{15}N$	620-93-9	-11,6 ± 7,5
N-phényl-2-naphtylamine	$C_{16}H_{13}N$	135-88-6	159,9 ± 1,9
5-méthyl-5H-indéno[2,1-b]quinoline	$C_{17}H_{13}N$	6626-64-8	205,4 ± 12,6
N-benzyldiphénylamine	$C_{19}H_{17}N$	606-87-1	184,7 ± 10,0
tribenzylamine	$C_{21}H_{21}N$	620-40-6	140,7 ± 11,3
cyanamide	CH_2N_2	420-04-2	58,8 ± 0,5
malononitrile	$C_3H_2N_2$	109-77-3	187,9 ± 0,2
1H-pyrazole	$C_3H_4N_2$	288-13-1	105,4 ± 0,7
1H-imidazole	$C_3H_4N_2$	288-32-4	49,8 ± 0,6
(E)-butènedinitrile	$C_4H_2N_2$	764-42-1	268,2 ± 1,7
pyrazine	$C_4H_4N_2$	290-37-9	139,8 ± 1,2
succinonitrile	$C_4H_4N_2$	110-61-2	139,7 ± 0,6
pipérazine	$C_4H_{10}N_2$	110-85-0	-41,8 ± 1,1
2,3-diazabicyclo[2.2.1]hept-2-ène	$C_5H_8N_2$	2721-32-6	152,0 ± 0,8
3-pyridinecarbonitrile	$C_6H_4N_2$	100-54-9	205,8 ± 0,9

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.) kJ.mol^{-1}
2-butyne-1,4-dicarbonitrile	$C_6H_4N_2$		366,8 ± 7,1
1,4-benzènediamine	$C_6H_8N_2$	106-50-3	3,1 ± 0,7
1,2-benzènediamine	$C_6H_8N_2$	95-54-5	39,1 ± 5,7
1,3-benzènediamine	$C_6H_8N_2$	108-45-2	-7,8 ± 4,2
triéthylènediamine	$C_6H_{12}N_2$	280-57-9	28,2 ± 3,6
tétraméthyldiazétine	$C_6H_{12}N_2$	54166-22-2	88,0 ± 2,5
3,3,5,5-tétraméthyl-1-pyrazoline	$C_7H_{14}N_2$	2721-31-5	-22,4 ± 3,5
phtalonitrile	$C_8H_4N_2$	91-15-6	280,6 ± 0,8
1,3-benzènedicarbonitrile	$C_8H_4N_2$	626-17-5	272,5 ± 0,8
1,4-benzènedicarbonitrile	$C_8H_4N_2$	623-26-7	268,5 ± 1,2
tétraméthylbutanedinitrile	$C_8H_{12}N_2$	3333-52-6	14,9 ± 1,3
1,4-diméthyl-2,3-diaza-bicyclo[2.2.2]oct-2-ène	$C_8H_{14}N_2$	49570-30-1	20,4 ± 1,2
Di-2-pyrrolylméthane	$C_9H_{10}N_2$	21211-65-4	126,2 ± 5,0
phénazine	$C_{12}H_8N_2$	92-82-0	243,9 ± 2,4
benzo[c]cinnoline	$C_{12}H_8N_2$	230-17-1	295,1 ± 1,8
(E)-azobenzène	$C_{12}H_{10}N_2$	17082-12-1	308,6 ± 1,9
(Z)-azobenzène	$C_{12}H_{10}N_2$	1080-16-6	357,7 ± 2,1
1,2-diphénylhydrazine	$C_{12}H_{12}N_2$	122-66-7	221,3 ± 1,3
4,4'-diaminobiphényle	$C_{12}H_{12}N_2$	92-87-5	70,7 ± 1,7
2,2',5,5'-tétraméthyl-1,1'-bipyrrole	$C_{12}H_{16}N_2$	10507-71-8	132,3 ± 1,0
9-aminoacridine	$C_{13}H_{10}N_2$	90-45-9	159,2 ± 7,1
2-aminoacridine	$C_{13}H_{10}N_2$	581-28-2	166,4 ± 13,4
N,N'-dibenzylidène-hydrazine	$C_{14}H_{12}N_2$	588-68-1	339,3 ± 13,0
dibenzylidène-1,2-éthylènediamine	$C_{16}H_{16}N_2$	104-71-2	271,4 ± 8,4
tétraphénylhydrazine	$C_{24}H_{20}N_2$	632-52-0	457,9 ± 2,6
guanidine	CH_5N_3	113-00-8	-56,0 ± 1,0
éthylènetricarbonitrile	C_5HN_3	997-76-2	439,3 ± 2,5
1,1,1-éthanetricarbonitrile	$C_5H_3N_3$	10359-20-3	348,6 ± 1,0
2,6-pyridinediamine	$C_5H_7N_3$	141-86-6	-6,5 ± 0,5
1H-benzotriazole	$C_6H_5N_3$	95-14-7	236,5 ± 1,2
1,1,1-tricyano-3-butyne	$C_7H_3N_3$	10359-26-9	605,7 ± 7,5
pyridinium dicyanométhylide	$C_8H_5N_3$	27032-01-5	397,9 ± 3,3
1H-naphto[2,3-d]triazole	$C_{10}H_7N_3$	269-12-5	274,2 ± 2,1
1H-naphto[1,2-d]triazole	$C_{10}H_7N_3$	233-59-0	260,5 ± 2,1
1,3-diphényltriazène	$C_{12}H_{11}N_3$	136-35-6	331,6 ± 1,4
3,6-diaminoacridine	$C_{13}H_{11}N_3$	92-62-6	127,2 ± 6,7
1H-tétrazole	CH_2N_4	288-94-8	236,02
dicyandiamide	$C_2H_4N_4$	461-58-5	21,3 ± 2,0
1H-1,2,4-triazole-3-amine	$C_2H_4N_4$	61-82-5	76,8 ± 3,9
1,5-diméthyltétrazole	$C_3H_6N_4$	5144-11-6	186,19
hexaméthylènetétramine	$C_6H_{12}N_4$	100-97-0	124,1 ± 0,8
1,1,2,2-cyclopropane-tétracarbonitrile	$C_7H_2N_4$	2424-32-0	591,7 ± 10,5
1-phényl-1H-tétrazole	$C_7H_6N_4$	5378-52-9	344,76
5-phényl-1H-tétrazole	$C_7H_6N_4$	18039-42-4	298,0 ± 3,0
1-phényl-5-méthyl-1H-tétrazole	$C_8H_8N_4$	14213-16-2	289,5 ± 2,1
1-méthyl-5-phényl-1H-tétrazole	$C_8H_8N_4$	20743-50-4	292,4 ± 1,3
2-phényl-5-méthyl-2H-tétrazole	$C_8H_8N_4$	22706-20-3	274,8 ± 2,6
2,2'-azo-bis-isobutyronitrile	$C_8H_{12}N_4$	78-67-1	246,0 ± 1,8
1,2-bis(2-cyano-2-propyl)-hydrazine	$C_8H_{14}N_4$	6869-07-4	119,6 ± 4,6
1,4,8,11-tétraazacyclotétradécane	$C_{10}H_{24}N_4$	295-37-4	-115,9 ± 2,1
bicyclo[2.2.1]hept-5-ène-2,2,3,3-tétracarbonitrile	$C_{11}H_6N_4$	6343-21-1	622,8 ± 3,7

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.) kJ.mol^{-1}
3-méthyl-4-cyclohexène-1,1,2,2-tétracarbonitrile	$C_{11}H_8N_4$	13358-02-6	514,7 ± 4,0
tétracyano-p-quinodiméthane	$C_{12}H_4N_4$	1518-16-7	666,1 ± 5,9
bicyclo[2.2.2]oct-5-ène-2,2,3,3-tétracarbonitrile	$C_{12}H_8N_4$	1017-93-2	576,1 ± 3,8
4,5-diméthyl-4-cyclohexène-1,1,2,2-tétracarbonitrile	$C_{12}H_{10}N_4$	69155-29-9	472,4 ± 2,8
1,3-diphényl-1-tétrazène	$C_{12}H_{12}N_4$	35364-31-9	412,1 ± 3,8
1,5-diphényl-1H-tétrazole	$C_{13}H_{10}N_4$	7477-73-8	406,89
2,5-diphényl-2H-tétrazole	$C_{13}H_{10}N_4$	18039-45-7	395,3 ± 2,2
1,5-diphénylformazane	$C_{13}H_{12}N_4$	1885-34-3	457,9 ± 3,8
1,3,5-triphénylformazane	$C_{19}H_{16}N_4$	531-52-2	543,1 ± 4,2
9,10-dihydro-9,10-éthanoanthracène-11,11,12,12-tétracarbonitrile	$C_{20}H_{10}N_4$	1625-84-9	712,5 ± 3,3
21H,23H-porphine	$C_{20}H_{14}N_4$	101-60-0	-1106,9 ± 3,6
2,7,12,17-tétraéthyl-3,8,13,18-tétraméthyl-21H,23H-porphine	$C_{32}H_{38}N_4$	448-71-5	-25,2 ± 18,0
2,8,12,18-tétraéthyl-3,7,13,18-tétraméthyl-21H,23H-porphine	$C_{32}H_{38}N_4$	448-70-4	1,6 ± 18,0
2,3,7,8,12,13,17,18-octaéthyl-21H,23H-porphine	$C_{36}H_{46}N_4$	2683-82-1	-183,2 ± 20,5
5-amino-1H-tétrazole	CH_3N_5	4418-61-5	209,20
5-cyano-1H-tétrazole	C_2HN_5	74418-40-9	402,0 ± 1,5
1-méthyl-5-aminotétrazole	$C_2H_5N_5$	5422-44-6	182,2 ± 4,5
5-amino-2-méthyl-2H-tétrazole	$C_2H_5N_5$	6154-04-7	206,8 ± 2,6
5-méthylamino-1H-tétrazole	$C_2H_5N_5$	53010-03-0	202,5 ± 3,9
1-méthyl-5-méthylaminotétrazole	$C_3H_7N_5$	17267-51-5	200,2 ± 5,9
5-(diméthylamino)-tétrazole	$C_3H_7N_5$	5422-45-7	182,6 ± 4,2
5-amino-1-(2-propényl)-1H-tétrazole	$C_4H_7N_5$	74999-22-7	265,4 ± 1,8
5-amino-2-(2-propényl)-2H-tétrazole	$C_4H_7N_5$	74999-26-1	282,9 ± 1,6
adénine	$C_5H_5N_5$	73-24-5	96,9 ± 1,3
5-amino-1-phényl-1H-tétrazole	$C_7H_7N_5$	5467-78-7	311,0 ± 3,3
1-amino-5-phényl-1H-tétrazole	$C_7H_7N_5$	23579-46-6	305,1 ± 2,6
1-(2-propényl)-5-(2-propénylamino)tétrazole	$C_7H_{11}N_5$	66907-70-8	350,2 ± 4,2
5-(di(2-propényl)amino)-1H-tétrazole	$C_7H_{11}N_5$	6280-33-7	351,1 ± 4,2
benzal-3-hydrazino-5-méthyl-1,2,4-triazole	$C_{10}H_{11}N_5$	87123-46-4	258,0 ± 2,1
mélamine	$C_3H_6N_6$	108-78-1	-87,07
N'-(5-tétrazolyl)-benzalhydrazone	$C_8H_8N_6$	10444-59-4	458,1 ± 4,0
benzal-5-hydrazinotétrazole	$C_8H_8N_6$	108480-28-0	441,0 ± 1,5
3-hexyne-1,1,1,6,6,6-hexacarbonitrile	$C_{12}H_4N_6$	10350-89-7	1001,5 ± 5,0
3-hexène-1,1,1,6,6,6-hexacarbonitrile	$C_{12}H_6N_6$		837,4 ± 26,4
3,5-octadiyne-1,1,1,8,8,8-hexacarbonitrile	$C_{14}H_4N_6$	10350-90-0	1218,6 ± 12,6
1-(1H-tétrazol-5-yl)-guanidine	$C_2H_5N_7$	66591-60-4	135,56
5,5'-bitétrazole	$C_2H_2N_8$	2783-98-4	531,79
1,2-bis-(5-tétrazolyl)-éthane	$C_4H_6N_8$	26670-16-6	444,4 ± 1,3
5,5'-hydrazotétrazole	$C_2H_4N_{10}$	74999-19-2	565,6 ± 4,2
cis-1,1'-diméthyl-5,5'-azotétrazole	$C_4H_6N_{10}$	41463-68-7	723,83
trans-1,1'-diméthyl-5,5'-azotétrazole	$C_4H_6N_{10}$	74999-23-8	792,2 ± 10,0
2,2'-diméthyl-5,5'-azotétrazole	$C_4H_6N_{10}$	41463-69-8	754,6 ± 4,6
2,5,8-triamino-1,3,4,6,7,9,9b-heptaazaphénalène	$C_6H_6N_{10}$	1502-47-2	15,7 ± 4,2
2,2'-diéthyl-5,5'-azotétrazole	$C_6H_{10}N_{10}$	74999-25-0	655,3 ± 5,9

Tableau IV-2 : Banque d'enthalpies standard de formation en phase solide concernant les 134 molécules $C_xH_yN_w$ étudiées dans le cadre de la démarche directe.

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.) kJ.mol^{-1}
3,4-dicyano-1,2,4-oxadiazole	C_4N_4O	55644-07-0	456,1 ± 5,4
3,4-dicyanofuroxane	$C_4N_4O_2$	17557-81-2	465,26
trinitroacétonitrile	$C_2N_4O_6$	630-72-8	174,1 ± 1,3
3-cyano-5-(cyanofurazanyl)-1,2,4-oxadiazole N-oxyde	$C_6N_6O_3$	56092-91-2	565,2 ± 4,2
benzotrifuroxane	$C_6N_6O_6$	3470-17-5	627,60
hexanitroéthane	$C_2N_6O_{12}$	918-37-6	79,50
acétamide	C_2H_5NO	60-35-5	-315,60 ± 0,82
propanamide	C_3H_7NO	79-05-0	-338,2 ± 0,5
butanamide	C_4H_9NO	541-35-5	-364,4 ± 0,7
1H-pyrrole-2-carboxaldéhyde	C_5H_5NO	1003-29-8	-106,4 ± 2,5
2-pyridinol	C_5H_5NO	72762-00-6	-166,3 ± 0,5
3-pyridinol	C_5H_5NO	109-00-2	-132,0 ± 0,9
4-pyridinol	C_5H_5NO	626-64-2	-148,9 ± 0,8
2-pipéridone	C_5H_9NO	675-20-7	-306,6 ± 0,5
pentanamide	$C_5H_{11}NO$	626-97-1	-379,5 ± 1,1
2-méthyl-3-hydroxypyridine	C_6H_7NO	1121-25-1	-173,6 ± 0,9
2-méthyl-4-hydroxypyridine	C_6H_7NO	18615-86-6	-184,7 ± 0,8
2-méthyl-5-hydroxypyridine	C_6H_7NO	1121-78-4	-166,0 ± 1,3
2-méthyl-6-hydroxypyridine	C_6H_7NO	3279-76-3	-212,3 ± 1,9
2-hexynamide	C_6H_9NO	62155-28-6	-117,9 ± 3,4
ε-caprolactame	$C_6H_{11}NO$	105-60-2	-329,4 ± 0,9
hexanamide	$C_6H_{13}NO$	628-02-4	-423,0 ± 0,5
benzamide	C_7H_7NO	55-21-0	-202,14 ± 0,60
2-amino-2,4,6-cycloheptatrièn-1-one	C_7H_7NO	33504-43-7	-31,6 ± 2,6
hexahydro-5-méthyl-2H-azépin-2-one	$C_7H_{13}NO$	2210-07-3	-364,0 ± 1,3
hexahydro-7-méthyl-2H-azépin-2-one	$C_7H_{13}NO$	1985-48-4	-362,3 ± 1,3
hexahydro-2(1H)-azocinone	$C_7H_{13}NO$	673-66-5	-348,5 ± 1,3

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.) kJ.mol^{-1}
α-oxobenzèneacétonitrile	C_8H_5NO	613-90-1	38,9 ± 0,5
N-phénylacétamide	C_8H_9NO	103-84-4	-209,6 ± 1,5
1-(4-aminophényl)éthanone	C_8H_9NO	99-92-3	-182,1 ± 0,5
1-(3-aminophényl)éthanone	C_8H_9NO	99-03-6	-173,3 ± 0,5
octanamide	$C_8H_{17}NO$	629-01-6	-473,2 ± 0,9
5-phénylisoxazole	C_9H_7NO	1006-67-3	80,5 ± 4,6
8-quinolinol	C_9H_7NO	148-24-3	-83,0 ± 1,5
β-oxobenzènepropanenitrile	C_9H_7NO	614-16-4	-22,3 ± 0,6
4-(diméthylamino)-benzaldéhyde	$C_9H_{11}NO$	100-10-7	-136,82
4-éthyl-3,5-diméthyl-1H-pyrrole-2-carboxaldéhyde	$C_9H_{13}NO$	6250-80-2	-254,8 ± 5,0
2,2,6,6-tétraméthyl-4-pipéridinone	$C_9H_{17}NO$	826-36-8	-334,2 ± 3,5
N-butylpentanamide	$C_9H_{19}NO$	2763-67-9	-465,1 ± 1,7
3-méthyl-5-phénylisoxazole	$C_{10}H_9NO$	1008-75-9	18,3 ± 5,4
3-phényl-5-méthylisoxazole	$C_{10}H_9NO$	1008-74-8	13,7 ± 5,4
β-cyanopropiophénone	$C_{10}H_9NO$	5343-98-6	-71,4 ± 0,6
2-méthyl-1',2'-naphtoxazole	$C_{12}H_9NO$	85-15-4	-87,6 ± 11,7
2-méthylnapht[2,3-d]oxazole	$C_{12}H_9NO$	20686-66-2	-52,4 ± 8,8
N,N-diphénylacétamide	$C_{14}H_{13}NO$	519-87-9	-42,9 ± 7,1
N-acétyl-N-cyclohexyl-phénylamine	$C_{14}H_{19}NO$	5769-11-9	-300,0 ± 15,9
3,5-diphénylisoxazole	$C_{15}H_{11}NO$	2039-49-8	144,8 ± 7,5
glycine	$C_2H_5NO_2$	56-40-6	-527,60
N-méthylglycine	$C_3H_7NO_2$	107-97-1	-513,3 ± 0,3
L-alanine	$C_3H_7NO_2$	56-41-7	-560,66
DL-alanine	$C_3H_7NO_2$	302-72-7	-563,6 ± 0,6
D-alanine	$C_3H_7NO_2$	338-69-2	-561,2 ± 0,6
succinimide	$C_4H_5NO_2$	123-56-8	-460,24
acide 4-aminobutanoïque	$C_4H_9NO_2$	56-12-2	-577,9 ± 0,9

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.) kJ.mol^{-1}
n-propylcarbamate	$C_4H_9NO_2$	627-12-3	-552,6 ± 0,5
2-méthyl-2-nitropropane	$C_4H_9NO_2$	594-70-7	-229,8 ± 2,5
DL-proline	$C_5H_9NO_2$	609-36-9	-524,2 ± 0,6
L-proline	$C_5H_9NO_2$	147-85-3	-507,52
acide 5-aminopentanoïque	$C_5H_{11}NO_2$	660-88-8	-604,1 ± 0,9
L-valine	$C_5H_{11}NO_2$	72-18-4	-614,71
acide 3-pyridinecarboxylique	$C_6H_5NO_2$	59-67-6	-344,9 ± 0,7
L-leucine	$C_6H_{13}NO_2$	61-90-5	-637,4 ± 0,9
DL-leucine	$C_6H_{13}NO_2$	328-39-2	-640,6 ± 1,0
D-leucine	$C_6H_{13}NO_2$	328-38-1	-637,3 ± 1,0
L-isoleucine	$C_6H_{13}NO_2$	73-32-5	-640,65
DL-isoleucine	$C_6H_{13}NO_2$	443-79-8	-635,13
acide 2-aminohexanoïque	$C_6H_{13}NO_2$	616-06-8	-639,1 ± 1,3
acide 4-aminohexanoïque	$C_6H_{13}NO_2$	5415-99-6	-646,2 ± 1,3
acide 5-aminohexanoïque	$C_6H_{13}NO_2$	628-47-7	-643,3 ± 1,3
acide 6-aminohexanoïque	$C_6H_{13}NO_2$	60-32-2	-637,35
2-hydroxybenzaldoxime	$C_7H_7NO_2$	94-67-7	-183,7 ± 0,8
acide 2-aminobenzoïque	$C_7H_7NO_2$	118-92-3	-400,9 ± 0,9
acide 3-aminobenzoïque	$C_7H_7NO_2$	99-05-8	-411,6 ± 2,3
acide 4-aminobenzoïque	$C_7H_7NO_2$	150-13-0	-412,8 ± 1,0
1-méthyl-4-nitrobenzène	$C_7H_7NO_2$	99-99-0	-48,1 ± 2,9
éthylméthyl maléimide	$C_7H_9NO_2$	29720-92-1	-469,7 ± 3,8
acide 7-aminoheptanoïque	$C_7H_{15}NO_2$	929-17-9	-667,4 ± 1,3
1H-indole-2,3-dione	$C_8H_5NO_2$	91-56-5	-262,34
1-nitro-2-phényléthène	$C_8H_7NO_2$	102-96-5	30,5 ± 2,1
méthyl phénylcarbamate	$C_8H_9NO_2$	2603-10-3	-186,7 ± 2,1
acide 2-méthyl-1H-pyrrole-3-carboxylique éthyl ester	$C_8H_{11}NO_2$	936-12-9	-411,0 ± 4,2

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.) kJ.mol^{-1}
acide 2,4-diméthyl-1H-pyrrole-3-carboxylique méthyl ester	$C_8H_{11}NO_2$	52459-90-2	-422,3 ± 4,2
acide 2,4-diméthyl-1H-pyrrole-5-carboxylique méthyl ester	$C_8H_{11}NO_2$	74999-36-3	-422,3 ± 4,2
2-nitro-1-phénylpropène	$C_9H_9NO_2$	705-60-2	-15,4 ± 2,1
L-phénylalanine	$C_9H_{11}NO_2$	63-91-2	-466,9 ± 0,9
DL-phénylalanine	$C_9H_{11}NO_2$	150-30-1	-460,6 ± 2,6
acide 4-aminobenzoïque éthyl ester	$C_9H_{11}NO_2$	94-09-7	-417,9 ± 0,9
acide 2,5-diméthyl-1H-pyrrole-3-carboxylique éthyl ester	$C_9H_{13}NO_2$	2199-52-2	-478,7 ± 5,0
acide 3,5-diméthyl-1H-pyrrole-2-carboxylique éthyl ester	$C_9H_{13}NO_2$	2199-44-2	-474,5 ± 5,0
acide 4,5-diméthyl-1H-pyrrole-3-carboxylique éthyl ester	$C_9H_{13}NO_2$	2199-53-3	-470,3 ± 5,0
acide 2,4-diméthyl-1H-pyrrole-3-carboxylique éthyl ester	$C_9H_{13}NO_2$	2199-51-1	-463,2 ± 5,0
acide 4,5-diméthyl-1H-pyrrole-2-carboxylique éthyl ester	$C_9H_{13}NO_2$	2199-45-3	-449,4 ± 5,0
2,2,6,6-tétraméthyl-4-oxo-1-pipéridinyloxy	$C_9H_{16}NO_2$	2896-70-0	-298,5 ± 6,5
1-hydroxy-2,2,6,6-tétraméthyl-4-pipéridinone	$C_9H_{17}NO_2$	3637-11-4	-378,1 ± 0,6
2,2,6,6-tétraméthyl-4-hydroxypipéridine-1-oxyde	$C_9H_{18}NO_2$	2226-96-2	-392,6 ± 7,6
1-hydroxy-2,2,6,6-tétraméthyl-4-pipéridinol	$C_9H_{19}NO_2$	3637-10-3	-445,5 ± 1,4
acide 9-aminononanoïque	$C_9H_{19}NO_2$	1120-12-3	-727,8 ± 1,7
1-nitronaphtalène	$C_{10}H_7NO_2$	86-57-7	42,6 ± 5,0
4-nitroso-1-naphtol	$C_{10}H_7NO_2$	605-60-7	-107,8 ± 2,5
2-nitroso-1-naphtol	$C_{10}H_7NO_2$	132-53-6	-61,8 ± 4,5
1-nitroso-2-naphtol	$C_{10}H_7NO_2$	131-91-9	-50,5 ± 2,2
N,N-diacétylaniline	$C_{10}H_{11}NO_2$	1563-87-7	-362,6 ± 1,6
acide phénylcarbamique isopropyl ester	$C_{10}H_{13}NO_2$	122-42-9	-442,1 ± 2,1
acide 2,4,5-triméthyl-1H-pyrrole-3-carboxylique éthyl ester	$C_{10}H_{15}NO_2$	2199-54-4	-489,8 ± 5,4
acide phénylcarbamique butyl ester	$C_{11}H_{15}NO_2$	1538-74-5	-395,5 ± 2,6
acide 3,5-diméthyl-4-vinyl-1H-pyrrole-2-carboxylique éthyl ester	$C_{11}H_{15}NO_2$	25894-11-5	-472,5 ± 5,9
acide 3,5-diméthyl-4-éthyl-1H-pyrrole-2-carboxylique éthyl ester	$C_{11}H_{17}NO_2$	2199-47-5	-534,0 ± 6,3
3-nitrobiphényle	$C_{12}H_9NO_2$	2113-58-8	65,1 ± 6,3

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.) kJ.mol^{-1}
4-nitrobiphényle	$C_{12}H_9NO_2$	92-93-3	40,5 ± 6,3
acide 3,5-diméthyl-4-propyl-1H-pyrrole-2-carboxylique éthyl ester	$C_{12}H_{19}NO_2$	4758-64-9	-569,0 ± 6,7
cis-4-nitrostilbène	$C_{14}H_{11}NO_2$	6624-53-9	132,0 ± 3,0
trans-4-nitrostilbène	$C_{14}H_{11}NO_2$	1694-20-8	102,7 ± 3,0
éthyl-N,N-diphénylcarbamate	$C_{15}H_{15}NO_2$	603-52-1	-280,9 ± 7,9
N,N-diphénylacétoacétamide	$C_{16}H_{15}NO_2$	2540-31-0	-227,9 ± 8,4
acide 3-N-phénylamino-2-naphtoïque	$C_{17}H_{13}NO_2$	6973-58-6	-263,6 ± 2,2
1-nitro-2-propanone	$C_3H_5NO_3$	10230-68-9	-294,7 ± 0,7
L-serine	$C_3H_7NO_3$	56-45-1	-732,7 ± 0,3
2-nitrofurane	$C_4H_3NO_3$	609-39-2	-104,1 ± 0,5
3-méthyl-2,5-oxazolidine-dione	$C_4H_5NO_3$	5840-76-6	-600,4 ± 2,9
2-méthyl-2-nitro-1-propanol	$C_4H_9NO_3$	76-39-1	-410,1 ± 1,7
L-thréonine	$C_4H_9NO_3$	72-19-5	-776,30
DL-thréonine	$C_4H_9NO_3$	80-68-2	-758,8 ± 0,5
2-amino-2-(hydroxyméthyl)-1,3-propanediol	$C_4H_{11}NO_3$	77-86-1	-717,8 ± 0,8
1-hydroxy-L-proline	$C_5H_9NO_3$	18610-59-8	-661,1 ± 1,8
acide 4-hydroxy-5-méthyl-1H-pyrrole-3-carboxylique éthyl ester	$C_8H_{11}NO_3$	74999-30-7	-611,9 ± 4,2
N-benzoylglycine	$C_9H_9NO_3$	495-69-2	-608,8 ± 1,6
L-tyrosine	$C_9H_{11}NO_3$	60-18-4	-685,1 ± 1,6
acide 2,4-diméthyl-5-hydroxy-1H-pyrrole-3-carboxylique éthyl ester	$C_9H_{13}NO_3$	74999-31-8	-684,5 ± 4,6
4-benzyl-2,5-oxazolidinedione	$C_{10}H_9NO_3$	1892-35-9	-552,4 ± 3,4
2-méthyl-2-nitro-1-phényl-1-propanol	$C_{10}H_{13}NO_3$	33687-74-0	-317,0 ± 5,9
2-méthyl-2-nitro-3-phényl-1-propanol	$C_{10}H_{13}NO_3$	62030-36-8	-347,5 ± 4,6
acide 4-formyl-3,5-diméthyl-1H-pyrrole-2-carboxylique éthyl ester	$C_{10}H_{13}NO_3$	2199-64-6	-640,8 ± 5,0
acide 5-formyl-2,4-diméthyl-1H-pyrrole-3-carboxylique éthyl ester	$C_{10}H_{13}NO_3$	2199-59-9	-645,8 ± 5,0
acide 4-acétyl-3,5-diméthyl-1H-pyrrole-2-carboxylique éthyl ester	$C_{11}H_{15}NO_3$	2386-26-7	-654,5 ± 5,9
acide 3,5-diméthyl-4-(1-oxopropyl)-1H-pyrrole-2-carboxylique éthyl ester	$C_{12}H_{17}NO_3$	40484-82-0	-679,4 ± 6,3

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.) kJ.mol^{-1}
acide 2,4-diméthyl-5-(1-oxopropyl)-1H-pyrrole-3-carboxylique éthyl ester	$C_{12}H_{17}NO_3$	78956-69-1	-681,5 ± 6,3
acide aspartique	$C_4H_7NO_4$	56-84-8	-973,3 ± 0,8
2-méthyl-2-nitro-1,3-propanediol	$C_4H_9NO_4$	77-49-6	-574,4 ± 4,7
5-nitro-2-furancarboxaldéhyde	$C_5H_3NO_4$	698-63-5	-226,9 ± 0,5
acide L-glutamique	$C_5H_9NO_4$	56-86-0	-1003,32
acide D-glutamique	$C_5H_9NO_4$	6893-26-1	-1002,49
2-éthyl-2-nitro-1,3-propanediol	$C_5H_{11}NO_4$	597-09-1	-606,4 ± 2,6
2-nitro-2-propyl-1,3-propanediol	$C_6H_{13}NO_4$	5638-92-6	-625,2 ± 2,9
2-isopropyl-2-nitro-1,3-propanediol	$C_6H_{13}NO_4$	62155-31-1	-623,0 ± 4,2
acide 2-nitrobenzoïque	$C_7H_5NO_4$	552-16-9	-398,5 ± 0,7
acide 3-nitrobenzoïque	$C_7H_5NO_4$	121-92-6	-414,0 ± 0,5
acide 4-nitrobenzoïque	$C_7H_5NO_4$	62-23-7	-426,9 ± 0,9
3-(5-nitro-2-furyl)-2-propénal	$C_7H_5NO_4$	1874-22-2	-162,76
acide 3,5-diméthyl-1H-pyrrole-2,4-dicarboxylique 4-méthyl ester	$C_9H_{11}NO_4$	50296-60-1	-841,8 ± 4,2
acide 3,5-diméthyl-1H-pyrrole-2,4-dicarboxylique diméthyl ester	$C_{10}H_{13}NO_4$	5448-17-9	-846,3 ± 5,0
acide 5-carbométhoxy-2,4-diméthyl-1H-pyrrole-3-acrylique	$C_{11}H_{13}NO_4$		-808,4 ± 5,4
acide phénylalanine-N-carboxylique diméthyl ester	$C_{12}H_{15}NO_4$	70288-75-4	-766,4 ± 5,9
acide 3,5-diméthyl-2-carboxy-1H-pyrrole-4-propanoïque diméthyl ester	$C_{12}H_{17}NO_4$	16132-20-0	-849,7 ± 6,3
acide 3,5-diméthyl-1H-pyrrole-2,4-dicarboxylique diéthyl ester	$C_{12}H_{17}NO_4$	2436-79-5	-916,7 ± 6,3
acide 2,4-diméthyl-5-carboxy-1H-pyrrole-3-propanoïque 5-éthyl ester	$C_{12}H_{17}NO_4$	37789-64-3	-935,9 ± 6,3
2-(hydroxyméthyl)-2-nitro-1,3-propanediol	$C_4H_9NO_5$	126-11-4	-735,5 ± 6,4
acide 5-nitrofuran-2-carboxylique	$C_5H_3NO_5$	645-12-5	-517,14
acide 5-nitro-2-furancarboxylique méthyl ester	$C_6H_5NO_5$	1874-23-3	-471,1 ± 0,5
acide 5-(hydroxyméthyl)-3-méthyl-1H-pyrrole-2,4-dicarboxylique diéthyl ester	$C_{12}H_{17}NO_5$	5422-89-9	-1057,7 ± 6,3
acide 2,4-diméthyl-5-carboxy-α-oxo-1H-pyrrole-3-oxoacétique diéthyl ester	$C_{13}H_{17}NO_5$	21898-53-3	-1015,2 ± 6,7
acide 3-méthyl-5-(1-hydroxyéthyl)-1H-pyrrole-2,4-dicarboxylique diéthyl ester	$C_{13}H_{19}NO_5$	74999-34-1	-1135,8 ± 6,7
acide 3-méthyl-5-(1-hydroxypropyl)-1H-pyrrole-2,4-dicarboxylique diéthyl ester	$C_{14}H_{21}NO_5$		-1084,6 ± 7,5

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.) kJ.mol^{-1}
acide 5-carbéthoxy-2,4-diméthyl-1H-pyrrole-3-méthylmalonique diéthyl ester	$C_{17}H_{25}NO_6$		-1402,5 ± 8,8
acide 5-nitro-2-acétoxy-2,5-dihydro-2-furancarboxylique méthyl ester	$C_8H_9NO_7$	22401-53-2	-919,4 ± 0,9
2-(diacétoxyméthyl)-5-nitrofurane	$C_9H_9NO_7$	92-55-7	-897,8 ± 0,9
2-(3,3-diacétoxypropényl)-5-nitrofurane	$C_{11}H_{11}NO_7$	1874-14-2	-872,3 ± 1,3
2-acétoxy-2-bis(acétoxy)méthyl-2,5-dihydro-5-nitrofurane	$C_{11}H_{13}NO_9$		-1374,1 ± 1,7
urée	CH_4N_2O	57-13-6	-333,11 ± 0,69
1,3-diazétidin-2-one	$C_2H_4N_2O$	5265-50-9	-327,1 ± 1,5
3-amino-5-méthylisoxazole	$C_4H_6N_2O$	1072-67-9	-61,8 ± 0,6
triméthylurée	$C_4H_{10}N_2O$	632-14-4	-330,5 ± 4,2
1-acétyl-1H-imidazole	$C_5H_6N_2O$	2466-76-4	-119,6 ± 3,6
1H-pyrrole-2-carboxaldéhyde oxime	$C_5H_6N_2O$	32597-34-5	12,1 ± 2,9
5-amino-3,4-diméthylisoxazole	$C_5H_8N_2O$	19947-75-2	-82,7 ± 1,3
1,2,3-benzoxadiazole	$C_6H_4N_2O$	273-59-6	235,8 ± 0,5
2-(diéthylamino)acétamide	$C_6H_{14}N_2O$	7409-48-5	-351,5 ± 0,6
phénylfurazane	$C_8H_6N_2O$	10349-06-1	237,9 ± 4,2
3-méthyl-4-phénylfurazane	$C_9H_8N_2O$	10349-09-4	187,8 ± 5,0
benzyl-1,2,4-oxadiazole	$C_9H_8N_2O$	37216-04-9	37,2 ± 9,2
3-méthyl-5-phényl-1,2,4-oxadiazole	$C_9H_8N_2O$	1199-00-4	103,3 ± 5,4
5-méthyl-3-phényl-1,2,4-oxadiazole	$C_9H_8N_2O$	1198-98-7	97,4 ± 5,4
2,2'-carbonylbis-(1H-pyrrole)	$C_9H_8N_2O$	15770-21-5	-25,2 ± 4,6
N,N'-diméthyl-N-phénylurée	$C_9H_{12}N_2O$	938-91-0	-217,8 ± 5,0
N'-éthyl-N-méthyl-N-phénylurée	$C_{10}H_{14}N_2O$	52073-04-8	-304,7 ± 5,9
4-nitroso-diphénylamine	$C_{12}H_{10}N_2O$	156-10-5	213,1 ± 3,2
N-nitroso-diphénylamine	$C_{12}H_{10}N_2O$	86-30-6	227,2 ± 6,3
N,N-diphénylurée	$C_{13}H_{12}N_2O$	603-54-3	-122,7 ± 3,4
tétrahydrocarbazole urée	$C_{13}H_{14}N_2O$	67242-61-9	-1076,8 ± 5,9

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.) kJ.mol^{-1}
diphénylfurazane	$C_{14}H_{10}N_2O$	19768-02-6	328,9 ± 8,4
3,5-diphényl-1,2,4-oxadiazole	$C_{14}H_{10}N_2O$	888-71-1	207,1 ± 11,3
2,5-diphényl-1,3,4-oxadiazole	$C_{14}H_{10}N_2O$	725-12-2	165,3 ± 8,4
N,N-diphényl-N'-méthylurée	$C_{14}H_{14}N_2O$	13114-72-2	-106,8 ± 7,1
acide acétique 1,2-diphénylhydrazide	$C_{14}H_{14}N_2O$	22293-38-5	-11,2 ± 11,1
4-acétamidobiphényle	$C_{14}H_{14}N_2O$	3366-61-8	-160,6 ± 10,6
N,N'-diméthyl-N,N'-diphénylurée	$C_{15}H_{16}N_2O$	611-92-7	-73,1 ± 7,9
N,N-diphényl-N'-éthylurée	$C_{15}H_{16}N_2O$	18168-01-9	-152,6 ± 7,9
N,N'-diheptylurée	$C_{15}H_{32}N_2O$	1798-20-5	-627,2 ± 5,5
N,N-diphényl-N'-allylurée	$C_{16}H_{16}N_2O$	101279-92-9	-38,7 ± 4,2
N-éthyl-N'-méthyl-N,N'-diphénylurée	$C_{16}H_{18}N_2O$	4474-03-7	-126,6 ± 4,2
N,N'-diéthyl-N,N'-diphénylurée	$C_{17}H_{20}N_2O$	85-98-3	-150,21
2,2',4,4'-tétraméthyl-3,3'-diéthyldipyrryl cétone	$C_{17}H_{24}N_2O$	13228-22-3	-253,8 ± 10,0
N,N'-dioctylurée	$C_{17}H_{36}N_2O$	1943-08-4	-715,2 ± 4,6
N-pipéridyl-N,N'-diphénylformamide	$C_{18}H_{20}N_2O$	75534-73-5	-108,2 ± 10,0
N,N'-didécylurée	$C_{21}H_{44}N_2O$	1943-09-5	-877,4 ± 7,2
N'-(2-naphtyl)-N,N-diphénylurée	$C_{23}H_{18}N_2O$	112322-16-4	64,0 ± 11,7
N'-(1-naphtyl)-N,N-diphénylurée	$C_{23}H_{18}N_2O$	60302-02-5	78,2 ± 11,7
oxamide	$C_2H_4N_2O_2$	471-46-5	-499,15
glyoxime	$C_2H_4N_2O_2$	557-30-2	-88,70
N-nitrodiméthylamine	$C_2H_6N_2O_2$	4164-28-7	-75,02
propanediamide	$C_3H_6N_2O_2$	108-13-4	-542,79
méthylglyoxime	$C_3H_6N_2O_2$	1804-15-5	-126,7 ± 1,9
uracile	$C_4H_4N_2O_2$	66-22-8	-429,4 ± 0,9
5-méthyl-2,4-imidazolidinedione	$C_4H_6N_2O_2$	616-03-5	-486,6 ± 1,1
2,5-pipérazinedione	$C_4H_6N_2O_2$	106-57-0	-446,5 ± 1,3
butanediamide	$C_4H_8N_2O_2$	110-14-5	-581,2 ± 2,1

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.) kJ.mol^{-1}
2,3-butanedione dioxime	$C_4H_8N_2O_2$	95-45-4	-177,9 ± 2,6
5-méthyluracile	$C_5H_6N_2O_2$	65-71-4	-462,8 ± 0,9
5,5-diméthyl-2,4-imidazolidinedione	$C_5H_8N_2O_2$	77-71-4	-533,3 ± 1,3
DL-ornithine	$C_5H_{12}N_2O_2$	616-07-9	-652,6 ± 1,8
2-nitroaniline	$C_6H_6N_2O_2$	88-74-4	-26,1 ± 0,5
3-nitroaniline	$C_6H_6N_2O_2$	99-09-2	-34,18
4-nitroaniline	$C_6H_6N_2O_2$	100-01-6	-42,0 ± 0,8
DL-5-éthyl-5-méthyl-2,4-imidazolidinedione	$C_6H_{10}N_2O_2$	16820-12-5	-566,1 ± 1,6
DL-lysine	$C_6H_{14}N_2O_2$	70-54-2	-678,7 ± 1,5
2-méthyl-5-nitroaniline	$C_7H_8N_2O_2$	99-55-8	-91,3 ± 1,3
4-méthyl-3-nitroaniline	$C_7H_8N_2O_2$	119-32-4	-71,7 ± 0,6
3-isopropyl-2,5-pipérazinedione	$C_7H_{12}N_2O_2$	14771-77-8	-502,9 ± 0,8
3-phényl-1,2,4-oxadiazol-5(4H)-one	$C_8H_6N_2O_2$	1456-22-0	-109,4 ± 5,9
5-phényl-1,2,4-oxadiazol-3(2H)-one	$C_8H_6N_2O_2$	21084-84-4	-4,4 ± 5,9
α-phénylglyoxime	$C_8H_8N_2O_2$	4589-97-3	42,4 ± 4,2
β-phénylglyoxime	$C_8H_8N_2O_2$	4589-97-3	-20,4 ± 4,2
1,4-benzènedicarboxamide	$C_8H_8N_2O_2$	3010-82-0	-433,1 ± 1,2
1,3-benzènedicarboxamide	$C_8H_8N_2O_2$	1740-57-4	-436,9 ± 1,0
3-isopropyl-6-méthyl-2,5-pipérazinedione	$C_8H_{14}N_2O_2$	15136-26-2	-514,3 ± 0,9
α-(4-méthylphényl)-glyoxime	$C_9H_{10}N_2O_2$		-41,84
β-(4-méthylphényl)-glyoxime	$C_9H_{10}N_2O_2$		25,10
N-(4-éthoxyphényl)urée	$C_9H_{12}N_2O_2$	150-69-6	-468,8 ± 3,4
N-(3-éthoxyphényl)urée	$C_9H_{12}N_2O_2$	13142-86-4	-429,5 ± 4,2
2,6-diméthylbenzo-[1,2-d,5,4-d]bisoxazole	$C_{10}H_8N_2O_2$	55850-41-4	-212,5 ± 3,7
2,7-diméthylbenzo-[1,2-d,3,4-d]bisoxazole	$C_{10}H_8N_2O_2$	53816-93-6	-207,5 ± 1,9
3-méthyl-4-benzoylfurazane	$C_{10}H_8N_2O_2$	10349-11-8	119,4 ± 5,9
L-tryptophane	$C_{11}H_{12}N_2O_2$	73-22-3	-415,3 ± 1,0

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.) kJ.mol^{-1}
3-benzyl-2,5-pipérazinedione	$C_{11}H_{12}N_2O_2$	5037-75-2	-345,4 ± 1,7
acide 2,4-diméthyl-3-méthylcarbonitrile-1H-pyrrole-carboxylique éthyl ester	$C_{11}H_{14}N_2O_2$		-387,3 ± 5,9
3-isopropyl-6-(2-méthyl-propyl)-2,5-pipérazinedione	$C_{11}H_{20}N_2O_2$	5625-50-3	-626,0 ± 1,0
2-nitrodiphénylamine	$C_{12}H_{10}N_2O_2$	119-75-5	78,99
3-benzyl-6-méthyl-2,5-pipérazinedione	$C_{12}H_{14}N_2O_2$	14474-78-3	-372,0 ± 2,6
(Z,Z)-diphényléthanedione dioxime	$C_{14}H_{12}N_2O_2$	572-45-2	41,8 ± 7,1
(E,E)-diphényléthanedione dioxime	$C_{14}H_{12}N_2O_2$	522-34-9	18,0 ± 7,1
(E,Z)-diphényléthanedione dioxime	$C_{14}H_{12}N_2O_2$	572-43-0	53,1 ± 7,1
acide benzoïque 2-benzoylhydrazide	$C_{14}H_{12}N_2O_2$	787-84-8	-201,67
3-benzyl-6-isopropyl-2,5-pipérazinedione	$C_{14}H_{18}N_2O_2$	14474-71-6	-392,7 ± 3,8
1,1'-méthylènebis(4-isocyanatobenzène)	$C_{15}H_{10}N_2O_2$	101-68-8	-52,8 ± 4,1
N,N-diphényl-N'-2-hydroxyéthylurée	$C_{15}H_{16}N_2O_2$	6123-87-1	-319,2 ± 7,5
1,2-diacétyl-1,2-diphénylhydrazine	$C_{16}H_{16}N_2O_2$	793-25-9	-188,4 ± 4,6
biphényl-4,4'-diacétamide	$C_{16}H_{16}N_2O_2$	613-35-4	-472,5 ± 5,9
4-diphénylamino-carbonylmorpholine	$C_{17}H_{18}N_2O_2$	75125-45-0	-217,6 ± 5,9
2-anilinométhyl-3-méthyl-4-éthyl-5-carbéthoxypyrrole	$C_{17}H_{22}N_2O_2$		-380,9 ± 9,6
3,6-dibenzyl-2,5-pipérazinedione	$C_{18}H_{18}N_2O_2$	2308-61-4	-287,6 ± 1,1
bis(hydroxyméthyl)urée	$C_3H_8N_2O_3$	25155-29-7	-717,0 ± 0,7
L-asparagine	$C_4H_8N_2O_3$	70-47-3	-789,4 ± 0,8
N-glycylglycine	$C_4H_8N_2O_3$	556-50-3	-747,7 ± 0,6
L-glutamine	$C_5H_{10}N_2O_3$	56-85-9	-826,4 ± 0,7
N-DL-alanylglycine	$C_5H_{10}N_2O_3$	1188-01-8	-777,8 ± 0,9
N-glycyl-DL-valine	$C_7H_{14}N_2O_3$	2325-17-9	-835,0 ± 0,5
N-DL-leucylglycine	$C_8H_{16}N_2O_3$	615-82-7	-859,8 ± 1,3
3-benzoyl-5-hydroxy-1,2,4-oxadiazole	$C_9H_6N_2O_3$		-269,9 ± 7,9
3-((4-hydroxyphényl)méthyl)-2,5-pipérazinedione	$C_{11}H_{12}N_2O_3$	5845-66-9	-512,3 ± 0,6
N-glycylphénylalanine	$C_{11}H_{14}N_2O_3$	6491-52-7	-684,4 ± 1,8

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.) kJ.mol^{-1}
N-alanylphénylalanine	$C_{12}H_{16}N_2O_3$	3061-90-3	-710,2 ± 0,6
N-valylphénylalanine	$C_{14}H_{20}N_2O_3$	75946-40-6	-765,8 ± 1,6
3,4-dibenzoyl-1,2,5-oxadiazole	$C_{16}H_{10}N_2O_3$	10349-12-9	104,2 ± 9,2
3,4-bis(4-méthylbenzoyl)-1,2,5-oxadiazole	$C_{18}H_{14}N_2O_3$		20,4 ± 13,0
1,2-dinitroéthane	$C_2H_4N_2O_4$	7570-26-5	-178,66
3-nitroisoxazolidine-2-oxyde	$C_3H_4N_2O_4$	4122-45-6	-51,0 ± 2,1
2,2-dinitropropane	$C_3H_6N_2O_4$	595-49-3	-191,63
N-nitrosuccinimide	$C_4H_4N_2O_4$	5336-95-8	-325,6 ± 2,1
tartramide	$C_4H_8N_2O_4$	634-63-9	-1193,5 ± 5,9
1,4-dinitrobutane	$C_4H_8N_2O_4$	4286-49-1	-249,2 ± 1,3
L-asparagine monohydrate	$C_4H_{10}N_2O_4$	5794-13-8	-1086,6 ± 0,8
5-nitro-2-furamide	$C_5H_4N_2O_4$	701-51-9	-332,21
2,2-diméthyl-1,3-dinitropropane	$C_5H_{10}N_2O_4$	762-98-1	-275,1 ± 3,2
1,3-dinitrobenzène	$C_6H_4N_2O_4$	99-65-0	-27,4 ± 0,5
1,2-dinitrobenzène	$C_6H_4N_2O_4$	528-29-0	-1,8 ± 0,7
1,4-dinitrobenzène	$C_6H_4N_2O_4$	100-25-4	-38,7 ± 0,5
3,6-bis(hydroxyméthyl)-2,5-pipérazinedione	$C_6H_{10}N_2O_4$	5625-41-2	-875,6 ± 0,9
2,3-diméthyl-2,3-dinitrobutane	$C_6H_{12}N_2O_4$	3964-18-9	-311,5 ± 1,3
1-méthyl-2,4-dinitrobenzène	$C_7H_6N_2O_4$	121-14-2	-66,4 ± 3,0
1-méthyl-2,6-dinitrobenzène	$C_7H_6N_2O_4$	606-20-2	-51,1 ± 3,6
(dinitrométhyl)benzène	$C_7H_6N_2O_4$	25321-14-6	-41,4 ± 1,7
méthyl(4-nitrophényl)carbamate	$C_8H_8N_2O_4$	1943-87-9	-427,9 ± 4,6
2,4-dinitro-1,3-diméthylbenzène	$C_8H_8N_2O_4$	603-02-1	-85,6 ± 4,2
4,6-dinitro-1,3-diméthylbenzène	$C_8H_8N_2O_4$	616-72-8	-102,0 ± 4,2
(1,1'-bipyrrolidine)-2,2',5,5'-tétrone	$C_8H_8N_2O_4$	3741-24-0	-709,4 ± 1,7
N,N'-dicarbéthoxy-éthylènediamine	$C_8H_{16}N_2O_4$	539-71-9	-980,9 ± 4,2
1,5-dinitronaphtalène	$C_{10}H_6N_2O_4$	605-71-0	29,7 ± 5,8

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.) kJ.mol^{-1}
1,8-dinitronaphtalène	$C_{10}H_6N_2O_4$	602-38-0	39,7 ± 6,5
N-hippuroylglycine	$C_{11}H_{12}N_2O_4$	1145-32-0	-832,7 ± 1,5
acide 1-amino-2,5-diméthyl-1H-pyrrole-3,4-dicarboxylique diéthyl ester	$C_{12}H_{18}N_2O_4$	4815-44-5	-760,0 ± 6,7
(Z)-1,2-bis(4-nitrophényl)éthylène	$C_{14}H_{10}N_2O_4$	619-93-2	74,1 ± 2,1
(E)-1,2-bis(4-nitrophényl)éthylène	$C_{14}H_{10}N_2O_4$	736-31-2	54,9 ± 1,3
2,2',4,4'-tétraméthyl-3,3'-dicarbéthoxy-dipyrrylméthène	$C_{19}H_{24}N_2O_4$	2407-87-6	-824,0 ± 10,0
4,4'-méthylènebis(acide 2,5-diméthyl-1H-pyrrole-3-carboxylique)diéthyl ester	$C_{19}H_{26}N_2O_4$		-873,9 ± 10,5
5,5'-méthylènebis(acide 2,4-diméthyl-1H-pyrrole-3-carboxylique)diéthyl ester	$C_{19}H_{26}N_2O_4$	5442-92-2	-853,4 ± 10,5
4,4'-méthylènebis(acide 3,5-diméthyl-1H-pyrrole-2-carboxylique)diéthyl ester	$C_{19}H_{26}N_2O_4$	6285-54-7	-868,4 ± 10,5
4,4'-éthylènebis(acide 2,5-diméthyl-1H-pyrrole-3-carboxylique)diéthyl ester	$C_{20}H_{28}N_2O_4$		-891,7 ± 10,9
N,N'-bis(2-méthoxyphényl)téréphtalamide	$C_{22}H_{20}N_2O_4$	36360-34-6	-507,9 ± 3,5
N,N'-bis(3-méthoxyphényl)téréphtalamide	$C_{22}H_{20}N_2O_4$	6957-81-9	-549,2 ± 3,2
N,N'-bis(4-méthoxyphényl)téréphtalamide	$C_{22}H_{20}N_2O_4$	7144-15-2	-548,4 ± 3,2
alloxane monohydrate	$C_4H_4N_2O_5$	2244-11-3	-1000,7 ± 0,5
2,4-dinitrophénol	$C_6H_4N_2O_5$	51-28-5	-232,7 ± 3,1
2,6-dinitrophénol	$C_6H_4N_2O_5$	573-56-8	-209,9 ± 2,7
N-serylserine	$C_6H_{12}N_2O_5$	6620-95-7	-1177,7 ± 0,5
2,4-dinitro-1-méthoxybenzène	$C_7H_6N_2O_5$	119-27-7	-186,6 ± 3,4
2,6-dinitro-1-méthoxybenzène	$C_7H_6N_2O_5$	3535-67-9	-189,3 ± 3,4
2,4-dinitro-1-éthoxybenzène	$C_8H_8N_2O_5$	610-54-8	-226,4 ± 4,1
2,4-dinitro-1-naphtol	$C_{10}H_6N_2O_5$	605-69-6	-181,4 ± 4,6
4-hydroxy-5,4'-bis(acide 2-méthyl-1H-pyrrole-3-carboxylique)diéthyl ester	$C_{16}H_{20}N_2O_5$		-1007,8 ± 7,9
2,4-dinitro-1,3-benzènediol	$C_6H_4N_2O_6$	519-44-8	-415,6 ± 2,5
4,6-dinitro-1,3-benzènediol	$C_6H_4N_2O_6$	616-74-0	-439,6 ± 2,5
acide 3,5-dinitrobenzoïque	$C_7H_4N_2O_6$	99-34-3	-432,6 ± 0,5
2,4-dinitrophénoxyéthanol	$C_8H_8N_2O_6$	2831-60-9	-398,7 ± 1,0
1,2-bis(3-carboxypropanoyl)hydrazine	$C_8H_{12}N_2O_6$	5343-02-2	-1329,4 ± 2,1

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.) kJ.mol^{-1}
N,N'-1,2-éthanediylbis-(N-(carboxyméthyl)glycine)	$C_{10}H_{16}N_2O_8$	60-00-4	-1759,5 ± 0,9
cytosine	$C_4H_5N_3O$	71-30-7	-221,3 ± 2,0
créatinine	$C_4H_7N_3O$	60-27-5	-238,5 ± 0,5
4-phénylfurazane amine	$C_8H_7N_3O$	10349-14-1	220,9 ± 5,0
créatine	$C_4H_9N_3O_2$	57-00-1	-537,2 ± 0,9
L-histidine	$C_6H_9N_3O_2$	71-00-1	-441,83
4-phényl-3-furazancarboxamide	$C_9H_7N_3O_2$	18600-75-4	79,2 ± 5,0
4-(4-méthylphényl)-3-furazancarboxamide	$C_{10}H_9N_3O_2$		42,1 ± 5,4
1,3,5-triazine-2,4,6(1H,3H,5H)-triol	$C_3H_3N_3O_3$	108-80-5	-703,54
3-méthyl-4-nitrofuroxane	$C_3H_3N_3O_4$	49558-02-3	100,7 ± 0,9
2,3-dinitroaniline	$C_6H_5N_3O_4$	602-03-9	-11,7 ± 2,9
2,4-dinitroaniline	$C_6H_5N_3O_4$	97-02-9	-67,8 ± 3,0
2,5-dinitroaniline	$C_6H_5N_3O_4$	619-18-1	-44,3 ± 2,9
2,6-dinitroaniline	$C_6H_5N_3O_4$	606-22-4	-50,6 ± 2,9
3,4-dinitroaniline	$C_6H_5N_3O_4$	610-41-3	-32,6 ± 2,9
3,5-dinitroaniline	$C_6H_5N_3O_4$	618-87-1	-38,9 ± 2,9
N-méthyl-2,6-dinitroaniline	$C_7H_7N_3O_4$	5910-19-0	-14,0 ± 1,9
N-méthyl-2,4-dinitroaniline	$C_7H_7N_3O_4$	2044-88-4	-67,5 ± 3,7
N,N-diméthyl-2,4-dinitroaniline	$C_8H_9N_3O_4$	1670-17-3	-30,7 ± 6,7
N-phényl-2,4-dinitroaniline	$C_{12}H_9N_3O_4$	961-68-2	22,5 ± 5,9
N-(N-glycyl-DL-phénylalanyl)alanine	$C_{14}H_{19}N_3O_4$	18828-33-6	-926,8 ± 0,7
N-méthyl-N-(2-nitroxyéthyl)nitramine	$C_3H_7N_3O_5$	17096-47-8	-149,83
trinitrométhane	CHN_3O_6	517-25-9	-48,1 ± 2,0
1,1,1-trinitroéthane	$C_2H_3N_3O_6$	595-86-8	-112,4 ± 0,9
2-méthyl-2,3,3-trinitrobutane	$C_5H_9N_3O_6$	5324-72-1	-331,5 ± 3,0
1,3,5-trinitrobenzène	$C_6H_3N_3O_6$	99-35-4	-47,70

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.) kJ.mol^{-1}
2-méthyl-2,3,3-trinitropentane	$C_6H_{11}N_3O_6$	62154-78-3	-290,3 ± 1,9
2,4,6-trinitrotoluène	$C_7H_5N_3O_6$	118-96-7	-80,54
2-éthyl-1,3,5-trinitrobenzène	$C_8H_7N_3O_6$	13985-60-9	-90,58
2,4-diméthyl-1,3,5-trinitrobenzène	$C_8H_7N_3O_6$	632-92-8	-102,7 ± 4,1
1,1,1-trinitro-2-phényléthane	$C_8H_7N_3O_6$	38677-56-4	-18,5 ± 3,8
1,3,8-trinitronaphtalène	$C_{10}H_5N_3O_6$	2364-46-7	24,3 ± 4,6
1,4,5-trinitronaphtalène	$C_{10}H_5N_3O_6$	2243-95-0	36,4 ± 4,6
2,2,2-trinitroéthanol	$C_2H_3N_3O_7$	918-54-7	-261,0 ± 2,5
2,4,6-trinitrophénol	$C_6H_3N_3O_7$	88-89-1	-248,53
3-méthyl-2,4,6-trinitrophénol	$C_7H_5N_3O_7$	602-99-3	-255,9 ± 3,2
2-méthoxy-1,3,5-trinitrobenzène	$C_7H_5N_3O_7$	606-35-9	-157,4 ± 3,3
2-éthoxy-1,3,5-trinitrobenzène	$C_8H_7N_3O_7$	4732-14-3	-204,6 ± 3,9
2-méthyl-2-nitro-1,3-propanediol dinitrate	$C_4H_7N_3O_8$	4055-94-1	-374,1 ± 2,2
2-(2,4-dinitrophénoxy)-éthanol nitrate	$C_8H_7N_3O_8$	62030-34-6	-292,8 ± 6,0
2-éthyl-2-(hydroxyméthyl)-1,3-propanediol trinitrate	$C_6H_{11}N_3O_9$	2921-92-8	-479,9 ± 3,4
N,N-bis(2-(bis(carboxyméthyl)amino)éthyl)glycine	$C_{14}H_{23}N_3O_{10}$	67-43-6	-2225,2 ± 1,0
5-hydroxytétrazole	CH_2N_4O	16421-52-6	6,3 ± 1,9
5-méthoxy-1H-tétrazole	$C_2H_4N_4O$	5376-15-8	69,1 ± 1,4
1-acétyl-1H-tétrazole	$C_3H_4N_4O$	21565-41-3	81,5 ± 1,3
1,4-diméthyl-5-tétrazolone	$C_3H_6N_4O$	13576-20-0	-27,6 ± 4,2
1,7-dihydro-6H-purin-6-one	$C_5H_4N_4O$	68-94-0	-110,8 ± 0,8
1-phényl-5-hydroxytétrazole	$C_7H_4N_4O$	51449-77-5	111,8 ± 2,8
nitroguanidine	$CH_4N_4O_2$	556-88-7	-86,61
azodicarbonamide	$C_2H_4N_4O_2$	123-77-3	-292,5 ± 2,1
tétrahydro-1,2,4,5-tétrazine-3,6-dione	$C_2H_4N_4O_2$	624-40-8	-261,2 ± 1,3
acide oxalique dihydrazide	$C_2H_6N_4O_2$	996-98-5	-295,2 ± 0,6
1,2-hydrazinedicarboxamide	$C_2H_6N_4O_2$	110-21-4	-498,7 ± 1,2

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.) kJ.mol^{-1}
6-amino-1,3,5-triazine-2,4(1H,3H)-dione	$C_3H_4N_4O_2$	645-93-2	-492,8 ± 4,2
propanedioyl dihydrazide	$C_3H_8N_4O_2$	3815-86-9	-332,6 ± 0,6
glycolurile	$C_4H_6N_4O_2$	496-46-8	-492,8 ± 1,9
1,4-dinitrosopipérazine	$C_4H_8N_4O_2$	140-79-4	93,1 ± 2,1
butanedioyl dihydrazide	$C_4H_{10}N_4O_2$	4146-43-4	-366,6 ± 0,5
3,7-dihydro-1H-purine-2,6-dione	$C_5H_4N_4O_2$	69-89-6	-379,6 ± 0,9
D-arginine	$C_6H_{14}N_4O_2$	157-06-2	-623,5 ± 1,3
2-phényl-5-carboxytétrazole	$C_8H_6N_4O_2$	54798-92-4	-41,3 ± 3,3
1,2-bis(diphénylcarbamoyl)hydrazine	$C_{26}H_{22}N_4O_2$	75011-84-6	54,4 ± 6,7
éthylène-bis-diphénylurée	$C_{28}H_{26}N_4O_2$	6123-88-2	-195,5 ± 14,6
acide 8,13-diéthyl-3,7,12,17-tétraméthyl-21H,23H-porphine-2-propanoïque méthyl ester	$C_{32}H_{36}N_4O_2$	5174-83-4	-387,9 ± 17,2
acide 8,13-diéthyl-3,7,12,17,20-pentaméthyl-21H,23H-porphine-2-propanoïque méthyl ester	$C_{33}H_{38}N_4O_2$	33719-66-3	-381,9 ± 18,0
désoxophylloérythrine monométhyl ester	$C_{34}H_{38}N_4O_2$	33902-83-9	-181,7 ± 18,4
2,5-dioxo-4-imidazolidinylurée	$C_4H_6N_4O_3$	97-59-6	-717,6 ± 0,7
acide urique	$C_5H_4N_4O_3$	69-93-2	-618,8 ± 0,9
pyrophaeophorbide-a-monométhyl ester	$C_{34}H_{36}N_4O_3$	6453-67-4	-374,9 ± 18,0
phylloérythrine monométhyl ester	$C_{34}H_{36}N_4O_3$	33719-95-8	-368,2 ± 18,0
N,N'-dinitro-1,2-éthanediamine	$C_2H_6N_4O_4$	505-71-5	-103,81
1,4-dinitropipérazine	$C_4H_8N_4O_4$	4164-37-8	-55,19
2,4-dinitrophénylhydrazine	$C_6H_6N_4O_4$	119-26-6	50,0 ± 3,3
5-nitrofurazone	$C_6H_6N_4O_4$	59-87-0	-223,6 ± 1,3
4,4'-dinitrohydrazobenzène	$C_{12}H_{10}N_4O_4$	22719-28-4	109,7 ± 1,3
protoporphyrine	$C_{34}H_{34}N_4O_4$	553-12-8	-521,7 ± 17,6
rhodoporphyrine (XV) diméthyl ester	$C_{34}H_{38}N_4O_4$	22361-85-9	-531,9 ± 18,4
mésoporphyrine (IX) diméthyl ester	$C_{36}H_{42}N_4O_4$	1263-63-4	-842,4 ± 19,2
N,N'-diméthyl-N,N'-dinitroéthanediamide	$C_4H_6N_4O_6$	14760-99-7	-305,5 ± 2,1
2,4,6-trinitro-N-méthylaniline	$C_7H_6N_4O_6$	1022-07-7	-49,8 ± 3,6

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.) kJ.mol^{-1}
2,4,N-trinitro-N-méthylaniline	$C_7H_6N_4O_6$	19092-03-6	16,2 ± 3,7
2,6,N-trinitro-N-méthylaniline	$C_7H_6N_4O_6$	102153-82-2	39,5 ± 3,6
méthylphaeophorbide-b	$C_{36}H_{36}N_4O_6$		-861,9 ± 18,4
chlorin-p6-triméthyl ester	$C_{36}H_{40}N_4O_6$	62786-89-4	-1242,8 ± 18,4
chloroporphyrin-e6-triméthyl ester	$C_{37}H_{42}N_4O_6$	28211-96-3	-983,7 ± 19,7
chlorin-e6-triméthyl ester	$C_{37}H_{42}N_4O_6$	71217-51-1	-946,4 ± 19,7
1-nitroacétaldéhyde o-(1,1-dinitroéthyl)oxime	$C_4H_6N_4O_7$	10565-52-3	-165,5 ± 2,1
2,2,3,3-tétranitrobutane	$C_4H_6N_4O_8$	20919-97-5	-182,2 ± 2,1
1,1,1,4-tétranitrobutane	$C_4H_6N_4O_8$	20919-96-4	-189,7 ± 2,1
N-nitrobis(2-hydroxyéthyl)amine dinitrate	$C_4H_8N_4O_8$	4185-47-1	-257,40
dinitrobutylèneglycol diuréthane	$C_6H_{10}N_4O_8$		-835,0 ± 3,0
1,4,5,8-tétranitronaphtalène	$C_{10}H_4N_4O_8$	4793-98-0	47,5 ± 8,4
coproporphyrin-(I) tétraméthyl ester	$C_{40}H_{46}N_4O_8$	25767-20-8	-1480,3 ± 20,5
2,4,6-trinitrophénoxyéthyl nitrate	$C_8H_6N_4O_{10}$	62030-33-5	-292,8 ± 5,3
pentaérythritol tétranitrate	$C_5H_8N_4O_{12}$	78-11-5	-538,6 ± 1,3
5-cyclohexène-(1α,2β,3β,4α)-1,2,3,4-tétrol tétranitrate	$C_6H_6N_4O_{12}$	29585-45-3	-387,6 ± 2,5
α-époxyconduritol-E tétranitrate	$C_6H_6N_4O_{13}$	23627-80-7	-444,1 ± 2,5
α-D-méthyl glucopyranoside-2,3,4,6-tétranitrate	$C_7H_{10}N_4O_{14}$	13225-10-0	-825,8 ± 3,3
isouroporphyrine (II) octaméthyl ester	$C_{48}H_{54}N_4O_{16}$	10170-03-3	-2624,0 ± 23,8
N-(1H-tétrazol-5-yl)-acétamide	$C_3H_5N_5O$	6158-77-6	-5,06
4,6-diamino-1,3,5-triazin-2(1H)-one	$C_3H_5N_5O$	645-92-1	-299,7 ± 2,1
guanine	$C_5H_5N_5O$	73-40-5	-183,9 ± 0,8
aminonitroguanidine	$CH_5N_5O_2$	27256-18-4	25,02
N-nitro-1H-1,2,4-triazol-3-amine	$C_2H_3N_5O_2$	34815-01-5	112,3 ± 4,2
5-méthyl-N-nitro-1H-1,2,4-triazol-3-amine	$C_3H_5N_5O_2$	42216-41-1	53,3 ± 1,6
5-tétrazolyluréthane	$C_4H_7N_5O_2$	5326-16-9	-220,0 ± 2,7
3-amino-1,2,4-triazole nitrate	$C_2H_5N_5O_3$	13040-74-9	-171,1 ± 5,0

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.) kJ.mol^{-1}
1-formamido-2-nitroguanidine	$C_2H_5N_5O_3$		-146,9 ± 2,5
1-nitro-3-guanidinourée	$C_2H_5N_5O_3$	28787-21-5	-313,3 ± 1,2
1-acétamido-2-nitroguanidine	$C_3H_7N_5O_3$	42216-29-5	-193,6 ± 5,9
5-méthyl-1H-1,2,4-triazol-3-amine nitrate	$C_3H_7N_5O_3$	13040-75-0	-228,4 ± 3,4
acétamidoguanidine nitrate	$C_3H_9N_5O_4$	75011-77-7	-494,0 ± 4,6
2,4,6-trinitrophénylhydrazine	$C_6H_5N_5O_6$	653-49-6	36,7 ± 3,1
1,3-diamino-2,4,6-trinitrobenzène	$C_6H_5N_5O_6$	1630-08-6	-97,9 ± 2,5
bis(2,2-dinitropropyl)amine	$C_6H_{11}N_5O_8$	1924-47-6	-265,4 ± 5,9
N-méthyl-N,2,4,6-tétranitroaniline	$C_7H_5N_5O_8$	479-45-8	26,3 ± 3,5
2,4,5,7-tétranitrocarbazole	$C_{12}H_5N_5O_8$	28453-24-9	18,8 ± 5,4
2,2',4,4',6-pentanitrobenzophénone	$C_{13}H_5N_5O_{11}$	32255-35-9	-114,4 ± 4,2
2,2,4,4-tétrakis(hydroxyméthyl nitrate)pyranol nitrate	$C_9H_{13}N_5O_{16}$		-792,9 ± 9,2
3-(5-tétrazolylazo)-butan-2-one	$C_5H_8N_6O$	74999-21-6	167,4 ± 2,5
nitroguanylazide	$CH_2N_6O_2$	62154-79-4	298,4 ± 4,2
3,7-dinitroso-1,3,5,7-tétraazabicyclo[3.3.1]nonane	$C_5H_{10}N_6O_2$	101-25-7	209,62
3-(5-tétrazolylazo)-pentan-2,4-dione	$C_6H_8N_6O_2$	74999-20-5	14,4 ± 5,4
5-aminotétrazole nitrate	$CH_4N_6O_3$		-27,6 ± 1,9
guanyl azide nitrate	$CH_4N_6O_3$		15,9 ± 1,5
diaminoguanidine nitrate	$CH_8N_6O_3$	37160-07-9	-196,98
hexahydro-1,3,5-trinitroso-1,3,5-triazine	$C_3H_6N_6O_3$	13980-04-6	285,9 ± 2,3
hexahydro-1,3,5-trinitro-1,3,5-triazine	$C_3H_6N_6O_6$	121-82-4	66,94
1,3,5-triamino-2,4,6-trinitrobenzène	$C_6H_6N_6O_6$	3058-38-6	-139,5 ± 4,2
hexaméthylènetétramine dinitrate	$C_6H_{14}N_6O_6$		-382,9 ± 4,2
N-nitroso-(2,2-dinitropropyl)amine	$C_6H_{10}N_6O_9$	28464-26-8	-192,4 ± 5,4
N-nitro-bis(2,2-dinitropropyl)amine	$C_6H_{10}N_6O_{10}$	28464-24-6	-231,7 ± 1,7
N,N'-dinitro-N,N'-bis(2-hydroxyéthyl)oxamide dinitrate	$C_6H_8N_6O_{12}$	62209-60-3	-561,91
2,2',4,4',6,6'-hexanitrobiphényle	$C_{12}H_4N_6O_{12}$	4433-16-3	68,5 ± 7,5

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.) kJ.mol^{-1}
(E)-2,2',4,4',6,6'-hexanitrostilbène	$C_{14}H_6N_6O_{12}$	20062-22-0	78,24
bis(2,2,2-trinitroéthoxy)méthane	$C_5H_6N_6O_{14}$	6263-74-7	-403,3 ± 2,7
éthylènedinitramine diuréthanglycol dinitrate	$C_8H_{12}N_6O_{14}$		-984,3 ± 3,9
1,1,1,9,9,9-hexanitro-3,5,7-trioxanonane	$C_6H_8N_6O_{15}$		-596,9 ± 1,3
dipentaérythritol hexanitrate	$C_{10}H_{16}N_6O_{19}$	13184-80-0	-979,6 ± 5,4
3-picrylamino-1,2,4-triazole	$C_8H_5N_7O_6$	18212-12-9	151,5 ± 3,3
bis(2,2,2-trinitroéthyl)amine	$C_4H_5N_7O_{12}$	34880-53-0	-33,4 ± 3,8
1,1,1,3,5,5,5-heptanitropentane	$C_5H_5N_7O_{14}$	20919-99-7	-153,7 ± 1,3
5,7-dinitro-1-picrylbenzotriazole	$C_{12}H_4N_8O_{10}$	50892-90-5	299,8 ± 5,0
2,2',4,4',6,6'-hexanitroazobenzène	$C_{12}H_4N_8O_{12}$	19159-68-3	241,84
3,3'-diamino-2,2',4,4',6,6'-hexanitrobiphényle	$C_{12}H_6N_8O_{12}$	17215-44-0	-14,9 ± 11,7
N-nitrosobis(2,2,2-trinitroéthyl)amine	$C_4H_4N_8O_{13}$	34882-73-0	49,2 ± 4,2
N-nitrobis(2,2,2-trinitroéthyl)amine	$C_4H_4N_8O_{14}$	19836-28-3	-27,9 ± 2,0
N,3,3,3-tétranitro-N-(2,2,2-trinitroéthyl)-propylamine	$C_5H_6N_8O_{14}$	71742-94-4	-87,86
1,1,1,4,9,9,9-heptanitro-4-aza-6-oxanonane	$C_7H_{10}N_8O_{15}$		-303,7 ± 7,1
1,1,1,5,9,9,9-heptanitro-3,7-dioxa-5-azanonane	$C_6H_8N_8O_{16}$	80308-88-9	-387,7 ± 3,8
2,2',4,4',4",6,6',6"-octanitroterphényle	$C_{18}H_6N_8O_{16}$	33491-88-2	94,7 ± 17,6
saccharose octanitrate	$C_{12}H_{14}N_8O_{27}$	30236-29-4	-1364,1 ± 10,9
5-nitraminotétrazole guanidinate	$C_2H_7N_9O_2$		111,2 ± 3,7
2,4,6-trinitro-1,3,5-tris(méthylnitramino)benzène	$C_9H_9N_9O_{12}$	62030-37-9	118,1 ± 9,6
2,2',2",4,4',4",6,6',6"-nonanitroterphényle	$C_{18}H_5N_9O_{18}$	51460-84-5	132,2 ± 10,0
1,3,5-tripicrylbenzène	$C_{24}H_9N_9O_{18}$	58505-78-5	-244,1 ± 15,9
1-(5-tétrazolyl)-4-guanyltétrazène hydrate	$C_2H_8N_{10}O$	109-27-3	189,1 ± 2,5
2,6-bis(picrylamino)-3,5-dinitropyridine	$C_{17}H_7N_{11}O_{16}$	38082-89-2	80,5 ± 6,7
2,4,6-tripicryl-1,3,5-triazine	$C_{21}H_6N_{12}O_{18}$	49753-54-0	300,0 ± 9,1
1,1,1,5,7,9,13,13,13-nonanitro-3,11-dioxa-5,7,9-triazatridécane	$C_8H_{12}N_{12}O_{20}$	80308-90-3	-340,2 ± 3,3
2,2',2",2"',4,4',4",4"',6,6',6",6"'-dodécanitroquatraphényle	$C_{24}H_6N_{12}O_{24}$	23242-92-4	213,1 ± 7,6

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.) kJ.mol^{-1}
2,6-bis(picrylazo)-3,5-dinitropyridine	$C_{17}H_5N_{13}O_{16}$	55106-96-2	617,3 ± 1,0
azo-bis(2,2',4,4',6,6'-hexanitrodiphényl)	$C_{24}H_6N_{14}O_{24}$	23987-32-8	480,0 ± 4,2
2,2',2",2"',4,4',4",4"',6,6',6",6"'-dodécanitro-3,3'-bis(phénylazo)biphényle	$C_{24}H_6N_{16}O_{24}$	58505-80-9	791,7 ± 8,4

Tableau IV-3 : Banque d'enthalpies standard de formation en phase solide concernant les 487 molécules $C_xH_yN_wO_z$ étudiées dans le cadre de la démarche directe.

1.2. Détermination des contributions de groupes à l'enthalpie standard de formation en phase solide

1.2.1. Procédure

La procédure de détermination des valeurs de contributions de groupes à l'enthalpie standard de formation en phase solide est exactement la même que celle explicitée au paragraphe 2.2.1. du chapitre III.

Afin de limiter la taille des systèmes d'équations traités et donc le temps de calcul et les risques de non-convergence, plusieurs banques de données sont étudiées successivement. En effet, à partir des composés hydrocarbonés répertoriés, la majorité des contributions de groupes renfermant les éléments C et H sont déterminées. Celles-ci sont ensuite utilisées pour calculer les contributions des groupes contenant de l'oxygène, à partir de données recueillies sur les molécules de formule générale $C_xH_yO_z$. De même, les contributions des groupes contenant de l'azote sont déterminées à partir des données réunies sur les substances de formule générale $C_xH_yN_w$. Enfin, l'étude s'achève par l'établissement de contributions de groupes mixtes (oxygénés et azotés) à partir d'enthalpies standard de formation de composés du type $C_xH_yN_wO_z$, et ceci, en reprenant les valeurs des contributions des groupes C-H, C-H-O et C-H-N obtenues précédemment.

Le détail du nombre de molécules retenues (sur les 1 025 molécules au total) pour la détermination des valeurs de contributions de groupes à l'enthalpie standard de formation en phase solide est indiqué dans le tableau ci-dessous :

Formule générale	Nombre de molécules traitées
C_xH_y	130
$C_xH_yO_z$ *(alcools)*	109
$C_xH_yO_z$ *(acides, esters, composés oxygénés polyfonctionnels)*	119
C_xN_w et $C_xH_yN_w$	127
$C_xN_wO_z$ et $C_xH_yNO_z$	151
$C_xH_yN_2O_z$	140
$C_xH_yN_{w\geq3}O_z$	147
Total	***923***

Tableau IV-4 : Détail du nombre de formules développées ayant permis de déterminer l'ensemble des contributions de groupes à l'enthalpie standard de formation en phase solide.

La différence majeure observée sur la procédure de détermination des contributions de groupes par rapport à celle mise en œuvre au chapitre III concernant la sublimation est qu'il y a beaucoup plus de corrections de structure et d'interactions à longue distance à prendre en compte dans le cas de la prévision des enthalpies standard de formation en phase solide. Celles-ci ne se décèlent pas aisément. Toute la difficulté à estimer des valeurs fiables et précises d'enthalpies standard de formation à l'état solide repose sur la définition de ces corrections et interactions.

1.2.2. Résultats

a. Valeurs de contributions de groupes à l'enthalpie standard de formation en phase solide

L'ensemble des valeurs de contributions de groupes à l'enthalpie standard de formation en phase solide (groupes de deuxième ordre, corrections de structure et interactions à longue distance) est présenté dans les tableaux IV-5 à IV-11. Le nombre de composés utilisés afin de déterminer chacune de ces contributions de groupes figure également dans ces tableaux.

A noter que quarante-quatre contributions de groupes C-H, soixante-treize contributions de groupes C-H-O et deux cent quarante-huit contributions de groupes C-H-N-O ont été déterminées. Viennent s'ajouter à cela quatre-vingt-une corrections de structure et trente-quatre interactions à longue distance.

Groupe	**Contribution** ($kJ.mol^{-1}$)	**Nombre de composés**
$C-(C)(H)_3$	-37,6	23
$C-(C)_2(H)_2$	-29,8	47
$C-(C)_3(H)$	-9,5	26
$C-(C)_4$	-14,7	12
$C-(C_d)(H)_3$	15,9	6
$C-(C_d)(C)(H)_2$	10,6	7
$C-(C_d)(C)_2(H)$	39,8	4
$C-(C_d)(C)_3$	-3,5	1
$C-(C_d)_2(H)_2$	167,6	3
$C-(C_t)(H)_3$	-40,2	1
$C-(C_t)(C)(H)_2$	15,0	3
$C-(C_t)(C)_3$	24,8	1
$C-(C_B)(H)_3$	-108,7	32
$C-(C_B)(C)(H)_2$	-71,6	15
$C-(C_B)(C)_2(H)$	-50,8	2
$C-(C_B)(C)_3$	-70,5	4
$C-(C_B)_2(H)_2$	-125,6	6
$C-(C_B)_2(C)(H)$	-76,1	3
$C-(C_B)_2(C)_2$	-82,5	1
$C-(C_B)_3(H)$	-101,8	2
$C-(C_B)_3(C)$	-73,4	4
$C-(C_B)_4$	-118,8	1
$C_d-(H)_2$	-1,8	3
$C_d-(C)(H)$	20,6	4
$C_d-(C)_2$	-20,7	1
$C_d-(C_d)(H)$	18,3	6
$C_d-(C_d)(C)$	57,0	4
$C_d-(C_d)_2$	31,7	2
$C_d-(C_B)(H)$	-1,5	12
$C_d-(C_B)(C)$	-80,6	2
$C_d-(C_B)(C_d)$	33,6	2
$C_d-(C_B)_2$	4,9	8
$C_t-(H)$	105,9	1
$C_t-(C)$	98,6	4
$C_t-(C_t)$	107,9	2
$C_t-(C_B)$	67,8	4
$C_B-(H)$	3,1	83
$C_B-(C)$	77,3	58
$C_B-(C_d)$	60,2	18
$C_B-(C_t)$	67,8	4
$C_B-(C_B)$	36,9	7

Groupe	Contribution (kJ.mol^{-1})	Nombre de composés
C_{BF}-(C_{BF})(C_B)$_2$	24,4	29
C_{BF}-(C_{BF})$_2$(C_B)	17,4	13
C_{BF}-(C_{BF})$_3$	3,0	4

Tableau IV-5 : Contributions de groupes de deuxième ordre C-H permettant de calculer des enthalpies standard de formation en phase solide, à T = 298,15 K.

Correction de structure	Contribution (kJ.mol^{-1})	Nombre de composés
cyclopropane	218,8	1
cyclobutane	102,7	2
cyclopentane	33,8	3
cyclopentène	7,7	2
cyclopentadiène	-37,7	3
cyclohexane	5,7	15
cyclohexène	58,1	4
1,4-cyclohexadiène	-26,7	3
cycloheptane	35,1	2
1,3,5-cycloheptatriène	14,1	3
cyclooctane	15,3	2
cyclododécane	50,5	1
1,5,9-cyclododécatriène	-7,0	1
cyclotétradécane	42,6	1
1,8-cyclotétradécadiyne	0,4	1
cyclopentadécane	70,2	1
cyclohexadécane	72,7	1
cycloheptadécane	75,4	1
bicyclo[2.2.1]heptane	72,4	5
bicyclo[2.2.1]hept-2-ène	129,2	1
bicyclo[2.2.2]octane	50,6	1
bicyclo[2.2.2]octène	-25,0	1
bicyclo[3.3.1]nonane	49,0	1
bicyclo[3.3.3]undécane	134,2	1
tricyclo[8.2.2.2^{4,7}]hexadécane	150,8	1
biphényle	-13,5	4
biphénylène	161,4	1
[2.2]métacyclophane	30,6	1

Correction de structure	Contribution ($kJ.mol^{-1}$)	Nombre de composés
[2.2]métaparacyclophane	83,0	1
acénaphtène	-8,7	1
acénaphtylène	1,6	1
indène	-15,9	1
benzo[c]phénantrène	23,4	1
[16]annulène	254,7	1
[18]annulène	-166,0	1
substitution identique en position para de 2 aromatiques[(1)]	34,5	2
1 atome de carbone entre 2 aromatiques[(2)]	-3,0	12

[(1)] Correction appliquée aux composés [2.2]paracyclophane, [3.3]paracyclophane, [1.8]paracyclophane, [6.6]paracyclophane et 9,10-dihydro-9,10-éthanoanthracène-11,11,12,12-tétracarbonitrile.
[(2)] Correction appliquée, par exemple, au diphénylméthane et au triphénylméthane.

Tableau IV-6 : Corrections de structure C-H permettant de calculer des enthalpies standard de formation en phase solide, à T = 298,15 K.

Groupe	Contribution ($kJ.mol^{-1}$)	Nombre de composés
$C-(CO)(H)_3$	-85,8	6
$C-(CO)(C)(H)_2$	-70,9	14
$C-(CO)(C)_2(H)$	-49,4	9
$C-(CO)(C)_3$	-37,9	6
$C-(CO)(C_d)(H)_2$	247,0	4
$C-(CO)(C_t)(H)_2$	27,2	2
$C-(CO)(C_B)(H)_2$	-120,6	3
$C-(CO)(C_B)(C)(H)$	-67,3	3
$C-(CO)_2(H)_2$	-99,5	1
$C-(CO)_2(C)(H)$	-216,3	1
$C-(O)(H)_3$	-41,4	7
$C-(O)(C)(H)_2$	-26,4	44
$C-(O)(C)_2(H)$	-19,4	44
$C-(O)(C)_3$	-32,4	8
$C-(O)(C_d)(H)_2$	63,8	1
$C-(O)(C_d)(C)(H)$	-5,8	2
$C-(O)(C_t)(C)_2$	31,7	2
$C-(O)(C_B)(H)_2$	-85,1	2
$C-(O)(C_B)(C)(H)$	-69,2	3
$C-(O)(C_B)(C)_2$	-77,3	1
$C-(O)(C_B)_2(C)$	-23,7	1

Groupe	Contribution ($kJ.mol^{-1}$)	Nombre de composés
C-(O)(CO)$(H)_2$	-74,5	2
C-(O)(CO)(C)(H)	-46,0	9
C-(O)(CO)$(C)_2$	-14,0	2
C-(O)(CO)(C_B)(H)	94,2	1
C-$(O)_2(H)_2$	-78,6	2
C-$(O)_2$(C)(H)	-66,8	11
C-$(O)_2(C)_2$	39,3	1
C-$(O)_2(C_d)$(H)	-29,2	2
C-$(O)_2(C_d)$(C)	8,8	1
C-$(O)_2$(CO)(C_d)	-37,4	1
C_d-(CO)(H)	-34,0	4
C_d-(CO)(C)	-2,6	1
C_d-(CO)(C_d)	-81,7	16
C_d-(O)(H)	-33,4	3
C_d-(O)(C)	-8,7	2
C_d-(O)(C_d)	-22,1	3
C_d-(O)(C_B)	46,6	2
C_d-(O)(CO)	-104,4	4
C_t-(CO)	-24,0	1
C_B-(CO)	-110,5	13
C_B-(O)	-67,9	29
CO-(C)(H)	-129,6	2
CO-$(C)_2$	-45,4	4
CO-(C_d)(H)	-42,5	6
CO-(C_d)(C)	29,3	3
CO-$(C_d)_2$	129,0	2
CO-(C_B)(H)	-58,2	1
CO-(C_B)(C)	7,6	7
CO-$(C_B)_2$	229,2	1
CO-(CO)(C)	-65,8	1
CO-(CO)(C_d)	-17,0	1
CO-$(CO)_2$	-86,0	1
CO-(O)(C)	-183,1	19
CO-(O)(C_d)	-118,1	3
CO-(O)(C_t)	-38,2	1
CO-(O)(C_B)	-86,7	5
CO-(O)(CO)	-210,8	3
CO-$(O)_2$	-248,5	3
O-$(H)_2$	-296,0	4
O-(C)(H)	-202,4	78
O-$(C)_2$	-128,7	14
O-(C_d)(H)	-173,7	4
O-$(C_d)_2$	-33,4	3
O-(C_B)(H)	-125,9	28

Groupe	Contribution (kJ.mol^{-1})	Nombre de composés
O-(C_B)(C)	-51,0	3
O-(CO)(H)	-212,4	11
O-(CO)(C)	-120,9	15
O-(CO)(C_B)	-31,7	6
O-$(CO)_2$	-89,8	2
O-(O)(H)	-210,6	4
O-(O)(C)	-77,3	1
O-(O)(CO)	86,8	6

Tableau IV-7 : Contributions de groupes de deuxième ordre C-H-O permettant de calculer des enthalpies standard de formation en phase solide, à T = 298,15 K.

Correction de structure	Contribution (kJ.mol^{-1})	Nombre de composés
éthylène oxyde	142,4	1
tétrahydrofurane	39,3	1
tétrahydropyrane	74,5	12
époxycyclohexane	204,9	1
(poly)saccharide cyclique[(1)]	-41,5	11
saccharide cyclique hydraté[(1)]	-41,5	11
polysaccharide cyclique hydraté[(2)]	41,5	11
furane	-33,4	3
2,5-dihydrofurane	-29,6	2
3-cyclobutèn-1,2-dione	-8,0	1
structure acide phényl ester benzoïque	24,8	2

[(1)] Correction appliquée, par exemple, au α-D-xylose, au α-D-glucose hydrate et au β-lactose.
[(2)] Correction appliquée au β-maltose monohydrate et au α-lactose monohydrate.

Tableau IV-8 : Corrections de structure C-H-O permettant de calculer des enthalpies standard de formation en phase solide, à T = 298,15 K.

Groupe	Contribution ($kJ.mol^{-1}$)	Nombre de composés
$C-(C_I)(H)_3$	-64,9	4
$C-(C_I)(C)(H)_2$	-27,6	1
$C-(C_I)(C_B)(H)_2$	-53,8	1
$C-(CN)(C)(H)_2$	86,7	1
$C-(CN)(C)_2(H)$	81,6	1
$C-(CN)(C)_3$	85,9	1
$C-(CN)(C_d)(H)_2$	74,3	1
$C-(CN)(C_t)(H)_2$	84,8	1
$C-(CN)(CO)(H)_2$	65,0	1
$C-(CN)_2(H)_2$	187,9	1
$C-(CN)_2(C)_2$	201,3	6
$C-(CN)_3(C)$	386,2	5
$C-(CN)_4$	611,6	1
$C-(N)(H)_3$	7,8	10
$C-(N)(C)(H)_2$	-4,3	6
$C-(N)(C)_2(H)$	2,2	5
$C-(N)(C)_3$	49,0	4
$C-(N)(C_d)(H)_2$	67,1	4
$C-(N)(CO)(H)_2$	-54,0	11
$C-(N)(CO)(C)(H)$	-35,7	24
$C-(N)(CO)(C)_2$	-46,4	2
$C-(N)(CN)(C)_2$	67,5	1
$C-(N)(O)(H)_2$	-29,3	3
$C-(N)_2(H)_2$	55,5	5
$C-(N)_2(C)(H)$	7,7	1
$C-(N)_2(CO)(H)$	2,5	1
$C-(N)_4$	34,0	1
$C-(N_I)(C)(H)_2$	-30,6	1
$C-(N_A)(C)_2(H)$	40,2	1
$C-(N_A)(C)_3$	38,7	3
$C-(N_A)(C_B)(H)_2$	-112,9	1
$C-(N_A)(CO)(C)(H)$	-124,9	1
$C-(N_A)(CO)_2(H)$	-184,3	1
$C-(N_A)(CN)(C)_2$	117,7	1
$C-(NO)(C)_3$	19,4	2
$C-(NO_2)(C)(H)_2$	-92,7	3
$C-(NO_2)(C)_2(H)$	-90,1	1
$C-(NO_2)(C)_3$	-89,9	8
$C-(NO_2)(CO)(H)_2$	-163,6	1
$C-(NO_2)(O)(C_d)(H)$	-29,6	2
$C-(NO_2)_2(C)_2$	-62,7	5
$C-(NO_2)_2(C_B)(H)$	-134,4	1
$C-(NO_2)_2(O)(C)$	-44,8	1
$C-(NO_2)_3(H)$	-48,1	1

Groupe	Contribution ($kJ.mol^{-1}$)	Nombre de composés
$C-(NO_2)_3(C)$	-4,1	13
$C-(NO_2)_3(CN)$	174,1	1
$C_d-(C_I)(H)$	-204,8	5
$C_d-(C_I)(C)$	248,7	3
$C_d-(CO)(C_I)$	34,4	1
$C_d-(CN)(H)$	187,6	1
$C_d-(CN)(C_d)$	134,1	1
$C_d-(CN)_2$	251,7	2
$C_d-(O)(C_I)$	12,7	1
$C_d-(N)(H)$	100,3	5
$C_d-(N)(C)$	-74,3	4
$C_d-(N)(C_d)$	-43,4	4
$C_d-(N)(C_B)$	1,9	1
$C_d-(N)(C_I)$	-12,4	1
$C_d-(N)(CO)$	-154,8	22
$C_d-(N)(O)$	-152,0	1
$C_d-(N)_2$	-8,1	1
$C_d-(N_I)(H)$	18,8	1
$C_d-(N_I)(C_d)$	-77,2	8
$C_d-(N_I)(N)$	-11,1	1
$C_d-(N_I)_2$	84,4	1
$C_d-(N_A)(H)$	14,5	1
$C_d-(NO_2)(H)$	-43,9	1
$C_d-(NO_2)(C)$	-105,7	1
$C_d-(NO_2)(O)$	-50,2	7
$C_B-(C_I)$	66,5	11
$C_B-(CN)$	131,0	5
$C_B-(N)$	62,0	36
$C_B-(N_I)$	-30,1	2
$C_B-(N_A)$	75,8	9
$C_B-(NO)$	40,5	3
$C_B-(NO_2)$	-27,6	9
$C_B-(NCO)$	-51,9	1
$C_{BF}-(N)(C_{BF})(C_B)$	-15,9	1
$C_{BF}-(N_I)(C_{BF})(C_B)$	44,0	7
$C_{BF}-(N_I)(C_{BF})_2$	54,5	1
$C_{BF}-(N_I)_2(N)$	18,6	1
$C_{BF}-(N_A)(C_{BF})(C_B)$	58,8	1
$C_I-(C_d)(H)$	12,7	1
$C_I-(C_d)(C)$	-118,6	2
$C_I-(C_d)_2$	-13,2	4
$C_I-(C_B)(H)$	-79,5	1
$C_I-(C_B)(C_d)$	-11,2	2
$C_I-(C_I)(H)$	-17,9	5

Groupe	Contribution ($kJ.mol^{-1}$)	Nombre de composés
C_I-(C_I)(C)	2,3	4
C_I-(C_I)(C_B)	-36,9	8
C_I-(C_I)$_2$	10,8	2
C_I-(CO)(C_I)	49,8	3
C_I-(CN)(C_I)	138,8	3
C_I-(CN)(N_I)	28,0	1
C_I-(CN)$_2$	191,1	1
C_I-(O)(C)	21,3	4
C_I-(O)(C_B)	-16,1	4
C_I-(O)(C_I)	28,0	1
C_I-(O)$_2$	-63,6	1
C_I-(N)(H)	-52,7	5
C_I-(N)(C)	-43,4	3
C_I-(N)(C_d)	2,1	1
C_I-(N)(C_B)	-76,6	3
C_I-(N)(C_I)	-10,4	1
C_I-(N)(CN)	110,8	1
C_I-(N)(O)	-156,3	3
C_I-(N)$_2$	-59,5	15
C_I-(N_I)(H)	-53,8	1
C_I-(N_I)(C)	71,6	1
C_I-(N_I)(C_B)	28,4	2
C_I-(N_I)(CO)	-63,6	1
C_I-(N_I)(N)	158,7	5
C_I-(N_A)(H)	22,9	1
C_I-(N_A)(C)	-47,1	2
C_I-(N_A)(C_B)	25,9	2
C_I-(N_A)(CO)	-42,6	1
C_I-(N_A)(N)	21,4	6
C_I-(N_3)(N)	333,4	2
C_I-(NO_2)(C)	-44,8	1
C_I-(NO_2)(C_I)	-24,2	1
CO-(C_I)(C_B)	-14,7	4
CO-(CN)(C_B)	133,8	1
CO-(O)(C_I)	-42,6	1
CO-(N)(H)	-142,4	1
CO-(N)(C)	-110,3	15
CO-(N)(C_d)	63,1	3
CO-(N)(C_B)	5,8	6
CO-(N)(C_t)	-24,0	1
CO-(N)(C_I)	-122,5	2
CO-(N)(CO)	-133,0	3
CO-(N)(O)	-201,7	4
CO-(N)$_2$	-127,3	24

Groupe	Contribution ($kJ.mol^{-1}$)	Nombre de composés
$CO-(N_I)(N)$	2,1	1
$CO-(N_A)(N)$	-15,1	1
$O-(C_I)(H)$	-131,0	2
$O-(C_I)(C)$	-24,3	1
$O-(C_I)(C_B)$	-30,1	2
$O-(C_I)_2$	5,9	1
$O-(N)(H)$	-59,6	2
$O-(N)(C_I)$	-17,6	1
$O-(N_I)(H)$	-96,0	9
$O-(N_I)(C)$	-44,8	1
$O-(N_I)(C_d)$	34,4	4
$O-(N_I)(C_I)$	-20,4	5
$O-(N_I)(CO)$	7,7	1
$O-(N_I)_2$	39,3	6
$O-(N_A)(C_B)$	69,8	1
$O-(NO_2)(H)$	-234,0	6
$O-(NO_2)(C)$	-101,0	15
$O-(NO_e)(C)$	-27,6	1
$O-(NO_e)(N_I)$	58,1	3
$N-(C)(H)_2$	-81,9	28
$N-(C)_2(H)$	-75,4	5
$N-(C)_3$	56,7	4
$N-(C_d)(H)_2$	-152,0	1
$N-(C_d)_2(H)$	-54,5	7
$N-(C_B)(H)_2$	-68,9	15
$N-(C_B)(C)(H)$	-77,2	3
$N-(C_B)(C)_2$	-62,3	1
$N-(C_B)(C_d)(H)$	59,3	2
$N-(C_B)(C_d)(C)$	-18,1	1
$N-(C_B)(C_d)_2$	-139,5	1
$N-(C_B)_2(H)$	-75,4	2
$N-(C_B)_2(C)$	1,5	2
$N-(C_{BF})(C_B)(C)$	-15,9	1
$N-(C_{BF})_3$	6,9	1
$N-(C_I)(H)_2$	-35,4	9
$N-(C_I)(C)(H)$	-41,9	4
$N-(C_I)(C)_2$	-58,5	2
$N-(C_I)(C_d)(H)$	72,2	2
$N-(C_I)(C_B)(H)$	8,4	2
$N-(C_I)(CO)(H)$	-52,9	5
$N-(C_I)_2(H)$	-75,5	1
$N-(CO)(H)_2$	-116,1	9
$N-(CO)(C)(H)$	-63,4	9
$N-(CO)(C)_2$	-78,8	1

Groupe	Contribution ($kJ.mol^{-1}$)	Nombre de composés
N-(CO)(C_d)(H)	-48,0	3
N-(CO)(C_B)(H)	-94,1	9
N-(CO)(C_B)(C)	-56,6	5
N-(CO)(C_B)(C_d)	-754,0	1
N-(CO)(C_B)$_2$	-3,2	7
N-(CO)(C_I)(C_d)	18,8	1
N-(CO)$_2$(H)	-112,3	4
N-(CO)$_2$(C)	-65,3	1
N-(CO)$_2$(C_B)	-48,1	1
N-(CN)(H)$_2$	58,8	1
N-(CN)(C_I)(H)	41,9	1
N-(O)(C)$_2$	-59,6	2
N-(O)(CO)(H)	-17,6	1
N-(N)(H)$_2$	-3,2	7
N-(N)(C)(H)	67,5	1
N-(N)(C_d)$_2$	73,5	1
N-(N)(C_B)(H)	14,0	3
N-(N)(C_B)$_2$	73,7	1
N-(N)(C_I)(H)	86,0	5
N-(N)(CO)(H)	-3,0	8
N-(N)(CO)(C_B)	14,8	1
N-(N)(CO)$_2$	-6,8	1
N-(N_I)(C_d)(H)	74,0	1
N-(N_I)(C_B)(H)	60,3	2
N-(N_I)(C_I)(H)	-48,5	4
N-(N_I)(CO)(H)	12,7	1
N-(N_A)(C)(H)	66,9	1
N-(N_A)(C_d)(H)	14,5	1
N-(N_A)(C_B)(H)	-4,6	4
N-(N_A)(C_B)$_2$	151,0	1
N-(N_A)(C_I)(H)	21,1	15
N-(N_A)(C_I)(C)	10,1	7
N-(N_A)(C_I)(C_B)	53,8	5
N-(N_A)(C_I)(CO)	60,2	1
N-(N_A)(CO)(C)	-49,2	1
N-(N_A)(N)(H)	77,2	1
N-(N_A)(N)(C_B)	37,9	1
N-(N_A)(N_I)(H)	2,0	1
N-(N_A)(N_I)(C)	-9,2	2
N-(N_A)(N_I)(C_B)	-42,6	1
N-(NO)(C)$_2$	45,6	5
N-(NO)(C_B)$_2$	72,0	1
N-(NO_2)(C)(H)	-47,6	2
N-(NO_2)(C)$_2$	-25,7	10

Groupe	Contribution ($kJ.mol^{-1}$)	Nombre de composés
N-(NO_2)(C_B)(C)	1,4	4
N-(NO_2)(C_I)(H)	35,8	4
N-(NO_2)(CO)(H)	16,8	1
N-(NO_2)(CO)(C)	-26,1	4
N-(NO_2)$(CO)_2$	22,3	1
N_I-(H)	-55,1	11
N_I-(C)	-30,6	1
N_I-(C_d)	-8,7	5
N_I-(C_B)	63,6	7
N_I-(C_{BF})	11,4	9
N_I-(C_I)	-20,4	5
N_I-(CO)	2,1	1
N_I-(O)	71,4	9
N_I-(N)	61,9	11
N_I-(N_I)	10,7	1
N_I-(N_A)	82,0	27
N_I-(NO_2)	7,4	3
N_A-(C)	80,5	6
N_A-(C_d)	14,5	1
N_A-(C_B)	75,8	9
N_A-(C_{BF})	58,8	1
N_A-(C_I)	67,9	9
N_A-(CO)	-15,1	1
N_A-(O)	69,8	1
N_A-(N)	91,3	36
N_A-(N_I)	82,0	27
N_e-(C_B)	191,1	1
NO_e-(O)	58,1	3

Tableau IV-9 : Contributions de groupes de deuxième ordre C-H-N-O permettant de calculer des enthalpies standard de formation en phase solide, à T = 298,15 K.

Correction de structure	Contribution ($kJ.mol^{-1}$)	Nombre de composés
pyrrolidine	70,2	3
pipéridine	7,2	1
3-azabicyclo[3.2.2]nonane	50,6	1
pipérazine	16,4	2
1,4-diazabicyclo[2.2.2]octane	-59,3	1
1-pyrazoline	-80,6	1
2,3-diazabicyclo[2.2.2]oct-2-ène	-23,7	1

Correction de structure	Contribution ($kJ.mol^{-1}$)	Nombre de composés
hexahydro s triazine	-20,0	2
1,3,5,7-tétraazabicyclo[3.3.1]nonane	-272,5	1
hexaméthylènetétramine	-474,9	1
pyrrole	-21,0	9
indole	-126,5	3
benzotriazole	-92,5	3
tétrazole	14,7	26
azobenzène substitué(1)	142,5	3
succinimide	14,5	2
4-pipéridinone	-19,5	2
ε-caprolactame	2,4	3
2-azacyclooctanone	19,5	1
2-imino-imidazolidin-4-one	143,6	1
2,5-pipérazinedione	11,3	4
3-benzyl-2,5-pipérazinedione	82,3	5
urazine	5,4	1
N-alkyl-N-phényl-N'-alkylurée	-74,3	6
N,N-diphényl-N'-alkylurée	-74,3	6
N,N-diphényl-N'-allylurée	-74,3	6
N,N-diphényl-N'-hydroxyalkylurée	-74,3	6
isoxazole	34,4	4
furazane	39,3	6
1,3,4-oxadiazole	5,9	1
uracile	-19,9	1
cytosine	2,1	1
acide urique	-8,1	1

(1) Correction appliquée, par exemple, à l'azo-bis(2,2',4,4',6,6'-hexanitrodiphényl).

Tableau IV-10 : Corrections de structure C-H-N-O permettant de calculer des enthalpies standard de formation en phase solide, à T = 298,15 K.

Interaction à longue distance	Contribution ($kJ.mol^{-1}$)	Nombre de composés
interaction gauche	0,7	34
structure but-2-ène	-2,2	13
phényl symétrique	6,0	8
interaction 1,8-alkylnaphtalène	22,7	2
interaction 2,6-diméthylnaphtalène	-10,4	1
interaction 2,7-diméthylnaphtalène	-10,1	1
interaction 2,7-naphtalènediol	-5,9	1
interaction 1,8-dinitronaphtalène	48,6	3
interaction 2,6-diméthyl sur un acide benzoïque	21,5	6
acide alcanedioïque sauf les acides en C_3 et C_5[(1)]	14,6	18
acide alcanedioïque C_n et C_{n+1} à partir des acides en C_9[(2)]	13,0	5
acide 2,4-diméthyl-1H-pyrrole-3-carboxylique alkyl ester	-114,2	3
acide 4,5-diméthyl-1H-pyrrole-3-carboxylique alkyl ester	-114,2	3
acide 3,4,5-trialkyl-1H-pyrrole-2-carboxylique alkyl ester	-48,1	2
acide 2,x-diméthyl-1H-pyrrole-5-carboxylique alkyl ester[(3)]	53,2	2
acide y,5-diméthyl-1H-pyrrole-2-carboxylique alkyl ester[(3)]	53,2	2
liaison hydrogène intramoléculaire	19,8	9
zwitterion aliphatique[(4)]	128,8	2
interaction ortho (non polaire/non polaire)	1,7	13
interaction ortho (non polaire/polaire)	0,1	6
interaction ortho (polaire/polaire)	-1,2	9
interaction ortho NO_2/alkyl	7,7	5
interaction ortho NO_2/C=C[(5)]	29,1	1
interaction ortho NO_2/O-C[(6)]	31,4	4
interaction ortho NO_2/NH_2	-24,0	1
interaction ortho NO_2/NO_2	32,8	2
interaction ortho NO_2/nitrobenzène	30,1	7
interaction ortho CH_3/N sur pyridine	-5,1	4
interaction ortho OH/N sur pyridine	-51,8	2
interaction méta OH/N sur pyridine	-13,1	3
interaction para OH/N sur pyridine	-29,3	2
interaction méta CN/N sur pyridine	-1,7	1
interaction ortho NH_2/N sur pyridine	-41,9	2
interaction para NH_2/N sur pyridine	-7,2	1

[(1)] Cette correction est à prendre considération pour tous les acides alcanedioïques, excepté l'acide malonique et l'acide pentanedioïque. Par ailleurs, l'acide butanedioïque requiert

l'opposé de cette correction et l'acide hexanedioïque nécessite un tiers de l'opposé de cette correction.
(2) Correction à prendre en compte dans le cas des acides nonanedioïque et décanedioïque. Les acides undécanedioïque et dodécanedioïque requièrent deux fois cette correction, et ainsi de suite.
(3) x et y peuvent être égaux à 3 ou 4 ; ce qui signifie que la correction en question s'applique à l'acide 2,3-diméthyl-1H-pyrrole-5-carboxylique alkyl ester, à l'acide 2,4-diméthyl-1H-pyrrole-5-carboxylique alkyl ester, à l'acide 3,5-diméthyl-1H-pyrrole-2-carboxylique alkyl ester et à l'acide 4,5-diméthyl-1H-pyrrole-2-carboxylique alkyl ester.
(4) Correction uniquement à prendre en considération dans le cas des zwitterions aliphatiques, tels que la créatine, *i.e.* dans le cas des molécules aliphatiques contenant une fonction H_2N-C=NH.
(5) Correction appliquée au (E)-2,2',4,4',6,6'-hexanitrostilbène.
(6) Correction à prendre en compte dans le cas des composés aromatiques contenant un substituant nitro et un autre substituant constitué d'un atome d'oxygène immédiatement suivi par un atome de carbone, et ceci, en position ortho. Cette correction est appliquée au 2,4-dinitro-1-méthoxybenzène ou au 2,4-dinitrophénoxyéthanol, par exemple.

Tableau IV-11 : Interactions à longue distance C-H, C-H-O et C-H-N-O permettant de calculer des enthalpies standard de formation en phase solide, à T = 298,15 K.

Les résultats de représentation de l'ensemble des molécules étudiées sont tous présentés plus loin, dans les tableaux IV-60 à IV-63 consacrés à la comparaison des calculs obtenus avec les résultats d'estimation observés grâce à la méthode de Domalski et Hearing. On remarquera que seules mille dix-sept substances figurent dans ces tableaux (et non pas 1 025). En effet, certains composés ont été éliminés au cours des phases de traitement des données (en raison de grandes incertitudes expérimentales et d'une mauvaise prédictivité en découlant), ce qui a empêché la détermination de quelques valeurs de contributions de groupes. Il est donc impossible, à présent, de représenter l'enthalpie standard de formation en phase solide des huit molécules restantes (soient α,α-diphényl-benzèneméthanol ; alcool 4,4′,4″-triméthyltrityl ; ergostérol ; 1H-indole-2,3-dione ; méthylphaeophorbide-b ; 2,6-bis(picrylamino)-3,5-dinitropyridine ; 2,4,6-tripicryl-1,3,5-triazine ; 2,6-bis(picrylazo)-3,5-dinitropyridine).

Voici le détail du nombre de molécules dont l'enthalpie standard de formation à l'état solide a été représentée et comparée à la valeur publiée dans la littérature :

Formule générale	Nombre de molécules dans la banque de $\Delta_f H°_{s,m}$	Nombre de molécules représentées
C_xH_y	145	145
$C_xH_yO_z$	259	256
C_xN_w et $C_xH_yN_w$	134	134
$C_xN_wO_z$ et $C_xH_yN_wO_z$	487	482
Total	***1 025***	***1 017***

Tableau IV-12 : Détail du nombre de molécules contenues dans la banque d'enthalpies constituée et du nombre de molécules dont l'enthalpie standard de formation en phase solide a été représentée.

b. Détail des résultats de représentation des valeurs d'enthalpies standard de formation en phase solide

Les tableaux ci-dessous contiennent les valeurs de résidus moyens et de moyennes quadratiques obtenues, les écarts extrêmes observés ainsi que les composés correspondant à ces écarts, et cela pour chaque type de molécules de formule brute C_xH_y, $C_xH_yO_z$, $C_xH_yN_w$ et $C_xH_yN_wO_z$. Par ailleurs, chacun des paragraphes consacrés aux composés étudiés comporte un graphe présentant une évaluation globale des résultats de représentation des enthalpies standard de formation en phase solide. Les incertitudes représentées par des barres d'erreur dans ces graphes correspondent aux valeurs publiées dans la littérature.

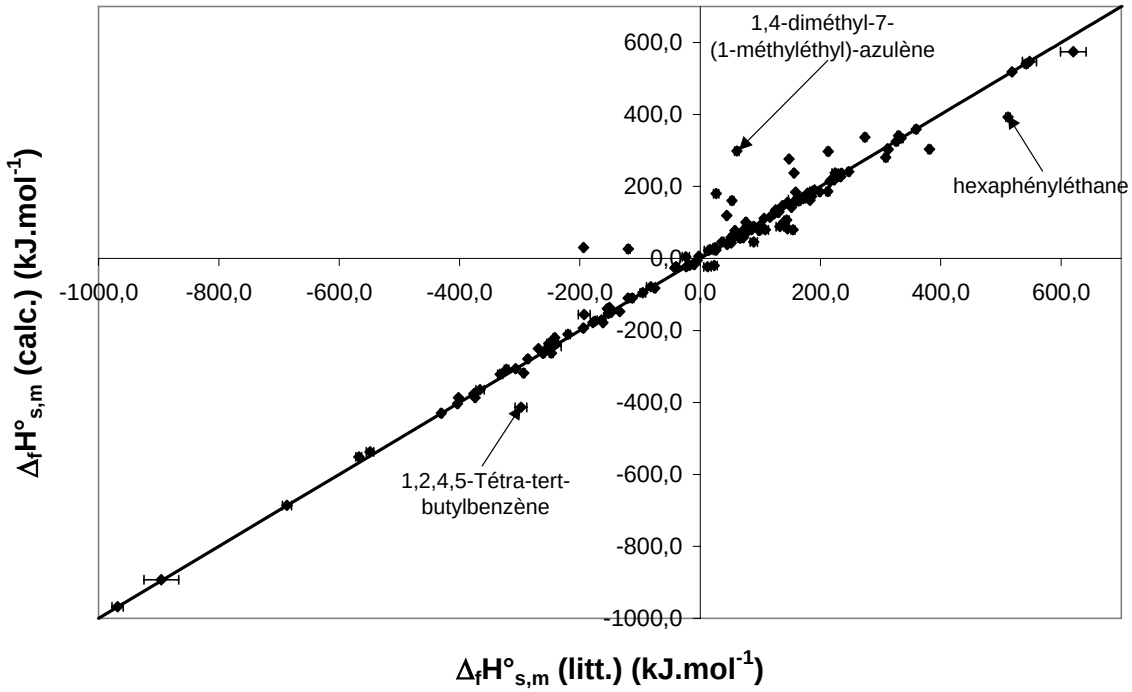
✓ Composés C_xH_y

Unité	Résidu moyen	Moyenne quadratique
$kJ.mol^{-1}$	20,2	43,3
$J.g^{-1}$	95,5	219,5

Tableau IV-13 : Résidus moyens et moyennes quadratiques obtenus sur la représentation des enthalpies standard de formation en phase solide de 145 molécules C_xH_y.

Unité	Ecart négatif le plus élevé (composé)	Ecart positif le plus élevé (composé)
$kJ.mol^{-1}$	-237,6 (1,4-diméthyl-7-(1-méthyléthyl)-azulène)	118,7 (hexaphényléthane)
$J.g^{-1}$	-1198,3 (1,4-diméthyl-7-(1-méthyléthyl)-azulène)	383,0 (1,2,4,5-Tétra-tert-butylbenzène)

Tableau IV-14 : Ecarts extrêmes entre les enthalpies standard de formation en phase solide mesurées et représentées de 145 molécules C_xH_y.



<u>Figure IV-1</u> : Evaluation globale des résultats de représentation des enthalpies standard de formation en phase solide de 145 composés C_xH_y.

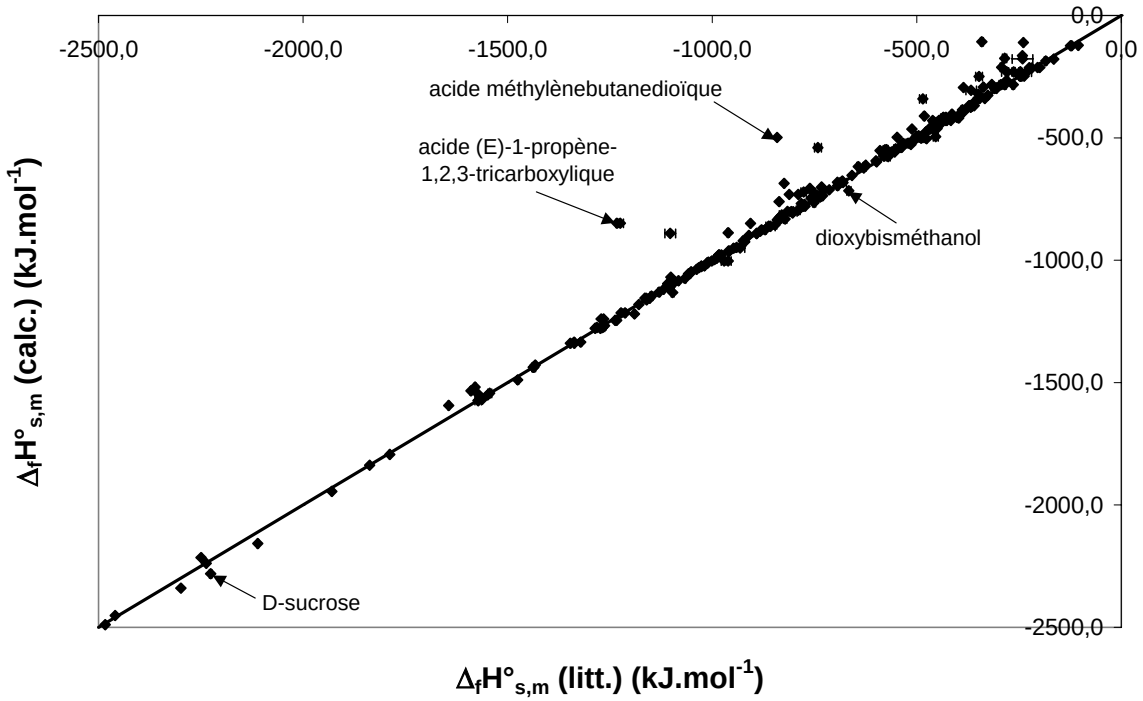
✓ Composés $C_xH_yO_z$

Unité	Résidu moyen	Moyenne quadratique
$kJ.mol^{-1}$	22,2	54,2
$J.g^{-1}$	131,8	335,3

<u>Tableau IV-15</u> : Résidus moyens et moyennes quadratiques obtenus sur la représentation des enthalpies standard de formation en phase solide de 256 molécules $C_xH_yO_z$.

Unité	Ecart négatif le plus élevé (composé)	Ecart positif le plus élevé (composé)
$kJ.mol^{-1}$	-384,5 (acide (E)-1-propène-1,2,3-tricarboxylique)	54,8 (D-sucrose)
$J.g^{-1}$	-2638,2 (acide méthylènebutanedioïque)	537,9 (dioxybisméthanol)

<u>Tableau IV-16</u> : Ecarts extrêmes entre les enthalpies standard de formation en phase solide mesurées et représentées de 256 molécules $C_xH_yO_z$.



<u>Figure IV-2</u> : Evaluation globale des résultats de représentation des enthalpies standard de formation en phase solide de 256 composés $C_xH_yO_z$.

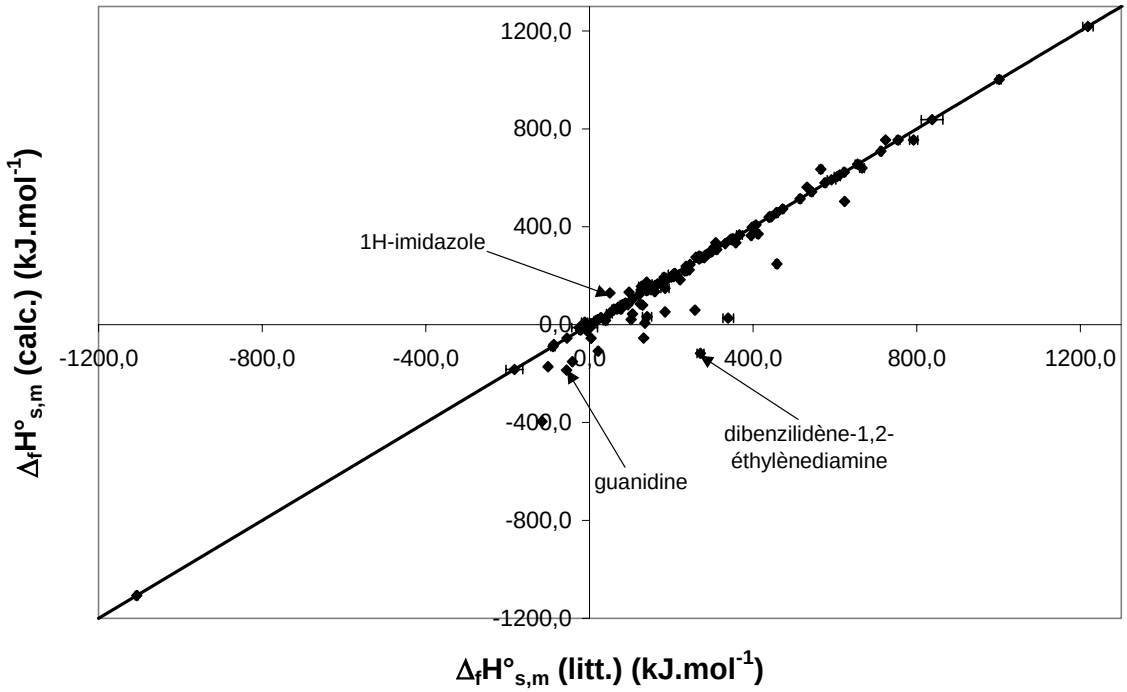
✓ Composés $C_xH_yN_w$

Unité	Résidu moyen	Moyenne quadratique
kJ.mol^{-1}	28,0	67,2
J.g^{-1}	188,8	436,7

<u>Tableau IV-17</u> : Résidus moyens et moyennes quadratiques obtenus sur la représentation des enthalpies standard de formation en phase solide de 134 molécules C_xN_w et $C_xH_yN_w$.

Unité	Ecart négatif le plus élevé (composé)	Ecart positif le plus élevé (composé)
kJ.mol^{-1}	-80,1 (1H-imidazole)	388,5 (dibenzylidène-1,2-éthylènediamine)
J.g^{-1}	-1176,4 (1H-imidazole)	2189,2 (guanidine)

<u>Tableau IV-18</u> : Ecarts extrêmes entre les enthalpies standard de formation en phase solide mesurées et représentées de 134 molécules C_xN_w et $C_xH_yN_w$.



<u>Figure IV-3</u> : Evaluation globale des résultats de représentation des enthalpies standard de formation en phase solide de 134 composés C_xN_w et $C_xH_yN_w$.

✓ Composés $C_xH_yN_wO_z$

Unité	Résidu moyen	Moyenne quadratique
kJ.mol^{-1}	21,3	48,4
J.g^{-1}	106,2	248,6

<u>Tableau IV-19</u> : Résidus moyens et moyennes quadratiques obtenus sur la représentation des enthalpies standard de formation en phase solide de 482 molécules $C_xN_wO_z$ et $C_xH_yN_wO_z$.

Unité	Ecart négatif le plus élevé (composé)	Ecart positif le plus élevé (composé)
kJ.mol^{-1}	-389,7 (éthylméthyl maléimide)	393,9 (rhodoporphyrine (XV) diméthyl ester)
J.g^{-1}	-2800,6 (éthylméthyl maléimide)	1281,7 (méthyl phénylcarbamate)

<u>Tableau IV-20</u> : Ecarts extrêmes entre les enthalpies standard de formation en phase solide mesurées et représentées de 482 molécules $C_xN_wO_z$ et $C_xH_yN_wO_z$.

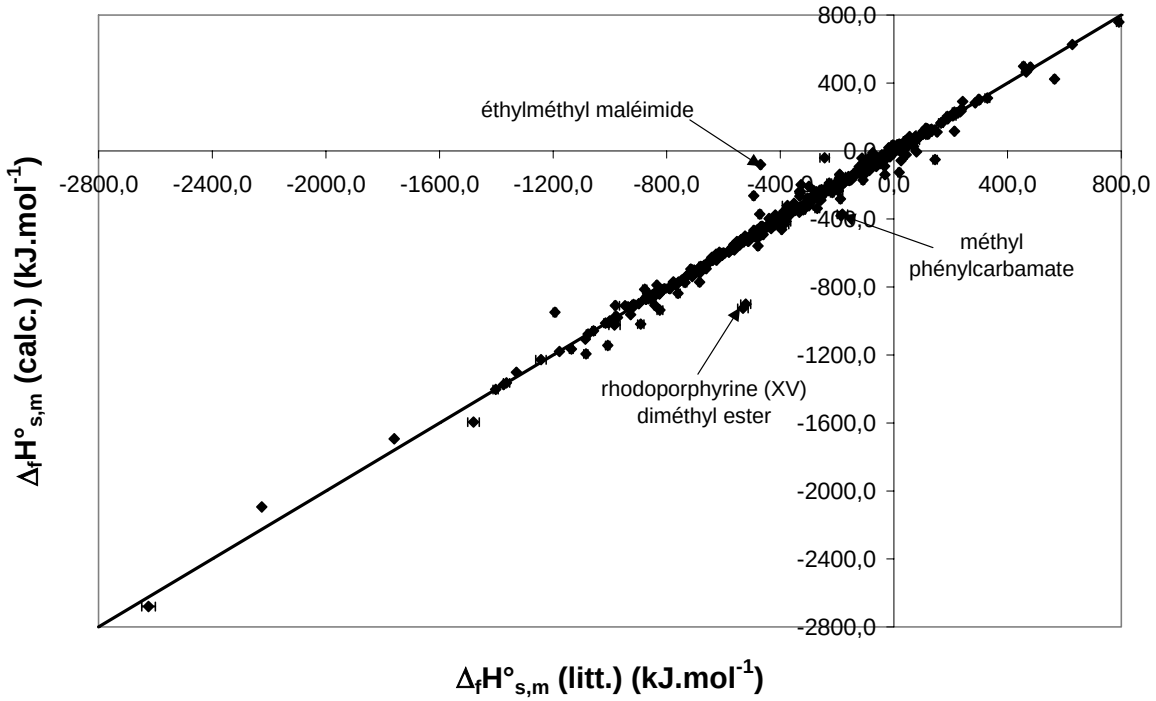


Figure IV-4 : Evaluation globale des résultats de représentation des enthalpies standard de formation en phase solide de 482 composés $C_xN_wO_z$ et $C_xH_yN_wO_z$.

1.3. Mise en évidence des points problématiques

1.3.1. Remarques générales

De manière générale, plusieurs points peuvent être évoqués permettant d'expliquer l'obtention de résidus élevés.

Tout d'abord, il est important de souligner le fait qu'il existe parfois plusieurs valeurs d'enthalpies standard de formation en phase solide pour un même composé. Ces grandeurs peuvent être très différentes d'une source à une autre. On peut ici citer l'exemple du naphtacène [92-24-0]. Cox et Pilcher [171] ont publié une enthalpie standard de formation à l'état condensé valant 158,8 kJ.mol^{-1} alors que Nagano [172] a rapporté une valeur tout à fait différente : 206,9 kJ.mol^{-1}. Ce cas n'est pas rare. Le 1,3,5-triamino-2,4,6-trinitrobenzène [3058-38-6] peut également illustrer cet état de fait. En effet, de nombreuses valeurs très diverses d'enthalpie standard de formation en phase solide ont été rapportées pour ce composé : -154,18 kJ.mol^{-1} [173], -74,68 kJ.mol^{-1} [174], -139,75 kJ.mol^{-1} [175], -302,00 kJ.mol^{-1} [176]. Il serait, par conséquent, très important d'analyser une nouvelle fois ce type de molécules afin de valider ou non les valeurs d'enthalpies standard de formation présentées dans la littérature. En effet, il est parfois très compliqué de faire « le bon choix » de valeur d'enthalpie standard de formation permettant la détermination de contributions de groupes. Lorsque le type de cas évoqué plus haut s'est présenté, il a donc fallu sélectionner la valeur la plus plausible, *i.e.* souvent, la valeur d'enthalpie standard de formation qui était retenue dans plusieurs banques de données.

Par ailleurs, seule une valeur d'enthalpie standard de formation en phase solide a été publiée pour un nombre non négligeable de substances organiques étudiées. Il est donc, dans ces cas précis, difficile d'être absolument certain de disposer d'une valeur juste.

Enfin, certains groupes sont rarement présents au sein des molécules organiques. C'est pour cette raison que plusieurs contributions de groupes n'ont pu être estimées qu'à l'aide d'un nombre de composés peu élevé. Or, plus ce chiffre est faible et plus une incertitude élevée pèse sur la valeur de contribution. En réalité, le faible nombre d'occurrence d'un groupe n'est pas directement responsable d'une incertitude élevée (car des mesures expérimentales tout à fait fiables engendrent la détermination de contributions de groupes exactes). Cela empêche simplement de certifier la validité de la valeur de contribution trouvée. Dans le cadre de la méthode établie, il faut considérer que les contributions de groupes qui ont été déterminées grâce à un nombre de molécules inférieur à 3 sont les moins fiables.

1.3.2. Polymorphisme

Les molécules solides peuvent se présenter sous trois formes différentes : cristalline, amorphe, et semi-cristalline. Un solide cristallin est un solide qui présente un ordre structural périodique parfait. Précisons cependant que dans la réalité, il existe toujours des défauts dans un cristal. Un solide amorphe est, quant à lui, un solide qui n'est pas organisé donc qui ne présente pas d'ordre à grande distance. Mais, toutes les matières amorphes sont très loin de posséder une structure complètement désordonnée. Il existe souvent des domaines, très petits, où les atomes ou les molécules sont parfaitement organisés. Dans ce cas, le solide est dit semi-cristallin. Notons que la majorité des phases solides de substances pures se trouvent sous la forme cristalline et que les solides peuvent cristalliser dans différents systèmes cristallins.

La première remarque évoquée au paragraphe précédent (*i.e.* paragraphe 1.3.1.) peut ainsi très certainement s'expliquer par le polymorphisme des espèces étudiées.

Le polymorphisme est la capacité d'un matériau solide à exister sous plusieurs formes. En effet, une substance peut cristalliser dans plusieurs structures. Il existe sept mailles différentes permettant de représenter l'ensemble des cristaux ; il s'agit des sept systèmes cristallins à partir desquels les quatorze réseaux de Bravais peuvent être définis.

Le polymorphisme de certaines molécules solides étudiées est très vraisemblablement la raison essentielle du manque de fiabilité de la méthode de contribution de groupes développée dans ces travaux. En effet, si une molécule cristallise dans différents systèmes, les atomes sont ainsi arrangés différemment. Par définition, les groupes de Benson sont intramoléculaires, ils restent donc inchangés suivant que le solide étudié cristallise dans un système ou dans un autre. Mais ces groupes ne prennent pas en compte le polymorphisme. Ils sont donc identiques quelque soit le système cristallin considéré. En ce qui concerne plus particulièrement les matériaux énergétiques, nous savons par exemple que l'octogène [2691-41-0], le trinitrotoluène [118-96-7] ou le CL-20 [135285-90-4] présentent plusieurs polymorphes.

Notons que Chickos et Acree Jr. [177] sont arrivés à la même conclusion lors de la compilation d'enthalpies de sublimation de molécules organiques et organo-métalliques. En effet, ces deux auteurs ont rapporté que les différences de valeurs d'enthalpies publiées par divers laboratoires étaient très probablement dues à la réalisation de mesures sur différents polymorphes d'un même composé.

1.3.3. Mise en évidence de problèmes d'estimation pour certaines familles de molécules

Ne disposant que de la formule développée de chacun des composés étudiés, il est difficile de mettre en évidence les raisons pour lesquelles la méthode de contribution de groupes mise en place aboutit à l'obtention de résultats médiocres dans quelques cas. Cependant, il est parfois possible de distinguer des familles de molécules pour lesquelles la méthode de calcul développée ne convient pas.

a. Composés C_xH_y

Les différentes représentations de molécules ne comportant que des atomes de carbone et d'hydrogène ont montré qu'il était difficile d'évaluer les enthalpies standard de formation en phase solide d'un certain nombre de HAP (Hydrocarbures Aromatiques Polycycliques). Les composés suivants peuvent illustrer ce constat (*cf.* tableau IV-60) : 1,12-diméthylbenzo[c]phénantrène [4076-43-1] (résidu = 75,1 kJ.mol^{-1}), 9,10-diméthyl-1,2-benzanthracène [57-97-6] (résidu = 37,0 kJ.mol^{-1}), 5,6-diméthylchrysène [3697-27-6] (résidu = 44,0 kJ.mol^{-1}). Il serait fort intéressant d'analyser de nouveau ces molécules afin d'être tout à fait sûr de la justesse des valeurs expérimentales d'enthalpies standard de formation publiées. Par ailleurs, il se pourrait que les HAP soient particulièrement sujets au polymorphisme. On notera qu'une étude du comportement de trois HAP soumis à de hautes pressions a été publiée par Fabbiani *et al.* en 2006 [178]. Un nouveau polymorphe du pyrène a été cristallisé à 0,3 GPa et à 0,5 GPa. Il apparaît que les interactions intermoléculaires concernant ce polymorphe sont différentes de celles trouvées dans des polymorphes formés à plus basses pressions. Un constat similaire peut être effectué en ce qui concerne les polymorphes du phénantrène. Par ailleurs, Petropavlov *et al.* [179] ont publié en 1988 l'enthalpie de transition de phase de second ordre pour le phénantrène, ΔH_{trs} (CI, CII) = 1,0 kJ.mol^{-1} à 332,2 K. On notera que cette valeur ne peut pas expliquer l'écart absolu moyen de 20,2 kJ.mol^{-1} calculé pour les molécules C_xH_y et figurant au tableau IV-13, mais on peut supposer qu'il existe d'autres formes cristallines non identifiées jusqu'à maintenant qui seraient la cause de l'erreur calculée.

Si l'on exclut les HAP pour lesquels l'écart entre l'enthalpie standard de formation à l'état condensé mesurée et représentée est supérieur à 20 kJ.mol^{-1} (soit dix-neuf composés), on obtient les résultats suivants :

Unité	Résidu moyen	Moyenne quadratique
kJ.mol^{-1}	13,1	29,5
J.g^{-1}	66,2	168,5

Tableau IV-21 : Résidus moyens et moyennes quadratiques obtenus sur la représentation des enthalpies standard de formation en phase solide de 126 molécules C_xH_y.

Les résidus moyens et moyennes quadratiques calculés sont ainsi améliorés d'environ 30% (comparés au tableau IV-13). Précisons bien que les résultats obtenus dans le tableau précédent sont calculés en tenant toujours compte des valeurs de contributions de groupes présentées dans les tableaux IV-5 à IV-11. Ces dernières valeurs n'ont pas été déterminées une nouvelle fois après suppression des composés pour lesquels les estimations d'enthalpies étaient insatisfaisantes.

b. Composés $C_xH_yO_z$

Les enthalpies standard de formation à l'état solide de la plupart des diastéréoisomères des acides alcènoïques sont difficilement prévisibles. Quelques exemples le montrent clairement : acide (Z)-3-phényl-2-propénoïque [102-94-3] (résidu = -19,9 kJ.mol^{-1}), acide (E)-3-phényl-2-propénoïque [140-10-3] (résidu = -44,7 kJ.mol^{-1}), acide (Z)-2-butènedioïque [110-16-7] (résidu = -58,3 kJ.mol^{-1}), acide (E)-2-butènedioïque [110-17-8] (résidu = -80,6 kJ.mol^{-1}). L'unique point commun qui puisse apparaître au vu de la seule étude de la formule développée de chacun de ces composés est le calcul d'un écart négatif entre l'enthalpie standard de formation mesurée et représentée.

Il semblerait également qu'il soit compliqué d'évaluer les enthalpies standard de formation en phase solide de certains diastéréoisomères de cycles. Deux molécules dont l'enthalpie standard de formation a été représentée le montrent : acide cis-cyclohexane-1,2-dicarboxylique [610-09-3] (résidu = 41,9 kJ.mol^{-1}) et acide trans-cyclohexane-1,2-dicarboxylique [2305-32-0] (résidu = 32,3 kJ.mol^{-1}).

En supprimant les diastéréoisomères d'acides alcènoïques et les diastéréoisomères de cycles, même ceux pour lesquels la méthode de contribution de groupes développée convient, les résultats de représentation sont optimisés de 21%, comme en témoigne le tableau ci-dessous :

Unité	Résidu moyen	Moyenne quadratique
kJ.mol^{-1}	18,1	41,7
J.g^{-1}	105,8	264,7

Tableau IV-22 : Résidus moyens et moyennes quadratiques obtenus sur la représentation des enthalpies standard de formation en phase solide de 244 molécules $C_xH_yO_z$.

c. Composés $C_xH_yN_w$

La méthode de contribution de groupes développée ne convient apparemment pas aux molécules présentant une structure benzyle. Les quelques substances suivantes reflètent cet état de fait : N-benzyldiphénylamine [606-87-1] (résidu = 36,1 kJ.mol^{-1}), N,N'-dibenzylidène-hydrazine [588-68-1] (résidu = 312,5 kJ.mol^{-1}), dibenzylidène-1,2-éthylènediamine [104-71-2] (résidu = 388,6 kJ.mol^{-1}). On remarquera que tous les résidus correspondant aux molécules ayant une telle structure sont positifs. Aucune correction de structure n'a été définie pour ce type de substances car les écarts absolus observés sont trop différents. A noter que le seul composé de ce type comportant une enthalpie standard de formation à l'état solide fort bien estimée est le benzal-5-hydrazinotétrazole [108480-28-0]. La raison est que le groupe C-$(N_A)(C_B)(H)_2$ permet d'estomper l'erreur de prévision car la contribution de ce groupe n'est déterminée qu'au moyen de l'enthalpie standard de formation du benzal-5-hydrazinotétrazole.

L'exclusion de l'ensemble des molécules de la liste comportant une structure benzyle conduit à une amélioration d'approximativement 26% des calculs de résidus moyens et moyennes quadratiques.

Unité	Résidu moyen	Moyenne quadratique
$kJ.mol^{-1}$	18,7	43,8
$J.g^{-1}$	149,2	374,5

Tableau IV-23 : Résidus moyens et moyennes quadratiques obtenus sur la représentation des enthalpies standard de formation en phase solide de 126 molécules C_xN_w et $C_xH_yN_w$.

d. Composés $C_xH_yN_wO_z$

Le tableau IV-63 montre que des problèmes se posent quant à l'évaluation des enthalpies standard de formation en phase solide de porphines contenant de l'oxygène. En effet, de nombreuses molécules de ce type sont affectées d'un résidu non négligeable : protoporphyrine [553-12-8] (résidu = 379,0 $kJ.mol^{-1}$), chloroporphyrin-e6-triméthyl ester [28211-96-3] (résidu = 40,5 $kJ.mol^{-1}$), coproporphyrin-(I) tétraméthyl ester [25767-20-8] (résidu = 114,0 $kJ.mol^{-1}$),…

Ceci est étonnant car les résultats obtenus sur les porphines ne contenant pas d'oxygène sont bien meilleurs. Il semblerait donc que l'introduction d'atomes d'oxygène dans ces structures implique un réarrangement possible des atomes au sein des molécules en question.

Si l'on supprime de la liste des molécules étudiées les treize porphines contenant de l'oxygène, cela permet d'optimiser les résultats de représentation de 8% environ.

Unité	Résidu moyen	Moyenne quadratique
$kJ.mol^{-1}$	18,9	40,4
$J.g^{-1}$	104,1	247,2

Tableau IV-24 : Résidus moyens et moyennes quadratiques obtenus sur la représentation des enthalpies standard de formation en phase solide de 469 molécules $C_xN_wO_z$ et $C_xH_yN_wO_z$.

1.4. Conclusion

L'ensemble des résultats de représentation est exposé dans les tableaux ci-dessous. Ils contiennent les résidus moyens, les moyennes quadratiques et les écarts extrêmes obtenus sur la totalité des molécules issues de la banque d'enthalpies standard de formation en phase solide constituée, soit mille dix-sept composés en tout.

Unité	Résidu moyen	Moyenne quadratique
$kJ.mol^{-1}$	22,3	52,1
$J.g^{-1}$	122,0	299,3

Tableau IV-25 : Résidus moyens et moyennes quadratiques obtenus sur la représentation des enthalpies standard de formation en phase solide des 1 017 molécules organiques étudiées.

Unité	Ecart négatif le plus élevé (composé)	Ecart positif le plus élevé (composé)
$kJ.mol^{-1}$	-389,7 (éthylméthyl maléimide)	393,9 (rhodoporphyrine (XV) diméthyl ester)
$J.g^{-1}$	-2800,6 (éthylméthyl maléimide)	2189,2 (guanidine)

Tableau IV-26 : Ecarts extrêmes entre les enthalpies standard de formation en phase solide mesurées et représentées des 1 017 molécules organiques étudiées.

Il s'est avéré que les enthalpies standard de formation en phase solide de certaines familles de composés étaient déterminées de façon peu satisfaisante voire médiocre. En ne connaissant que la formule développée de ces molécules, il est difficile d'expliquer les raisons de ce constat. Toutefois, si l'on désire évaluer l'enthalpie standard de formation à l'état solide de composés du type de ceux cités au paragraphe 1.3.3., on sait par avance que l'estimation sera probablement entachée d'une erreur non négligeable. L'hypothèse émise au sujet du polymorphisme de certains composés solides permet vraisemblablement d'expliquer en grande partie les difficultés de prévision d'enthalpies de formation en phase solide.

Le tableau suivant met en évidence les calculs de résidus moyens et moyennes quadratiques obtenus après suppression des molécules problématiques évoquées plus haut.

Unité	Résidu moyen	Moyenne quadratique
$kJ.mol^{-1}$	17,9	38,9
$J.g^{-1}$	105,5	263,5

Tableau IV-27 : Résidus moyens et moyennes quadratiques obtenus sur la représentation des enthalpies standard de formation en phase solide de 965 molécules organiques C_xH_y, $C_xH_yO_z$, C_xN_w, $C_xH_yN_w$, $C_xN_wO_z$ et $C_xH_yN_wO_z$.

On obtient ainsi une optimisation des résultats de représentation de 18% en moyenne.

Finalement, les enthalpies standard de formation à l'état solide représentées de sept cent soixante-cinq composés (sur les mille dix-sept) présentent un écart moyen de 5,7 $kJ.mol^{-1}$ par rapport aux enthalpies standard de formation mesurées correspondantes. Ceci représente 75% de la totalité des molécules étudiées.

2. Prévision d'enthalpies standard de formation en phase solide - Comparaison des méthodes de contribution de groupes

2.1. Prévision et comparaison avec les enthalpies standard de formation en phase solide issues de la littérature

A seule fin de comparer les résultats de représentation (*cf.* paragraphe 1.2.2. b.) avec des résultats de prévision, plusieurs enthalpies standard de formation à l'état solide ont été déterminées. Pour cela, la banque de données thermochimiques issues de la littérature (*The Journal of Chemical Thermodynamics*) constituée et présentée au paragraphe 1.3.1. du chapitre III a été employée. Rappelons que l'on parle de représentation lorsque les enthalpies de formation des composés sont calculées à l'aide des contributions de groupes établies grâce aux valeurs d'enthalpies de formation de ces mêmes composés. En revanche, on parle de prévision lorsque les enthalpies de formation de molécules ont été évaluées au moyen des contributions de groupes déterminées à l'aide d'enthalpies de formation de molécules différentes. Les valeurs d'enthalpies standard de formation en phase solide de cent vingt-sept composés organiques de formule brute C_xH_y, $C_xH_yO_z$, $C_xH_yN_w$ et $C_xH_yN_wO_z$ ont été extraites du tableau III-1 et sont présentées dans le tableau IV-28. Elles sont accompagnées des estimations d'enthalpies standard de formation et des écarts absolus calculés.

Un tableau similaire est présenté en annexe 10 dans lequel tous les résultats sont convertis en joules par gramme.

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_fH°_{s,m}$ (litt.)	$\Delta_fH°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
fullerène C_{70}	C_{70}	115383-22-7	2452 ± 33	-	-
fullerène C_{70}	C_{70}	115383-22-7	2554,0 ± 57,6	-	-
phénantrène	$C_{14}H_{10}$	85-01-8	110,4 ± 1,0	114,9	-4,5
antracène	$C_{14}H_{10}$	120-12-7	126,7 ± 1,1	128,8	-2,1
9-méthylantracène	$C_{15}H_{12}$	779-02-2	97,1 ± 3,9	94,3	2,8
2-éthylantracène	$C_{16}H_{14}$	52251-71-5	60,3 ± 3,8	93,9	-33,6
9,10-diméthylantracène	$C_{16}H_{14}$	781-43-1	70,2 ± 4,4	59,8	10,4
naphtacène	$C_{18}H_{12}$	92-24-0	206,9 ± 1,9	183,9	23,0
o-terphényle	$C_{18}H_{14}$	84-15-1	178,3 ± 1,2	166,1	12,2
p-terphényle	$C_{18}H_{14}$	92-94-4	152,47 ± 0,91	170,4	-17,9
m-terphényle	$C_{18}H_{14}$	92-06-8	161,8 ± 1,2	164,4	-2,6
corannulène	$C_{20}H_{10}$	5821-51-2	342,3 ± 5,6	130,6	211,7
benzo[k]fluorantène	$C_{20}H_{12}$	207-08-9	172,4 ± 4,3	244,9	-72,5
pérylène	$C_{20}H_{12}$	198-55-0	182,8 ± 0,8	162,0	20,8
coronène	$C_{24}H_{12}$	191-07-1	146,5 ± 4,8	202,0	-55,5
coronène	$C_{24}H_{12}$	191-07-1	152,5 ± 6,9	202,0	-49,5
1,3,5-triphénylbenzène	$C_{24}H_{18}$	612-71-5	222,0 ± 1,2	237,2	-15,2
3-tert-butylphénol	$C_{10}H_{14}O$	585-34-2	-286,5 ± 1,4	-287,2	0,7
4-tert-butylphénol	$C_{10}H_{14}O$	98-54-4	-289,7 ± 1,5	-287,2	-2,5
2-tert-butyl-4-méthylphénol	$C_{11}H_{16}O$	2409-55-4	-306,9 ± 1,6	-321,7	14,8
4-tert-amylphénol	$C_{11}H_{16}O$	80-46-6	-304,7 ± 1,6	-315,6	10,9
2-phénylphénol	$C_{12}H_{10}O$	90-43-7	-88,3 ± 0,6	-105,3	17,0
4-phénylphénol	$C_{12}H_{10}O$	92-69-3	-106,2 ± 0,7	-105,4	-0,8
cyclododécanone	$C_{12}H_{22}O$	830-13-7	-442,5 ± 3,1	-	-
2,4-di-tert-butylphénol	$C_{14}H_{22}O$	96-76-4	-383,4 ± 2,1	-396,1	12,7
4-tert-octylphénol	$C_{14}H_{22}O$	140-66-9	-375,1 ± 2,0	-404,1	29,0
cyclopentadécanone	$C_{15}H_{28}O$	502-72-7	-501,4 ± 5,5	-	-
benzanthrone	$C_{17}H_{10}O$	82-05-3	-4,1 ± 3,0	-	-
2,6-diphénylphénol	$C_{18}H_{14}O$	2432-11-3	-14,5 ± 1,6	-32,5	18,0
acide 2,2-diméthylpropanoïque	$C_5H_{10}O_2$	75-98-9	-567,9 ± 1,1	-546,1	-21,8
p-benzoquinone	$C_6H_4O_2$	106-51-4	-186,02 ± 1,60	-	-

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
duroquinone	$C_6H_4O_2$	527-17-3	-361,59 ± 4,27	-	-
pentacyclo[5.4.0.0^{2,6}.0^{3,10}.0^{5,9}]undécane-8,11-dione	$C_{11}H_{10}O_2$	2958-72-7	-206,2 ± 3,2	-	-
acide trans-2,3-diméthoxycinnamique	$C_{11}H_{12}O_2$	7461-60-1	-660,4 ± 3,0	-618,1	-42,3
acide trans-2,4-diméthoxycinnamique	$C_{11}H_{12}O_2$		-683,0 ± 2,5	-616,9	-66,1
acide trans-2,5-diméthoxycinnamique	$C_{11}H_{12}O_2$		-665,2 ± 2,8	-616,9	-48,3
acide trans-3,4-diméthoxycinnamique	$C_{11}H_{12}O_2$	2316-26-9	-664,0 ± 2,2	-618,1	-45,9
acide trans-3,5-diméthoxycinnamique	$C_{11}H_{12}O_2$		-666,3 ± 2,2	-617,0	-49,3
dibenzo-p-dioxine	$C_{12}H_8O_2$	262-12-4	-141,6 ± 2,1	-	-
2,2'-dihydroxybiphényle	$C_{12}H_{10}O_2$	1806-29-7	-293,9 ± 0,6	-302,2	8,3
4,4'-dihydroxybiphényle	$C_{12}H_{10}O_2$	92-88-6	-320,3 ± 1,6	-302,4	-17,9
trans-2-phénylcyclopropanecarboxylate éthyl ester	$C_{12}H_{14}O_2$		-337,2 ± 1,9	-186,1	-151,1
dibenzoylméthane	$C_{15}H_{12}O_2$		-224,2 ± 1,8	-	-
acide salicylique	$C_7H_6O_3$	69-72-7	-588,4 ± 1,7	-552,5	-35,9
acide trans-2-méthoxycinnamique	$C_{10}H_{10}O_3$	6099-03-2	-505,6 ± 2,1	-453,4	-52,2
acide trans-3-méthoxycinnamique	$C_{10}H_{10}O_3$		-504,4 ± 3,2	-453,5	-50,9
acide trans-4-méthoxycinnamique	$C_{10}H_{10}O_3$	830-09-1	-512,6 ± 4,0	-453,5	-59,1
acide malonique	$C_3H_4O_4$	141-82-2	-891,1 ± 0,4	-890,5	-0,6
acide undécanedioïque	$C_3H_4O_4$	1852-04-6	-1099,4 ± 2,6	-1100,5	1,1
acide succinique	$C_4H_6O_4$	110-15-6	-940,4 ± 0,2	-947,3	6,9
acide glutarique	$C_5H_8O_4$	110-94-1	-960,0 ± 1,2	-962,5	2,5
acide méthylsuccinique	$C_5H_8O_4$	498-21-5	-958,2 ± 1,1	-962,7	4,5
acide 2,2-diméthylsuccinique	$C_6H_{10}O_4$	597-43-3	-987,8 ± 1,4	-988,2	0,4
acide pimelique	$C_7H_{12}O_4$	111-16-0	-1009,4 ± 1,2	-1007,5	-1,9
acide acétylsalicylique	$C_9H_8O_4$	50-78-2	-758,19 ± 0,52	-746,9	-11,3
acide azelaïque	$C_9H_{16}O_4$	123-99-9	-1054,3 ± 2,1	-1054,0	-0,3
D-galactono-1,4-lactone	$C_6H_{10}O_6$		-1232,36 ± 0,65	-1243,2	10,9
L-galactono-1,4-lactone	$C_6H_{10}O_6$		-1231,79 ± 0,65	-1243,2	11,5
D-gulono-1,4-lactone	$C_6H_{10}O_6$		-1230,13 ± 0,65	-1243,2	13,1
L-gulono-1,4-lactone	$C_6H_{10}O_6$		-1230,54 ± 0,62	-1243,2	12,7
L-mannono-1,4-lactone	$C_6H_{10}O_6$		-1228,02 ± 0,65	-1243,2	15,2
méthyl-α-D-glucopyranoside	$C_7H_{14}O_6$	97-30-3	-1239,15 ± 0,88	-1245,8	6,7
méthyl-β-D-glucopyranoside	$C_7H_{14}O_6$	709-50-2	-1241,27 ± 0,86	-1245,8	4,6
méthyl-α-D-galactopyranoside	$C_7H_{14}O_6$	3396-99-4	-1237,18 ± 0,91	-1245,8	8,7
méthyl-β-D-galactopyranoside	$C_7H_{14}O_6$	1824-94-8	-1249,63 ± 0,89	-1245,8	-3,8
N-phényl-benzaldéhyde-imine	$C_{13}H_{11}N$	538-51-2	181,6 ± 1,4	-	-
N-benzylaniline	$C_{13}H_{13}N$	103-32-2	101,4 ± 1,1	-	-
2-phénylquinoline	$C_{15}H_{11}N$	612-96-4	181,8 ± 3,9	-	-
N-cyclohexyl-(2,4,6-triméthyl)-benzaldéhyde-imine	$C_{16}H_{23}N$		-128,0 ± 2,0	-	-
N-benzyl-pivalophénone-imine	$C_{18}H_{21}N$		46,74 ± 0,98	-	-
2,4,6-tri-tert-butylaniline	$C_{18}H_{31}N$	961-38-6	-286,8 ± 4,2	-318,1	31,3
N-phényl-benzophénone-imine	$C_{19}H_{15}N$		252,5 ± 1,4	-	-
pipérazine	$C_4H_{10}N_2$	110-85-0	-40,97 ± 0,60	-151,7	110,7
3,5-diméthylpyrazole	$C_5H_8N_2$	67-51-6	18,9 ± 1,7	-310,8	329,7
2,2'-biquinoline	$C_8H_{12}N_2$	119-91-5	265,1 ± 3,7	-	-
4-aminoquinaldine	$C_{10}H_{10}N_2$	6628-04-2	34,2 ± 2,6	44,8	-10,6
2-propylbenzimidazole	$C_{10}H_{12}N_2$		-46,2 ± 3,7	-21,8	-24,4
2-isopropylbenzimidazole	$C_{11}H_{14}N_2$	5851-43-4	-31,6 ± 2,3	-	-
2-phénylbenzimidazole	$C_{13}H_{10}N_2$	716-79-0	135,0 ± 1,9	122,0	13,0
2-benzylbenzimidazole	$C_{14}H_{12}N_2$	621-72-7	103,0 ± 4,4	112,2	-9,2
2,3-dicyanopyrazine	$C_6H_2N_4$		429,6 ± 2,1	-	-
5,10,15,20-tétraphénylporphine	$C_{44}H_{30}N_4$	917-23-7	655 ± 9	-	-
4-méthylpyridine N-oxyde	C_6H_7NO	1003-67-4	5,6 ± 2,1	-	-
1-hydroxyisoquinoline	C_9H_7NO	491-30-5	-146,8 ± 1,9	-114,4	-32,4
5-hydroxyisoquinoline	C_9H_7NO	2439-04-5	-86,8 ± 2,2	-62,7	-24,1
3-hydroxypyridine N-oxyde	$C_5H_5NO_2$	6602-28-4	-171,3 ± 1,0	-	-
2-hydroxypyridine N-oxyde	$C_5H_5NO_2$		-198,7 ± 1,7	-	-
2,3-dihydroxypyridine	$C_5H_5NO_2$	16867-04-2	-373,0 ± 1,5	-379,5	6,5

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
D-valine	$C_5H_{11}NO_2$	640-68-6	-612,9 ± 1,5	-596,5	-16,4
L-valine	$C_5H_{11}NO_2$	72-18-4	-614,7 ± 1,3	-596,5	-18,2
DL-valine	$C_5H_{11}NO_2$	7004-03-7	-617,1 ± 1,0	-596,5	-20,6
acide 2-pyridinecarboxylique	$C_6H_5NO_2$	98-98-6	-341,0 ± 1,2	-	-
acide 4-pyridinecarboxylique	$C_6H_5NO_2$	55-22-1	-348,7 ± 1,6	-	-
1,5-dihydroxyisoquinoline	$C_9H_7NO_2$	5154-02-9	-347,9 ± 2,5	-311,4	-36,5
2,6-di-isopropylnitrobenzène	$C_{12}H_{17}NO_2$		-161,5 ± 2,8	-100,0	-61,5
2,4,6-tri-tert-butylnitrobenzène	$C_{18}H_{29}NO_2$	4074-25-3	-301,3 ± 4,2	-323,5	22,2
acide 2-pyridinecarboxylique N-oxyde	$C_6H_5NO_3$	824-40-8	-364,1 ± 1,8	-	-
acide 4-pyridinecarboxylique N-oxyde	$C_6H_5NO_3$	13602-12-5	-381,2 ± 1,3	-	-
2-méthoxy-4-nitrophénol	$C_7H_7NO_4$	3251-56-7	-377,0 ± 1,8	-353,8	-23,2
2-méthoxy-5-nitrophénol	$C_7H_7NO_4$	636-93-1	-374,1 ± 1,5	-353,8	-20,3
4-méthoxy-2-nitrophénol	$C_7H_7NO_4$	1568-70-3	-364,3 ± 1,4	-352,6	-11,7
3-cyanopyridine N-oxyde	$C_6H_4N_2O$		170,9 ± 1,4	-	-
4-cyanopyridine N-oxyde	$C_6H_4N_2O$	14906-59-3	162,8 ± 1,4	-	-
picolinamide	$C_6H_6N_2O$	1452-77-3	-156,4 ± 1,8	-	-
nicotinamide	$C_6H_6N_2O$	98-92-0	-150,1 ± 1,6	-144,7	-5,4
isonicotinamide	$C_6H_6N_2O$	1453-82-3	-150,2 ± 1,4	-	-
acide pyrazinecarboxylique	$C_5H_4N_2O_2$	98-97-5	-271,2 ± 1,1	-	-
nicotinamide N-oxyde	$C_6H_6N_2O_2$		-199,2 ± 2,1	-	-
isonicotinamide N-oxyde	$C_6H_6N_2O_2$		-198,8 ± 2,1	-	-
5-méthoxybenzofurazane	$C_7H_6N_2O_2$	4413-48-3	57,9 ± 1,7	-	-
5-nitroquinoline	$C_9H_6N_2O_2$	607-34-1	109,2 ± 2,5	70,9	38,3
6-nitroquinoline	$C_9H_6N_2O_2$	613-50-3	88,4 ± 2,2	70,9	17,5
8-nitroquinoline	$C_9H_6N_2O_2$	607-35-2	100,2 ± 2,4	70,9	29,3
8-nitroquinaldine	$C_{10}H_8N_2O_2$	881-07-2	55,4 ± 2,3	31,3	24,1
N-benzoyl-N',N'-diéthylurée	$C_{12}H_{16}N_2O_2$		-479,2 ± 4,8	-491,2	12,0
N-phényl-4-nitrobenzaldéhyde-imine	$C_{13}H_{10}N_2O_2$		137,50 ± 0,74	-	-
benzoxazino-benzoxazine	$C_{14}H_{12}N_2O_2$		-180,9 ± 6,3	-	-
N-benzoyl-N',N'-diisobutylurée	$C_{16}H_{24}N_2O_2$		-582,8 ± 6,0	-585,3	2,5
3-méthyl-4-nitropyridine N-oxyde	$C_6H_6N_2O_3$	1074-98-2	-19,5 ± 3,4	-	-
pyrazinamide	$C_5H_5N_3O$	98-96-4	-93,5 ± 1,5	-	-
3,5-diméthyl-4-nitrosopyrazole	$C_5H_7N_3O$		111,2 ± 2,9	-	-
1,3,5-triméthyl-4-nitrosopyrazole	$C_6H_9N_3O$		111,9 ± 2,1	-	-
3,5-diméthyl-1-phényl-4-nitrosopyrazole	$C_{11}H_{11}N_3O$		209,7 ± 2,1	-	-
5-amino-6-nitroquinoline	$C_9H_7N_3O_2$	35975-00-9	59,9 ± 2,7	36,9	23,0
5,10,15,20-tétrakis(4-méthoxyphényl)porphine	$C_{48}H_{38}N_4O_4$	22112-78-3	69 ± 9	-504,0	573,0
inosine	$C_{10}H_{12}N_4O_5$	58-63-9	-847,9 ± 4,7	-	-
adénosine	$C_{10}H_{13}N_5O_4$	58-61-7	-653,6 ± 3,6	-	-

Tableau IV-28 : Comparaison des enthalpies standard de formation en phase solide issues de la littérature avec les enthalpies calculées, concernant 127 molécules contenant carbone, hydrogène, oxygène et azote.

L'ensemble des résultats de prévision est présentée sous la même forme que les résultats de représentation (*cf.* paragraphe 1.2.2. b.) dans le paragraphe qui suit.

2.1.1. Détail des résultats de prévision

a. Composés C_xH_y

Les enthalpies standard de formation à l'état solide mesurées expérimentalement de quinze molécules C_xH_y (sur dix-sept substances C_xH_y répertoriées dans le tableau III-1) ont été comparées aux valeurs prévues par la méthode de contribution de groupes mise en place. L'ensemble des résultats est présenté dans les tableaux ci-dessous :

Unité	Résidu moyen	Moyenne quadratique
$kJ.mol^{-1}$	35,6	62,5
$J.g^{-1}$	141,5	247,4

Tableau IV-29 : Résidus moyens et moyennes quadratiques obtenus sur la prévision des enthalpies standard de formation en phase solide de 15 molécules C_xH_y.

Unité	Ecart négatif le plus élevé (composé)	Ecart positif le plus élevé (composé)
$kJ.mol^{-1}$	-72,5 (benzo[k]fluorantène)	211,7 (corannulène)
$J.g^{-1}$	-287,5 (benzo[k]fluorantène)	845,9 (corannulène)

Tableau IV-30 : Ecarts extrêmes entre les enthalpies standard de formation en phase solide mesurées et calculées de 15 molécules C_xH_y.

Les résultats prédictifs sont moins bons que les résultats de représentation (*cf.* tableau IV-13). Le composé venant entacher les résidus moyens et moyennes quadratiques calculés est le corannulène [5821-51-2]. En effet, l'exclusion de cette molécule entraînerait l'obtention des valeurs suivantes :

Unité	Résidu moyen	Moyenne quadratique
$kJ.mol^{-1}$	23,0	31,3
$J.g^{-1}$	91,2	120,2

Tableau IV-31 : Résidus moyens et moyennes quadratiques obtenus sur la prévision des enthalpies standard de formation en phase solide de 14 molécules C_xH_y.

Les résultats d'évaluation sont ainsi meilleurs que les résultats de représentation. L'explication de cette amélioration considérable se trouve dans le paragraphe 1.3.3. a. En effet, le corannulène est un HAP. Or il fut noté que des problèmes se posent en ce qui concerne l'estimation de certaines enthalpies standard de formation en phase solide de composés de cette famille.

b. Composés $C_xH_yO_z$

Quarante enthalpies standard de formation en phase solide de composés oxygénés (sur quarante-huit) ont été calculées grâce aux valeurs de contributions de groupes contenues dans les tableaux IV-5 à IV-11. Les résultats d'évaluation obtenus sont résumés dans les tableaux suivants :

Unité	Résidu moyen	Moyenne quadratique
$kJ.mol^{-1}$	21,8	35,3
$J.g^{-1}$	124,8	196,4

Tableau IV-32 : Résidus moyens et moyennes quadratiques obtenus sur la prévision des enthalpies standard de formation en phase solide de 40 molécules $C_xH_yO_z$.

Unité	Ecart négatif le plus élevé (composé)	Ecart positif le plus élevé (composé)
$kJ.mol^{-1}$	-151,1 (trans-2-phénylcyclopropanecarboxylate éthyl ester)	29,0 (4-tert-octylphénol)
$J.g^{-1}$	-794,2 (trans-2-phénylcyclopropanecarboxylate éthyl ester)	140,6 (4-tert-octylphénol)

Tableau IV-33 : Ecarts extrêmes entre les enthalpies standard de formation en phase solide mesurées et calculées de 40 molécules $C_xH_yO_z$.

Le tableau IV-32 présente de meilleurs résultats que ceux consacrés à la représentation des enthalpies standard de formation à l'état solide de composés oxygénés. En effet, malgré la présence de nombreux diastéréoisomères d'acides alcènoïques et de diastéréoisomères de cycles (tels que le trans-2-phénylcyclopropanecarboxylate éthyl ester) pour lesquels les résidus obtenus ne sont pas satisfaisants, les résidus moyens et moyennes quadratiques calculés sur la prévision de quarante molécules $C_xH_yO_z$ sont meilleurs que ceux figurant au tableau IV-15.

c. Composés $C_xH_yN_w$

Les valeurs d'enthalpies standard de formation à l'état solide de sept substances azotées (sur dix-sept) ont été déterminées et comparées aux valeurs issues de la littérature. Voici les résultats d'évaluation :

Unité	Résidu moyen	Moyenne quadratique
$kJ.mol^{-1}$	75,6	132,5
$J.g^{-1}$	737,8	1386,7

Tableau IV-34 : Résidus moyens et moyennes quadratiques obtenus sur la prévision des enthalpies standard de formation en phase solide de 7 molécules $C_xH_yN_w$.

Unité	Ecart négatif le plus élevé (composé)	Ecart positif le plus élevé (composé)
$kJ.mol^{-1}$	-24,4 (2-propylbenzimidazole)	329,7 (3,5-diméthylpyrazole)
$J.g^{-1}$	-152,0 (2-propylbenzimidazole)	3429,3 (3,5-diméthylpyrazole)

Tableau IV-35 : Ecarts extrêmes entre les enthalpies standard de formation en phase solide mesurées et calculées de 7 molécules $C_xH_yN_w$.

Les résidus moyens et moyennes quadratiques obtenus, qu'ils soient exprimés en kilojoules par mole ou en joules par gramme, sont très supérieurs aux résultats de représentation. La cause principale de ce constat est l'erreur calculée sur la prévision de l'enthalpie standard de formation à l'état condensé du 3,5-diméthylpyrazole [67-51-6]. L'exclusion de ce composé améliorerait considérablement les résultats comme en témoigne le tableau ci-dessous :

Unité	Résidu moyen	Moyenne quadratique
$kJ.mol^{-1}$	33,2	48,6
$J.g^{-1}$	289,2	532,4

Tableau IV-36 : Résidus moyens et moyennes quadratiques obtenus sur la prévision des enthalpies standard de formation en phase solide de 6 molécules $C_xH_yN_w$.

A noter qu'il n'existe aucune autre valeur d'enthalpie standard de formation mesurée du 3,5-diméthylpyrazole dans la littérature consultée au cours de cette étude. En outre, nous ignorons si cette molécule présente un caractère polymorphe ou non.

d. Composés $C_xH_yN_wO_z$

En ce qui concerne les composés de formule générale $C_xH_yN_wO_z$, vingt-et-une enthalpies standard de formation en phase solide (sur quarante-cinq) ont pu être évaluées et comparées aux enthalpies standard de formation mesurées et publiées. Les résultats prédictifs sont regroupés dans les tableaux ci-dessous :

Unité	Résidu moyen	Moyenne quadratique
$kJ.mol^{-1}$	48,5	127,5
$J.g^{-1}$	165,3	225,7

Tableau IV-37 : Résidus moyens et moyennes quadratiques obtenus sur la prévision des enthalpies standard de formation en phase solide de 21 molécules $C_xH_yN_wO_z$.

Unité	Ecart négatif le plus élevé (composé)	Ecart positif le plus élevé (composé)
$kJ.mol^{-1}$	-61,5 (2,6-di-isopropylnitrobenzène)	573,0 (5,10,15,20-tétrakis(4-méthoxyphényl)porphine)
$J.g^{-1}$	-296,5 (2,6-di-isopropylnitrobenzène)	779,8 (5,10,15,20-tétrakis(4-méthoxyphényl)porphine)

Tableau IV-38 : Ecarts extrêmes entre les enthalpies standard de formation en phase solide mesurées et calculées de 21 molécules $C_xH_yN_wO_z$.

Dans le cas des composés de formule brute $C_xH_yN_wO_z$, les résultats de prévision sont moins bons que les résultats de représentation. La raison de ce constat est évoquée au paragraphe 1.3.3. d. En effet, la présence de la 5,10,15,20-tétrakis(4-méthoxyphényl)porphine [22112-78-3] vient entacher les résidus moyens et moyennes quadratiques calculés. Cette molécule, comme la plupart des porphines contenant de l'oxygène, possède une enthalpie standard de formation en phase solide difficilement prévisible au moyen de la méthode de contribution de groupes développée. La suppression de ce composé de la liste des substances azotées et oxygénées conduit à l'obtention des valeurs suivantes :

Unité	Résidu moyen	Moyenne quadratique
$kJ.mol^{-1}$	22,3	25,8
$J.g^{-1}$	134,6	151,9

Tableau IV-39 : Résidus moyens et moyennes quadratiques obtenus sur la prévision des enthalpies standard de formation en phase solide de 20 molécules $C_xH_yN_wO_z$.

Les résidus moyens et moyennes quadratiques obtenus sont ainsi équivalents, voire bien meilleurs (dans le cas des moyennes quadratiques) que ceux obtenus lors de la représentation des enthalpies standard de formation à l'état solide de substances $C_xH_yN_wO_z$.

Cela précisé, deux points essentiels concernant la 5,10,15,20-tétrakis(4-méthoxyphényl)porphine doivent être mis en évidence :

1. Deux valeurs très différentes d'enthalpie standard de formation en phase solide sont répertoriées dans la littérature : $-(171,1 \pm 9,7)$ $kJ.mol^{-1}$ [180] et (69 ± 9) $kJ.mol^{-1}$ [135].
2. Les incertitudes associées aux deux valeurs d'enthalpies standard de formation mesurées sont grandes.

Il apparaît donc que la mesure même de l'enthalpie standard de formation à l'état solide de cette molécule est compliquée. L'estimation de cette grandeur l'est donc de surcroît.

2.1.2. Détermination de nouvelles contributions de groupes

L'étude réalisée sur les cent vingt-sept molécules dont l'enthalpie standard de formation en phase condensée a été répertoriée dans le tableau IV-28 a permis de déterminer de nouvelles valeurs de contributions de groupes. En effet, la publication des enthalpies standard de formation à l'état solide du cyclododécanone [830-13-7], du cyclopentadécanone [502-72-7], de la N-phényl-benzaldéhyde-imine [538-51-2], de la N-phényl-4-

nitrobenzaldéhyde-imine et de la 2,3-cyanopyrazine a conduit à l'évaluation des contributions des trois corrections de structure et de l'interaction à longue distance suivantes :

Groupe	Contribution ($kJ.mol^{-1}$)	Nombre de composés
cyclododécanone	12,4	1
cyclopentadécanone	42,8	1
N-phényl-benzaldéhyde-imine	123,1	2
interaction ortho CN/N sur pyridine	18,7	1

Tableau IV-40 : Evaluation de la contribution à l'enthalpie standard de formation en phase solide de quatre nouveaux groupes.

A noter que la correction de structure N-phényl-benzaldéhyde-imine améliore légèrement les résultats de représentation figurant aux paragraphes 1.2.2. b. et 1.4., puisque le composé N-phényl-benzaldéhyde-imine fait partie de la liste des molécules $C_xH_yN_w$ dont l'enthalpie standard de formation en phase solide a été représentée. En tenant compte de cette correction, on obtient les valeurs suivantes :

Unité	Résidu moyen	Moyenne quadratique
$kJ.mol^{-1}$	27,0	66,2
$J.g^{-1}$	183,7	432,0

Tableau IV-41 : Résidus moyens et moyennes quadratiques obtenus sur la représentation des enthalpies standard de formation en phase solide de 134 molécules C_xN_w et $C_xH_yN_w$, après prise en compte de la correction N-phényl-benzaldéhyde-imine.

Unité	Résidu moyen	Moyenne quadratique
$kJ.mol^{-1}$	22,1	51,9
$J.g^{-1}$	121,3	298,4

Tableau IV-42 : Résidus moyens et moyennes quadratiques obtenus sur la représentation des enthalpies standard de formation en phase solide des 1 017 molécules organiques étudiées, après prise en compte de la correction N-phényl-benzaldéhyde-imine.

2.1.3. Conclusion

Les enthalpies standard de formation à l'état solide des composés contenant des atomes de carbone, d'hydrogène, d'oxygène et d'azote répertoriés au tableau III-1 ont permis d'effectuer une comparaison des résultats de représentation figurant au paragraphe 1.2.2. b. avec les résultats de prévision. La banque de données thermochimiques issues de la littérature comprend cent vingt-sept molécules contenant les quatre atomes cités plus haut et dont l'enthalpie standard de formation en phase solide a été mesurée. La méthode de contribution de groupes développée dans cette étude permet d'estimer quatre-vingt-trois enthalpies standard de formation à l'état condensé (sur les cent vingt-sept).

L'étude comparative a montré que, dans la plupart des cas, les résidus moyens et moyennes quadratiques calculés sur les prévisions d'enthalpies standard de formation (en

kilojoules par mole et en joules par gramme) étaient équivalents voire meilleurs que ceux obtenus sur les représentations d'enthalpies standard de formation. En effet, si l'on exclut les molécules pour lesquelles il a été noté au préalable que la méthode développée ne convenait pas (*i.e.* corannulène et 5,10,15,20-tétrakis(4-méthoxyphényl)porphine) ainsi que le 3,5-diméthylpyrazole, les valeurs de contributions de groupes établies permettent l'obtention de résultats tout à fait satisfaisants puisqu'ils sont très souvent meilleurs que ceux calculés grâce aux différentes représentations d'enthalpies standard de formation en phase solide.

L'ensemble des résultats prédictifs est résumé dans les trois tableaux suivants, le dernier ne tenant pas compte des trois molécules évoquées plus haut.

Unité	Résidu moyen	Moyenne quadratique
$kJ.mol^{-1}$	35,6	83,1
$J.g^{-1}$	189,7	452,5

Tableau IV-43 : Résidus moyens et moyennes quadratiques obtenus sur la prévision des enthalpies standard de formation en phase solide de 83 molécules C_xH_y, $C_xH_yO_z$, $C_xH_yN_w$ et $C_xH_yN_wO_z$.

Unité	Ecart négatif le plus élevé (composé)	Ecart positif le plus élevé (composé)
$kJ.mol^{-1}$	-151,1 (trans-2-phénylcyclopropanecarboxylate éthyl ester)	573,0 (5,10,15,20-tétrakis(4-méthoxyphényl)porphine)
$J.g^{-1}$	-794,2 (trans-2-phénylcyclopropanecarboxylate éthyl ester)	3429,3 (3,5-diméthylpyrazole)

Tableau IV-44 : Ecarts extrêmes entre les enthalpies standard de formation en phase solide mesurées et calculées de 83 molécules C_xH_y, $C_xH_yO_z$, $C_xH_yN_w$ et $C_xH_yN_wO_z$.

Unité	Résidu moyen	Moyenne quadratique
$kJ.mol^{-1}$	23,0	33,8
$J.g^{-1}$	133,7	221,0

Tableau IV-45 : Résidus moyens et moyennes quadratiques obtenus sur la prévision des enthalpies standard de formation en phase solide de 80 molécules C_xH_y, $C_xH_yO_z$, $C_xH_yN_w$ et $C_xH_yN_wO_z$.

On notera que même dans le cas où l'ensemble des quatre-vingt-trois molécules est pris en compte, la moyenne quadratique calculée reste en dessous de la valeur retenue comme objectif de précision pour cette étude, *i.e.* 500 $J.g^{-1}$.

2.2. Prévision et comparaison avec les enthalpies standard de formation en phase solide mesurées

Les mesures d'enthalpies standard de formation à l'état solide de vingt-cinq molécules organiques ont été réalisées au laboratoire et décrites au chapitre II. L'objectif essentiel de ces expérimentations était la validation des valeurs de contributions de groupes figurant dans les tableaux IV-5 à IV-11. Ces mesures avaient également pour but de comparer les estimations obtenues par la méthode de contribution de groupes développée dans cette étude avec les estimations de Domalski *et al.* [53] et celles de Cohen [54]. Par ailleurs, les analyses effectuées devaient permettre, si besoin était, de déterminer des valeurs de contributions de groupes n'ayant pu l'être au préalable (*cf.* tableaux IV-5 à IV-11).

Les paragraphes ci-dessous détaillent les valeurs expérimentales et calculées à l'aide des trois méthodes de contribution de groupes considérées. Des tableaux similaires à ceux présentés au paragraphe 2.2.1., dans lesquels les valeurs sont toutes converties en joules par gramme, figurent en annexe 11.

2.2.1. Détail des résultats de prévision

a. Composés C_xH_y

Cinq molécules ne contenant que des atomes de carbone et d'hydrogène ont été analysées. L'ensemble des résultats est présenté dans le tableau suivant :

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (exp.)	Salmon		Domalski *et al.*		Cohen	
				$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
pentaméthylbenzène	$C_{11}H_{16}$	700-12-9	-144,2 ± 1,9	-147,2	3,1	-129,7	-14,5	-134,7	-9,5
nonadécane	$C_{19}H_{40}$	629-92-5	-576,6 ± 2,9	-581,0	4,4	-593,5	16,8	-582,7	6,1
docosane	$C_{22}H_{46}$	629-97-0	-679,8 ± 3,2	-670,2	-9,6	-681,7	1,9	-670,6	-9,2
tricosane	$C_{23}H_{48}$	638-67-5	-737,9 ± 4,4	-700,0	-37,9	-711,1	-26,8	-699,9	-38,0
tétracosane	$C_{24}H_{50}$	646-31-1	-731,9 ± 4,1	-729,7	-2,2	-740,5	8,6	-729,2	-2,7

Tableau IV-46 : Enthalpies standard de formation en phase solide mesurées et calculées des 5 molécules C_xH_y analysées.

Les estimations effectuées sur les substances C_xH_y grâce aux contributions de groupes déterminées préalablement sont satisfaisantes voire excellentes, excepté sur le tricosane. En effet, plusieurs formes cristallines existent dans ce cas. Barbillon *et al.* [78] publièrent une valeur de l'enthalpie de transition de phase de second ordre : ΔH_{trs} (CI, CII) = 21,5 kJ.mol^{-1} à 313,5 K.

Trois enthalpies standard de formation sur les cinq sont mieux évaluées grâce à la méthode de contribution de groupes développée, et ceci est observable pour le pentaméthylbenzène, le nonadécane et le tétracosane. Dans les deux autres cas, la technique établie permet d'obtenir des résultats équivalents à ceux calculés au moyen des valeurs de contributions de groupes de Cohen.

b. Composés $C_xH_yO_z$

Les enthalpies standard de formation en phase solide de cinq substances de formule brute $C_xH_yO_z$ ont été mesurées par calorimétrie de combustion. Voici les résultats expérimentaux et calculés :

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (exp.)	Salmon		Domalski *et al.*		Cohen	
				$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
2-adamantanone	$C_{10}H_{14}O$	700-58-3	-316,5 $\pm$ 1,8	-	-	-314,7	-1,8	-310,9	-5,6
acide 2-méthylbenzoïque	$C_8H_8O_2$	118-90-1	-422,8 $\pm$ 1,3	-428,4	5,6	-420,7	-2,1	-409,6	-13,2
acide salicylique	$C_7H_6O_3$	69-72-7	-601,0 $\pm$ 2,1	-552,5 (-592,1)*	-48,5 (-8,9)*	-591,1	-9,8	-579,0	-22,0
acide pentanedioïque	$C_5H_8O_4$	110-94-1	-971,5 $\pm$ 0,8	-962,5	-9,0	-956,7	-14,8	-962,3	-9,2
acide hexanedioïque	$C_6H_{10}O_4$	124-04-9	-1000,0 $\pm$ 1,8	-992,3	-7,8	-986,1	-13,9	-991,7	-8,3

* *cf.* explications fournies dans le paragraphe 2.2.1. b.

Tableau IV-47 : Enthalpies standard de formation en phase solide mesurées et calculées des 5 molécules $C_xH_yO_z$ analysées.

Pour ce qui est des composés oxygénés étudiés, quatre comparaisons d'enthalpies standard de formation en phase condensée peuvent être effectuées au moyen de la méthode développée. Le manque d'une valeur de contribution de groupe empêche la prévision sur le 2-adamantanone. Mise à part cette molécule, les estimations d'enthalpies standard de formation sont bonnes, sauf pour l'acide salicylique. En effet, le calcul d'enthalpie inclut deux valeurs de contributions de groupe relatives à la formation éventuelle de liaisons hydrogène intramoléculaires. L'élimination de ces contributions améliorerait considérablement la prévision (résidu = -8,9 kJ.mol^{-1}). On en déduit que le résultat obtenu signifie vraisemblablement l'absence de ces liaisons au sein de cet acide. Mais la simple connaissance de la formule développée de ce composé ne permet pas de répondre à cette question ; seule une analyse plus poussée permettrait de trancher.

On remarque, par ailleurs, que les contributions de groupes établies dans cette étude permettent de mieux évaluer les enthalpies standard de formation à l'état solide des acides pentanedioïque et hexanedioïque. Notons l'existence de plusieurs formes cristallines en ce qui concerne l'acide pentanedioïque. A ce sujet, Petropavlov *et al.* [179] publièrent l'enthalpie de transition de phase suivante : ΔH_{trs} (CI, CII) = 2,4 kJ.mol^{-1} à 338,0 K. Pour ce qui est de l'acide 2-méthylbenzoïque, la méthode prédictive développée arrive en deuxième position par rapport aux évaluations de Domalski *et al.* et de Cohen.

En ce qui concerne les paragraphes suivants, on rappelle que Cohen a publié les contributions de groupes ne contenant que des atomes de carbone, d'hydrogène et d'oxygène. Ne s'intéressant pas aux substances azotées, la méthode de Cohen ne permet donc pas de déterminer d'enthalpies standard de formation à l'état solide pour les molécules figurant aux paragraphes c. et d.

c. Composés $C_xH_yN_w$

Huit molécules ne comportant que des atomes de carbone, d'hydrogène et d'azote ont été étudiées. Leurs enthalpies standard de formation en phase solide mesurées et calculées figurent dans le tableau ci-dessous :

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_fH°_{s,m}$ (exp.)	Salmon		Domalski *et al.*	
				$\Delta_fH°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_fH°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
diphénylamine	$C_{12}H_{11}N$	122-39-4	112,5 ± 2,2	79,8	32,7	130,2	-17,7
2-aminopyridine	$C_5H_6N_2$	504-29-0	36,4 ± 1,1	27,3	9,1	71,3	-34,9
phtalonitrile	$C_8H_4N_2$	91-15-6	266,2 ± 1,6	273,3	-7,1	273,5	-7,3
5,6-diméthylbenzimidazole	$C_9H_{10}N_2$	582-60-5	-9,0 ± 2,5	-5,3	-3,7	-	-
1,2,4-triazole	$C_2H_3N_3$	288-88-0	98,0 ± 0,8	-	-	-	-
benzotriazole	$C_6H_5N_3$	95-14-7	212,3 ± 1,2	220,4	-8,1	-	-
4-amino-1,2,4-triazole	$C_2H_2N_4$	584-13-4	222,8 ± 1,3	-	-	-	-
mélamine	$C_3H_6N_6$	108-78-1	-81,0 ± 1,1	-81,4	0,4	105,5	-186,4

Tableau IV-48 : Enthalpies standard de formation en phase solide mesurées et calculées des 8 molécules $C_xH_yN_w$ analysées.

Les prévisions observées sur les substances contenant de l'azote sont bonnes voire très bonnes dans le cas de la méthode de contribution de groupes développée. Seule une exception apparaît : la diphénylamine. Par ailleurs, deux enthalpies standard de formation ne peuvent être estimées grâce à la méthode de prévision mise en place. En effet, une contribution de groupe manque pour chacune des enthalpies non évaluées. Les groupes dont la valeur de contribution n'a pas été déterminée au paragraphe 1.2.2. a. sont le C_I-(N_I)(H) et le N-(N_I)(N)(C_I).

Pour ce qui est de la technique de Domalski et Hearing, elle ne permet pas d'effectuer d'évaluations d'enthalpies standard de formation en phase solide pour quatre des huit composés analysés. En ce qui concerne les autres molécules, seule la prévision sur le phtalonitrile est satisfaisante. L'estimation de l'enthalpie standard de formation de la diphénylamine est correcte, mais un peu élevée. Quant à la 2-aminopyridine et la mélamine, les résultats sont médiocres (surtout pour ce qui est de la mélamine).

Sur les quatre comparaisons possibles d'enthalpies standard de formation à l'état solide (diphénylamine, 2-aminopyridine, phtalonitrile et mélamine), trois évaluations démontrent la supériorité de la méthode développée dans cette étude par rapport à la technique de Domalski et Hearing.

d. Composés $C_xH_yN_wO_z$

Les enthalpies standard de formation à l'état solide de sept composés de formule générale $C_xH_yN_wO_z$ ont été mesurées. L'ensemble des résultats est présenté dans le tableau suivant :

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_fH°_{s,m}$ (exp.)	Salmon		Domalski *et al.*	
				$\Delta_fH°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_fH°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
acide picolinique N-oxyde	$C_6H_5NO_3$	824-40-8	-398,8 ± 1,6	-	-	-	-
uracile	$C_4H_4N_2O_2$	66-22-8	-450,8 ± 1,7	-429,4	-21,4	-267,4	-183,4
phtalhydrazide	$C_8H_6N_2O_2$		-298,1 ± 3,5	-	-	-	-
4-nitro-imidazole	$C_3H_3N_3O_2$	3034-38-6	-27,0 ± 1,7	-	-	-	-
2-méthyl-5-nitro-imidazole	$C_4H_5N_3O_2$	88054-22-2	-69,3 ± 1,7	-	-	-	-
5-nitro-uracile	$C_4H_3N_3O_4$	611-08-5	-470,6 ± 3,3	-460,2	-10,4	-293,5	-177,1
azodicarbonamide	$C_2H_4N_4O_2$	123-77-3	-321,3 ± 2,3	-292,5	-28,8	-	-

Tableau IV-49 : Enthalpies standard de formation en phase solide mesurées et calculées des 7 molécules $C_xH_yN_wO_z$ analysées.

Trois enthalpies standard de formation peuvent être évaluées grâce à la méthode de contribution de groupes développée. Les molécules pour lesquelles aucune prévision n'est possible ont permis, quant à elles, de déterminer de nouvelles valeurs de contributions de groupes (*cf.* paragraphe 2.2.2.) : NO_e-(C_B), C_d-(NO_2)(N) et la correction phtalhydrazide. On remarquera que l'estimation de l'enthalpie standard de formation à l'état solide du 5-nitro-uracile est satisfaisante tandis que celle concernant l'uracile est moyenne. Toutefois, ces prévisions sont bien meilleures que celles obtenues grâce à la méthode de Domalski et Hearing. En ce qui concerne l'azodicarbonamide, l'évaluation d'enthalpie n'est pas très satisfaisante. Cependant, il est indispensable de noter que ce composé n'est constitué que de trois groupes. Or, la contribution de deux de ces trois groupes n'a été déterminée qu'à l'aide d'une seule molécule. Ces valeurs de contributions étant moins fiables que les autres, il semble logique que l'évaluation de l'enthalpie standard de formation en phase solide de l'azodicarbonamide ne soit pas excellente.

A noter que les estimations d'enthalpies standard de formation à l'état condensé de Domalski et Hearing sont tout à fait médiocres en ce qui concerne les composés mixtes (*i.e.* oxygénés et azotés) analysés. En effet, seules deux évaluations peuvent être effectuées sur les sept attendues, et celles-ci sont très mauvaises.

2.2.2. Détermination de nouvelles contributions de groupes

L'analyse des vingt-cinq composés organiques décrite au chapitre II permet la détermination de plusieurs nouvelles contributions de groupes relatives à la phase solide. Les valeurs correspondantes sont présentées dans le tableau ci-dessous :

Groupe	**Contribution** ($kJ.mol^{-1}$)	**Nombre de composés**
C_I-(N_I)(H)	157,7	1
N-(N_I)(N)(C_I)	79,5	1
C_d-(NO_2)(N)	-138,1 (ou -43,3)*	1 (1)*
NO_e-(C_B)	-1,7	1
cyclohexanone	-8,0	1
phtalhydrazide	-95,2	1

* *cf.* explications fournies dans le texte ci-dessous

Tableau IV-50 : Evaluation de la contribution à l'enthalpie standard de formation en phase solide de six nouveaux groupes.

Des explications s'imposent quant à l'estimation de ces nouvelles valeurs de contributions de groupes :

La valeur de la contribution du groupe C_I-(N_I)(H) a déjà été déterminée (*cf.* tableau IV-9) mais à l'aide d'un seul composé, le benzyl-1,2,4-oxadiazole [37216-04-9]. Or, cette valeur semble erronée au vu du calcul de l'enthalpie standard de formation en phase solide du 1,2,4-triazole. Elle a donc été estimée une nouvelle fois, mais à l'aide de la mesure effectuée sur le 1,2,4-triazole (*cf.* tableau IV-50).

On en déduit, par la même occasion, que le benzyl-1,2,4-oxadiazole doit certainement comporter une correction de structure non prise en compte jusqu'alors puisque la valeur de contribution du groupe C_I-(N_I)(H) utilisée pour le calcul de son enthalpie standard de formation est fausse. On a vu au paragraphe 1.3.3. c. que la méthode de contribution de groupes développée ne semblait pas convenir aux molécules contenant une structure benzyle. Voila peut-être la cause de l'erreur observée sur ce composé, si on tient compte de la nouvelle valeur de contribution du groupe C_I-(N_I)(H). En tous les cas, la correction de structure à introduire pour le benzyl-1,2,4-oxadiazole n'est vraisemblablement pas la correction 1,2,4-oxadiazole si l'on en croit les résultats de représentation obtenus sur les autres composés présentant un cycle 1,2,4-oxadiazole (ex : 3,5-diphényl-1,2,4-oxadiazole, résidu = 0,0 $kJ.mol^{-1}$).

En introduisant la nouvelle valeur de contribution à l'enthalpie standard de formation à l'état solide du groupe C_I-(N_I)(H), on peut en déduire la contribution du groupe N-(N_I)(N)(C_I). En effet, la mesure réalisée sur le 4-amino-1,2,4-triazole permet de déterminer la seule valeur de contribution de groupe manquante pour cette molécule.

Concernant le groupe C_d-(NO_2)(N), deux valeurs de contributions sont possibles car ce groupe est à la fois présent dans le 4-nitro-imidazole et dans le 2-méthyl-5-nitro-imidazole. Il est difficile de déterminer une valeur sûre de contribution dans ce cas car le 4-nitro-imidazole comprend le groupe N-(C_I)(C_d)(H) (contribution évaluée grâce à deux composés) et le 2-

méthyl-5-nitro-imidazole contient également ce même groupe mais aussi le groupe C_d-(N_I)(H) (contribution calculée grâce à un seul composé). Il semblerait donc que la valeur la plus vraisemblable de contribution à l'enthalpie standard de formation en phase condensée du groupe C_d-(NO_2)(N) soit celle déterminée au moyen du 4-nitro-imidazole, soit -138,1 kJ.mol^{-1}.

Pour ce qui est de la contribution du groupe NO_e-(C_B), elle a été estimée grâce à l'analyse par calorimétrie de combustion de l'acide picolinique N-oxyde. La valeur calculée semble tout à fait fiable car les autres contributions de groupes constituant le composé en question ont été évaluées à l'aide d'au minimum cinq molécules (*cf.* tableau IV-51).

Groupe	**Contribution** (kJ.mol^{-1})	**Nombre de composés**
C_B-(H)	3,1	83
C_B-(CO)	-110,5	13
CO-(O)(C_B)	-86,7	5
O-(CO)(H)	-212,4	11

Tableau IV-51 : Contributions de groupes intervenant dans l'acide picolinique N-oxyde.

La mesure d'enthalpie standard de formation en phase solide du 2-adamantanone a permis de déterminer la valeur de la correction de structure cyclohexanone. Contrairement à Cohen qui a introduit la correction 2-adamantanone, la correction cyclohexanone est, dans notre cas, préférée. En effet, il a été inutile jusqu'à présent de faire usage d'une quelconque valeur de contribution relative à la présence d'une structure adamantane au sein des molécules étudiées. Il est donc logique de faire de même en ce qui concerne les composés contenant de l'oxygène.

Quant à la correction phtalhydrazide, elle semble évidente au vu du calcul de l'enthalpie standard de formation à l'état solide du phtalhydrazide sans la prise en compte de cette contribution. De plus, la correction phtalhydrazide présentée au tableau IV-50 paraît tout à fait fiable car toutes les valeurs de contributions de groupes intervenant dans le phtalhydrazide ont été déterminées grâce à au moins 6 composés (*cf.* tableau IV-52).

Groupe	**Contribution** (kJ.mol^{-1})	**Nombre de composés**
C_B-(H)	3,1	83
C_B-(CO)	-110,5	13
CO-(N)(C_B)	5,8	6
N-(N)(CO)(H)	-3,0	8

Tableau IV-52 : Contributions de groupes intervenant dans le phtalhydrazide.

2.2.3. Conclusion

Dix-huit comparaisons sont donc possibles entre les enthalpies standard de formation en phase solide mesurées et calculées grâce aux contributions de groupes présentées aux tableaux IV-5 à IV-11. Il s'avère que treize de ces enthalpies sont évaluées de manière plus satisfaisante que celles prévues par les méthodes de Domalski *et al.* et de Cohen. Dans quatre

cas sur les dix-huit évoqués, les contributions de groupes établies par Domalski et Hearing permettent une meilleure prévision que celles déterminées dans cette étude, conduisant elles-mêmes à une estimation meilleure ou équivalente à celle de Cohen. Enfin, le seul composé pour lequel la méthode de prévision développée entraîne une évaluation moins bonne que celle de Domalski *et al.* et que celle de Cohen est l'acide salicylique.

Neuf enthalpies standard de formation à l'état solide ne peuvent être estimées à l'aide de la méthode de Domalski *et al.* car il manque de nombreuses valeurs de contributions de groupes. A noter que, dans certains cas, aucune des contributions constituant les molécules étudiées expérimentalement n'a été déterminée. Cela signifie qu'il est même impossible d'évaluer de nouvelles contributions de groupes pour cette méthode. En effet, pour cela, seule une valeur de contribution de groupe intervenant dans un composé donné doit être inconnue.

On remarquera, par ailleurs, que les estimations obtenues par la méthode de Domalski et Hearing sont souvent médiocres dans le cas des molécules contenant de l'azote (*i.e.* les molécules qui nous intéressent particulièrement). Une seule estimation d'enthalpie standard de formation en phase solide est satisfaisante, celle concernant le phtalonitrile.

3. Représentation et Prévision d'enthalpies standard de formation en phase solide - Comparaison avec les méthodes existantes

3.1. Représentation d'enthalpies standard de formation en phase solide et comparaison avec d'autres méthodes de contribution de groupes

3.1.1. Comparaison avec la méthode de Cohen

Afin d'estimer les enthalpies standard de formation en phase solide de composés organiques de formule brute C_xH_y et $C_xH_yO_z$, Cohen [54] a déterminé les contributions de groupes correspondantes (*cf.* paragraphe 2.5.2. du chapitre I). Nous avons donc utilisé ces dernières pour l'évaluation des enthalpies standard de formation à l'état solide des molécules hydrocarbonées et oxygénées contenues dans la liste établie au paragraphe 1.1. (*cf.* tableaux III-5 et IV-1). Ce travail permet ensuite de comparer les résultats de représentation d'enthalpies standard de formation en phase solide avec les résultats de prévision de ces mêmes enthalpies obtenus grâce aux travaux de Cohen.

Les deux tableaux suivants mettent en évidence toutes les valeurs nécessaires à la comparaison des deux méthodes de contribution de groupes. Ils rassemblent le nom de chaque composé étudié, accompagné de sa formule brute et de son numéro CAS (si celui-ci est connu), l'enthalpie standard de formation en phase solide mesurée, l'enthalpie standard de formation à l'état condensé calculée grâce aux contributions de groupes établies dans cette étude et à celles de Cohen, ainsi que les écarts calculés entre les enthalpies standard de formation publiée et estimée avec chacune des deux méthodes de contribution de groupes.

A noter que des tableaux semblables figurent dans l'annexe 12, où les résultats sont tous exprimés en joules par gramme.

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Cohen	
				$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
2-norbornène	C_7H_{10}	498-66-8	52,9	160,7	-107,8	53,0	-0,1
norbornane	C_7H_{12}	279-23-2	-95,1	-95,3	0,2	-96,2	1,1
cubane	C_8H_8	277-10-1	541,8	540,6	1,2	-133,6	675,4
bicyclo[2.2.2]oct-2-ène	C_8H_{12}	931-64-6	-23,3	-23,3	0,0	-23,2	-0,1
bicyclo[2.2.2]octane	C_8H_{14}	280-33-1	-146,9	-146,9	0,0	-209,2	62,3
2,2,3,3-tétraméthylbutane	C_8H_{18}	594-82-1	-268,9	-250,8	-18,1	-256,2	-12,7
7,7-diméthyl-bicyclo[2.2.1]heptane	C_9H_{16}	2034-53-9	-148,2	-150,1	1,9	-144,2	-4,0
bicyclo[3.3.1]nonane	C_9H_{16}	280-65-9	-178,2	-178,2	0,0	-177,8	-0,4
azulène	$C_{10}H_8$	275-51-4	212,3	186,1	26,2	212,1	0,2
naphtalène	$C_{10}H_8$	91-20-3	77,9	73,8	4,1	85,6	-7,7
1,2,4,5-tétraméthylbenzène	$C_{10}H_{14}$	95-93-2	-119,9	-110,0	-9,9	-108,2	-11,7
3a,4,5,6,7,7a-hexahydro-4,7-méthanoindène	$C_{10}H_{14}$	4488-57-7	-23,9	4,8	-28,7	-7,4	-16,5
octahydro-4,7-méthano-1H-indène	$C_{10}H_{16}$	6004-38-2	-112,9	-110,3	-2,6	-129,6	16,7
adamantane	$C_{10}H_{16}$	281-23-2	-194,1	-193,6	-0,5	-193,6	-0,5
protoadamantane	$C_{10}H_{16}$	53130-19-1	-150,8	-136,2	-14,6	-242,6	91,8
camphène	$C_{10}H_{16}$	79-92-5	-75,4	-82,5	7,1	-	-
bicyclo[3.3.2]décane	$C_{10}H_{18}$	283-50-1	-164,2	-171,5	7,3	-164,0	-0,2
2-méthylnaphtalène	$C_{11}H_{10}$	91-57-6	44,9	39,3	5,6	49,1	-4,2
pentaméthylbenzène	$C_{11}H_{16}$	700-12-9	-133,6	-147,2	13,6	-134,7	1,1
1-méthyladamantane	$C_{11}H_{18}$	768-91-2	-239,3	-236,4	-2,9	-215,3	-24,0
2-méthyladamantane	$C_{11}H_{18}$	700-56-1	-219,6	-210,9	-8,7	-214,8	-4,8
bicyclo[3.3.3]undécane	$C_{11}H_{20}$	29415-95-0	-152,5	-152,5	0,0	-152,3	-0,2
biphénylène	$C_{12}H_8$	259-79-0	334,0	334,0	0,0	334,5	-0,5
acénaphtylène	$C_{12}H_8$	208-96-8	186,7	186,7	0,0	151,0	35,7
biphényle	$C_{12}H_{10}$	92-52-4	99,4	91,6	7,8	99,8	-0,4
acénaphtène	$C_{12}H_{10}$	83-32-9	70,3	70,3	0,0	70,8	-0,5

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Cohen	
				$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
1,8-diméthylnaphtalène	$C_{12}H_{12}$	569-41-5	25,9	27,4	-1,5	33,5	-7,6
2,3-diméthylnaphtalène	$C_{12}H_{12}$	581-40-8	-2,3	6,4	-8,7	15,1	-17,4
2,6-diméthylnaphtalène	$C_{12}H_{12}$	581-42-0	-5,7	-5,7	0,0	12,6	-18,3
2,7-diméthylnaphtalène	$C_{12}H_{12}$	582-16-1	-5,4	-5,4	0,0	12,6	-18,0
hexacyclo[6.2.1.1^{3,6}.0^{2,7}.0^{4,10}.0^{5,9}]dodécane	$C_{12}H_{14}$	704-02-9	51,1	58,4	-7,3	-250,8	301,9
hexaméthylbenzène	$C_{12}H_{18}$	87-85-4	-161,5	-178,4	16,9	-166,2	4,7
(E,E,E)-1,5,9-cyclododécatriène	$C_{12}H_{18}$	676-22-2	26,6	180,3	-153,7	27,6	-1,0
2,2,7,7-tétraméthylocta-3,5-diyne	$C_{12}H_{18}$	6130-98-9	156,1	237,1	-81,0	157,0	-0,9
2,2-diméthyladamantane	$C_{12}H_{20}$	19740-34-2	-256,3	-253,7	-2,7	-241,6	-14,7
1,3-diméthyladamantane	$C_{12}H_{20}$	702-79-4	-286,4	-279,1	-7,3	-240,4	-46,0
cyclododécane	$C_{12}H_{24}$	294-62-2	-306,6	-306,6	0,0	-305,6	-1,0
4-méthyl-1,1'-biphényle	$C_{13}H_{12}$	644-08-6	55,4	57,0	-1,6	63,3	-7,9
diphénylméthane	$C_{13}H_{12}$	101-81-5	71,5	57,3	14,2	62,1	9,4
1,3,5-triméthyladamantane	$C_{13}H_{22}$	707-35-7	-332,3	-321,9	-10,4	-258,7	-73,6
diphényléthyne	$C_{14}H_{10}$	501-65-5	312,4	302,6	9,8	305,6	6,8
anthracène	$C_{14}H_{10}$	120-12-7	129,2	128,8	0,4	133,4	-4,2
phénantrène	$C_{14}H_{10}$	85-01-8	116,2	114,9	1,3	122,4	-6,2
9,10-dihydro-anthracène	$C_{14}H_{12}$	613-31-0	66,4	56,3	10,1	63,2	3,2
(E)-stilbène	$C_{14}H_{12}$	103-30-0	136,9	146,6	-9,7	136,8	0,1
4,4'-diméthylbiphényle	$C_{14}H_{14}$	613-33-2	14,1	22,5	-8,4	26,8	-12,7
bibenzyle	$C_{14}H_{14}$	103-29-7	51,5	42,7	8,8	32,8	18,7
1,4,5,8-tétraméthylnaphtalène	$C_{14}H_{16}$	2717-39-7	-18,2	-19,0	0,8	-18,6	0,4
1,2,3,4,5,6,7,8-octahydro-anthracène	$C_{14}H_{18}$	1079-71-6	-119,5	26,3	-145,8	-119,8	0,3
1,8-cyclotétradécadiyne	$C_{14}H_{20}$	1540-80-3	147,8	276,3	-128,5	147,2	0,6
diadamantane	$C_{14}H_{20}$	2292-79-7	-241,8	-220,1	-21,7	-229,9	-11,9
1,1,4,6,7-pentaméthylindane	$C_{14}H_{20}$	6682-67-3	-175,1	-174,0	-1,1	-171,8	-3,3

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Cohen	
				$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
trans-anti-trans-tétradécahydro-anthracène	$C_{14}H_{24}$	28071-99-0	-293,3	-318,3	25,0	-330,0	36,7
1,3,5,7-tétraméthyladamantane	$C_{14}H_{24}$	1687-36-1	-365,8	-364,7	-1,1	-300,8	-65,0
cyclotétradécane	$C_{14}H_{28}$	295-17-0	-374,0	-374,0	0,0	-374,2	0,2
cis-1,4-Di-tert-butyl-cyclohexane	$C_{14}H_{28}$	4789-34-8	-374,1	-387,0	12,9	-399,8	25,7
trans-1,4-Di-tert-butyl-cyclohexane	$C_{14}H_{28}$	4789-35-9	-401,8	-387,0	-14,8	-417,0	15,2
1,4-diméthyl-7-(1-méthyléthyl)-azulène	$C_{15}H_{18}$	489-84-9	61,1	298,7	-237,6	61,5	-122,6
4-méthyldiadamantane	$C_{15}H_{22}$	30545-28-9	-261,5	-262,8	1,3	-255,0	-6,5
3-méthyldiadamantane	$C_{15}H_{22}$	28375-86-2	-260,4	-262,8	2,4	-255,0	-5,4
1-méthyldiadamantane	$C_{15}H_{22}$	26460-76-4	-247,4	-262,8	15,4	-244,8	-2,6
cyclopentadécane	$C_{15}H_{30}$	295-48-7	-376,1	-376,1	0,0	-376,7	0,6
1,1'-(1,3-butadiyne-1,4-diyl)bis-benzène	$C_{16}H_{10}$	886-66-8	518,4	518,4	0,0	512,2	6,2
fluoranthène	$C_{16}H_{10}$	206-44-0	189,9	189,9	0,0	190,6	-0,7
pyrène	$C_{16}H_{10}$	129-00-0	125,5	134,9	-9,4	171,8	-46,3
bis-(2-méthylphényl)-acétylène	$C_{16}H_{14}$	5294-03-1	234,8	236,9	-2,1	237,6	-2,8
Di-p-tolylacétylène	$C_{16}H_{14}$	2789-88-0	225,8	233,5	-7,7	232,6	-6,8
(Z,Z)-1,4-diphénylbutadiène	$C_{16}H_{14}$	5807-76-1	198,8	185,4	13,4	188,8	10,0
(E,E)-1,4-diphénylbutadiène	$C_{16}H_{14}$	538-81-8	178,8	181,0	-2,2	180,4	-1,6
2,7-diméthylphénantrène	$C_{16}H_{14}$	1576-69-8	36,4	45,8	-9,4	49,4	-13,0
4,5-diméthylphénantrène	$C_{16}H_{14}$	3674-69-9	89,0	45,8	43,2	91,2	-2,2
9,10-diméthylphénantrène	$C_{16}H_{14}$	604-83-1	47,6	47,5	0,2	51,9	-4,3
1,1-Di-o-tolyléthylène	$C_{16}H_{16}$	2919-19-9	89,0	89,1	-0,1	108,9	-19,9
cis-1,2-Di-o-tolyléthène	$C_{16}H_{16}$	10311-74-7	85,9	80,9	5,0	73,0	12,9
trans-1,2-Di-o-tolyléthène	$C_{16}H_{16}$	36888-18-3	74,9	80,9	-6,0	68,8	6,1
1,1-Di-p-tolyléthylène	$C_{16}H_{16}$	2919-20-2	85,9	85,8	0,1	103,9	-18,0
(Z)-1,2-bis(4-méthylphényl)éthène	$C_{16}H_{16}$	2510-76-1	97,9	77,6	20,4	68,0	29,9
(E)-1,2-bis(4-méthylphényl)éthène	$C_{16}H_{16}$	18869-29-9	57,9	77,6	-19,7	63,8	-5,9

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Cohen	
				$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
[2.2]métacyclophane	$C_{16}H_{16}$	2319-97-3	78,5	78,5	0,0	-10,0	88,5
[2.2]paracyclophane	$C_{16}H_{16}$	1633-22-3	145,1	82,4	62,7	-10,0	155,1
[2.2]métaparacyclophane	$C_{16}H_{16}$	5385-36-4	130,9	130,9	0,0	-10,0	140,9
[16]annulène	$C_{16}H_{16}$	3332-38-5	547,5	547,5	0,0	549,6	-2,1
1,2-Di-o-tolyléthane	$C_{16}H_{18}$	952-80-7	-40,0	-23,0	-17,0	-35,2	-4,8
1,2-Di-p-tolyléthane	$C_{16}H_{18}$	538-39-6	-42,1	-26,4	-15,8	-40,2	-1,9
1,4-diphénylbutane	$C_{16}H_{18}$	1083-56-3	-9,9	-16,8	6,9	-25,8	15,9
tricyclo[8.2.2.2^{4,7}]hexadécane	$C_{16}H_{28}$	283-68-1	-244,1	-244,1	0,0	-418,4	174,3
cyclohexadécane	$C_{16}H_{32}$	295-65-8	-403,4	-403,4	0,0	-403,5	0,1
cycloheptadécane	$C_{17}H_{34}$	295-97-6	-430,4	-430,4	0,0	-431,2	0,8
triphénylène	$C_{18}H_{12}$	217-59-4	151,8	142,0	9,9	148,2	3,6
chrysène	$C_{18}H_{12}$	218-01-9	145,3	155,9	-10,6	159,2	-13,9
benzo[c]phénantrène	$C_{18}H_{12}$	195-19-7	184,9	172,0	12,9	156,4	28,5
benzo[a]anthracène	$C_{18}H_{12}$	56-55-3	170,8	169,9	0,9	170,2	0,6
naphtacène	$C_{18}H_{12}$	92-24-0	158,8	183,9	-25,1	181,2	-22,4
5,12-dihydro-naphtacène	$C_{18}H_{14}$	959-02-4	106,4	111,3	-4,9	111,0	-4,6
[18]annulène	$C_{18}H_{18}$	2040-73-5	163,4	163,4	0,0	402,4	-239,0
3,4,5,6-tétraméthylphénantrène	$C_{18}H_{18}$	7343-06-8	23,4	-20,0	43,4	23,2	0,2
2,4,5,7-tétraméthylphénantrène	$C_{18}H_{18}$	7396-38-5	12,2	-23,3	35,5	18,2	-6,0
[3.3]paracyclophane	$C_{18}H_{20}$	2913-24-8	26,3	22,9	3,4	-68,6	94,9
1,2,3,4,5,6,7,8,9,10,11,12-dodécahydro-triphénylène	$C_{18}H_{24}$	1610-39-5	-193,9	30,0	-223,9	-194,0	0,1
1,2,4-Tri-tert-butylbenzène	$C_{18}H_{30}$	1459-11-6	-251,6	-236,2	-15,4	-131,9	-119,7
1,3,5-Tri-tert-butylbenzène	$C_{18}H_{30}$	1460-02-2	-321,9	-308,2	-13,7	-320,4	-1,5
octadécane	$C_{18}H_{38}$	593-45-3	-567,4	-551,2	-16,2	-553,4	-14,0
triphénylméthane	$C_{19}H_{16}$	519-73-3	171,2	168,2	3,0	171,8	-0,6
2,2',4,4',5,5'-hexaméthyldiphénylméthane	$C_{19}H_{24}$	4957-16-8	-154,4	-139,9	-14,5	-141,9	-12,5

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Cohen	
				$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
pérylène	$C_{20}H_{12}$	198-55-0	182,8	162,0	20,9	166,8	16,0
9,10-dihydro-9,10[1',2']benzénoanthracène	$C_{20}H_{14}$	477-75-8	217,1	217,6	-0,5	217,2	-0,1
triphényléthylène	$C_{20}H_{16}$	58-72-0	233,4	226,6	6,8	224,4	9,0
5,8-diméthylbenzo[c]phénantrène	$C_{20}H_{16}$	54986-63-9	108,2	79,4	28,8	83,4	24,8
1,12-diméthylbenzo[c]phénantrène	$C_{20}H_{16}$	4076-43-1	154,5	79,4	75,1	104,3	50,2
3,9-diméthylbenz[a]anthracène	$C_{20}H_{16}$	316-51-8	76,2	100,8	-24,6	97,2	-21,0
1,12-diméthylbenz[a]anthracène	$C_{20}H_{16}$	313-74-6	139,0	100,8	38,2	139,0	0,0
9,10-diméthyl-1,2-benzanthracène	$C_{20}H_{16}$	57-97-6	143,8	106,8	37,0	118,1	25,7
5,6-diméthylchrysène	$C_{20}H_{16}$	3697-27-6	132,5	88,5	44,0	109,6	22,9
1,1,1-triphényléthane	$C_{20}H_{18}$	5271-39-6	157,2	159,0	-1,8	214,0	-56,8
1,1,2-triphényléthane	$C_{20}H_{18}$	1520-42-9	130,2	128,2	2,0	127,0	3,2
1-(2-naphtalénylméthyl)naphtalène	$C_{21}H_{16}$	611-48-3	162,0	167,4	-5,4	157,7	4,3
1',2',3',4'-tétrahydro-1,2-dinaphtylméthane	$C_{21}H_{20}$	56818-06-5	44,1	119,2	-75,1	4,8	39,3
[1.8]paracyclophane	$C_{21}H_{26}$	6169-94-4	-81,9	-78,5	-3,4	-156,5	74,6
1,2,4,5-Tétra-tert-butylbenzène	$C_{22}H_{38}$	796-97-4	-297,9	-413,8	115,9	-296,8	-1,1
tris(2-méthylphényl)éthylène	$C_{23}H_{22}$	62155-47-9	125,2	128,0	-2,8	122,4	2,8
tris(4-méthylphényl)éthylène	$C_{23}H_{22}$	6629-83-0	121,2	123,0	-1,8	114,9	6,3
1,1,2-Tri-o-tolyléthane	$C_{23}H_{24}$		24,4	29,6	-5,2	25,0	-0,6
1,1,2-Tri-p-tolyléthane	$C_{23}H_{24}$	27497-47-8	16,4	24,6	-8,2	17,5	-1,1
1,3,5-triphénylbenzène	$C_{24}H_{18}$	612-71-5	224,6	237,2	-12,6	223,8	0,8
[6.6]paracyclophane	$C_{24}H_{32}$	4384-23-0	-192,7	-155,6	-37,1	-244,4	51,7
tétraphénylméthane	$C_{25}H_{20}$	630-76-2	247,1	241,2	5,9	247,6	-0,5
1,3,6-triphénylcycloheptatriène	$C_{25}H_{20}$	17760-68-8	273,9	336,6	-62,7	274,2	-0,3
9,10-diphénylanthracène	$C_{26}H_{18}$	1499-10-1	308,7	280,5	28,2	257,4	51,3
tétraphényléthylène	$C_{26}H_{20}$	632-51-9	311,5	304,4	7,1	312,0	-0,5
1,1,1,2-tétraphényléthane	$C_{26}H_{22}$	2294-94-2	223,0	217,9	5,1	272,7	-49,7

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Cohen	
				$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
1,1,2,2-tétraphényléthane	$C_{26}H_{22}$	632-50-8	216,0	213,7	2,3	221,2	-5,2
3-phényléicosane	$C_{26}H_{46}$	2400-02-4	-548,8	-537,5	-11,3	-539,9	-8,9
9,9'-bianthracène	$C_{28}H_{18}$	1055-23-8	326,2	325,2	1,0	291,0	35,2
9,9'-biphénanthryl	$C_{28}H_{18}$	20532-03-0	212,8	297,3	-84,5	269,0	-56,2
1,1,4,4-tétraphényl-1,3-butadiène	$C_{28}H_{22}$	1450-63-1	329,9	341,0	-11,1	355,6	-25,7
1,2,3,4-tétraphényl-1,3-butadiène	$C_{28}H_{22}$	806-71-3	358,9	358,9	0,0	367,2	-8,3
1,1,4,4-tétraphénylbutane	$C_{28}H_{26}$	1483-64-3	163,3	159,5	3,8	366,8	-203,5
tétra-p-tolyléthène	$C_{30}H_{28}$	5831-43-6	171,5	166,3	5,2	166,0	5,5
1,1,2,2-Tétra-p-tolyléthane	$C_{30}H_{30}$	40673-57-2	73,6	80,9	-7,3	279,4	-205,8
cyclotriacontane	$C_{30}H_{60}$	297-35-8	-895,7	-892,6	-3,1	-879,0	-16,7
13-phénylpentacosane	$C_{31}H_{56}$	6006-90-2	-687,0	-686,3	-0,7	-686,4	-0,6
pentaphényléthane	$C_{32}H_{26}$	19112-42-6	381,2	303,4	77,8	366,9	14,3
dotriacontane	$C_{32}H_{66}$	544-85-4	-968,3	-967,8	-0,5	-963,6	-4,7
hexaphényléthane	$C_{38}H_{30}$	17854-07-8	511,8	393,1	118,7	512,6	-0,8
5,6,11,12-tétraphénylnaphtacène	$C_{42}H_{28}$	517-51-1	620,3	574,4	45,9	471,0	149,3

Tableau IV-53 : Comparaison des enthalpies standard de formation en phase solide issues de la littérature avec les enthalpies représentées par la méthode développée et avec les enthalpies prévues par la méthode de Cohen, concernant 145 molécules contenant carbone et hydrogène.

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Cohen	
				$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
phénol	C_6H_6O	108-95-2	-165,1	-178,2	13,1	-168,1	3,0
2-méthylphénol	C_7H_8O	95-48-7	-204,6	-212,7	8,1	-198,3	-6,3
4-méthylphénol	C_7H_8O	106-44-5	-199,3	-212,8	13,5	-204,6	5,3
4-éthylphénol	$C_8H_{10}O$	123-07-9	-224,4	-213,2	-11,2	-231,8	7,4
2,3-diméthylphénol	$C_8H_{10}O$	526-75-0	-241,2	-245,6	4,4	-232,3	-8,9
2,5-diméthylphénol	$C_8H_{10}O$	95-87-4	-246,6	-247,2	0,6	-234,8	-11,8
2,6-diméthylphénol	$C_8H_{10}O$	576-26-1	-237,4	-247,2	9,8	-228,5	-8,9
3,4-diméthylphénol	$C_8H_{10}O$	95-65-8	-242,3	-245,6	3,3	-238,6	-3,7
3,5-diméthylphénol	$C_8H_{10}O$	108-68-9	-244,4	-247,3	2,9	-241,1	-3,3
2-isopropylphénol	$C_9H_{12}O$	88-69-7	-246,6	-229,9	-16,7	-244,8	-1,8
3-isopropylphénol	$C_9H_{12}O$	618-45-1	-263,0	-230,0	-33,1	-251,1	-11,9
4-isopropylphénol	$C_9H_{12}O$	99-89-8	-279,7	-230,0	-49,8	-251,1	-28,6
1-naphtol	$C_{10}H_8O$	90-15-3	-121,0	-123,2	2,2	-120,3	-0,7
2-naphtol	$C_{10}H_8O$	135-19-3	-124,2	-123,2	-1,0	-120,3	-3,9
1,2,3,4-tétrahydro-1-naphtol	$C_{10}H_{12}O$	529-33-9	-241,4	-177,4	-64,0	-253,6	12,2
5,6,7,8-tétrahydro-1-naphtol	$C_{10}H_{12}O$	529-35-1	-285,3	-174,5	-110,8	-271,6	-13,7
2-isopropyl-5-méthylphénol	$C_{10}H_{14}O$	89-83-8	-280,3	-264,4	-15,9	-281,3	1,0
1-adamantanol	$C_{10}H_{16}O$	768-95-6	-397,6	-418,9	21,3	-399,3	1,7
2-adamantanol	$C_{10}H_{16}O$	700-57-2	-388,0	-385,6	-2,5	-369,2	-18,8
exo-4-hydroxy-exo-exo-tétracyclo[6.2.1.1^{3,6}.0^{2,7}]dodécane	$C_{12}H_{18}O$	74007-11-7	-284,9	-282,6	-2,3	-284,2	-0,7
exo-4-hydroxy-exo-endo-tétracyclo[6.2.1.1^{3,6}.0^{2,7}]dodécane	$C_{12}H_{18}O$	107133-43-7	-294,3	-282,6	-11,7	-285,9	-8,4
exo-4-hydroxy-endo-endo-tétracyclo[6.2.1.1^{3,6}.0^{2,7}]dodécane	$C_{12}H_{18}O$	7273-98-5	-264,2	-282,6	18,4	-285,9	21,7
(1,1'-biphényl)méthanol	$C_{13}H_{12}O$	41376-19-6	-104,8	-121,7	16,9	-116,2	11,4
1-tridécanol	$C_{13}H_{28}O$	112-70-9	-599,4	-593,6	-5,8	-594,7	-4,7
1-diamantanol	$C_{14}H_{20}O$	30545-19-8	-428,8	-415,6	-13,2	-399,5	-29,3
3-diamantanol	$C_{14}H_{20}O$	30545-24-5	-413,8	-402,6	-11,3	-390,5	-23,3
4-diamantanol	$C_{14}H_{20}O$	30651-03-7	-434,9	-415,6	-19,3	-409,7	-25,2
1-tétradécanol	$C_{14}H_{30}O$	112-72-1	-629,6	-623,4	-6,2	-624,0	-5,6

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Cohen	
				$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
1-pentadécanol	$C_{15}H_{32}O$	629-76-5	-658,2	-653,1	-5,1	-653,3	-4,9
1-hexadécanol	$C_{16}H_{34}O$	36653-82-4	-686,5	-682,9	-3,6	-682,6	-3,9
3',5'-diisopropyl-4,4-diméthyl-3-phényl-1,2-benzocyclobutèn-3-ol	$C_{22}H_{28}O$	33574-16-2	-218,8	-214,6	-4,2	-	-
acide 3-butynoïque	$C_4H_4O_2$	2345-51-9	-241,8	-163,8	-78,0	-	-
acide 3-pentynoïque	$C_5H_6O_2$	36781-65-4	-292,3	-211,3	-81,0	-184,1	-108,2
cis-1,2-cyclopentanediol	$C_5H_{10}O_2$	5057-98-7	-485,1	-498,9	13,8	-510,5	25,4
trans-1,2-cyclopentanediol	$C_5H_{10}O_2$	5057-99-8	-490,1	-498,9	8,8	-514,7	24,6
2,2-diméthyl-1,3-propanediol	$C_5H_{12}O_2$	126-30-7	-551,2	-544,7	-6,5	-544,3	-6,9
hydroquinone	$C_6H_6O_2$	123-31-9	-364,5	-369,2	4,7	-374,0	9,5
résorcinol	$C_6H_6O_2$	108-46-3	-368,0	-375,2	7,2	-374,0	6,0
1,6-hexanediol	$C_6H_{14}O_2$	629-11-8	-569,9	-576,5	6,6	-577,4	7,5
acide benzoïque	$C_7H_6O_2$	65-85-0	-385,2	-394,0	8,8	-377,3	-7,9
2-hydroxy-2,4,6-cycloheptatrièn-1-one	$C_7H_6O_2$	533-75-5	-239,3	-109,9	-129,4	-246,2	6,9
1-(2-hydroxyphényl)éthanone	$C_8H_8O_2$	118-93-4	-357,6	-351,3	-6,3	-360,7	3,1
1-(3-hydroxyphényl)éthanone	$C_8H_8O_2$	121-71-1	-370,6	-370,0	-0,6	-363,2	-7,4
1-(4-hydroxyphényl)éthanone	$C_8H_8O_2$	99-93-4	-364,3	-370,0	5,7	-363,2	-1,1
acide 2-méthylbenzoïque	$C_8H_8O_2$	118-90-1	-416,5	-428,4	11,9	-409,6	-6,9
acide 3-méthylbenzoïque	$C_8H_8O_2$	99-04-7	-426,1	-428,5	2,4	-413,8	-12,3
acide 4-méthylbenzoïque	$C_8H_8O_2$	99-94-5	-429,2	-428,5	-0,7	-413,8	-15,4
1,4-benzènediméthanol	$C_8H_{10}O_2$	589-29-7	-393,9	-401,8	7,9	-394,2	0,3
2,5-diméthyl-3-hexyne-2,5-diol	$C_8H_{14}O_2$	142-30-3	-385,7	-294,4	-91,3	-375,0	-10,7
2,5-diméthyl-2,5-hexanediol	$C_8H_{18}O_2$	110-03-2	-681,7	-676,6	-5,1	-686,2	4,5
acide (Z)-3-phényl-2-propénoïque	$C_9H_8O_2$	102-94-3	-312,1	-292,2	-19,9	-322,4	10,3
acide (E)-3-phényl-2-propénoïque	$C_9H_8O_2$	140-10-3	-336,9	-292,2	-44,7	-326,6	-10,3
acide 2,3-diméthylbenzoïque	$C_9H_{10}O_2$	603-79-2	-450,4	-461,3	10,9	-443,6	-6,8
acide 2,4-diméthylbenzoïque	$C_9H_{10}O_2$	611-01-8	-458,5	-463,0	4,5	-446,1	-12,4
acide 2,5-diméthylbenzoïque	$C_9H_{10}O_2$	610-72-0	-456,1	-463,0	6,9	-446,1	-10,0
acide 2,6-diméthylbenzoïque	$C_9H_{10}O_2$	632-46-2	-440,7	-441,4	0,7	-441,9	1,2

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Cohen	
				$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
acide 3,4-diméthylbenzoïque	$C_9H_{10}O_2$	619-04-5	-468,8	-461,4	-7,4	-447,8	-21,0
acide 3,5-diméthylbenzoïque	$C_9H_{10}O_2$	499-06-9	-466,4	-463,1	-3,4	-450,3	-16,1
acide 2-éthylbenzoïque	$C_9H_{10}O_2$	612-19-1	-441,3	-428,9	-12,4	-436,8	-4,5
acide 3-éthylbenzoïque	$C_9H_{10}O_2$	619-20-5	-445,8	-428,9	-16,9	-441,0	-4,8
acide 4-éthylbenzoïque	$C_9H_{10}O_2$	619-64-7	-460,7	-428,9	-31,8	-441,0	-19,7
2,6-diméthyl-2,6-heptanediol	$C_9H_{20}O_2$	6257-51-8	-761,1	-706,4	-54,7	-715,5	-45,6
2,7-naphtalènediol	$C_{10}H_8O_2$	582-17-2	-326,1	-326,1	0,0	-326,2	0,1
2,3-naphtalènediol	$C_{10}H_8O_2$	92-44-4	-316,4	-281,7	-34,7	-319,9	3,5
acide 2,4-diméthylphénylacétique	$C_{10}H_{12}O_2$	6331-04-0	-495,8	-490,6	-5,2	-444,9	-50,9
acide 2,3,4-triméthylbenzoïque	$C_{10}H_{12}O_2$	1076-47-7	-486,6	-494,2	7,6	-477,6	-9,0
acide 2,3,5-triméthylbenzoïque	$C_{10}H_{12}O_2$	2437-66-3	-488,7	-495,9	7,2	-480,1	-8,6
acide 2,3,6-triméthylbenzoïque	$C_{10}H_{12}O_2$	2529-36-4	-475,7	-474,3	-1,4	-475,9	0,2
acide 2,4,5-triméthylbenzoïque	$C_{10}H_{12}O_2$	528-90-5	-495,7	-495,9	0,2	-480,1	-15,6
acide 2,4,6-triméthylbenzoïque	$C_{10}H_{12}O_2$	480-63-7	-477,9	-475,9	-2,0	-478,4	0,5
acide 3,4,5-triméthylbenzoïque	$C_{10}H_{12}O_2$	1076-88-6	-500,9	-494,2	-6,7	-477,6	-23,3
2-hydroxy-4-isopropyl-2,4,6-cycloheptatrièn-1-one	$C_{10}H_{12}O_2$	499-44-5	-340,6	-106,6	-234,0	-333,0	-7,6
acide décanoïque	$C_{10}H_{20}O_2$	334-48-5	-713,7	-712,2	-1,5	-713,9	0,2
1,10-décanediol	$C_{10}H_{22}O_2$	112-47-0	-693,5	-695,5	2,0	-694,6	1,1
2,7-diméthyl-2,7-octanediol	$C_{10}H_{22}O_2$	19781-07-8	-730,0	-736,1	6,1	-744,8	14,8
acide 1-naphtalènecarboxylique	$C_{11}H_8O_2$	86-55-5	-333,5	-338,9	5,4	-329,5	-4,0
acide 2-naphtalènecarboxylique	$C_{11}H_8O_2$	93-09-4	-346,1	-338,9	-7,2	-329,5	-16,6
acide 2,3,4,5-tétraméthylbenzoïque	$C_{11}H_{14}O_2$	2529-39-7	-514,4	-527,0	12,6	-511,6	-2,8
acide 2,3,4,6-tétraméthylbenzoïque	$C_{11}H_{14}O_2$	2408-38-0	-507,7	-507,1	-0,6	-509,9	2,2
acide 2,3,5,6-tétraméthylbenzoïque	$C_{11}H_{14}O_2$	2604-45-7	-506,1	-507,1	1,0	-509,9	3,8
acide 3,5-diéthylbenzoïque	$C_{11}H_{14}O_2$	3854-90-8	-511,9	-463,9	-48,0	-504,7	-7,2
acide 2-tert-butylbenzoïque	$C_{11}H_{14}O_2$	1077-58-3	-476,2	-502,9	26,7	-475,4	-0,8
acide 3-tert-butylbenzoïque	$C_{11}H_{14}O_2$	7498-54-6	-504,3	-502,9	-1,4	-496,7	-7,6
acide 4-tert-butylbenzoïque	$C_{11}H_{14}O_2$	98-73-7	-502,9	-502,9	0,0	-496,7	-6,2

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Cohen	
				$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
acide adamantane-1-carboxylique	$C_{11}H_{16}O_2$	828-51-3	-643,1	-617,5	-25,6	-593,9	-49,2
acide adamantane-2-carboxylique	$C_{11}H_{16}O_2$	15897-81-1	-627,2	-617,5	-9,7	-593,9	-33,3
acide undécanoïque	$C_{11}H_{22}O_2$	112-37-8	-735,9	-742,0	6,1	-743,2	7,3
1-naphtyl acétate	$C_{12}H_{10}O_2$	830-81-9	-305,0	-297,8	-7,2	-262,1	-42,9
2-naphtyl acétate	$C_{12}H_{10}O_2$	1523-11-1	-309,6	-297,8	-11,8	-262,1	-47,5
acide 1-naphtalèneacétique	$C_{12}H_{10}O_2$	86-87-3	-359,2	-368,2	9,0	-326,6	-32,6
acide 2-naphtalèneacétique	$C_{12}H_{10}O_2$	581-96-4	-371,9	-368,2	-3,8	-326,6	-45,3
acide pentaméthylbenzoïque	$C_{12}H_{16}O_2$	2243-32-5	-536,1	-538,3	2,2	-541,4	5,3
3,6-diéthyloct-4-yne-3,6-diol	$C_{12}H_{22}O_2$	2044-37-3	-481,5	-410,8	-70,7	-485,4	3,9
acide dodécanoïque	$C_{12}H_{24}O_2$	143-07-7	-774,6	-771,7	-2,9	-772,5	-2,1
2,9-diméthyl-2,9-décanediol	$C_{12}H_{26}O_2$	22092-57-5	-789,6	-795,6	6,0	-803,4	13,8
acide phényl ester benzoïque	$C_{13}H_{10}O_2$	93-99-2	-241,6	-240,7	-0,9	-239,5	-2,1
acide 2-phénylbenzoïque	$C_{13}H_{10}O_2$	947-84-2	-349,1	-321,1	-28,0	-311,1	-38,0
acide tridécanoïque	$C_{13}H_{26}O_2$	638-53-9	-806,6	-801,5	-5,1	-801,8	-4,8
2,10-diméthyl-2,10-undécanediol	$C_{13}H_{28}O_2$	22092-58-6	-835,8	-825,4	-10,4	-832,7	-3,1
2-hydroxy-1,2-diphényléthanone	$C_{14}H_{12}O_2$	119-53-9	-247,7	-247,7	0,0	-263,8	16,1
acide tétradécanoïque	$C_{14}H_{28}O_2$	544-63-8	-833,5	-831,3	-2,3	-831,1	-2,4
2,11-diméthyl-2,11-dodécanediol	$C_{14}H_{30}O_2$	22092-59-7	-846,2	-855,2	9,0	-862,0	15,8
2,2'-bis(4-hydroxyphényl)propane	$C_{15}H_{16}O_2$	80-05-7	-368,6	-368,6	0,0	-368,2	-0,4
acide 3,5-Di-tert-butylbenzoïque	$C_{15}H_{22}O_2$	16225-26-6	-624,6	-611,9	-12,7	-616,1	-8,5
acide pentadécanoïque	$C_{15}H_{30}O_2$	1002-84-2	-861,7	-861,0	-0,7	-860,4	-1,3
acide hexadécanoïque	$C_{16}H_{32}O_2$	57-10-3	-891,5	-890,8	-0,7	-889,7	-1,8
acide 2-naphtyl ester benzoïque	$C_{17}H_{12}O_2$	93-44-7	-184,8	-185,7	0,9	-191,7	6,9
acide heptadécanoïque	$C_{17}H_{34}O_2$	506-12-7	-924,4	-920,5	-3,9	-919,0	-5,4
acide octadécanoïque	$C_{18}H_{36}O_2$	57-11-4	-947,7	-950,3	2,6	-948,3	0,6
acide nonadécanoïque	$C_{19}H_{38}O_2$	646-30-0	-984,0	-980,0	-4,0	-977,6	-6,4
acide éicosanoïque	$C_{20}H_{40}O_2$	506-30-9	-1011,9	-1009,8	-2,1	-1006,9	-5,0
acide (E)-13-docosénoïque	$C_{22}H_{42}O_2$	506-33-2	-960,7	-887,8	-72,9	-939,1	-21,6

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Cohen	
				$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
acide (S)-2-hydroxypropanoïque	$C_3H_6O_3$	79-33-4	-694,0	-681,4	-12,6	-685,8	-8,2
acide furancarboxylique	$C_5H_4O_3$	26447-28-9	-498,4	-498,4	0,0	-506,2	7,8
2-(hydroxyméthyl)-2-méthyl-1,3-propanediol	$C_5H_{12}O_3$	77-85-0	-744,6	-734,5	-10,1	-728,7	-15,9
2-éthyl-2-(hydroxyméthyl)-1,3-propanediol	$C_6H_{14}O_3$	77-99-6	-750,9	-764,3	13,4	-758,0	7,1
acide perbenzoïque	$C_7H_6O_3$	93-59-4	-367,0	-305,3	-61,7	-285,0	-82,0
acide salicylique	$C_7H_6O_3$	69-72-7	-589,9	-552,5	-37,4	-579,0	-10,9
acide 3-(2-furanyl)-2-propénoïque	$C_7H_6O_3$	539-47-9	-459,0	-434,0	-25,0	-455,1	-3,9
3-hydroxy-4-méthoxy-benzaldéhyde	$C_8H_8O_3$	621-59-0	-453,4	-494,8	41,4	-461,5	8,1
2,4-dihydroxyacétophénone	$C_8H_8O_3$	89-84-9	-573,5	-548,3	-25,2	-562,8	-10,7
acide (R,S)-α-hydroxybenzèneacétique	$C_8H_8O_3$	611-72-3	-579,4	-574,1	-5,3	-570,6	-8,8
acide (S)-α-hydroxybenzèneacétique	$C_8H_8O_3$	17199-29-0	-580,6	-574,1	-6,5	-570,6	-10,0
acide 2-méthoxybenzoïque	$C_8H_8O_3$	579-75-9	-538,5	-538,8	0,3	-560,6	22,1
acide 3-méthoxybenzoïque	$C_8H_8O_3$	586-38-9	-553,5	-557,5	4,0	-564,8	11,3
acide 4-méthoxybenzoïque	$C_8H_8O_3$	100-09-4	-561,7	-557,5	-4,2	-564,8	3,1
acide 3-hydroxy-2-naphtoïque	$C_{11}H_8O_3$	92-70-6	-547,8	-497,4	-50,4	-531,2	-16,6
acide dodécanepéroxoïque	$C_{12}H_{24}O_3$	2388-12-7	-680,3	-683,1	2,8	-680,2	-0,1
phényl-2-hydroxybenzoate	$C_{13}H_{10}O_3$	118-55-8	-436,6	-419,0	-17,6	-441,2	4,6
diphényl carbonate	$C_{13}H_{10}O_3$	102-09-0	-401,2	-416,3	15,1	-376,3	-24,9
acide carbonique dicyclohexyl ester	$C_{13}H_{22}O_3$	4427-97-8	-830,2	-815,1	-15,1	-807,7	-22,5
acide tétradécanepéroxoïque	$C_{14}H_{28}O_3$	19816-73-0	-749,9	-742,6	-7,3	-738,8	-11,1
acide 2-méthylbenzoïque anhydride	$C_{16}H_{14}O_3$	607-86-3	-533,5	-521,9	-11,6	-	-
acide 4-méthylbenzoïque anhydride	$C_{16}H_{14}O_3$	13222-85-0	-521,0	-522,0	1,0	-	-
acide 1-méthyl-1-phényléthyl ester benzènecarbopéroxoïque	$C_{16}H_{16}O_3$	7074-00-2	-231,5	-231,5	0,0	-196,9	-34,6
acide hexadécanepéroxoïque	$C_{16}H_{32}O_3$	7311-29-7	-801,9	-802,1	0,2	-797,4	-4,5
acide 3-phényl-2-propénoïque anhydride	$C_{18}H_{14}O_3$	538-56-7	-347,8	-249,5	-98,3	-	-
acide octadécanepéroxoïque	$C_{18}H_{36}O_3$	5796-86-1	-857,3	-861,6	4,3	-856,0	-1,3
acide oxalique	$C_2H_2O_4$	144-62-7	-821,7	-831,8	10,1	-815,0	-6,7
dioxybisméthanol	$C_2H_6O_4$	17088-73-2	-665,8	-716,4	50,6	-665,2	-0,6

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Cohen	
				$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
acide malonique	$C_3H_4O_4$	141-82-2	-891,0	-890,5	-0,5	-844,3	-46,7
acide 2-butynedioïque	$C_4H_2O_4$	142-45-0	-577,4	-549,1	-28,3	-585,0	7,6
3,4-dihydroxy-3-cyclobutène-1,2-dione	$C_4H_2O_4$	2892-51-5	-598,2	-598,2	0,0	-598,3	0,1
acide (Z)-2-butènedioïque	$C_4H_4O_4$	110-16-7	-789,4	-731,1	-58,3	-785,8	-3,6
acide (E)-2-butènedioïque	$C_4H_4O_4$	110-17-8	-811,7	-731,1	-80,6	-790,0	-21,7
acide butanedioïque	$C_4H_6O_4$	110-15-6	-940,5	-947,3	6,8	-933,0	-7,5
acide éthanedioïque diméthyl ester	$C_4H_6O_4$	553-90-2	-756,3	-746,2	-10,1	-754,0	-2,3
2(R),3(S)-1,2,3,4-butanetétrol	$C_4H_{10}O_4$	149-32-6	-910,4	-898,3	-12,1	-880,2	-30,2
acide (E)-2-méthyl-2-butènedioïque	$C_5H_6O_4$	498-24-8	-824,4	-686,0	-138,4	-820,6	-3,8
acide méthylènebutanedioïque	$C_5H_6O_4$	97-65-4	-841,1	-497,9	-343,2	-830,6	-10,5
acide méthylbutanedioïque	$C_5H_8O_4$	498-21-5	-958,2	-962,7	4,5	-950,2	-8,0
acide pentanedioïque	$C_5H_8O_4$	110-94-1	-960,0	-962,5	2,5	-962,3	2,3
2,2-bis(hydroxyméthyl)-1,3-propanediol	$C_5H_{12}O_4$	115-77-5	-920,6	-924,4	3,8	-913,1	-7,5
acide 2,2-diméthylbutanedioïque	$C_6H_{10}O_4$	597-43-3	-987,8	-988,2	0,4	-974,9	-12,9
acide méso-2,3-diméthylbutanedioïque	$C_6H_{10}O_4$	608-39-9	-977,5	-978,1	0,6	-967,4	-10,1
acide racémique-2,3-diméthylbutanedioïque	$C_6H_{10}O_4$	608-40-2	-983,8	-978,1	-5,7	-967,4	-16,4
acide (-)-2,3-diméthylbutanedioïque	$C_6H_{10}O_4$	57694-62-9	-982,5	-978,1	-4,4	-967,4	-15,1
acide 2-éthylbutanedioïque	$C_6H_{10}O_4$	636-48-6	-989,2	-992,5	3,3	-979,5	-9,7
acide hexanedioïque	$C_6H_{10}O_4$	124-04-9	-994,3	-997,1	2,8	-991,6	-2,7
5-(1α,2β,3β,4α)-1,2,3,4-cyclohexènetétrol	$C_6H_{10}O_4$	526-87-4	-836,3	-760,4	-75,9	-836,0	-0,3
acide triméthylbutanedioïque	$C_7H_{12}O_4$	2103-16-4	-1000,8	-1002,9	2,1	-990,4	-10,4
acide heptanedioïque	$C_7H_{12}O_4$	111-16-0	-1009,4	-1007,5	-1,9	-1020,9	11,5
acide 1,2-benzènedicarboxylique	$C_8H_6O_4$	88-99-3	-782,0	-768,2	-13,8	-766,9	-15,1
acide 1,3-benzènedicarboxylique	$C_8H_6O_4$	121-91-5	-803,0	-806,7	3,7	-792,4	-10,6
acide 1,4-benzènedicarboxylique	$C_8H_6O_4$	100-21-0	-816,1	-800,7	-15,4	-792,4	-23,7
acide cis-cyclohexane-1,2-dicarboxylique	$C_8H_{12}O_4$	610-09-3	-961,1	-1003,0	41,9	-1003,4	42,3
acide trans-cyclohexane-1,2-dicarboxylique	$C_8H_{12}O_4$	2305-32-0	-970,7	-1003,0	32,3	-1003,4	32,7
acide tétraméthylbutanedioïque	$C_8H_{14}O_4$	630-51-3	-1012,4	-1013,1	0,7	-1013,4	1,0

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Cohen	
				$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
acide 2,2-diéthylbutanedioïque	$C_8H_{14}O_4$	5692-97-7	-1032,7	-1030,5	-2,2	-1026,7	-6,0
acide méso-2,3-diéthylbutanedioïque	$C_8H_{14}O_4$	35392-80-4	-1019,2	-1023,1	3,9	-1026,0	6,8
acide racémique-2,3-diéthylbutanedioïque	$C_8H_{14}O_4$	35392-77-9	-1026,3	-1023,1	-3,3	-1026,0	-0,3
acide octanedioïque	$C_8H_{14}O_4$	505-48-6	-1038,0	-1037,2	-0,8	-1050,2	12,2
acide 2-acétoxybenzoïque	$C_9H_8O_4$	50-78-2	-758,1	-746,9	-11,3	-720,8	-37,3
acide nonanedioïque	$C_9H_{16}O_4$	123-99-9	-1054,3	-1054,0	-0,3	-1079,5	25,2
acide phénylbutanedioïque	$C_{10}H_{10}O_4$	635-51-8	-841,0	-834,9	-6,1	-820,7	-20,3
2,4-diacétyl-1,3-benzènediol	$C_{10}H_{10}O_4$	2163-12-4	-753,5	-722,6	-30,9	-745,3	-8,2
4,6-diacétyl-1,3-benzènediol	$C_{10}H_{10}O_4$	2161-85-5	-776,5	-721,5	-55,1	-751,6	-24,9
acide 1,3-benzènedicarboxylique diméthyl ester	$C_{10}H_{10}O_4$	1459-93-4	-730,9	-706,6	-24,4	-731,4	0,5
acide 1,4-benzènedicarboxylique diméthyl ester	$C_{10}H_{10}O_4$	120-61-6	-732,6	-700,5	-32,1	-731,4	-1,2
1,2,3-propanetriol 1-benzoate	$C_{10}H_{12}O_4$	3376-59-8	-777,3	-779,3	2,0	-768,9	-8,4
1,2,3-propanetriol 2-benzoate	$C_{10}H_{12}O_4$		-772,8	-779,3	6,5	-768,9	-3,9
acide triéthylbutanedioïque	$C_{10}H_{18}O_4$	2103-18-6	-1066,3	-1074,3	8,0	-1069,8	3,5
acide décanedioïque	$C_{10}H_{18}O_4$	111-20-6	-1082,6	-1083,8	1,2	-1108,8	26,2
acide undécanedioïque	$C_{11}H_{20}O_4$	1852-04-6	-1099,4	-1100,5	1,1	-1138,1	38,7
acide tétraéthylsuccinique	$C_{12}H_{22}O_4$	4111-60-8	-1096,5	-1132,2	35,7	-1130,6	34,1
acide dodécanedioïque	$C_{12}H_{22}O_4$	693-23-2	-1130,0	-1130,3	0,3	-1167,4	37,4
acide tridécanedioïque	$C_{13}H_{24}O_4$	505-52-2	-1148,3	-1147,1	-1,2	-1196,7	48,4
1,2,3-propanetriol 1-décanoate	$C_{13}H_{26}O_4$	2277-23-8	-1109,0	-1096,3	-12,8	-1102,1	-6,9
1,2,3-propanetriol 2-décanoate	$C_{13}H_{26}O_4$	3376-48-5	-1095,7	-1096,3	0,6	-1102,1	6,4
acide oxalique diphényl ester	$C_{14}H_{10}O_4$	3155-16-6	-539,7	-534,1	-5,6	-535,2	-4,5
1,2,3-propanetriol 1-dodécanoate	$C_{15}H_{30}O_4$	142-18-7	-1160,9	-1155,8	-5,1	-1160,7	-0,2
1,2,3-propanetriol 2-dodécanoate	$C_{15}H_{30}O_4$	1678-45-1	-1152,6	-1155,8	3,2	-1160,7	8,1
acide méso-2,3-diphénylbutanedioïque	$C_{16}H_{14}O_4$	1225-13-4	-733,5	-738,3	4,8	-711,8	-21,7
acide racémique-2,3-diphénylbutanedioïque	$C_{16}H_{14}O_4$	7584-72-7	-740,1	-738,3	-1,8	-711,8	-28,3
(-)α-desmotroposantonin acétate	$C_{17}H_{20}O_4$	14794-71-9	-870,6	-875,6	5,0	-891,9	21,3
(+)β-desmotroposantonin acétate	$C_{17}H_{20}O_4$	14794-69-5	-879,2	-875,6	-3,7	-891,9	12,7

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Cohen	
				$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
1,2,3-propanetriol 1-tétradécanoate	$C_{17}H_{34}O_4$	589-68-4	-1222,6	-1215,3	-7,3	-1219,3	-3,3
1,2,3-propanetriol 2-tétradécanoate	$C_{17}H_{34}O_4$	3443-83-2	-1212,9	-1215,3	2,4	-1219,3	6,4
1,2,3-propanetriol 1-hexadécanoyl ester	$C_{19}H_{38}O_4$	542-44-9	-1281,5	-1274,8	-6,7	-1277,9	-3,6
1,2,3-propanetriol 2-hexadécanoyl ester	$C_{19}H_{38}O_4$	23470-00-0	-1268,7	-1274,8	6,1	-1277,9	9,2
acide 1,2-benzènedicarboxylique diphényl ester	$C_{20}H_{14}O_4$	84-62-8	-489,2	-501,4	12,2	-491,3	2,1
acide 1,2-benzènedicarboxylique dicyclohexyl ester	$C_{20}H_{26}O_4$	84-61-7	-931,4	-949,7	18,3	-922,7	-8,7
1,2,3-propanetriol 1-octadécanoyl ester	$C_{21}H_{42}O_4$	123-94-4	-1337,4	-1334,3	-3,1	-1336,5	-0,9
1,2,3-propanetriol 2-octadécanoyl ester	$C_{21}H_{42}O_4$	621-61-4	-1321,3	-1334,3	13,0	-1336,5	15,2
acide (R)-hydroxybutanedioïque	$C_4H_6O_5$	636-61-3	-1105,7	-1109,6	3,9	-1108,3	2,6
acide (S)-hydroxybutanedioïque	$C_4H_6O_5$	97-67-6	-1103,6	-1109,6	6,0	-1108,3	4,7
acide 2-oxopentanedioïque	$C_5H_6O_5$	328-50-7	-1026,2	-1026,2	0,0	-1026,3	0,1
α-D-xylose	$C_5H_{10}O_5$	31178-70-8	-1057,8	-1056,4	-1,4	-1060,7	2,9
D-ribose	$C_5H_{10}O_5$	50-69-1	-1051,1	-1046,9	-4,2	-	-
D-arabinose	$C_5H_{10}O_5$	10323-20-3	-1057,9	-1056,4	-1,5	-1060,7	2,8
xylitol	$C_5H_{12}O_5$	87-99-0	-1118,5	-1118,7	0,2	-1090,2	-28,3
1,2-anhydro-3,4,5,6-alloinositol	$C_6H_{10}O_5$	23559-36-6	-906,2	-849,4	-56,8	-906,4	0,2
2-(diacétoxyméthyl)furane	$C_9H_{10}O_5$	613-75-2	-882,1	-881,0	-1,1	-882,0	-0,1
benzoylcarboxypéroxyde phényl ester	$C_{14}H_{10}O_5$	962-16-3	-484,9	-340,3	-144,6	-506,4	21,5
benzoyl(cyclohexyloxy)carbonylpéroxyde	$C_{14}H_{16}O_5$	20666-86-8	-741,5	-539,7	-201,8	-722,1	-19,4
acide (E)-1-propène-1,2,3-tricarboxylique	$C_6H_6O_6$	4023-65-8	-1232,7	-848,2	-384,5	-1246,5	13,8
acide (Z)-1-propène-1,2,3-tricarboxylique	$C_6H_6O_6$	585-84-2	-1224,4	-848,2	-376,2	-1246,5	22,1
acide L-ascorbique	$C_6H_8O_6$	50-81-7	-1164,6	-1155,1	-9,5	-1164,3	-0,3
α-D-glucose	$C_6H_{12}O_6$	26655-34-5	-1273,3	-1278,1	4,8	-1274,1	0,8
L-sorbose	$C_6H_{12}O_6$	87-79-6	-1271,5	-1239,5	-32,1	-1263,0	-8,5
β-D-fructose	$C_6H_{12}O_6$	57-48-7	-1265,6	-1239,5	-26,2	-1263,0	-2,6
D-mannose	$C_6H_{12}O_6$	3458-28-4	-1263,0	-1267,3	4,3	-	-
α-D-galactose	$C_6H_{12}O_6$	3646-73-9	-1286,3	-1278,1	-8,2	1274,1	-12,2
D-mannitol	$C_6H_{14}O_6$	69-65-8	-1337,1	-1339,1	2,0	-1300,2	-36,9

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Cohen	
				$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
galactitol	$C_6H_{14}O_6$	608-66-2	-1346,7	-1339,1	-7,7	-1300,2	-46,5
α-D-méthylglucopyranoside	$C_7H_{14}O_6$	97-30-3	-1233,3	-1245,8	12,5	-1211,8	-21,5
β-D-méthylglucopyranoside	$C_7H_{14}O_6$	709-50-2	-1237,5	-1245,8	8,3	-1211,8	-25,7
acide 1,2,3-benzènetricarboxylique	$C_9H_6O_6$	569-51-7	-1160,3	-1162,3	2,0	-1156,5	-3,8
acide 1,2,4-benzènetricarboxylique	$C_9H_6O_6$	528-44-9	-1179,1	-1181,0	1,9	-1182,0	2,9
acide 1,3,5-benzènetricarboxylique	$C_9H_6O_6$	554-95-0	-1190,1	-1219,4	29,3	-1207,5	17,4
4-hydroxy-2H-pyran-3,3,5,5,(4H,6H)-tétraméthanol	$C_9H_{18}O_6$	4744-47-2	-1267,7	-1273,0	5,3	-1294,9	27,2
acide 1,3,5-benzènetricarboxylique triméthyl ester	$C_{12}H_{12}O_6$	2672-58-4	-1101,1	-1069,2	-31,9	-1116,0	14,9
acide péroxydicarbonique dicyclohexyl ester	$C_{14}H_{22}O_6$	1561-49-5	-1102,5	-889,9	-212,6	-1074,6	-27,9
acide 2-hydroxy-1,2,3-propanetricarboxylique	$C_6H_8O_7$	77-92-9	-1543,8	-1543,3	-0,5	-1487,7	-56,1
acide D-glutarique 1,4-lactone	$C_6H_8O_7$	389-36-6	-1435,8	-1437,3	1,5	-1431,8	-4,0
acide D-glutarique 3,6-lactone	$C_6H_8O_7$	2782-04-9	-1437,5	-1437,3	-0,2	-1431,8	-5,7
α-D-glucose hydrate	$C_6H_{14}O_7$	16824-90-1	-1572,2	-1574,1	1,9	-1565,9	-6,3
dipentaérythritol	$C_{10}H_{22}O_7$	126-58-9	-1572,3	-1572,7	0,4	-1512,4	-59,9
acide citrique monohydrate	$C_6H_{10}O_8$	5949-29-1	-1837,5	-1838,0	0,5	-1776,1	-61,4
acide 1,2,3,4-benzènetétracarboxylique	$C_{10}H_6O_8$	476-73-3	-1548,6	-1550,3	1,7	-1546,1	-2,5
acide 1,2,3,5-benzènetétracarboxylique	$C_{10}H_6O_8$	479-47-0	-1562,3	-1569,0	6,7	-1571,6	9,3
acide 1,2,4,5-benzènetétracarboxylique	$C_{10}H_6O_8$	89-05-4	-1570,8	-1549,2	-21,6	-1571,6	0,8
acide 1,2,4,5-benzènetétracarboxylique diméthyl ester	$C_{12}H_{10}O_8$	39900-53-3	-1475,5	-1488,7	13,2	-1510,6	35,1
acide 1,2,4,5-benzènetétracarboxylique tétraméthyl ester	$C_{14}H_{14}O_8$	635-10-9	-1432,5	-1428,2	-4,3	-1449,6	17,1
acide 1,2,4,5-benzènetétracarboxylique diéthyl ester	$C_{14}H_{14}O_8$	50853-29-7	-1589,8	-1533,8	-56,1	-1552,4	-37,4
acide 1,2,4,5-benzènetétracarboxylique dipropyl ester	$C_{16}H_{18}O_8$	56941-72-1	-1644,2	-1593,3	-50,9	-1611,0	-33,2
acide 1,2,4,5-benzènetétracarboxylique tétraéthyl ester	$C_{18}H_{22}O_8$	6634-01-1	-1579,6	-1518,3	-61,3	-1533,2	-46,4
acide benzènepentacarboxylique	$C_{11}H_6O_{10}$	1585-40-6	-1929,7	-1944,4	14,7	-1935,7	6,0
acide benzènepentacarboxylique pentaméthyl ester	$C_{16}H_{16}O_{10}$	3327-06-8	-1788,1	-1793,1	5,0	-1783,2	-4,9
D-sucrose	$C_{12}H_{22}O_{11}$	57-50-1	-2226,1	-2280,9	54,8	-2226,8	0,7
β-lactose	$C_{12}H_{22}O_{11}$	5965-66-2	-2236,7	-2238,7	2,0	-2234,4	-2,3
α-D-glucose 2,3,4,5,6-pentaacétate	$C_{16}H_{22}O_{11}$	3891-59-6	-2249,4	-2215,2	-34,2	-	-

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Cohen	
				$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
acide benzènehexacarboxylique	$C_{12}H_6O_{12}$	517-60-2	-2298,7	-2339,6	40,9	-2299,8	1,1
β-maltose monohydrate	$C_{12}H_{24}O_{12}$	6363-53-7	-2459,6	-2451,8	-7,8	-2526,2	66,6
α-lactose monohydrate	$C_{12}H_{24}O_{12}$	10639-26-6	-2484,1	-2489,4	5,3	-2618,2	134,1
acide benzènehexacarboxylique hexaméthyl ester	$C_{18}H_{18}O_{12}$	6237-59-8	-2110,8	-2158,1	47,3	-2116,8	6,0

Tableau IV-54 : Comparaison des enthalpies standard de formation en phase solide issues de la littérature avec les enthalpies représentées par la méthode développée et avec les enthalpies prévues par la méthode de Cohen, concernant 256 molécules contenant carbone, hydrogène et oxygène.

Les résultats d'évaluation d'enthalpies sont tous présentés dans ce qui suit.

Les résidus moyens et moyennes quadratiques calculés, exprimés en kilojoules par mole et en joules par gramme, sont rassemblés dans les tableaux IV-55 et IV-57. Les écarts extrêmes obtenus sont présentés dans les tableaux IV-56 et IV-58, accompagnés du nom des molécules auxquelles ces écarts sont liés. Enfin, les figures IV-5 et IV-6 représentent l'enthalpie standard de formation à l'état solide calculée par la méthode de contribution de groupes de Cohen en fonction de l'enthalpie standard de formation en phase solide issue de la littérature. Les incertitudes présentées pour chacun des points correspondent à l'incertitude expérimentale publiée dans la littérature.

Tous ces résultats sont à comparer à ceux obtenus grâce à la méthode développée dans cette étude et qui ont déjà été présentés (*cf.* paragraphe 1.2.2. b.).

a. Détail des résultats de prévision

✓ Composés C_xH_y

Les enthalpies standard de formation en phase solide de cent quarante-quatre molécules C_xH_y ont été calculées grâce à la méthode de Cohen. Seule l'enthalpie standard de formation du camphène [79-92-5] n'a pu être évaluée car la technique étudiée ne prévoit pas de valeur pour la contribution du groupe C_d-$(C)_2$.

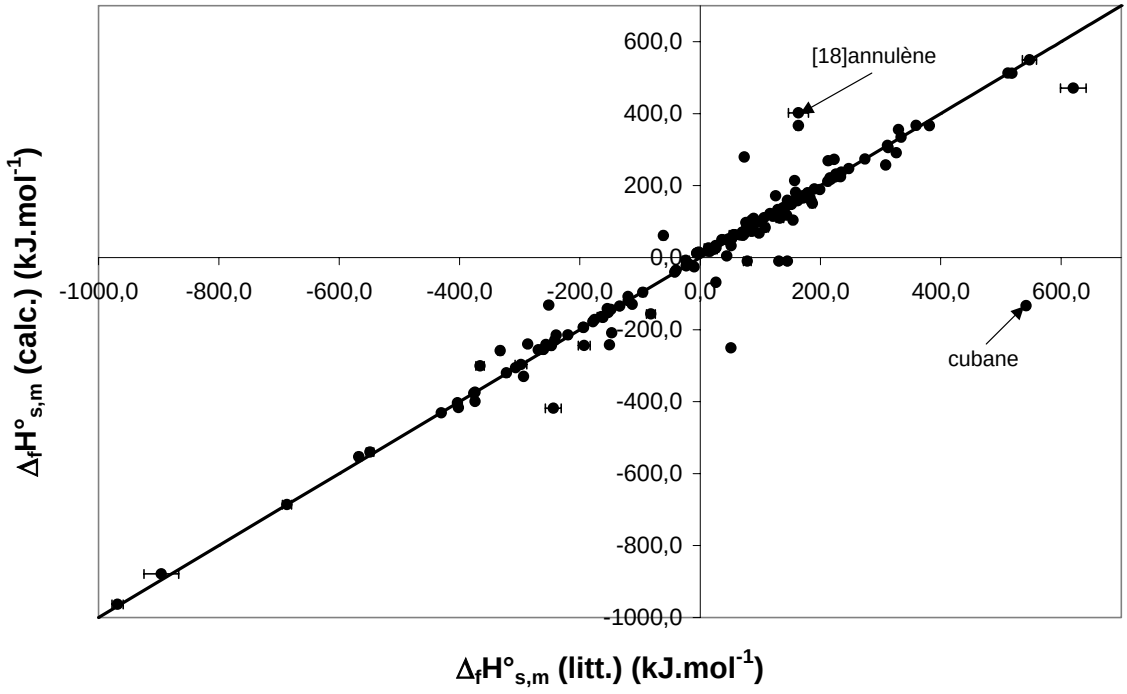
Les résultats d'évaluation sont regroupés ci-dessous. Ils doivent être comparés aux résultats de représentation obtenus par notre méthode qui ont d'ores et déjà été présentés dans les tableaux IV-13 et IV-14.

Méthode	***Salmon***		***Cohen***	
Unité	**Résidu moyen**	**Moyenne quadratique**	**Résidu moyen**	**Moyenne quadratique**
$kJ.mol^{-1}$	20,2	43,3	30,8	79,0
$J.g^{-1}$	95,5	219,5	163,4	600,4

<u>Tableau IV-55</u> : Comparaison avec la méthode de Cohen des résidus moyens et moyennes quadratiques obtenus sur le calcul des enthalpies standard de formation en phase solide de molécules C_xH_y.

Unité	**Ecart négatif le plus élevé (composé)**	**Ecart positif le plus élevé (composé)**
$kJ.mol^{-1}$	-239,0 ([18]annulène)	675,4 (cubane)
$J.g^{-1}$	-1019,9 ([18]annulène)	6484,9 (cubane)

<u>Tableau IV-56</u> : Ecarts extrêmes entre les enthalpies standard de formation en phase solide mesurées et prévues par la méthode de Cohen de 144 molécules C_xH_y.



<u>Figure IV-5</u> : Evaluation globale des résultats de prévision par la méthode de Cohen des enthalpies standard de formation en phase solide de 144 composés C_xH_y.

Dans tous les cas, on remarque que les estimations d'enthalpies standard de formation à l'état solide obtenues par la méthode de Cohen sont beaucoup moins satisfaisantes que les enthalpies standard de formation calculées grâce aux contributions de groupes déterminées dans cette étude. On retiendra notamment la moyenne quadratique particulièrement élevée qui a été calculée à partir des résultats obtenus grâce à la méthode de Cohen. Elle dépasse les 500 J.g^{-1} (objectif de précision fixé pour cette étude), empêchant ainsi d'effectuer des estimations fiables.

- ✓ Composés $C_xH_yO_z$

Deux cent quarante-huit enthalpies standard de formation en phase solide ont été évaluées grâce à la méthode de contribution de groupes de Cohen. Huit enthalpies n'ont donc pu être prévues par cette technique car quelques lacunes résident dans la banque de contributions de groupes déterminées : C_t-(H), C-(O)$(C_B)_2$(C), CO-(C)(H) et O-$(CO)_2$.

L'ensemble des résultats de prévision calculés grâce à la méthode de Cohen sont présentés dans ce qui suit. Ils doivent être comparés aux résultats de représentation figurant aux tableaux IV-15 et IV-16.

Méthode	*Salmon*		*Cohen*	
Unité	**Résidu moyen**	**Moyenne quadratique**	**Résidu moyen**	**Moyenne quadratique**
$kJ.mol^{-1}$	22,2	54,2	14,1	22,2
$J.g^{-1}$	131,8	335,3	78,9	130,9

Tableau IV-57 : Comparaison avec la méthode de Cohen des résidus moyens et moyennes quadratiques obtenus sur le calcul des enthalpies standard de formation en phase solide de molécules $C_xH_yO_z$.

Unité	**Ecart négatif le plus élevé (composé)**	**Ecart positif le plus élevé (composé)**
$kJ.mol^{-1}$	-108,2 (acide 3-pentynoïque)	134,1 (α-lactose monohydrate)
$J.g^{-1}$	-1103,0 (acide 3-pentynoïque)	372,2 (α-lactose monohydrate)

Tableau IV-58 : Ecarts extrêmes entre les enthalpies standard de formation en phase solide mesurées et prévues par la méthode de Cohen de 248 molécules $C_xH_yO_z$.

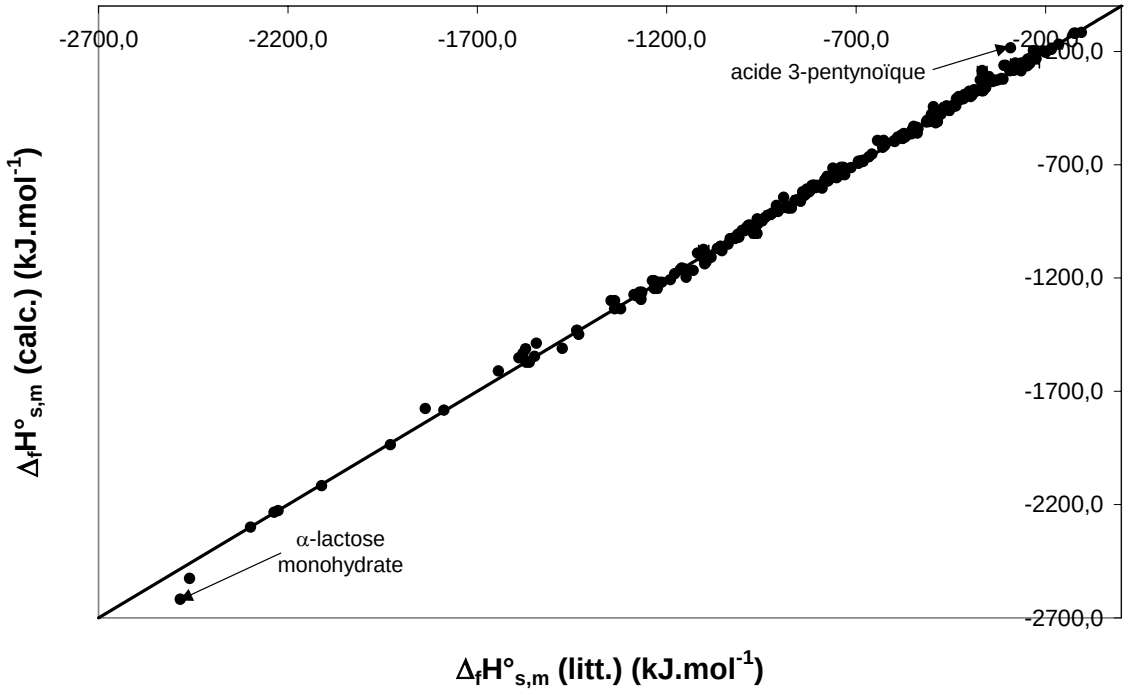


Figure IV-6 : Evaluation globale des résultats de prévision par la méthode de Cohen des enthalpies standard de formation en phase solide de 248 composés $C_xH_yO_z$.

On notera les bons résultats obtenus sur l'évaluation des enthalpies standard de formation en phase solide des composés oxygénés grâce à la méthode de Cohen. L'une des explications possibles de ces estimations tout à fait satisfaisantes est l'étude d'un très grand

nombre de molécules $C_xH_yO_z$ (soit quatre cent trente-huit molécules) ayant ensuite permis la détermination de l'ensemble des contributions de groupes C-H-O. Dans le cas de la présente étude, on rappelle que deux cent cinquante-six enthalpies standard de formation ont permis de calculer les contributions de groupes correspondantes. L'objectif essentiel étant l'évaluation d'enthalpies standard de formation à l'état solide de composés contenant de l'azote, on a fait le choix de privilégier ces derniers composés précisément. En effet, la détermination des valeurs de contributions de groupes C-H-O n'est pas le cœur du présent sujet. Par ailleurs, on remarquera que la méthode de Cohen comprend soixante-et-une corrections de structure C-H-O contre onze dans notre cas. Cela semble expliquer en grande partie la qualité des résultats prédictifs obtenus par Cohen en ce qui concerne les molécules oxygénées.

b. Conclusion

Au final, trois cent quatre-vingt-douze enthalpies standard de formation en phase solide sur les quatre cent unes contenues dans la liste complète ont pu être évaluées grâce aux contributions de groupes C-H et C-H-O établies par Cohen.

Les résidus moyens et moyennes quadratiques calculés pour chacune des deux méthodes de contribution de groupes sont regroupés dans le tableau ci-dessous :

Méthode	***Salmon***		***Cohen***	
Unité	**Résidu moyen**	**Moyenne quadratique**	**Résidu moyen**	**Moyenne quadratique**
$kJ.mol^{-1}$	21,5	50,6	20,2	51,0
$J.g^{-1}$	118,7	298,7	109,9	378,5

Tableau IV-59 : Comparaison avec la méthode de Cohen des résidus moyens et moyennes quadratiques obtenus sur le calcul des enthalpies standard de formation en phase solide de molécules C_xH_y et $C_xH_yO_z$.

Il apparaît que les résultats de représentation sont équivalents voire meilleurs que les résultats de prévision de Cohen. Les moyennes quadratiques obtenues grâce aux enthalpies standard de formation calculées au moyen des contributions de groupes présentées dans les tableaux IV-5 à IV-11 sont les plus satisfaisantes, en particulier lorsque cette moyenne est exprimée en joules par gramme.

Par ailleurs, si l'on élimine les composés pour lesquels un écart entre l'enthalpie standard de formation en phase solide mesurée et calculée est strictement supérieur à 20 $kJ.mol^{-1}$, les meilleurs résultats sont observés dans le cas de la méthode développée dans cette étude. En effet, 77% de la liste complète des molécules étudiées (309/401) permet d'obtenir un résidu moyen de 5,7 $kJ.mol^{-1}$ contre 74% (291/392) dans le cas de la méthode de Cohen avec un résidu moyen un peu plus élevé : 6,2 $kJ.mol^{-1}$.

3.1.2. Comparaison avec la méthode de Domalski et Hearing

Domalski et Hearing ont publiés les valeurs de contributions de groupes permettant l'évaluation d'enthalpies standard de formation en phase solide de composés contenant notamment les atomes de carbone, d'hydrogène, d'oxygène et d'azote (*cf.* paragraphe 2.5.1. du chapitre I). Nous avons employé ces contributions afin de calculer les enthalpies standard

de formation à l'état solide des molécules présentées dans les tableaux III-5 et IV-1 à IV-3. L'évaluation de ces enthalpies permet ainsi de comparer les résultats de représentation obtenus grâce à la méthode de contribution de groupes décrite dans cette étude avec les résultats de prévision calculés grâce à la méthode de Domalski et Hearing.

Les tableaux IV-60 à IV-63 regroupent l'ensemble des valeurs d'enthalpies standard de formation représentées par la méthode développée dans ce travail et celles calculées grâce à la méthode de Domalski et Hearing. L'annexe 13 présente des tableaux semblables dans lesquels tous les résultats sont convertis en joules par gramme.

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Domalski *et al.*	
				$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
2-norbornène	C_7H_{10}	498-66-8	52,9	160,6	-107,7	52,5	0,4
norbornane	C_7H_{12}	279-23-2	-95,1	-95,3	0,2	-102,0	6,9
cubane	C_8H_8	277-10-1	541,8	540,6	1,2	585,0	-43,2
bicyclo[2.2.2]oct-2-ène	C_8H_{12}	931-64-6	-23,3	-23,3	0,0	-23,3	0,0
bicyclo[2.2.2]octane	C_8H_{14}	280-33-1	-146,9	-146,9	0,0	-146,9	0,0
2,2,3,3-tétraméthylbutane	C_8H_{18}	594-82-1	-268,9	-250,8	-18,1	-268,9	0,0
7,7-diméthyl-bicyclo[2.2.1]heptane	C_9H_{16}	2034-53-9	-148,2	-150,1	1,9	-162,3	14,1
bicyclo[3.3.1]nonane	C_9H_{16}	280-65-9	-178,2	-178,2	0,0	-178,2	0,0
azulène	$C_{10}H_8$	275-51-4	212,3	186,1	26,2	-	-
naphtalène	$C_{10}H_8$	91-20-3	77,9	73,8	4,1	80,4	-2,5
1,2,4,5-tétraméthylbenzène	$C_{10}H_{14}$	95-93-2	-119,9	-110,0	-9,9	-104,3	-15,6
3a,4,5,6,7,7a-hexahydro-4,7-méthanoindène	$C_{10}H_{14}$	4488-57-7	-23,9	4,8	-28,7	-28,5	4,6
octahydro-4,7-méthano-1H-indène	$C_{10}H_{16}$	6004-38-2	-112,9	-110,3	-2,6	-109,4	-3,5
adamantane	$C_{10}H_{16}$	281-23-2	-194,1	-193,6	-0,5	-197,2	3,1
protoadamantane	$C_{10}H_{16}$	53130-19-1	-150,8	-136,2	-14,6	-144,5	-6,3
camphène	$C_{10}H_{16}$	79-92-5	-75,4	-82,4	7,0	-78,0	2,6
bicyclo[3.3.2]décane	$C_{10}H_{18}$	283-50-1	-164,2	-171,5	7,3	-247,2	83,0
2-méthylnaphtalène	$C_{11}H_{10}$	91-57-6	44,9	39,3	5,6	41,1	3,8
pentaméthylbenzène	$C_{11}H_{16}$	700-12-9	-133,6	-147,2	13,6	-129,7	-3,9
1-méthyladamantane	$C_{11}H_{18}$	768-91-2	-239,3	-236,4	-2,9	-229,8	-9,5
2-méthyladamantane	$C_{11}H_{18}$	700-56-1	-219,6	-210,9	-8,7	-222,9	3,3
bicyclo[3.3.3]undécane	$C_{11}H_{20}$	29415-95-0	-152,5	-152,5	0,0	-152,6	0,1
biphénylène	$C_{12}H_8$	259-79-0	334,0	334,0	0,0	120,4	213,6
acénaphtylène	$C_{12}H_8$	208-96-8	186,7	186,7	0,0	143,0	43,7
biphényle	$C_{12}H_{10}$	92-52-4	99,4	91,6	7,8	99,4	0,0
acénaphtène	$C_{12}H_{10}$	83-32-9	70,3	70,3	0,0	51,0	19,3

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Domalski *et al.*	
				$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
1,8-diméthylnaphtalène	$C_{12}H_{12}$	569-41-5	25,9	27,4	-1,5	1,7	24,2
2,3-diméthylnaphtalène	$C_{12}H_{12}$	581-40-8	-2,3	6,4	-8,7	6,7	-9,0
2,6-diméthylnaphtalène	$C_{12}H_{12}$	581-42-0	-5,7	-5,7	0,0	1,7	-7,4
2,7-diméthylnaphtalène	$C_{12}H_{12}$	582-16-1	-5,4	-5,4	0,0	1,7	-7,1
hexacyclo[6.2.1.1^{3,6}.0^{2,7}.0^{4,10}.0^{5,9}]dodécane	$C_{12}H_{14}$	704-02-9	51,1	58,4	-7,3	85,0	-33,9
hexaméthylbenzène	$C_{12}H_{18}$	87-85-4	-161,5	-178,4	16,9	-155,0	-6,5
(E,E,E)-1,5,9-cyclododécatriène	$C_{12}H_{18}$	676-22-2	26,6	180,3	-153,7	6,8	19,8
2,2,7,7-tétraméthylocta-3,5-diyne	$C_{12}H_{18}$	6130-98-9	156,1	237,1	-81,0	168,8	-12,7
2,2-diméthyladamantane	$C_{12}H_{20}$	19740-34-2	-256,3	-253,7	-2,6	-257,5	1,2
1,3-diméthyladamantane	$C_{12}H_{20}$	702-79-4	-286,4	-279,1	-7,3	-258,3	-28,1
cyclododécane	$C_{12}H_{24}$	294-62-2	-306,6	-306,6	0,0	-306,7	0,1
4-méthyl-1,1'-biphényle	$C_{13}H_{12}$	644-08-6	55,4	57,0	-1,6	60,0	-4,6
diphénylméthane	$C_{13}H_{12}$	101-81-5	71,5	57,3	14,2	71,7	-0,2
1,3,5-triméthyladamantane	$C_{13}H_{22}$	707-35-7	-332,3	-321,9	-10,4	-288,8	-43,5
diphényléthyne	$C_{14}H_{10}$	501-65-5	312,4	302,6	9,8	312,0	0,4
anthracène	$C_{14}H_{10}$	120-12-7	129,2	128,8	0,4	121,7	7,5
phénantrène	$C_{14}H_{10}$	85-01-8	116,2	114,9	1,3	117,5	-1,3
9,10-dihydro-anthracène	$C_{14}H_{12}$	613-31-0	66,4	56,3	10,1	65,0	1,4
(E)-stilbène	$C_{14}H_{12}$	103-30-0	136,9	146,6	-9,7	140,9	-4,0
4,4'-diméthylbiphényle	$C_{14}H_{14}$	613-33-2	14,1	22,5	-8,4	20,6	-6,5
bibenzyle	$C_{14}H_{14}$	103-29-7	51,5	42,7	8,8	48,9	2,6
1,4,5,8-tétraméthylnaphtalène	$C_{14}H_{16}$	2717-39-7	-18,2	-19,0	0,8	-77,0	58,8
1,2,3,4,5,6,7,8-octahydro-anthracène	$C_{14}H_{18}$	1079-71-6	-119,5	26,3	-145,8	-137,4	17,9
1,8-cyclotétradécadiyne	$C_{14}H_{20}$	1540-80-3	147,8	276,3	-128,5	112,5	35,3
diadamantane	$C_{14}H_{20}$	2292-79-7	-241,8	-220,1	-21,7	-158,7	-83,1
1,1,4,6,7-pentaméthylindane	$C_{14}H_{20}$	6682-67-3	-175,1	-174,0	-1,1	-189,3	14,2

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Domalski *et al.*	
				$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
trans-anti-trans-tétradécahydro-anthracène	$C_{14}H_{24}$	28071-99-0	-293,3	-318,3	25,0	-285,2	-8,1
1,3,5,7-tétraméthyladamantane	$C_{14}H_{24}$	1687-36-1	-365,8	-364,7	-1,1	-319,3	-46,5
cyclotétradécane	$C_{14}H_{28}$	295-17-0	-374,0	-374,0	0,0	-374,3	0,3
cis-1,4-Di-tert-butyl-cyclohexane	$C_{14}H_{28}$	4789-34-8	-374,1	-387,0	12,9	-400,9	26,8
trans-1,4-Di-tert-butyl-cyclohexane	$C_{14}H_{28}$	4789-35-9	-401,8	-387,0	-14,8	-400,9	-0,9
1,4-diméthyl-7-(1-méthyléthyl)-azulène	$C_{15}H_{18}$	489-84-9	61,1	298,7	-237,6	-	-
4-méthyldiadamantane	$C_{15}H_{22}$	30545-28-9	-261,5	-262,8	1,3	-193,2	-68,3
3-méthyldiadamantane	$C_{15}H_{22}$	28375-86-2	-260,4	-262,8	2,4	-193,2	-67,2
1-méthyldiadamantane	$C_{15}H_{22}$	26460-76-4	-247,4	-262,8	15,4	-193,2	-54,2
cyclopentadécane	$C_{15}H_{30}$	295-48-7	-376,1	-376,1	0,0	-376,1	0,0
1,1'-(1,3-butadiyne-1,4-diyl)bis-benzène	$C_{16}H_{10}$	886-66-8	518,4	518,4	0,0	518,6	-0,2
fluoranthène	$C_{16}H_{10}$	206-44-0	189,9	189,9	0,0	161,6	28,3
pyrène	$C_{16}H_{10}$	129-00-0	125,5	134,9	-9,4	125,6	-0,1
bis-(2-méthylphényl)-acétylène	$C_{16}H_{14}$	5294-03-1	234,8	236,9	-2,1	243,3	-8,5
Di-p-tolylacétylène	$C_{16}H_{14}$	2789-88-0	225,8	233,5	-7,7	233,3	-7,5
(Z,Z)-1,4-diphénylbutadiène	$C_{16}H_{14}$	5807-76-1	198,8	185,4	13,4	176,0	22,8
(E,E)-1,4-diphénylbutadiène	$C_{16}H_{14}$	538-81-8	178,8	181,0	-2,2	176,0	2,8
2,7-diméthylphénantrène	$C_{16}H_{14}$	1576-69-8	36,4	45,8	-9,4	38,8	-2,4
4,5-diméthylphénantrène	$C_{16}H_{14}$	3674-69-9	89,0	45,8	43,2	38,8	50,2
9,10-diméthylphénantrène	$C_{16}H_{14}$	604-83-1	47,6	47,5	0,2	43,8	3,8
1,1-Di-o-tolyléthylène	$C_{16}H_{16}$	2919-19-9	89,0	89,1	-0,1	109,4	-20,4
cis-1,2-Di-o-tolyléthène	$C_{16}H_{16}$	10311-74-7	85,9	80,9	5,0	72,2	13,7
trans-1,2-Di-o-tolyléthène	$C_{16}H_{16}$	36888-18-3	74,9	80,9	-6,0	72,2	2,7
1,1-Di-p-tolyléthylène	$C_{16}H_{16}$	2919-20-2	85,9	85,8	0,1	99,4	-13,5
(Z)-1,2-bis(4-méthylphényl)éthène	$C_{16}H_{16}$	2510-76-1	97,9	77,5	20,4	62,2	35,7
(E)-1,2-bis(4-méthylphényl)éthène	$C_{16}H_{16}$	18869-29-9	57,9	77,5	-19,6	62,2	-4,3

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Domalski *et al.*	
				$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
[2.2]métacyclophane	$C_{16}H_{16}$	2319-97-3	78,5	78,5	0,0	78,5	0,0
[2.2]paracyclophane	$C_{16}H_{16}$	1633-22-3	145,1	82,4	62,7	19,4	125,7
[2.2]métaparacyclophane	$C_{16}H_{16}$	5385-36-4	130,9	130,9	0,0	130,9	0,0
[16]annulène	$C_{16}H_{16}$	3332-38-5	547,5	547,5	0,0	280,5	267,0
1,2-Di-o-tolyléthane	$C_{16}H_{18}$	952-80-7	-40,0	-23,0	-17,0	-19,8	-20,2
1,2-Di-p-tolyléthane	$C_{16}H_{18}$	538-39-6	-42,1	-26,3	-15,8	-29,8	-12,3
1,4-diphénylbutane	$C_{16}H_{18}$	1083-56-3	-9,9	-16,8	6,9	-9,9	0,0
tricyclo[8.2.2.2^{4,7}]hexadécane	$C_{16}H_{28}$	283-68-1	-244,1	-244,1	0,0	-356,2	112,1
cyclohexadécane	$C_{16}H_{32}$	295-65-8	-403,4	-403,4	0,0	-403,4	0,0
cycloheptadécane	$C_{17}H_{34}$	295-97-6	-430,4	-430,4	0,0	-430,4	0,0
triphénylène	$C_{18}H_{12}$	217-59-4	151,8	142,0	9,8	150,4	1,4
chrysène	$C_{18}H_{12}$	218-01-9	145,3	155,9	-10,6	154,6	-9,3
benzo[c]phénantrène	$C_{18}H_{12}$	195-19-7	184,9	172,0	12,9	146,6	38,3
benzo[a]anthracène	$C_{18}H_{12}$	56-55-3	170,8	169,9	0,9	158,8	12,0
naphtacène	$C_{18}H_{12}$	92-24-0	158,8	183,9	-25,1	163,0	-4,2
5,12-dihydro-naphtacène	$C_{18}H_{14}$	959-02-4	106,4	111,3	-4,9	106,2	0,2
[18]annulène	$C_{18}H_{18}$	2040-73-5	163,4	163,4	0,0	315,5	-152,1
3,4,5,6-tétraméthylphénantrène	$C_{18}H_{18}$	7343-06-8	23,4	-20,0	43,4	-30,0	53,4
2,4,5,7-tétraméthylphénantrène	$C_{18}H_{18}$	7396-38-5	12,2	-23,3	35,5	-36,0	48,2
[3.3]paracyclophane	$C_{18}H_{20}$	2913-24-8	26,3	22,9	3,4	26,2	0,1
1,2,3,4,5,6,7,8,9,10,11,12-dodécahydro-triphénylène	$C_{18}H_{24}$	1610-39-5	-193,9	30,0	-223,9	-225,7	31,8
1,2,4-Tri-tert-butylbenzène	$C_{18}H_{30}$	1459-11-6	-251,6	-236,2	-15,4	-170,8	-80,8
1,3,5-Tri-tert-butylbenzène	$C_{18}H_{30}$	1460-02-2	-321,9	-308,2	-13,7	-327,8	5,9
octadécane	$C_{18}H_{38}$	593-45-3	-567,4	-551,2	-16,2	-564,0	-3,4
triphénylméthane	$C_{19}H_{16}$	519-73-3	171,2	168,2	3,0	174,1	-2,9
2,2',4,4',5,5'-hexaméthyldiphénylméthane	$C_{19}H_{24}$	4957-16-8	-154,4	-139,9	-14,5	-126,6	-27,8

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Domalski *et al.*	
				$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
pérylène	$C_{20}H_{12}$	198-55-0	182,8	162,0	20,8	158,4	24,4
9,10-dihydro-9,10[1',2']benzénoanthracène	$C_{20}H_{14}$	477-75-8	217,1	217,6	-0,5	230,7	-13,6
triphényléthylène	$C_{20}H_{16}$	58-72-0	233,4	226,6	6,8	226,2	7,2
5,8-diméthylbenzo[c]phénantrène	$C_{20}H_{16}$	54986-63-9	108,2	79,4	28,8	67,9	40,3
1,12-diméthylbenzo[c]phénantrène	$C_{20}H_{16}$	4076-43-1	154,5	79,4	75,1	67,9	86,6
3,9-diméthylbenz[a]anthracène	$C_{20}H_{16}$	316-51-8	76,2	100,8	-24,6	80,0	-3,8
1,12-diméthylbenz[a]anthracène	$C_{20}H_{16}$	313-74-6	139,0	100,8	38,2	80,0	59,0
9,10-diméthyl-1,2-benzanthracène	$C_{20}H_{16}$	57-97-6	143,8	106,8	37,0	80,0	63,8
5,6-diméthylchrysène	$C_{20}H_{16}$	3697-27-6	132,5	88,5	44,0	80,8	51,7
1,1,1-triphényléthane	$C_{20}H_{18}$	5271-39-6	157,2	159,0	-1,8	204,8	-47,6
1,1,2-triphényléthane	$C_{20}H_{18}$	1520-42-9	130,2	128,2	2,0	134,0	-3,8
1-(2-naphtalénylméthyl)naphtalène	$C_{21}H_{16}$	611-48-3	162,0	167,4	-5,4	154,2	7,8
1',2',3',4'-tétrahydro-1,2-dinaphtylméthane	$C_{21}H_{20}$	56818-06-5	44,1	119,2	-75,1	40,0	4,1
[1.8]paracyclophane	$C_{21}H_{26}$	6169-94-4	-81,9	-78,5	-3,4	-134,3	52,4
1,2,4,5-Tétra-tert-butylbenzène	$C_{22}H_{38}$	796-97-4	-297,9	-413,8	115,9	-444,1	146,2
tris(2-méthylphényl)éthylène	$C_{23}H_{22}$	62155-47-9	125,2	128,0	-2,8	123,1	2,1
tris(4-méthylphényl)éthylène	$C_{23}H_{22}$	6629-83-0	121,2	123,0	-1,8	108,1	13,1
1,1,2-Tri-o-tolyléthane	$C_{23}H_{24}$		24,4	29,6	-5,2	30,8	-6,4
1,1,2-Tri-p-tolyléthane	$C_{23}H_{24}$	27497-47-8	16,4	24,6	-8,2	15,8	0,6
1,3,5-triphénylbenzène	$C_{24}H_{18}$	612-71-5	224,6	237,2	-12,6	219,7	4,9
[6.6]paracyclophane	$C_{24}H_{32}$	4384-23-0	-192,7	-155,6	-37,1	-215,8	23,1
tétraphénylméthane	$C_{25}H_{20}$	630-76-2	247,1	241,2	5,9	251,1	-4,0
1,3,6-triphénylcycloheptatriène	$C_{25}H_{20}$	17760-68-8	273,9	336,5	-62,6	-	-
9,10-diphénylanthracène	$C_{26}H_{18}$	1499-10-1	308,7	280,5	28,2	303,9	4,8
tétraphényléthylène	$C_{26}H_{20}$	632-51-9	311,5	304,4	7,1	311,5	0,0
1,1,1,2-tétraphényléthane	$C_{26}H_{22}$	2294-94-2	223,0	217,9	5,1	280,4	-57,4

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Domalski *et al.*	
				$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
1,1,2,2-tétraphényléthane	$C_{26}H_{22}$	632-50-8	216,0	213,7	2,3	219,0	-3,0
3-phényléicosane	$C_{26}H_{46}$	2400-02-4	-548,8	-537,5	-11,3	-550,4	1,6
9,9'-bianthracène	$C_{28}H_{18}$	1055-23-8	326,2	325,2	1,0	326,2	0,0
9,9'-biphénanthryl	$C_{28}H_{18}$	20532-03-0	212,8	297,2	-84,4	204,4	8,4
1,1,4,4-tétraphényl-1,3-butadiène	$C_{28}H_{22}$	1450-63-1	329,9	341,0	-11,1	346,6	-16,7
1,2,3,4-tétraphényl-1,3-butadiène	$C_{28}H_{22}$	806-71-3	358,9	358,9	0,0	358,9	0,0
1,1,4,4-tétraphénylbutane	$C_{28}H_{26}$	1483-64-3	163,3	159,5	3,8	359,9	-196,6
tétra-p-tolyléthène	$C_{30}H_{28}$	5831-43-6	171,5	166,3	5,2	154,0	17,5
1,1,2,2-Tétra-p-tolyléthane	$C_{30}H_{30}$	40673-57-2	73,6	80,9	-7,3	261,2	-187,6
cyclotriacontane	$C_{30}H_{60}$	297-35-8	-895,7	-892,6	-3,1	-882,3	-13,4
13-phénylpentacosane	$C_{31}H_{56}$	6006-90-2	-687,0	-686,3	-0,7	-697,5	10,5
pentaphényléthane	$C_{32}H_{26}$	19112-42-6	381,2	303,4	77,8	365,4	15,8
dotriacontane	$C_{32}H_{66}$	544-85-4	-968,3	-967,8	-0,5	-975,8	7,5
hexaphényléthane	$C_{38}H_{30}$	17854-07-8	511,8	393,1	118,7	511,8	0,0
5,6,11,12-tétraphénylnaphtacène	$C_{42}H_{28}$	517-51-1	620,3	574,4	45,9	527,3	93,0

Tableau IV-60 : Comparaison des enthalpies standard de formation en phase solide issues de la littérature avec les enthalpies représentées par la méthode développée et avec les enthalpies prévues par la méthode de Domalski *et al.*, concernant 145 molécules contenant carbone et hydrogène.

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Domalski *et al.*	
				$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
phénol	C_6H_6O	108-95-2	-165,1	-178,2	13,1	-165,6	0,5
2-méthylphénol	C_7H_8O	95-48-7	-204,6	-212,7	8,1	-200,0	-4,6
4-méthylphénol	C_7H_8O	106-44-5	-199,3	-212,7	13,4	-205,0	5,7
4-éthylphénol	$C_8H_{10}O$	123-07-9	-224,4	-213,2	-11,2	-227,1	2,7
2,3-diméthylphénol	$C_8H_{10}O$	526-75-0	-241,2	-245,6	4,4	-232,3	-8,9
2,5-diméthylphénol	$C_8H_{10}O$	95-87-4	-246,6	-247,2	0,6	-237,3	-9,3
2,6-diméthylphénol	$C_8H_{10}O$	576-26-1	-237,4	-247,2	9,8	-232,3	-5,1
3,4-diméthylphénol	$C_8H_{10}O$	95-65-8	-242,3	-245,6	3,3	-237,3	-5,0
3,5-diméthylphénol	$C_8H_{10}O$	108-68-9	-244,4	-247,3	2,9	-238,3	-6,1
2-isopropylphénol	$C_9H_{12}O$	88-69-7	-246,6	-229,9	-16,7	-254,9	8,3
3-isopropylphénol	$C_9H_{12}O$	618-45-1	-263,0	-230,0	-33,0	-257,9	-5,1
4-isopropylphénol	$C_9H_{12}O$	99-89-8	-279,7	-230,0	-49,7	-259,9	-19,8
1-naphtol	$C_{10}H_8O$	90-15-3	-121,0	-123,2	2,2	-124,3	3,3
2-naphtol	$C_{10}H_8O$	135-19-3	-124,2	-123,2	-1,0	-124,3	0,1
1,2,3,4-tétrahydro-1-naphtol	$C_{10}H_{12}O$	529-33-9	-241,4	-177,4	-64,0	-	-
5,6,7,8-tétrahydro-1-naphtol	$C_{10}H_{12}O$	529-35-1	-285,3	-174,5	-110,8	-253,9	-31,4
2-isopropyl-5-méthylphénol	$C_{10}H_{14}O$	89-83-8	-280,3	-264,4	-15,9	-292,3	12,0
1-adamantanol	$C_{10}H_{16}O$	768-95-6	-397,6	-418,9	21,3	-403,1	5,5
2-adamantanol	$C_{10}H_{16}O$	700-57-2	-388,0	-385,5	-2,5	-396,5	8,5
exo-4-hydroxy-exo-exo-tétracyclo[6.2.1.1^{3,6}.0^{2,7}]dodécane	$C_{12}H_{18}O$	74007-11-7	-284,9	-282,6	-2,3	-297,7	12,8
exo-4-hydroxy-exo-endo-tétracyclo[6.2.1.1^{3,6}.0^{2,7}]dodécane	$C_{12}H_{18}O$	107133-43-7	-294,3	-282,6	-11,7	-297,7	3,4
exo-4-hydroxy-endo-endo-tétracyclo[6.2.1.1^{3,6}.0^{2,7}]dodécane	$C_{12}H_{18}O$	7273-98-5	-264,2	-282,6	18,4	-297,7	33,5
(1,1'-biphényl)méthanol	$C_{13}H_{12}O$	41376-19-6	-104,8	-121,7	16,9	-	-
1-tridécanol	$C_{13}H_{28}O$	112-70-9	-599,4	-593,6	-5,8	-602,9	3,5
1-diamantanol	$C_{14}H_{20}O$	30545-19-8	-428,8	-415,6	-13,2	-337,1	-91,7
3-diamantanol	$C_{14}H_{20}O$	30545-24-5	-413,8	-402,5	-11,3	-353,3	-60,5
4-diamantanol	$C_{14}H_{20}O$	30651-03-7	-434,9	-415,6	-19,3	-337,1	-97,8
1-tétradécanol	$C_{14}H_{30}O$	112-72-1	-629,6	-623,4	-6,2	-632,3	2,7

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Domalski *et al.*	
				$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
1-pentadécanol	$C_{15}H_{32}O$	629-76-5	-658,2	-653,1	-5,1	-661,7	3,5
1-hexadécanol	$C_{16}H_{34}O$	36653-82-4	-686,5	-682,9	-3,6	-691,1	4,6
3',5'-diisopropyl-4,4-diméthyl-3-phényl-1,2-benzocyclobutèn-3-ol	$C_{22}H_{28}O$	33574-16-2	-218,8	-214,6	-4,2	-	-
acide 3-butynoïque	$C_4H_4O_2$	2345-51-9	-241,8	-163,8	-78,0	-	-
acide 3-pentynoïque	$C_5H_6O_2$	36781-65-4	-292,3	-211,3	-81,0	-	-
cis-1,2-cyclopentanediol	$C_5H_{10}O_2$	5057-98-7	-485,1	-498,9	13,8	-511,7	26,6
trans-1,2-cyclopentanediol	$C_5H_{10}O_2$	5057-99-8	-490,1	-498,9	8,8	-511,7	21,6
2,2-diméthyl-1,3-propanediol	$C_5H_{12}O_2$	126-30-7	-551,2	-544,7	-6,5	-555,0	3,8
hydroquinone	$C_6H_6O_2$	123-31-9	-364,5	-369,2	4,7	-370,4	5,9
résorcinol	$C_6H_6O_2$	108-46-3	-368,0	-375,2	7,2	-368,4	0,4
1,6-hexanediol	$C_6H_{14}O_2$	629-11-8	-569,9	-576,5	6,6	-583,0	13,1
acide benzoïque	$C_7H_6O_2$	65-85-0	-385,2	-394,0	8,8	-386,4	1,2
2-hydroxy-2,4,6-cycloheptatrièn-1-one	$C_7H_6O_2$	533-75-5	-239,3	-109,9	-129,4	-	-
1-(2-hydroxyphényl)éthanone	$C_8H_8O_2$	118-93-4	-357,6	-351,3	-6,3	-349,4	-8,2
1-(3-hydroxyphényl)éthanone	$C_8H_8O_2$	121-71-1	-370,6	-370,0	-0,6	-352,4	-18,2
1-(4-hydroxyphényl)éthanone	$C_8H_8O_2$	99-93-4	-364,3	-370,0	5,7	-354,4	-9,9
acide 2-méthylbenzoïque	$C_8H_8O_2$	118-90-1	-416,5	-428,4	11,9	-420,7	4,2
acide 3-méthylbenzoïque	$C_8H_8O_2$	99-04-7	-426,1	-428,5	2,4	-423,7	-2,4
acide 4-méthylbenzoïque	$C_8H_8O_2$	99-94-5	-429,2	-428,5	-0,7	-425,7	-3,5
1,4-benzènediméthanol	$C_8H_{10}O_2$	589-29-7	-393,9	-401,7	7,8	-	-
2,5-diméthyl-3-hexyne-2,5-diol	$C_8H_{14}O_2$	142-30-3	-385,7	-294,4	-91,3	-	-
2,5-diméthyl-2,5-hexanediol	$C_8H_{18}O_2$	110-03-2	-681,7	-676,6	-5,1	-678,6	-3,1
acide (Z)-3-phényl-2-propénoïque	$C_9H_8O_2$	102-94-3	-312,1	-292,2	-19,9	-332,3	20,2
acide (E)-3-phényl-2-propénoïque	$C_9H_8O_2$	140-10-3	-336,9	-292,2	-44,7	-338,0	1,1
acide 2,3-diméthylbenzoïque	$C_9H_{10}O_2$	603-79-2	-450,4	-461,3	10,9	-453,1	2,7
acide 2,4-diméthylbenzoïque	$C_9H_{10}O_2$	611-01-8	-458,5	-463,0	4,5	-458,1	-0,4
acide 2,5-diméthylbenzoïque	$C_9H_{10}O_2$	610-72-0	-456,1	-463,0	6,9	-458,1	2,0
acide 2,6-diméthylbenzoïque	$C_9H_{10}O_2$	632-46-2	-440,7	-441,4	0,7	-453,1	12,4

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Domalski *et al.*	
				$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
acide 3,4-diméthylbenzoïque	$C_9H_{10}O_2$	619-04-5	-468,8	-461,4	-7,4	-458,1	-10,7
acide 3,5-diméthylbenzoïque	$C_9H_{10}O_2$	499-06-9	-466,4	-463,0	-3,4	-459,1	-7,3
acide 2-éthylbenzoïque	$C_9H_{10}O_2$	612-19-1	-441,3	-428,9	-12,4	-442,8	1,5
acide 3-éthylbenzoïque	$C_9H_{10}O_2$	619-20-5	-445,8	-428,9	-16,9	-445,8	0,0
acide 4-éthylbenzoïque	$C_9H_{10}O_2$	619-64-7	-460,7	-428,9	-31,8	-447,8	-12,9
2,6-diméthyl-2,6-heptanediol	$C_9H_{20}O_2$	6257-51-8	-761,1	-706,4	-54,7	-708,0	-53,1
2,7-naphtalènediol	$C_{10}H_8O_2$	582-17-2	-326,1	-326,1	0,0	-329,1	3,0
2,3-naphtalènediol	$C_{10}H_8O_2$	92-44-4	-316,4	-281,7	-34,7	-313,1	-3,3
acide 2,4-diméthylphénylacétique	$C_{10}H_{12}O_2$	6331-04-0	-495,8	-490,6	-5,2	-	-
acide 2,3,4-triméthylbenzoïque	$C_{10}H_{12}O_2$	1076-47-7	-486,6	-494,2	7,6	-485,5	-1,1
acide 2,3,5-triméthylbenzoïque	$C_{10}H_{12}O_2$	2437-66-3	-488,7	-495,8	7,1	-490,5	1,8
acide 2,3,6-triméthylbenzoïque	$C_{10}H_{12}O_2$	2529-36-4	-475,7	-474,3	-1,4	-485,5	9,8
acide 2,4,5-triméthylbenzoïque	$C_{10}H_{12}O_2$	528-90-5	-495,7	-495,8	0,1	-490,5	-5,2
acide 2,4,6-triméthylbenzoïque	$C_{10}H_{12}O_2$	480-63-7	-477,9	-475,9	-2,0	-488,5	10,6
acide 3,4,5-triméthylbenzoïque	$C_{10}H_{12}O_2$	1076-88-6	-500,9	-494,2	-6,7	-485,5	-15,4
2-hydroxy-4-isopropyl-2,4,6-cycloheptatrièn-1-one	$C_{10}H_{12}O_2$	499-44-5	-340,6	-106,6	-234,0	-	-
acide décanoïque	$C_{10}H_{20}O_2$	334-48-5	-713,7	-712,2	-1,5	-716,3	2,6
1,10-décanediol	$C_{10}H_{22}O_2$	112-47-0	-693,5	-695,5	2,0	-700,6	7,1
2,7-diméthyl-2,7-octanediol	$C_{10}H_{22}O_2$	19781-07-8	-730,0	-736,1	6,1	-737,4	7,4
acide 1-naphtalènecarboxylique	$C_{11}H_8O_2$	86-55-5	-333,5	-338,9	5,4	-345,1	11,6
acide 2-naphtalènecarboxylique	$C_{11}H_8O_2$	93-09-4	-346,1	-338,9	-7,2	-345,1	-1,0
acide 2,3,4,5-tétraméthylbenzoïque	$C_{11}H_{14}O_2$	2529-39-7	-514,4	-527,0	12,6	-515,8	1,4
acide 2,3,4,6-tétraméthylbenzoïque	$C_{11}H_{14}O_2$	2408-38-0	-507,7	-507,1	-0,6	-515,8	8,1
acide 2,3,5,6-tétraméthylbenzoïque	$C_{11}H_{14}O_2$	2604-45-7	-506,1	-507,1	1,0	-515,8	9,7
acide 3,5-diéthylbenzoïque	$C_{11}H_{14}O_2$	3854-90-8	-511,9	-463,9	-48,0	-503,3	-8,6
acide 2-tert-butylbenzoïque	$C_{11}H_{14}O_2$	1077-58-3	-476,2	-502,9	26,7	-505,7	29,5
acide 3-tert-butylbenzoïque	$C_{11}H_{14}O_2$	7498-54-6	-504,3	-502,9	-1,4	-508,7	4,4
acide 4-tert-butylbenzoïque	$C_{11}H_{14}O_2$	98-73-7	-502,9	-502,9	0,0	-510,7	7,8

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Domalski *et al.*	
				$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
acide adamantane-1-carboxylique	$C_{11}H_{16}O_2$	828-51-3	-643,1	-617,5	-25,6	-603,0	-40,2
acide adamantane-2-carboxylique	$C_{11}H_{16}O_2$	15897-81-1	-627,2	-617,5	-9,7	-603,0	-24,3
acide undécanoïque	$C_{11}H_{22}O_2$	112-37-8	-735,9	-742,0	6,1	-745,7	9,8
1-naphtyl acétate	$C_{12}H_{10}O_2$	830-81-9	-305,0	-297,8	-7,2	-295,4	-9,6
2-naphtyl acétate	$C_{12}H_{10}O_2$	1523-11-1	-309,6	-297,8	-11,8	-295,4	-14,2
acide 1-naphtalèneacétique	$C_{12}H_{10}O_2$	86-87-3	-359,2	-368,2	9,0	-	-
acide 2-naphtalèneacétique	$C_{12}H_{10}O_2$	581-96-4	-371,9	-368,2	-3,7	-	-
acide pentaméthylbenzoïque	$C_{12}H_{16}O_2$	2243-32-5	-536,1	-538,3	2,2	-541,2	5,1
3,6-diéthyloct-4-yne-3,6-diol	$C_{12}H_{22}O_2$	2044-37-3	-481,5	-410,8	-70,7	-	-
acide dodécanoïque	$C_{12}H_{24}O_2$	143-07-7	-774,6	-771,7	-2,9	-775,1	0,5
2,9-diméthyl-2,9-décanediol	$C_{12}H_{26}O_2$	22092-57-5	-789,6	-795,6	6,0	-796,2	6,6
acide phényl ester benzoïque	$C_{13}H_{10}O_2$	93-99-2	-241,6	-240,7	-0,9	-240,6	-1,1
acide 2-phénylbenzoïque	$C_{13}H_{10}O_2$	947-84-2	-349,1	-321,1	-28,0	-321,2	-27,9
acide tridécanoïque	$C_{13}H_{26}O_2$	638-53-9	-806,6	-801,5	-5,1	-804,5	-2,1
2,10-diméthyl-2,10-undécanediol	$C_{13}H_{28}O_2$	22092-58-6	-835,8	-825,4	-10,4	-825,6	-10,2
2-hydroxy-1,2-diphényléthanone	$C_{14}H_{12}O_2$	119-53-9	-247,7	-247,7	0,0	-	-
acide tétradécanoïque	$C_{14}H_{28}O_2$	544-63-8	-833,5	-831,2	-2,3	-833,9	0,4
2,11-diméthyl-2,11-dodécanediol	$C_{14}H_{30}O_2$	22092-59-7	-846,2	-855,2	9,0	-855,0	8,8
2,2'-bis(4-hydroxyphényl)propane	$C_{15}H_{16}O_2$	80-05-7	-368,6	-368,6	0,0	-365,8	-2,8
acide 3,5-Di-tert-butylbenzoïque	$C_{15}H_{22}O_2$	16225-26-6	-624,6	-611,9	-12,7	-629,0	4,4
acide pentadécanoïque	$C_{15}H_{30}O_2$	1002-84-2	-861,7	-861,0	-0,7	-863,3	1,6
acide hexadécanoïque	$C_{16}H_{32}O_2$	57-10-3	-891,5	-890,8	-0,7	-892,7	1,2
acide 2-naphtyl ester benzoïque	$C_{17}H_{12}O_2$	93-44-7	-184,8	-185,7	0,9	-199,3	14,5
acide heptadécanoïque	$C_{17}H_{34}O_2$	506-12-7	-924,4	-920,5	-3,9	-922,1	-2,3
acide octadécanoïque	$C_{18}H_{36}O_2$	57-11-4	-947,7	-950,3	2,6	-951,5	3,8
acide nonadécanoïque	$C_{19}H_{38}O_2$	646-30-0	-984,0	-980,0	-4,0	-981,0	-3,1
acide éicosanoïque	$C_{20}H_{40}O_2$	506-30-9	-1011,9	-1009,8	-2,1	-1010,4	-1,5
acide (E)-13-docosénoïque	$C_{22}H_{42}O_2$	506-33-2	-960,7	-887,8	-72,9	-949,3	-11,4

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Domalski *et al.*	
				$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
acide (S)-2-hydroxypropanoïque	$C_3H_6O_3$	79-33-4	-694,0	-681,4	-12,6	-698,9	4,9
acide furancarboxylique	$C_5H_4O_3$	26447-28-9	-498,4	-498,4	0,0	-	-
2-(hydroxyméthyl)-2-méthyl-1,3-propanediol	$C_5H_{12}O_3$	77-85-0	-744,6	-734,5	-10,1	-736,6	-8,0
2-éthyl-2-(hydroxyméthyl)-1,3-propanediol	$C_6H_{14}O_3$	77-99-6	-750,9	-764,3	13,4	-761,7	10,8
acide perbenzoïque	$C_7H_6O_3$	93-59-4	-367,0	-305,3	-61,7	-290,0	-77,0
acide salicylique	$C_7H_6O_3$	69-72-7	-589,9	-552,5	-37,4	-591,1	1,2
acide 3-(2-furanyl)-2-propénoïque	$C_7H_6O_3$	539-47-9	-459,0	-434,0	-25,0	-	-
3-hydroxy-4-méthoxy-benzaldéhyde	$C_8H_8O_3$	621-59-0	-453,4	-494,8	41,4	-492,3	38,9
2,4-dihydroxyacétophénone	$C_8H_8O_3$	89-84-9	-573,5	-548,3	-25,2	-552,2	-21,3
acide (R,S)-α-hydroxybenzèneacétique	$C_8H_8O_3$	611-72-3	-579,4	-574,1	-5,3	-	-
acide (S)-α-hydroxybenzèneacétique	$C_8H_8O_3$	17199-29-0	-580,6	-574,1	-6,5	-	-
acide 2-méthoxybenzoïque	$C_8H_8O_3$	579-75-9	-538,5	-538,8	0,3	-538,5	0,0
acide 3-méthoxybenzoïque	$C_8H_8O_3$	586-38-9	-553,5	-557,5	4,0	-556,5	3,0
acide 4-méthoxybenzoïque	$C_8H_8O_3$	100-09-4	-561,7	-557,5	-4,2	-561,5	-0,2
acide 3-hydroxy-2-naphtoïque	$C_{11}H_8O_3$	92-70-6	-547,8	-497,4	-50,4	-549,9	2,1
acide dodécanepéroxoïque	$C_{12}H_{24}O_3$	2388-12-7	-680,3	-683,1	2,8	-678,7	-1,6
phényl-2-hydroxybenzoate	$C_{13}H_{10}O_3$	118-55-8	-436,6	-419,0	-17,6	-440,3	3,7
diphényl carbonate	$C_{13}H_{10}O_3$	102-09-0	-401,2	-416,3	15,1	-395,7	-5,5
acide carbonique dicyclohexyl ester	$C_{13}H_{22}O_3$	4427-97-8	-830,2	-815,1	-15,1	-857,9	27,7
acide tétradécanepéroxoïque	$C_{14}H_{28}O_3$	19816-73-0	-749,9	-742,6	-7,3	-737,6	-12,4
acide 2-méthylbenzoïque anhydride	$C_{16}H_{14}O_3$	607-86-3	-533,5	-521,9	-11,6	-512,1	-21,4
acide 4-méthylbenzoïque anhydride	$C_{16}H_{14}O_3$	13222-85-0	-521,0	-522,0	1,0	-522,1	1,1
acide 1-méthyl-1-phényléthyl ester benzènecarbopéroxoïque	$C_{16}H_{16}O_3$	7074-00-2	-231,5	-231,5	0,0	-241,2	9,7
acide hexadécanepéroxoïque	$C_{16}H_{32}O_3$	7311-29-7	-801,9	-802,1	0,2	-796,4	-5,5
acide 3-phényl-2-propénoïque anhydride	$C_{18}H_{14}O_3$	538-56-7	-347,8	-249,5	-98,3	-346,7	-1,1
acide octadécanepéroxoïque	$C_{18}H_{36}O_3$	5796-86-1	-857,3	-861,6	4,3	-855,2	-2,1
acide oxalique	$C_2H_2O_4$	144-62-7	-821,7	-831,8	10,1	-805,9	-15,8
dioxybisméthanol	$C_2H_6O_4$	17088-73-2	-665,8	-716,4	50,6	-	-

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Domalski *et al.*	
				$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
acide malonique	$C_3H_4O_4$	141-82-2	-891,0	-890,5	-0,5	-890,6	-0,4
acide 2-butynedioïque	$C_4H_2O_4$	142-45-0	-577,4	-549,1	-28,3	-	-
3,4-dihydroxy-3-cyclobutène-1,2-dione	$C_4H_2O_4$	2892-51-5	-598,2	-598,2	0,0	-	-
acide (Z)-2-butènedioïque	$C_4H_4O_4$	110-16-7	-789,4	-731,1	-58,3	-811,1	21,7
acide (E)-2-butènedioïque	$C_4H_4O_4$	110-17-8	-811,7	-731,1	-80,6	-816,9	5,2
acide butanedioïque	$C_4H_6O_4$	110-15-6	-940,5	-947,3	6,8	-927,3	-13,2
acide éthanedioïque diméthyl ester	$C_4H_6O_4$	553-90-2	-756,3	-746,2	-10,1	-756,3	0,0
2(R),3(S)-1,2,3,4-butanetétrol	$C_4H_{10}O_4$	149-32-6	-910,4	-898,3	-12,1	-922,8	12,4
acide (E)-2-méthyl-2-butènedioïque	$C_5H_6O_4$	498-24-8	-824,4	-686,0	-138,4	-	-
acide méthylènebutanedioïque	$C_5H_6O_4$	97-65-4	-841,1	-497,9	-343,2	-	-
acide méthylbutanedioïque	$C_5H_8O_4$	498-21-5	-958,2	-962,7	4,5	-958,3	0,1
acide pentanedioïque	$C_5H_8O_4$	110-94-1	-960,0	-962,5	2,5	-956,7	-3,3
2,2-bis(hydroxyméthyl)-1,3-propanediol	$C_5H_{12}O_4$	115-77-5	-920,6	-924,4	3,8	-918,2	-2,4
acide 2,2-diméthylbutanedioïque	$C_6H_{10}O_4$	597-43-3	-987,8	-988,2	0,4	-977,6	-10,2
acide méso-2,3-diméthylbutanedioïque	$C_6H_{10}O_4$	608-39-9	-977,5	-978,1	0,6	-989,3	11,8
acide racémique-2,3-diméthylbutanedioïque	$C_6H_{10}O_4$	608-40-2	-983,8	-978,1	-5,7	-989,3	5,5
acide (-)-2,3-diméthylbutanedioïque	$C_6H_{10}O_4$	57694-62-9	-982,5	-978,1	-4,4	-989,3	6,8
acide 2-éthylbutanedioïque	$C_6H_{10}O_4$	636-48-6	-989,2	-992,5	3,3	-985,4	-3,8
acide hexanedioïque	$C_6H_{10}O_4$	124-04-9	-994,3	-997,1	2,8	-986,1	-8,2
5-(1α,2β,3β,4α)-1,2,3,4-cyclohexènetétrol	$C_6H_{10}O_4$	526-87-4	-836,3	-760,4	-75,9	-	-
acide triméthylbutanedioïque	$C_7H_{12}O_4$	2103-16-4	-1000,8	-1002,9	2,1	-1005,6	4,8
acide heptanedioïque	$C_7H_{12}O_4$	111-16-0	-1009,4	-1007,5	-1,9	-1015,5	6,1
acide 1,2-benzènedicarboxylique	$C_8H_6O_4$	88-99-3	-782,0	-768,2	-13,8	-777,7	-4,3
acide 1,3-benzènedicarboxylique	$C_8H_6O_4$	121-91-5	-803,0	-806,7	3,7	-798,7	-4,3
acide 1,4-benzènedicarboxylique	$C_8H_6O_4$	100-21-0	-816,1	-800,7	-15,4	-811,9	-4,2
acide cis-cyclohexane-1,2-dicarboxylique	$C_8H_{12}O_4$	610-09-3	-961,1	-1003,0	41,9	-998,5	37,4
acide trans-cyclohexane-1,2-dicarboxylique	$C_8H_{12}O_4$	2305-32-0	-970,7	-1003,0	32,3	-998,5	27,8
acide tétraméthylbutanedioïque	$C_8H_{14}O_4$	630-51-3	-1012,4	-1013,1	0,7	-1019,4	7,0

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Domalski *et al.*	
				$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
acide 2,2-diéthylbutanedioïque	$C_8H_{14}O_4$	5692-97-7	-1032,7	-1030,5	-2,2	-1027,7	-5,0
acide méso-2,3-diéthylbutanedioïque	$C_8H_{14}O_4$	35392-80-4	-1019,2	-1023,0	3,8	-1043,5	24,3
acide racémique-2,3-diéthylbutanedioïque	$C_8H_{14}O_4$	35392-77-9	-1026,3	-1023,0	-3,3	-1043,5	17,2
acide octanedioïque	$C_8H_{14}O_4$	505-48-6	-1038,0	-1037,2	-0,8	-1044,9	6,9
acide 2-acétoxybenzoïque	$C_9H_8O_4$	50-78-2	-758,1	-746,9	-11,3	-757,2	-0,9
acide nonanedioïque	$C_9H_{16}O_4$	123-99-9	-1054,3	-1054,0	-0,3	-1074,4	20,1
acide phénylbutanedioïque	$C_{10}H_{10}O_4$	635-51-8	-841,0	-834,9	-6,1	-838,0	-3,0
2,4-diacétyl-1,3-benzènediol	$C_{10}H_{10}O_4$	2163-12-4	-753,5	-722,6	-30,9	-729,0	-24,5
4,6-diacétyl-1,3-benzènediol	$C_{10}H_{10}O_4$	2161-85-5	-776,5	-721,4	-55,1	-734,0	-42,5
acide 1,3-benzènedicarboxylique diméthyl ester	$C_{10}H_{10}O_4$	1459-93-4	-730,9	-706,6	-24,3	-760,3	29,4
acide 1,4-benzènedicarboxylique diméthyl ester	$C_{10}H_{10}O_4$	120-61-6	-732,6	-700,5	-32,1	-762,3	29,7
1,2,3-propanetriol 1-benzoate	$C_{10}H_{12}O_4$	3376-59-8	-777,3	-779,3	2,0	-809,2	31,9
1,2,3-propanetriol 2-benzoate	$C_{10}H_{12}O_4$		-772,8	-779,3	6,5	-809,2	36,4
acide triéthylbutanedioïque	$C_{10}H_{18}O_4$	2103-18-6	-1066,3	-1074,3	8,0	-1085,8	19,5
acide décanedioïque	$C_{10}H_{18}O_4$	111-20-6	-1082,6	-1083,8	1,2	-1103,8	21,2
acide undécanedioïque	$C_{11}H_{20}O_4$	1852-04-6	-1099,4	-1100,5	1,1	-1133,2	33,8
acide tétraéthylsuccinique	$C_{12}H_{22}O_4$	4111-60-8	-1096,5	-1132,2	35,7	-1128,1	31,6
acide dodécanedioïque	$C_{12}H_{22}O_4$	693-23-2	-1130,0	-1130,3	0,3	-1162,6	32,6
acide tridécanedioïque	$C_{13}H_{24}O_4$	505-52-2	-1148,3	-1147,1	-1,2	-1192,0	43,7
1,2,3-propanetriol 1-décanoate	$C_{13}H_{26}O_4$	2277-23-8	-1109,0	-1096,3	-12,7	-1139,1	30,1
1,2,3-propanetriol 2-décanoate	$C_{13}H_{26}O_4$	3376-48-5	-1095,7	-1096,3	0,6	-1130,1	34,4
acide oxalique diphényl ester	$C_{14}H_{10}O_4$	3155-16-6	-539,7	-534,1	-5,6	-579,9	40,2
1,2,3-propanetriol 1-dodécanoate	$C_{15}H_{30}O_4$	142-18-7	-1160,9	-1155,8	-5,1	-1197,9	37,0
1,2,3-propanetriol 2-dodécanoate	$C_{15}H_{30}O_4$	1678-45-1	-1152,6	-1155,8	3,2	-1188,9	36,3
acide méso-2,3-diphénylbutanedioïque	$C_{16}H_{14}O_4$	1225-13-4	-733,5	-738,3	4,8	-748,8	15,3
acide racémique-2,3-diphénylbutanedioïque	$C_{16}H_{14}O_4$	7584-72-7	-740,1	-738,3	-1,8	-748,8	8,7
(-)α-desmotroposantonin acétate	$C_{17}H_{20}O_4$	14794-71-9	-870,6	-875,6	5,0	-	-
(+)β-desmotroposantonin acétate	$C_{17}H_{20}O_4$	14794-69-5	-879,2	-875,6	-3,6	-	-

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Domalski *et al.*	
				$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
1,2,3-propanetriol 1-tétradécanoate	$C_{17}H_{34}O_4$	589-68-4	-1222,6	-1215,3	-7,3	-1256,8	34,2
1,2,3-propanetriol 2-tétradécanoate	$C_{17}H_{34}O_4$	3443-83-2	-1212,9	-1215,3	2,4	-1247,8	34,9
1,2,3-propanetriol 1-hexadécanoyl ester	$C_{19}H_{38}O_4$	542-44-9	-1281,5	-1274,8	-6,7	-1315,6	34,1
1,2,3-propanetriol 2-hexadécanoyl ester	$C_{19}H_{38}O_4$	23470-00-0	-1268,7	-1274,8	6,1	-1306,6	37,9
acide 1,2-benzènedicarboxylique diphényl ester	$C_{20}H_{14}O_4$	84-62-8	-489,2	-501,4	12,2	-515,3	26,1
acide 1,2-benzènedicarboxylique dicyclohexyl ester	$C_{20}H_{26}O_4$	84-61-7	-931,4	-949,7	18,3	-998,0	66,6
1,2,3-propanetriol 1-octadécanoyl ester	$C_{21}H_{42}O_4$	123-94-4	-1337,4	-1334,3	-3,1	-1374,4	37,0
1,2,3-propanetriol 2-octadécanoyl ester	$C_{21}H_{42}O_4$	621-61-4	-1321,3	-1334,3	13,0	-1365,4	44,1
acide (R)-hydroxybutanedioïque	$C_4H_6O_5$	636-61-3	-1105,7	-1109,6	3,9	-1113,5	7,8
acide (S)-hydroxybutanedioïque	$C_4H_6O_5$	97-67-6	-1103,6	-1109,6	6,0	-1113,5	9,9
acide 2-oxopentanedioïque	$C_5H_6O_5$	328-50-7	-1026,2	-1026,2	0,0	-1035,3	9,1
α-D-xylose	$C_5H_{10}O_5$	31178-70-8	-1057,8	-1056,4	-1,4	-1089,6	31,8
D-ribose	$C_5H_{10}O_5$	50-69-1	-1051,1	-1046,9	-4,2	-	-
D-arabinose	$C_5H_{10}O_5$	10323-20-3	-1057,9	-1056,4	-1,5	-1089,6	31,7
xylitol	$C_5H_{12}O_5$	87-99-0	-1118,5	-1118,7	0,2	-1151,5	33,0
1,2-anhydro-3,4,5,6-alloinositol	$C_6H_{10}O_5$	23559-36-6	-906,2	-849,4	-56,8	-1063,8	157,6
2-(diacétoxyméthyl)furane	$C_9H_{10}O_5$	613-75-2	-882,1	-881,0	-1,1	-	-
benzoylcarboxypéroxyde phényl ester	$C_{14}H_{10}O_5$	962-16-3	-484,9	-340,3	-144,6	-524,6	39,7
benzoyl(cyclohexyloxy)carbonylpéroxyde	$C_{14}H_{16}O_5$	20666-86-8	-741,5	-539,7	-201,8	-755,6	14,1
acide (E)-1-propène-1,2,3-tricarboxylique	$C_6H_6O_6$	4023-65-8	-1232,7	-848,2	-384,5	-	-
acide (Z)-1-propène-1,2,3-tricarboxylique	$C_6H_6O_6$	585-84-2	-1224,4	-848,2	-376,2	-	-
acide L-ascorbique	$C_6H_8O_6$	50-81-7	-1164,6	-1155,1	-9,5	-	-
α-D-glucose	$C_6H_{12}O_6$	26655-34-5	-1273,3	-1278,1	4,8	-1303,8	30,5
L-sorbose	$C_6H_{12}O_6$	87-79-6	-1271,5	-1239,4	-32,1	-	-
β-D-fructose	$C_6H_{12}O_6$	57-48-7	-1265,6	-1239,4	-26,2	-	-
D-mannose	$C_6H_{12}O_6$	3458-28-4	-1263,0	-1267,2	4,2	-	-
α-D-galactose	$C_6H_{12}O_6$	3646-73-9	-1286,3	-1278,1	-8,2	-1309,3	23,0
D-mannitol	$C_6H_{14}O_6$	69-65-8	-1337,1	-1339,0	1,9	-1380,3	43,2

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Domalski *et al.*	
				$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
galactitol	$C_6H_{14}O_6$	608-66-2	-1346,7	-1339,0	-7,7	-1380,3	33,6
α-D-méthylglucopyranoside	$C_7H_{14}O_6$	97-30-3	-1233,3	-1245,8	12,5	-1275,4	42,1
β-D-méthylglucopyranoside	$C_7H_{14}O_6$	709-50-2	-1237,5	-1245,8	8,3	-1275,4	37,9
acide 1,2,3-benzènetricarboxylique	$C_9H_6O_6$	569-51-7	-1160,3	-1162,3	2,0	-1156,0	-4,3
acide 1,2,4-benzènetricarboxylique	$C_9H_6O_6$	528-44-9	-1179,1	-1181,0	1,9	-1190,1	11,0
acide 1,3,5-benzènetricarboxylique	$C_9H_6O_6$	554-95-0	-1190,1	-1219,4	29,3	-1198,0	7,9
4-hydroxy-2H-pyran-3,3,5,5,(4H,6H)-tétraméthanol	$C_9H_{18}O_6$	4744-47-2	-1267,7	-1273,0	5,3	-1318,6	50,9
acide 1,3,5-benzènetricarboxylique triméthyl ester	$C_{12}H_{12}O_6$	2672-58-4	-1101,1	-1069,2	-31,9	-1157,0	55,9
acide péroxydicarbonique dicyclohexyl ester	$C_{14}H_{22}O_6$	1561-49-5	-1102,5	-889,9	-212,6	-1141,9	39,4
acide 2-hydroxy-1,2,3-propanetricarboxylique	$C_6H_8O_7$	77-92-9	-1543,8	-1543,3	-0,5	-	-
acide D-glutarique 1,4-lactone	$C_6H_8O_7$	389-36-6	-1435,8	-1437,3	1,5	-1476,9	41,1
acide D-glutarique 3,6-lactone	$C_6H_8O_7$	2782-04-9	-1437,5	-1437,3	-0,2	-1476,9	39,4
α-D-glucose hydrate	$C_6H_{14}O_7$	16824-90-1	-1572,2	-1574,1	1,9	-	-
dipentaérythritol	$C_{10}H_{22}O_7$	126-58-9	-1572,3	-1572,7	0,4	-1556,0	-16,3
acide citrique monohydrate	$C_6H_{10}O_8$	5949-29-1	-1837,5	-1838,0	0,5	-	-
acide 1,2,3,4-benzènetétracarboxylique	$C_{10}H_6O_8$	476-73-3	-1548,6	-1550,3	1,7	-1534,2	-14,4
acide 1,2,3,5-benzènetétracarboxylique	$C_{10}H_6O_8$	479-47-0	-1562,3	-1569,0	6,7	-1555,2	-7,1
acide 1,2,4,5-benzènetétracarboxylique	$C_{10}H_6O_8$	89-05-4	-1570,8	-1549,2	-21,6	-1568,4	-2,4
acide 1,2,4,5-benzènetétracarboxylique diméthyl ester	$C_{12}H_{10}O_8$	39900-53-3	-1475,5	-1488,7	13,2	-1599,3	123,8
acide 1,2,4,5-benzènetétracarboxylique tétraméthyl ester	$C_{14}H_{14}O_8$	635-10-9	-1432,5	-1428,2	-4,3	-1549,7	117,2
acide 1,2,4,5-benzènetétracarboxylique diéthyl ester	$C_{14}H_{14}O_8$	50853-29-7	-1589,8	-1533,8	-56,0	-1665,3	75,5
acide 1,2,4,5-benzènetétracarboxylique dipropyl ester	$C_{16}H_{18}O_8$	56941-72-1	-1644,2	-1593,3	-50,9	-1724,1	79,9
acide 1,2,4,5-benzènetétracarboxylique tétraéthyl ester	$C_{18}H_{22}O_8$	6634-01-1	-1579,6	-1518,3	-61,3	-1681,7	102,1
acide benzènepentacarboxylique	$C_{11}H_6O_{10}$	1585-40-6	-1929,7	-1944,4	14,7	-1899,4	-30,3
acide benzènepentacarboxylique pentaméthyl ester	$C_{16}H_{16}O_{10}$	3327-06-8	-1788,1	-1793,1	5,0	-1936,4	148,3
D-sucrose	$C_{12}H_{22}O_{11}$	57-50-1	-2226,1	-2280,9	54,8	-2328,4	102,3
β-lactose	$C_{12}H_{22}O_{11}$	5965-66-2	-2236,7	-2238,7	2,0	-2329,3	92,6
α-D-glucose 2,3,4,5,6-pentaacétate	$C_{16}H_{22}O_{11}$	3891-59-6	-2249,4	-2215,2	-34,2	-2338,7	89,3

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Domalski *et al.*	
				$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
acide benzènehexacarboxylique	$C_{12}H_6O_{12}$	517-60-2	-2298,7	-2339,6	40,9	-2230,3	-68,4
β-maltose monohydrate	$C_{12}H_{24}O_{12}$	6363-53-7	-2459,6	-2451,8	-7,8	-	-
α-lactose monohydrate	$C_{12}H_{24}O_{12}$	10639-26-6	-2484,1	-2489,4	5,3	-	-
acide benzènehexacarboxylique hexaméthyl ester	$C_{18}H_{18}O_{12}$	6237-59-8	-2110,8	-2158,1	47,3	-2323,1	212,3

Tableau IV-61 : Comparaison des enthalpies standard de formation en phase solide issues de la littérature avec les enthalpies représentées par la méthode développée et avec les enthalpies prévues par la méthode de Domalski *et al.*, concernant 256 molécules contenant carbone, hydrogène et oxygène.

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Domalski *et al.*	
				$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
méthanetétracarbonitrile	C_5N_4	24331-09-7	611,6	611,6	0,0	-	-
éthènetétracarbonitrile	C_6N_4	670-54-2	623,8	503,4	120,4	-	-
quinuclidine	$C_7H_{13}N$	100-76-5	-55,0	-55,0	0,0	-95,2	40,2
indole	C_8H_7N	120-72-9	86,7	86,7	0,0	-	-
endo-bicyclo[2.2.1]heptane-2-carbonitrile	$C_8H_{11}N$	3211-87-8	20,3	20,3	0,0	29,5	-9,2
3-azabicyclo[3.2.2]nonane	$C_8H_{15}N$	283-24-9	-101,5	-171,4	69,9	-149,8	48,3
3-éthyl-2,4,5-triméthyl-1H-pyrrole	$C_9H_{15}N$	520-69-4	-89,2	-89,2	0,0	-142,9	53,7
1-naphtylamine	$C_{10}H_9N$	134-32-7	67,7	63,7	4,0	62,1	5,6
2-naphtylamine	$C_{10}H_9N$	91-59-8	59,7	63,7	-4,0	62,1	-2,4
1-phényl-1H-pyrrole	$C_{10}H_9N$	635-90-5	154,3	154,3	0,0	-	-
2-phényl-1H-pyrrole	$C_{10}H_9N$	3042-22-6	139,2	139,2	0,0	-	-
2,3-diméthyl-1H-indole	$C_{10}H_{11}N$	91-55-4	4,2	-55,5	59,7	-	-
9H-carbazole	$C_{12}H_9N$	86-74-8	101,7	20,8	80,9	151,2	-49,5
2-aminobiphényle	$C_{12}H_{11}N$	90-41-5	93,8	81,6	12,2	86,0	7,8
4-aminobiphényle	$C_{12}H_{11}N$	92-67-1	81,0	81,5	-0,5	81,0	0,0

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Domalski *et al.*	
				$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
diphénylamine	$C_{12}H_{11}N$	122-39-4	130,2	79,8	50,4	130,2	0,0
acridine	$C_{13}H_9N$	260-94-6	179,4	176,4	3,0	-	-
biphényl-2-carbonitrile	$C_{13}H_9N$	24973-49-7	232,7	219,5	13,2	219,0	13,7
6,7-benzoquinoline	$C_{13}H_9N$	260-36-6	148,9	156,7	-7,8	-	-
benzo[f]quinoline	$C_{13}H_9N$	85-02-9	150,6	142,8	7,8	-	-
benzo[h]quinoline	$C_{13}H_9N$	230-27-3	160,2	160,2	0,0	-	-
p-benzylidèneaniline	$C_{13}H_{11}N$	538-51-2	185,0	174,9	10,1	-	-
9-méthyl-9H-carbazole	$C_{13}H_{11}N$	1484-12-4	105,5	105,5	0,0	148,4	-42,9
4-méthyldiphénylamine	$C_{13}H_{13}N$	620-84-8	48,9	45,3	3,6	90,8	-41,9
4,4'-diméthyldiphénylamine	$C_{14}H_{15}N$	620-93-9	-11,6	10,7	-22,3	51,5	-63,1
N-phényl-2-naphtylamine	$C_{16}H_{13}N$	135-88-6	159,9	134,8	25,1	171,5	-11,6
5-méthyl-5H-indéno[2,1-b]quinoline	$C_{17}H_{13}N$	6626-64-8	205,4	205,4	0,0	-	-
N-benzyldiphénylamine	$C_{19}H_{17}N$	606-87-1	184,7	148,6	36,1	96,7	88,1
tribenzylamine	$C_{21}H_{21}N$	620-40-6	140,7	32,5	108,2	-131,4	272,1
cyanamide	CH_2N_2	420-04-2	58,8	58,8	0,0	-	-
malononitrile	$C_3H_2N_2$	109-77-3	187,9	187,9	0,0	-	-
1H-pyrazole	$C_3H_4N_2$	288-13-1	105,4	44,2	61,2	-	-
1H-imidazole	$C_3H_4N_2$	288-32-4	49,8	129,9	-80,1	-	-
(E)-butènedinitrile	$C_4H_2N_2$	764-42-1	268,2	268,2	0,0	-	-
pyrazine	$C_4H_4N_2$	290-37-9	139,8	139,8	0,0	140,1	-0,3
succinonitrile	$C_4H_4N_2$	110-61-2	139,7	173,5	-33,8	139,7	0,0
pipérazine	$C_4H_{10}N_2$	110-85-0	-41,8	-151,7	109,9	-40,4	-1,4
2,3-diazabicyclo[2.2.1]hept-2-ène	$C_5H_8N_2$	2721-32-6	152,0	152,0	0,0	-	-
3-pyridinecarbonitrile	$C_6H_4N_2$	100-54-9	205,8	205,5	0,3	204,3	1,5
2-butyne-1,4-dicarbonitrile	$C_6H_4N_2$		366,8	366,8	0,0	-	-
1,4-benzènediamine	$C_6H_8N_2$	106-50-3	3,1	4,7	-1,6	2,4	0,7
1,2-benzènediamine	$C_6H_8N_2$	95-54-5	39,1	17,3	21,8	-0,6	39,7
1,3-benzènediamine	$C_6H_8N_2$	108-45-2	-7,8	-1,4	-6,4	-7,6	-0,2

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Domalski *et al.*	
				$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
triéthylènediamine	$C_6H_{12}N_2$	280-57-9	28,2	28,2	0,0	-2,0	30,2
tétraméthyldiazétine	$C_6H_{12}N_2$	54166-22-2	88,0	88,0	0,0	31,1	56,9
3,3,5,5-tétraméthyl-1-pyrazoline	$C_7H_{14}N_2$	2721-31-5	-22,4	-22,4	0,0	-22,3	-0,1
phtalonitrile	$C_8H_4N_2$	91-15-6	280,6	273,3	7,3	273,5	7,1
1,3-benzènedicarbonitrile	$C_8H_4N_2$	626-17-5	272,5	274,5	-2,0	270,5	2,0
1,4-benzènedicarbonitrile	$C_8H_4N_2$	623-26-7	268,5	280,5	-12,0	268,5	0,0
tétraméthylbutanedinitrile	$C_8H_{12}N_2$	3333-52-6	14,9	14,9	0,0	-57,9	72,8
1,4-diméthyl-2,3-diaza-bicyclo[2.2.2]oct-2-ène	$C_8H_{14}N_2$	49570-30-1	20,4	20,4	0,0	11,4	9,0
Di-2-pyrrolylméthane	$C_9H_{10}N_2$	21211-65-4	126,2	141,8	-15,6	69,7	56,5
phénazine	$C_{12}H_8N_2$	92-82-0	243,9	223,9	20,0	-	-
benzo[c]cinnoline	$C_{12}H_8N_2$	230-17-1	295,1	295,1	0,0	-	-
(E)-azobenzène	$C_{12}H_{10}N_2$	17082-12-1	308,6	334,6	-26,0	308,6	0,0
(Z)-azobenzène	$C_{12}H_{10}N_2$	1080-16-6	357,7	334,6	23,1	357,7	0,0
1,2-diphénylhydrazine	$C_{12}H_{12}N_2$	122-66-7	221,3	183,3	38,0	218,6	2,7
4,4'-diaminobiphényle	$C_{12}H_{12}N_2$	92-87-5	70,7	71,5	-0,8	62,6	8,1
2,2',5,5'-tétraméthyl-1,1'-bipyrrole	$C_{12}H_{16}N_2$	10507-71-8	132,3	-55,4	187,7	-	-
9-aminoacridine	$C_{13}H_{10}N_2$	90-45-9	159,2	159,1	0,1	-	-
2-aminoacridine	$C_{13}H_{10}N_2$	581-28-2	166,4	166,3	0,1	-	-
N,N'-dibenzylidène-hydrazine	$C_{14}H_{12}N_2$	588-68-1	339,3	26,8	312,5	-	-
dibenzylidène-1,2-éthylènediamine	$C_{16}H_{16}N_2$	104-71-2	271,4	-117,2	388,6	-	-
tétraphénylhydrazine	$C_{24}H_{20}N_2$	632-52-0	457,9	457,9	0,0	444,3	13,6
guanidine	CH_5N_3	113-00-8	-56,0	-185,3	129,3	-	-
éthylènetricarbonitrile	C_5HN_3	997-76-2	439,3	439,3	0,0	-	-
1,1,1-éthanetricarbonitrile	$C_5H_3N_3$	10359-20-3	348,6	348,6	0,0	-	-
2,6-pyridinediamine	$C_5H_7N_3$	141-86-6	-6,5	-24,7	18,2	42,9	-49,4
1H-benzotriazole	$C_6H_5N_3$	95-14-7	236,5	220,4	16,1	-	-
1,1,1-tricyano-3-butyne	$C_7H_3N_3$	10359-26-9	605,7	605,7	0,0	-	-
pyridinium dicyanométhylide	$C_8H_5N_3$	27032-01-5	397,9	397,9	0,0	-	-

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Domalski *et al.*	
				$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
1H-naphto[2,3-d]triazole	$C_{10}H_7N_3$	269-12-5	274,2	275,4	-1,2	-	-
1H-naphto[1,2-d]triazole	$C_{10}H_7N_3$	233-59-0	260,5	275,4	-14,9	-	-
1,3-diphényltriazène	$C_{12}H_{11}N_3$	136-35-6	331,6	331,6	0,0	-	-
3,6-diaminoacridine	$C_{13}H_{11}N_3$	92-62-6	127,2	156,2	-29,0	-	-
1H-tétrazole	CH_2N_4	288-94-8	236,0	238,5	-2,5	-	-
dicyandiamide	$C_2H_4N_4$	461-58-5	21,3	-108,0	129,3	-	-
1H-1,2,4-triazole-3-amine	$C_2H_4N_4$	61-82-5	76,8	63,6	13,2	-	-
1,5-diméthyltétrazole	$C_3H_6N_4$	5144-11-6	186,2	179,6	6,6	-	-
hexaméthylènetétramine	$C_6H_{12}N_4$	100-97-0	124,1	85,1	39,0	248,0	-123,9
1,1,2,2-cyclopropane-tétracarbonitrile	$C_7H_2N_4$	2424-32-0	591,7	591,7	0,0	-	-
1-phényl-1H-tétrazole	$C_7H_6N_4$	5378-52-9	344,8	348,9	-4,1	-	-
5-phényl-1H-tétrazole	$C_7H_6N_4$	18039-42-4	298,0	296,7	1,3	-	-
1-phényl-5-méthyl-1H-tétrazole	$C_8H_8N_4$	14213-16-2	289,5	289,5	0,0	-	-
1-méthyl-5-phényl-1H-tétrazole	$C_8H_8N_4$	20743-50-4	292,4	293,5	-1,1	-	-
2-phényl-5-méthyl-2H-tétrazole	$C_8H_8N_4$	22706-20-3	274,8	274,8	0,0	-	-
2,2'-azo-bis-isobutyronitrile	$C_8H_{12}N_4$	78-67-1	246,0	246,0	0,0	-	-
1,2-bis(2-cyano-2-propyl)-hydrazine	$C_8H_{14}N_4$	6869-07-4	119,6	119,6	0,0	-	-
1,4,8,11-tétraazacyclotétradécane	$C_{10}H_{24}N_4$	295-37-4	-115,9	-395,7	279,8	-139,6	23,7
bicyclo[2.2.1]hept-5-ène-2,2,3,3-tétracarbonitrile	$C_{11}H_6N_4$	6343-21-1	622,8	622,8	0,0	-	-
3-méthyl-4-cyclohexène-1,1,2,2-tétracarbonitrile	$C_{11}H_8N_4$	13358-02-6	514,7	514,7	0,0	-	-
tétracyano-p-quinodiméthane	$C_{12}H_4N_4$	1518-16-7	666,1	639,9	26,2	-	-
bicyclo[2.2.2]oct-5-ène-2,2,3,3-tétracarbonitrile	$C_{12}H_8N_4$	1017-93-2	576,1	579,9	-3,8	-	-
4,5-diméthyl-4-cyclohexène-1,1,2,2-tétracarbonitrile	$C_{12}H_{10}N_4$	69155-29-9	472,4	472,4	0,0	-	-
1,3-diphényl-1-tétrazène	$C_{12}H_{12}N_4$	35364-31-9	412,1	371,0	41,1	-	-
1,5-diphényl-1H-tétrazole	$C_{13}H_{10}N_4$	7477-73-8	406,9	407,1	-0,2	-	-
2,5-diphényl-2H-tétrazole	$C_{13}H_{10}N_4$	18039-45-7	395,3	364,3	31,0	-	-
1,5-diphénylformazane	$C_{13}H_{12}N_4$	1885-34-3	457,9	457,9	0,0	-	-
1,3,5-triphénylformazane	$C_{19}H_{16}N_4$	531-52-2	543,1	543,1	0,0	-	-

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Domalski *et al.*	
				$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
9,10-dihydro-9,10-éthanoanthracène-11,11,12,12-tétracarbonitrile	$C_{20}H_{10}N_4$	1625-84-9	712,5	708,7	3,8	-	-
21H,23H-porphine	$C_{20}H_{14}N_4$	101-60-0	-1106,9	-1106,9	0,0	-	-
2,7,12,17-tétraéthyl-3,8,13,18-tétraméthyl-21H,23H-porphine	$C_{32}H_{38}N_4$	448-71-5	-25,2	-11,8	-13,4	-	-
2,8,12,18-tétraéthyl-3,7,13,18-tétraméthyl-21H,23H-porphine	$C_{32}H_{38}N_4$	448-70-4	1,6	-11,8	13,4	-	-
2,3,7,8,12,13,17,18-octaéthyl-21H,23H-porphine	$C_{36}H_{46}N_4$	2683-82-1	-183,2	-183,2	0,0	-	-
5-amino-1H-tétrazole	CH_3N_5	4418-61-5	209,2	209,2	0,0	-	-
5-cyano-1H-tétrazole	C_2HN_5	74418-40-9	402,0	402,0	0,0	-	-
1-méthyl-5-aminotétrazole	$C_2H_5N_5$	5422-44-6	182,2	193,1	-10,9	-	-
5-amino-2-méthyl-2H-tétrazole	$C_2H_5N_5$	6154-04-7	206,8	205,8	1,0	-	-
5-méthylamino-1H-tétrazole	$C_2H_5N_5$	53010-03-0	202,5	197,6	4,9	-	-
1-méthyl-5-méthylaminotétrazole	$C_3H_7N_5$	17267-51-5	200,2	194,4	5,8	-	-
5-(diméthylamino)-tétrazole	$C_3H_7N_5$	5422-45-7	182,6	188,7	-6,1	-	-
5-amino-1-(2-propényl)-1H-tétrazole	$C_4H_7N_5$	74999-22-7	265,4	275,7	-10,3	-	-
5-amino-2-(2-propényl)-2H-tétrazole	$C_4H_7N_5$	74999-26-1	282,9	283,9	-1,0	-	-
adénine	$C_5H_5N_5$	73-24-5	96,9	132,8	-35,9	-	-
5-amino-1-phényl-1H-tétrazole	$C_7H_7N_5$	5467-78-7	311,0	306,7	4,3	-	-
1-amino-5-phényl-1H-tétrazole	$C_7H_7N_5$	23579-46-6	305,1	317,7	-12,6	-	-
1-(2-propényl)-5-(2-propénylamino)tétrazole	$C_7H_{11}N_5$	66907-70-8	350,2	350,6	-0,4	-	-
5-(di(2-propényl)amino)-1H-tétrazole	$C_7H_{11}N_5$	6280-33-7	351,1	345,0	6,1	-	-
benzal-3-hydrazino-5-méthyl-1,2,4-triazole	$C_{10}H_{11}N_5$	87123-46-4	258,0	59,5	198,5	-	-
mélamine	$C_3H_6N_6$	108-78-1	-87,1	-81,4	-5,7	105,5	-192,5
N'-(5-tétrazolyl)-benzalhydrazone	$C_8H_8N_6$	10444-59-4	458,1	247,8	210,3	-	-
benzal-5-hydrazinotétrazole	$C_8H_8N_6$	108480-28-0	441,0	441,0	0,0	-	-
3-hexyne-1,1,1,6,6,6-hexacarbonitrile	$C_{12}H_4N_6$	10350-89-7	1001,5	1002,2	-0,7	-	-
3-hexène-1,1,1,6,6,6-hexacarbonitrile	$C_{12}H_6N_6$		837,4	837,4	0,0	-	-
3,5-octadiyne-1,1,1,8,8,8-hexacarbonitrile	$C_{14}H_4N_6$	10350-90-0	1218,6	1217,9	0,7	-	-
1-(1H-tétrazol-5-yl)-guanidine	$C_2H_5N_7$	66591-60-4	135,6	6,2	129,3	-	-
5,5'-bitétrazole	$C_2H_2N_8$	2783-98-4	531,8	561,5	-29,7	-	-

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Domalski *et al.*	
				$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
1,2-bis-(5-tétrazolyl)-éthane	$C_4H_6N_8$	26670-16-6	444,4	440,4	4,0	-	-
5,5'-hydrazotétrazole	$C_2H_4N_{10}$	74999-19-2	565,6	635,3	-69,7	-	-
cis-1,1'-diméthyl-5,5'-azotétrazole	$C_4H_6N_{10}$	41463-68-7	723,8	754,6	-30,8	-	-
trans-1,1'-diméthyl-5,5'-azotétrazole	$C_4H_6N_{10}$	74999-23-8	792,2	754,6	37,6	-	-
2,2'-diméthyl-5,5'-azotétrazole	$C_4H_6N_{10}$	41463-69-8	754,6	754,6	0,0	-	-
2,5,8-triamino-1,3,4,6,7,9,9b-heptaazaphénalène	$C_6H_6N_{10}$	1502-47-2	15,7	15,7	0,0	-	-
2,2'-diéthyl-5,5'-azotétrazole	$C_6H_{10}N_{10}$	74999-25-0	655,3	655,3	0,0	-	-

<u>Tableau IV-62</u> : Comparaison des enthalpies standard de formation en phase solide issues de la littérature avec les enthalpies représentées par la méthode développée et avec les enthalpies prévues par la méthode de Domalski *et al.*, concernant 134 molécules contenant carbone, hydrogène et azote.

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Domalski *et al.*	
				$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
3,4-dicyano-1,2,4-oxadiazole	C_4N_4O	55644-07-0	456,1	499,1	-43,0	-	-
3,4-dicyanofuroxane	$C_4N_4O_2$	17557-81-2	465,3	465,3	0,0	-	-
trinitroacétonitrile	$C_2N_4O_6$	630-72-8	174,1	174,1	0,0	-	-
3-cyano-5-(cyanofurazanyl)-1,2,4-oxadiazole N-oxyde	$C_6N_6O_3$	56092-91-2	565,2	423,9	141,3	-	-
benzotrifuroxane	$C_6N_6O_6$	3470-17-5	627,6	627,6	0,0	-	-
hexanitroéthane	$C_2N_6O_{12}$	918-37-6	79,5	-4,1	83,6	-	-
acétamide	C_2H_5NO	60-35-5	-315,6	-312,2	-3,4	-306,6	-9,0
propanamide	C_3H_7NO	79-05-0	-338,2	-334,9	-3,3	-334,5	-3,7
butanamide	C_4H_9NO	541-35-5	-364,4	-364,7	0,3	-363,9	-0,5
1H-pyrrole-2-carboxaldéhyde	C_5H_5NO	1003-29-8	-106,4	-135,9	29,5	-	-
2-pyridinol	C_5H_5NO	72762-00-6	-166,3	-169,5	3,2	-115,1	-51,2
3-pyridinol	C_5H_5NO	109-00-2	-132,0	-130,8	-1,2	-115,1	-16,9
4-pyridinol	C_5H_5NO	626-64-2	-148,9	-147,0	-1,9	-115,1	-33,8
2-pipéridone	C_5H_9NO	675-20-7	-306,6	-308,4	1,8	-325,1	18,5

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Domalski *et al.*	
				$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
pentanamide	$C_5H_{11}NO$	626-97-1	-379,5	-394,4	14,9	-393,3	13,8
2-méthyl-3-hydroxypyridine	C_6H_7NO	1121-25-1	-173,6	-170,4	-3,2	-149,5	-24,1
2-méthyl-4-hydroxypyridine	C_6H_7NO	18615-86-6	-184,7	-186,6	1,9	-152,5	-32,2
2-méthyl-5-hydroxypyridine	C_6H_7NO	1121-78-4	-166,0	-170,4	4,4	-154,5	-11,5
2-méthyl-6-hydroxypyridine	C_6H_7NO	3279-76-3	-212,3	-209,1	-3,2	-152,5	-59,8
2-hexynamide	C_6H_9NO	62155-28-6	-117,9	-117,9	0,0	-	-
ε-caprolactame	$C_6H_{11}NO$	105-60-2	-329,4	-335,8	6,4	-354,5	25,1
hexanamide	$C_6H_{13}NO$	628-02-4	-423,0	-424,2	1,2	-422,7	-0,3
benzamide	C_7H_7NO	55-21-0	-202,1	-205,2	3,1	-202,2	0,1
2-amino-2,4,6-cycloheptatrièn-1-one	C_7H_7NO	33504-43-7	-31,6	-138,6	107,0	-	-
hexahydro-5-méthyl-2H-azépin-2-one	$C_7H_{13}NO$	2210-07-3	-364,0	-353,1	-10,9	-380,2	16,2
hexahydro-7-méthyl-2H-azépin-2-one	$C_7H_{13}NO$	1985-48-4	-362,3	-366,8	4,5	-383,5	21,2
hexahydro-2(1H)-azocinone	$C_7H_{13}NO$	673-66-5	-348,5	-348,5	0,0	-383,9	35,4
α-oxobenzèneacétonitrile	C_8H_5NO	613-90-1	38,9	38,9	0,0	-	-
N-phénylacétamide	C_8H_9NO	103-84-4	-209,6	-212,5	2,9	-202,4	-7,2
1-(4-aminophényl)éthanone	C_8H_9NO	99-92-3	-182,1	-183,1	1,0	-168,0	-14,1
1-(3-aminophényl)éthanone	C_8H_9NO	99-03-6	-173,3	-183,1	9,8	-166,0	-7,3
octanamide	$C_8H_{17}NO$	629-01-6	-473,2	-483,7	10,5	-481,5	8,3
5-phénylisoxazole	C_9H_7NO	1006-67-3	80,5	70,8	9,7	-	-
8-quinolinol	C_9H_7NO	148-24-3	-83,0	-95,3	12,3	-	-
β-oxobenzènepropanenitrile	C_9H_7NO	614-16-4	-22,3	-22,3	0,0	-	-
4-(diméthylamino)-benzaldéhyde	$C_9H_{11}NO$	100-10-7	-136,8	-141,0	4,1	-113,1	-23,7
4-éthyl-3,5-diméthyl-1H-pyrrole-2-carboxaldéhyde	$C_9H_{13}NO$	6250-80-2	-254,8	-228,1	-26,7	-	-
2,2,6,6-tétraméthyl-4-pipéridinone	$C_9H_{17}NO$	826-36-8	-334,2	-334,2	0,0	-359,9	25,7
N-butylpentanamide	$C_9H_{19}NO$	2763-67-9	-465,1	-443,1	-22,0	-477,4	12,3
3-méthyl-5-phénylisoxazole	$C_{10}H_9NO$	1008-75-9	18,3	-125,5	143,8	-	-
3-phényl-5-méthylisoxazole	$C_{10}H_9NO$	1008-74-8	13,7	13,7	0,0	-	-
β-cyanopropiophénone	$C_{10}H_9NO$	5343-98-6	-71,4	-71,4	0,0	-61,0	-10,5
2-méthyl-1',2'-naphtoxazole	$C_{12}H_9NO$	85-15-4	-87,6	-40,6	-47,0	-	-
2-méthylnapht[2,3-d]oxazole	$C_{12}H_9NO$	20686-66-2	-52,4	-40,6	-11,8	-	-
N,N-diphénylacétamide	$C_{14}H_{13}NO$	519-87-9	-42,9	-44,0	1,1	-95,7	52,8
N-acétyl-N-cyclohexyl-phénylamine	$C_{14}H_{19}NO$	5769-11-9	-300,0	-321,6	21,6	-287,9	-12,1
3,5-diphénylisoxazole	$C_{15}H_{11}NO$	2039-49-8	144,8	-50,6	195,4	-	-
glycine	$C_2H_5NO_2$	56-40-6	-527,6	-531,4	3,8	-528,1	0,5

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Domalski *et al.*	
				$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
N-méthylglycine	$C_3H_7NO_2$	107-97-1	-513,3	-517,1	3,8	-520,7	7,4
L-alanine	$C_3H_7NO_2$	56-41-7	-560,7	-550,7	-9,9	-557,9	-2,8
DL-alanine	$C_3H_7NO_2$	302-72-7	-563,6	-550,7	-12,9	-557,9	-5,7
D-alanine	$C_3H_7NO_2$	338-69-2	-561,2	-550,7	-10,5	-557,9	-3,3
succinimide	$C_4H_5NO_2$	123-56-8	-460,2	-460,2	-0,1	-459,1	-1,1
acide 4-aminobutanoïque	$C_4H_9NO_2$	56-12-2	-577,9	-582,4	4,5	-588,5	10,6
n-propylcarbamate	$C_4H_9NO_2$	627-12-3	-552,6	-532,4	-20,2	-	-
2-méthyl-2-nitropropane	$C_4H_9NO_2$	594-70-7	-229,8	-202,6	-27,2	-229,8	0,0
DL-proline	$C_5H_9NO_2$	609-36-9	-524,2	-500,3	-23,9	-547,5	23,3
L-proline	$C_5H_9NO_2$	147-85-3	-507,5	-500,3	-7,2	-547,5	40,0
acide 5-aminopentanoïque	$C_5H_{11}NO_2$	660-88-8	-604,1	-612,1	8,0	-617,9	13,8
L-valine	$C_5H_{11}NO_2$	72-18-4	-614,7	-595,8	-18,9	-612,9	-1,8
acide 3-pyridinecarboxylique	$C_6H_5NO_2$	59-67-6	-344,9	-333,5	-11,4	-335,9	-9,0
L-leucine	$C_6H_{13}NO_2$	61-90-5	-637,4	-626,9	-10,5	-642,4	5,0
DL-leucine	$C_6H_{13}NO_2$	328-39-2	-640,6	-626,9	-13,7	-642,4	1,8
D-leucine	$C_6H_{13}NO_2$	328-38-1	-637,3	-626,9	-10,4	-642,4	5,1
L-isoleucine	$C_6H_{13}NO_2$	73-32-5	-640,7	-625,5	-15,1	-640,0	-0,6
DL-isoleucine	$C_6H_{13}NO_2$	443-79-8	-635,1	-626,2	-8,9	-640,0	4,9
acide 2-aminohexanoïque	$C_6H_{13}NO_2$	616-06-8	-639,1	-639,3	0,2	-643,8	4,7
acide 4-aminohexanoïque	$C_6H_{13}NO_2$	5415-99-6	-646,2	-642,5	-3,7	-644,5	-1,7
acide 5-aminohexanoïque	$C_6H_{13}NO_2$	628-47-7	-643,3	-642,5	-0,8	-644,5	1,2
acide 6-aminohexanoïque	$C_6H_{13}NO_2$	60-32-2	-637,4	-641,9	4,5	-647,3	9,9
2-hydroxybenzaldoxime	$C_7H_7NO_2$	94-67-7	-183,7	-200,2	16,5	-	-
acide 2-aminobenzoïque	$C_7H_7NO_2$	118-92-3	-400,9	-385,4	-15,5	-401,7	0,8
acide 3-aminobenzoïque	$C_7H_7NO_2$	99-05-8	-411,6	-404,0	-7,6	-411,7	0,1
acide 4-aminobenzoïque	$C_7H_7NO_2$	150-13-0	-412,8	-404,0	-8,8	-415,7	2,9
1-méthyl-4-nitrobenzène	$C_7H_7NO_2$	99-99-0	-48,1	-46,5	-1,6	-39,2	-8,9
éthylméthyl maléimide	$C_7H_9NO_2$	29720-92-1	-469,7	-80,0	-389,7	-	-
acide 7-aminoheptanoïque	$C_7H_{15}NO_2$	929-17-9	-667,4	-671,6	4,2	-676,7	9,3
1-nitro-2-phényléthène	$C_8H_7NO_2$	102-96-5	30,5	30,5	0,0	-	-
méthyl phénylcarbamate	$C_8H_9NO_2$	2603-10-3	-186,7	-380,4	193,7	-	-
acide 2-méthyl-1H-pyrrole-3-carboxylique éthyl ester	$C_8H_{11}NO_2$	936-12-9	-411,0	-399,9	-11,1	-	-
acide 2,4-diméthyl-1H-pyrrole-3-carboxylique méthyl ester	$C_8H_{11}NO_2$	52459-90-2	-422,3	-436,9	14,6	-	-
acide 2,4-diméthyl-1H-pyrrole-5-carboxylique méthyl ester	$C_8H_{11}NO_2$	74999-36-3	-422,3	-424,6	2,3	-	-

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Domalski *et al.*	
				$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
2-nitro-1-phénylpropène	$C_9H_9NO_2$	705-60-2	-15,4	-15,4	0,0	-	-
L-phénylalanine	$C_9H_{11}NO_2$	63-91-2	-466,9	-491,1	24,2	-461,3	-5,7
DL-phénylalanine	$C_9H_{11}NO_2$	150-30-1	-460,6	-491,1	30,5	-461,3	0,7
acide 4-aminobenzoïque éthyl ester	$C_9H_{11}NO_2$	94-09-7	-417,9	-376,5	-41,4	-412,9	-5,0
acide 2,5-diméthyl-1H-pyrrole-3-carboxylique éthyl ester	$C_9H_{13}NO_2$	2199-52-2	-478,7	-558,5	79,8	-	-
acide 3,5-diméthyl-1H-pyrrole-2-carboxylique éthyl ester	$C_9H_{13}NO_2$	2199-44-2	-474,5	-500,3	25,8	-	-
acide 4,5-diméthyl-1H-pyrrole-3-carboxylique éthyl ester	$C_9H_{13}NO_2$	2199-53-3	-470,3	-459,4	-10,9	-	-
acide 2,4-diméthyl-1H-pyrrole-3-carboxylique éthyl ester	$C_9H_{13}NO_2$	2199-51-1	-463,2	-459,4	-3,8	-	-
acide 4,5-diméthyl-1H-pyrrole-2-carboxylique éthyl ester	$C_9H_{13}NO_2$	2199-45-3	-449,4	-447,1	-2,3	-	-
2,2,6,6-tétraméthyl-4-oxo-1-pipéridinyloxy	$C_9H_{16}NO_2$	2896-70-0	-298,5	-298,5	0,0	-	-
1-hydroxy-2,2,6,6-tétraméthyl-4-pipéridinone	$C_9H_{17}NO_2$	3637-11-4	-378,1	-378,1	0,0	-	-
2,2,6,6-tétraméthyl-4-hydroxypipéridine-1-oxyde	$C_9H_{18}NO_2$	2226-96-2	-392,6	-392,6	0,0	-	-
1-hydroxy-2,2,6,6-tétraméthyl-4-pipéridinol	$C_9H_{19}NO_2$	3637-10-3	-445,5	-445,5	0,0	-	-
acide 9-aminononanoïque	$C_9H_{19}NO_2$	1120-12-3	-727,8	-731,2	3,4	-735,5	7,7
1-nitronaphtalène	$C_{10}H_7NO_2$	86-57-7	42,6	43,0	-0,4	41,4	1,2
4-nitroso-1-naphtol	$C_{10}H_7NO_2$	605-60-7	-107,8	-85,8	-22,0	-107,9	0,1
2-nitroso-1-naphtol	$C_{10}H_7NO_2$	132-53-6	-61,8	-67,1	5,3	-102,9	41,1
1-nitroso-2-naphtol	$C_{10}H_7NO_2$	131-91-9	-50,5	-67,1	16,6	-102,9	52,4
N,N-diacétylaniline	$C_{10}H_{11}NO_2$	1563-87-7	-362,6	-362,6	0,0	-	-
acide phénylcarbamique isopropyl ester	$C_{10}H_{13}NO_2$	122-42-9	-442,1	-433,5	-8,6	-	-
acide 2,4,5-triméthyl-1H-pyrrole-3-carboxylique éthyl ester	$C_{10}H_{15}NO_2$	2199-54-4	-489,8	-503,9	14,1	-	-
acide phénylcarbamique butyl ester	$C_{11}H_{15}NO_2$	1538-74-5	-395,5	-462,5	67,0	-	-
acide 3,5-diméthyl-4-vinyl-1H-pyrrole-2-carboxylique éthyl ester	$C_{11}H_{15}NO_2$	25894-11-5	-472,5	-470,4	-2,1	-	-
acide 3,5-diméthyl-4-éthyl-1H-pyrrole-2-carboxylique éthyl ester	$C_{11}H_{17}NO_2$	2199-47-5	-534,0	-536,6	2,6	-	-
3-nitrobiphényle	$C_{12}H_9NO_2$	2113-58-8	65,1	60,8	4,3	62,3	2,8
4-nitrobiphényle	$C_{12}H_9NO_2$	92-93-3	40,5	60,8	-20,3	60,3	-19,8
acide 3,5-diméthyl-4-propyl-1H-pyrrole-2-carboxylique éthyl ester	$C_{12}H_{19}NO_2$	4758-64-9	-569,0	-566,4	-2,6	-	-
cis-4-nitrostilbène	$C_{14}H_{11}NO_2$	6624-53-9	132,0	115,9	16,1	107,6	24,4
trans-4-nitrostilbène	$C_{14}H_{11}NO_2$	1694-20-8	102,7	115,9	-13,2	101,9	0,8
éthyl-N,N-diphénylcarbamate	$C_{15}H_{15}NO_2$	603-52-1	-280,9	-234,5	-46,4	-	-
N,N-diphénylacétoacétamide	$C_{16}H_{15}NO_2$	2540-31-0	-227,9	-188,9	-39,0	-272,7	44,8
acide 3-N-phénylamino-2-naphtoïque	$C_{17}H_{13}NO_2$	6973-58-6	-263,6	-259,2	-4,4	-260,1	-3,5
1-nitro-2-propanone	$C_3H_5NO_3$	10230-68-9	-294,7	-294,7	0,0	-	-
L-serine	$C_3H_7NO_3$	56-45-1	-732,7	-741,9	9,2	-741,5	8,8

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Domalski *et al.*	
				$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
2-nitrofurane	$C_4H_3NO_3$	609-39-2	-104,1	-113,7	9,6	-	-
3-méthyl-2,5-oxazolidine-dione	$C_4H_5NO_3$	5840-76-6	-600,4	-599,6	-0,8	-	-
2-méthyl-2-nitro-1-propanol	$C_4H_9NO_3$	76-39-1	-410,1	-392,4	-17,7	-411,4	1,3
L-thréonine	$C_4H_9NO_3$	72-19-5	-776,3	-770,5	-5,8	-786,6	10,3
DL-thréonine	$C_4H_9NO_3$	80-68-2	-758,8	-771,1	12,3	-786,6	27,8
2-amino-2-(hydroxyméthyl)-1,3-propanediol	$C_4H_{11}NO_3$	77-86-1	-717,8	-717,8	0,0	-703,3	-14,5
1-hydroxy-L-proline	$C_5H_9NO_3$	18610-59-8	-661,1	-692,2	31,1	-746,9	85,8
acide 4-hydroxy-5-méthyl-1H-pyrrole-3-carboxylique éthyl ester	$C_8H_{11}NO_3$	74999-30-7	-611,9	-614,0	2,1	-	-
N-benzoylglycine	$C_9H_9NO_3$	495-69-2	-608,8	-601,9	-6,9	-609,2	0,4
L-tyrosine	$C_9H_{11}NO_3$	60-18-4	-685,1	-688,1	3,0	-666,0	-19,1
acide 2,4-diméthyl-5-hydroxy-1H-pyrrole-3-carboxylique éthyl ester	$C_9H_{13}NO_3$	74999-31-8	-684,5	-771,3	86,8	-	-
4-benzyl-2,5-oxazolidinedione	$C_{10}H_9NO_3$	1892-35-9	-552,4	-552,4	0,0	-	-
2-méthyl-2-nitro-1-phényl-1-propanol	$C_{10}H_{13}NO_3$	33687-74-0	-317,0	-340,9	23,9	-	-
2-méthyl-2-nitro-3-phényl-1-propanol	$C_{10}H_{13}NO_3$	62030-36-8	-347,5	-332,2	-15,3	-335,9	-11,7
acide 4-formyl-3,5-diméthyl-1H-pyrrole-2-carboxylique éthyl ester	$C_{10}H_{13}NO_3$	2199-64-6	-640,8	-642,8	2,0	-	-
acide 5-formyl-2,4-diméthyl-1H-pyrrole-3-carboxylique éthyl ester	$C_{10}H_{13}NO_3$	2199-59-9	-645,8	-642,8	-3,0	-	-
acide 4-acétyl-3,5-diméthyl-1H-pyrrole-2-carboxylique éthyl ester	$C_{11}H_{15}NO_3$	2386-26-7	-654,5	-656,7	2,2	-	-
acide 3,5-diméthyl-4-(1-oxopropyl)-1H-pyrrole-2-carboxylique éthyl ester	$C_{12}H_{17}NO_3$	40484-82-0	-679,4	-679,4	0,0	-	-
acide 2,4-diméthyl-5-(1-oxopropyl)-1H-pyrrole-3-carboxylique éthyl ester	$C_{12}H_{17}NO_3$	78956-69-1	-681,5	-679,4	-2,1	-	-
acide aspartique	$C_4H_7NO_4$	56-84-8	-973,3	-978,9	5,6	-972,5	-0,9
2-méthyl-2-nitro-1,3-propanediol	$C_4H_9NO_4$	77-49-6	-574,4	-582,3	7,9	-593,0	18,6
5-nitro-2-furancarboxaldéhyde	$C_5H_3NO_4$	698-63-5	-226,9	-227,3	0,4	-	-
acide L-glutamique	$C_5H_9NO_4$	56-86-0	-1003,3	-1008,6	5,3	-1001,9	-1,5
acide D-glutamique	$C_5H_9NO_4$	6893-26-1	-1002,5	-1008,6	6,1	-1001,9	-0,6
2-éthyl-2-nitro-1,3-propanediol	$C_5H_{11}NO_4$	597-09-1	-606,4	-612,0	5,6	-618,0	11,6
2-nitro-2-propyl-1,3-propanediol	$C_6H_{13}NO_4$	5638-92-6	-625,2	-641,8	16,6	-647,4	22,2
2-isopropyl-2-nitro-1,3-propanediol	$C_6H_{13}NO_4$	62155-31-1	-623,0	-629,3	6,3	-646,0	23,0
acide 2-nitrobenzoïque	$C_7H_5NO_4$	552-16-9	-398,5	-404,9	6,4	-400,4	1,9
acide 3-nitrobenzoïque	$C_7H_5NO_4$	121-92-6	-414,0	-424,7	10,7	-411,4	-2,6
acide 4-nitrobenzoïque	$C_7H_5NO_4$	62-23-7	-426,9	-424,7	-2,2	-425,4	-1,5
3-(5-nitro-2-furyl)-2-propénal	$C_7H_5NO_4$	1874-22-2	-162,8	-160,6	-2,1	-	-
acide 3,5-diméthyl-1H-pyrrole-2,4-dicarboxylique 4-méthyl ester	$C_9H_{11}NO_4$	50296-60-1	-841,8	-908,2	66,4	-	-
acide 3,5-diméthyl-1H-pyrrole-2,4-dicarboxylique diméthyl ester	$C_{10}H_{13}NO_4$	5448-17-9	-846,3	-858,1	11,8	-	-
acide 5-carbométhoxy-2,4-diméthyl-1H-pyrrole-3-acrylique	$C_{11}H_{13}NO_4$		-808,4	-810,5	2,1	-	-

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Domalski *et al.*	
				$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
acide phénylalanine-N-carboxylique diméthyl ester	$C_{12}H_{15}NO_4$	70288-75-4	-766,4	-786,6	20,2	-	-
acide 3,5-diméthyl-2-carboxy-1H-pyrrole-4-propanoïque diméthyl ester	$C_{12}H_{17}NO_4$	16132-20-0	-849,7	-844,7	-5,0	-	-
acide 3,5-diméthyl-1H-pyrrole-2,4-dicarboxylique diéthyl ester	$C_{12}H_{17}NO_4$	2436-79-5	-916,7	-903,2	-13,5	-	-
acide 2,4-diméthyl-5-carboxy-1H-pyrrole-3-propanoïque 5-éthyl ester	$C_{12}H_{17}NO_4$	37789-64-3	-935,9	-917,3	-18,6	-	-
2-(hydroxyméthyl)-2-nitro-1,3-propanediol	$C_4H_9NO_5$	126-11-4	-735,5	-773,4	37,9	-774,5	39,0
acide 5-nitrofuran-2-carboxylique	$C_5H_3NO_5$	645-12-5	-517,1	-515,2	-1,9	-	-
acide 5-nitro-2-furancarboxylique méthyl ester	$C_6H_5NO_5$	1874-23-3	-471,1	-465,1	-6,0	-	-
acide 5-(hydroxyméthyl)-3-méthyl-1H-pyrrole-2,4-dicarboxylique diéthyl ester	$C_{12}H_{17}NO_5$	5422-89-9	-1057,7	-1057,7	0,0	-	-
acide 2,4-diméthyl-5-carboxy-α-oxo-1H-pyrrole-3-oxoacétique diéthyl ester	$C_{13}H_{17}NO_5$	21898-53-3	-1015,2	-1012,9	-2,3	-	-
acide 3-méthyl-5-(1-hydroxyéthyl)-1H-pyrrole-2,4-dicarboxylique diéthyl ester	$C_{13}H_{19}NO_5$	74999-34-1	-1135,8	-1164,8	29,0	-	-
acide 3-méthyl-5-(1-hydroxypropyl)-1H-pyrrole-2,4-dicarboxylique diéthyl ester	$C_{14}H_{21}NO_5$		-1084,6	-1193,2	108,6	-	-
acide 5-carbéthoxy-2,4-diméthyl-1H-pyrrole-3-méthylmalonique diéthyl ester	$C_{17}H_{25}NO_6$		-1402,5	-1402,5	0,0	-	-
acide 5-nitro-2-acétoxy-2,5-dihydro-2-furancarboxylique méthyl ester	$C_8H_9NO_7$	22401-53-2	-919,4	-919,4	0,0	-	-
2-(diacétoxyméthyl)-5-nitrofurane	$C_9H_9NO_7$	92-55-7	-897,8	-897,8	0,0	-	-
2-(3,3-diacétoxypropényl)-5-nitrofurane	$C_{11}H_{11}NO_7$	1874-14-2	-872,3	-872,3	0,0	-	-
2-acétoxy-2-bis(acétoxy)méthyl-2,5-dihydro-5-nitrofurane	$C_{11}H_{13}NO_9$		-1374,1	-1374,1	0,0	-	-
urée	CH_4N_2O	57-13-6	-333,1	-359,6	26,5	-333,6	0,5
1,3-diazétidin-2-one	$C_2H_4N_2O$	5265-50-9	-327,1	-198,6	-128,5	-248,7	-78,4
3-amino-5-méthylisoxazole	$C_4H_6N_2O$	1072-67-9	-61,8	-90,5	28,7	-	-
triméthylurée	$C_4H_{10}N_2O$	632-14-4	-330,5	-246,2	-84,3	-298,1	-32,4
1-acétyl-1H-imidazole	$C_5H_6N_2O$	2466-76-4	-119,6	-119,6	0,0	-	-
1H-pyrrole-2-carboxaldéhyde oxime	$C_5H_6N_2O$	32597-34-5	12,1	37,2	-25,1	-	-
5-amino-3,4-diméthylisoxazole	$C_5H_8N_2O$	19947-75-2	-82,7	-82,7	0,0	-	-
1,2,3-benzoxadiazole	$C_6H_4N_2O$	273-59-6	235,8	235,8	0,0	-	-
2-(diéthylamino)acétamide	$C_6H_{14}N_2O$	7409-48-5	-351,5	-307,5	-44,0	-351,3	-0,2
phénylfurazane	$C_8H_6N_2O$	10349-06-1	237,9	248,8	-10,9	-	-
3-méthyl-4-phénylfurazane	$C_9H_8N_2O$	10349-09-4	187,8	204,0	-16,2	-	-
benzyl-1,2,4-oxadiazole	$C_9H_8N_2O$	37216-04-9	37,2	37,2	0,0	-	-
3-méthyl-5-phényl-1,2,4-oxadiazole	$C_9H_8N_2O$	1199-00-4	103,3	103,3	0,0	-	-
5-méthyl-3-phényl-1,2,4-oxadiazole	$C_9H_8N_2O$	1198-98-7	97,4	97,4	0,0	-	-
2,2'-carbonylbis-(1H-pyrrole)	$C_9H_8N_2O$	15770-21-5	-25,2	-36,8	11,6	-	-
N,N'-diméthyl-N-phénylurée	$C_9H_{12}N_2O$	938-91-0	-217,8	-228,5	10,7	-192,0	-25,8
N'-éthyl-N-méthyl-N-phénylurée	$C_{10}H_{14}N_2O$	52073-04-8	-304,7	-278,1	-26,6	-226,0	-78,7

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Domalski *et al.*	
				$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
4-nitroso-diphénylamine	$C_{12}H_{10}N_2O$	156-10-5	213,1	117,2	95,9	146,7	66,4
N-nitroso-diphénylamine	$C_{12}H_{10}N_2O$	86-30-6	227,2	227,2	0,0	-	-
N,N-diphénylurée	$C_{13}H_{12}N_2O$	603-54-3	-122,7	-91,4	-31,3	-122,7	0,0
tétrahydrocarbazole urée	$C_{13}H_{14}N_2O$	67242-61-9	-1076,8	-1076,8	0,0	-	-
diphénylfurazane	$C_{14}H_{10}N_2O$	19768-02-6	328,9	311,9	17,0	-	-
3,5-diphényl-1,2,4-oxadiazole	$C_{14}H_{10}N_2O$	888-71-1	207,1	207,1	0,0	-	-
2,5-diphényl-1,3,4-oxadiazole	$C_{14}H_{10}N_2O$	725-12-2	165,3	165,3	0,0	-	-
N,N-diphényl-N'-méthylurée	$C_{14}H_{14}N_2O$	13114-72-2	-106,8	-105,2	-1,6	-114,0	7,2
acide acétique 1,2-diphénylhydrazide	$C_{14}H_{14}N_2O$	22293-38-5	-11,2	-12,0	0,8	-	-
4-acétamidobiphényle	$C_{14}H_{14}N_2O$	3366-61-8	-160,6	-149,8	-10,8	-160,6	0,0
N,N'-diméthyl-N,N'-diphénylurée	$C_{15}H_{16}N_2O$	611-92-7	-73,1	-69,6	-3,5	-67,8	-5,3
N,N-diphényl-N'-éthylurée	$C_{15}H_{16}N_2O$	18168-01-9	-152,6	-154,9	2,3	-148,0	-4,6
N,N'-diheptylurée	$C_{15}H_{32}N_2O$	1798-20-5	-627,2	-635,5	8,3	-678,3	51,1
N,N-diphényl-N'-allylurée	$C_{16}H_{16}N_2O$	101279-92-9	-38,7	-27,1	-11,6	-	-
N-éthyl-N'-méthyl-N,N'-diphénylurée	$C_{16}H_{18}N_2O$	4474-03-7	-126,6	-119,3	-7,3	-101,8	-24,8
N,N'-diéthyl-N,N'-diphénylurée	$C_{17}H_{20}N_2O$	85-98-3	-150,2	-168,9	18,7	-135,8	-14,4
2,2',4,4'-tétraméthyl-3,3'-diéthyldipyrryl cétone	$C_{17}H_{24}N_2O$	13228-22-3	-253,8	-242,2	-11,6	-	-
N,N'-dioctylurée	$C_{17}H_{36}N_2O$	1943-08-4	-715,2	-695,0	-20,2	-737,1	21,9
N-pipéridyl-N,N'-diphénylformamide	$C_{18}H_{20}N_2O$	75534-73-5	-108,2	-144,7	36,5	-158,7	50,5
N,N'-didécylurée	$C_{21}H_{44}N_2O$	1943-09-5	-877,4	-814,0	-63,4	-854,7	-22,7
N'-(2-naphtyl)-N,N-diphénylurée	$C_{23}H_{18}N_2O$	112322-16-4	64,0	63,4	0,6	22,7	41,3
N'-(1-naphtyl)-N,N-diphénylurée	$C_{23}H_{18}N_2O$	60302-02-5	78,2	63,4	14,8	22,7	55,5
oxamide	$C_2H_4N_2O_2$	471-46-5	-499,1	-498,2	-0,9	-	-
glyoxime	$C_2H_4N_2O_2$	557-30-2	-88,7	-84,8	-3,9	-	-
N-nitrodiméthylamine	$C_2H_6N_2O_2$	4164-28-7	-75,0	-10,2	-64,8	-53,5	-21,5
propanediamide	$C_3H_6N_2O_2$	108-13-4	-542,8	-552,4	9,6	-538,8	-4,0
méthylglyoxime	$C_3H_6N_2O_2$	1804-15-5	-126,7	-129,6	2,9	-	-
uracile	$C_4H_4N_2O_2$	66-22-8	-429,4	-429,4	0,0	-267,4	-162,0
5-méthyl-2,4-imidazolidinedione	$C_4H_6N_2O_2$	616-03-5	-486,6	-486,6	0,0	-499,0	12,4
2,5-pipérazinedione	$C_4H_6N_2O_2$	106-57-0	-446,5	-444,1	-2,4	-470,7	24,2
butanediamide	$C_4H_8N_2O_2$	110-14-5	-581,2	-594,7	13,5	-575,5	-5,7
2,3-butanedione dioxime	$C_4H_8N_2O_2$	95-45-4	-177,9	-174,4	-3,5	-	-
5-méthyluracile	$C_5H_6N_2O_2$	65-71-4	-462,8	-444,0	-18,8	-301,8	-161,0
5,5-diméthyl-2,4-imidazolidinedione	$C_5H_8N_2O_2$	77-71-4	-533,3	-534,8	1,5	-	-

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Domalski *et al.*	
				$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
DL-ornithine	$C_5H_{12}N_2O_2$	616-07-9	-652,6	-658,3	5,7	-647,6	-5,0
2-nitroaniline	$C_6H_6N_2O_2$	88-74-4	-26,1	-26,2	0,1	-22,2	-3,9
3-nitroaniline	$C_6H_6N_2O_2$	99-09-2	-34,2	-22,1	-12,1	-28,2	-6,0
4-nitroaniline	$C_6H_6N_2O_2$	100-01-6	-42,0	-22,1	-19,9	-18,2	-23,8
DL-5-éthyl-5-méthyl-2,4-imidazolidinedione	$C_6H_{10}N_2O_2$	16820-12-5	-566,1	-564,6	-1,5	-	-
DL-lysine	$C_6H_{14}N_2O_2$	70-54-2	-678,7	-688,0	9,3	-677,0	-1,7
2-méthyl-5-nitroaniline	$C_7H_8N_2O_2$	99-55-8	-91,3	-56,5	-34,8	-62,6	-28,7
4-méthyl-3-nitroaniline	$C_7H_8N_2O_2$	119-32-4	-71,7	-48,9	-22,8	-63,6	-8,1
3-isopropyl-2,5-pipérazinedione	$C_7H_{12}N_2O_2$	14771-77-8	-502,9	-510,4	7,5	-555,5	52,6
3-phényl-1,2,4-oxadiazol-5(4H)-one	$C_8H_6N_2O_2$	1456-22-0	-109,4	-170,0	60,6	-	-
5-phényl-1,2,4-oxadiazol-3(2H)-one	$C_8H_6N_2O_2$	21084-84-4	-4,4	35,1	-39,5	-	-
α-phénylglyoxime	$C_8H_8N_2O_2$	4589-97-3	42,4	-21,7	64,1	-	-
β-phénylglyoxime	$C_8H_8N_2O_2$	4589-97-3	-20,4	-21,7	1,3	-	-
1,4-benzènedicarboxamide	$C_8H_8N_2O_2$	3010-82-0	-433,1	-423,1	-10,0	-443,6	10,5
1,3-benzènedicarboxamide	$C_8H_8N_2O_2$	1740-57-4	-436,9	-429,2	-7,7	-441,6	4,7
3-isopropyl-6-méthyl-2,5-pipérazinedione	$C_8H_{14}N_2O_2$	15136-26-2	-514,3	-529,8	15,5	-585,3	71,0
α-(4-méthylphényl)-glyoxime	$C_9H_{10}N_2O_2$		-41,8	-56,3	14,4	-	-
β-(4-méthylphényl)-glyoxime	$C_9H_{10}N_2O_2$		25,1	-56,3	81,4	-	-
N-(4-éthoxyphényl)urée	$C_9H_{12}N_2O_2$	150-69-6	-468,8	-445,9	-22,9	-437,6	-31,2
N-(3-éthoxyphényl)urée	$C_9H_{12}N_2O_2$	13142-86-4	-429,5	-445,9	16,4	-432,6	3,1
2,6-diméthylbenzo-[1,2-d,5,4-d]bisoxazole	$C_{10}H_8N_2O_2$	55850-41-4	-212,5	-210,0	-2,5	-	-
2,7-diméthylbenzo-[1,2-d,3,4-d]bisoxazole	$C_{10}H_8N_2O_2$	53816-93-6	-207,5	-210,0	2,5	-	-
3-méthyl-4-benzoylfurazane	$C_{10}H_8N_2O_2$	10349-11-8	119,4	99,0	20,4	-	-
L-tryptophane	$C_{11}H_{12}N_2O_2$	73-22-3	-415,3	-415,3	0,0	-	-
3-benzyl-2,5-pipérazinedione	$C_{11}H_{12}N_2O_2$	5037-75-2	-345,4	-333,5	-11,9	-427,0	81,6
acide 2,4-diméthyl-3-méthylcarbonitrile-1H-pyrrole-carboxylique éthyl ester	$C_{11}H_{14}N_2O_2$		-387,3	-387,3	0,0	-	-
3-isopropyl-6-(2-méthyl-propyl)-2,5-pipérazinedione	$C_{11}H_{20}N_2O_2$	5625-50-3	-626,0	-606,6	-19,4	-669,8	43,8
2-nitrodiphénylamine	$C_{12}H_{10}N_2O_2$	119-75-5	79,0	68,9	10,1	96,2	-17,2
3-benzyl-6-méthyl-2,5-pipérazinedione	$C_{12}H_{14}N_2O_2$	14474-78-3	-372,0	-352,9	-19,1	-456,7	84,7
(Z,Z)-diphényléthanedione dioxime	$C_{14}H_{12}N_2O_2$	572-45-2	41,8	41,4	0,4	-	-
(E,E)-diphényléthanedione dioxime	$C_{14}H_{12}N_2O_2$	522-34-9	18,0	41,4	-23,4	-	-
(E,Z)-diphényléthanedione dioxime	$C_{14}H_{12}N_2O_2$	572-43-0	53,1	41,4	11,7	-	-
acide benzoïque 2-benzoylhydrazide	$C_{14}H_{12}N_2O_2$	787-84-8	-201,7	-184,1	-17,5	-	-
3-benzyl-6-isopropyl-2,5-pipérazinedione	$C_{14}H_{18}N_2O_2$	14474-71-6	-392,7	-399,9	7,2	-511,8	119,1

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Domalski *et al.*	
				$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
1,1'-méthylènebis(4-isocyanatobenzène)	$C_{15}H_{10}N_2O_2$	101-68-8	-52,8	-52,8	0,0	-	-
N,N-diphényl-N'-2-hydroxyéthylurée	$C_{15}H_{16}N_2O_2$	6123-87-1	-319,2	-346,0	26,8	-333,9	14,7
1,2-diacétyl-1,2-diphénylhydrazine	$C_{16}H_{16}N_2O_2$	793-25-9	-188,4	-282,0	93,6	-	-
biphényl-4,4'-diacétamide	$C_{16}H_{16}N_2O_2$	613-35-4	-472,5	-371,0	-101,5	-383,9	-88,6
4-diphénylamino-carbonylmorpholine	$C_{17}H_{18}N_2O_2$	75125-45-0	-217,6	-244,1	26,5	-255,5	37,9
2-anilinométhyl-3-méthyl-4-éthyl-5-carbéthoxypyrrole	$C_{17}H_{22}N_2O_2$		-380,9	-371,0	-9,9	-	-
3,6-dibenzyl-2,5-pipérazinedione	$C_{18}H_{18}N_2O_2$	2308-61-4	-287,6	-293,9	6,3	-383,2	95,6
bis(hydroxyméthyl)urée	$C_3H_8N_2O_3$	25155-29-7	-717,0	-717,4	0,4	-	-
L-asparagine	$C_4H_8N_2O_3$	70-47-3	-789,4	-809,8	20,4	-791,1	1,7
N-glycylglycine	$C_4H_8N_2O_3$	556-50-3	-747,7	-759,1	11,4	-748,2	0,5
L-glutamine	$C_5H_{10}N_2O_3$	56-85-9	-826,4	-839,6	13,2	-820,5	-5,9
N-DL-alanylglycine	$C_5H_{10}N_2O_3$	1188-01-8	-777,8	-778,4	0,6	-777,9	0,1
N-glycyl-DL-valine	$C_7H_{14}N_2O_3$	2325-17-9	-835,0	-824,2	-10,8	-833,0	-2,0
N-DL-leucylglycine	$C_8H_{16}N_2O_3$	615-82-7	-859,8	-853,9	-5,9	-862,4	2,6
3-benzoyl-5-hydroxy-1,2,4-oxadiazole	$C_9H_6N_2O_3$		-269,9	-337,2	67,3	-	-
3-((4-hydroxyphényl)méthyl)-2,5-pipérazinedione	$C_{11}H_{12}N_2O_3$	5845-66-9	-512,3	-530,5	18,2	-631,7	119,4
N-glycylphénylalanine	$C_{11}H_{14}N_2O_3$	6491-52-7	-684,4	-718,8	34,4	-681,3	-3,1
N-alanylphénylalanine	$C_{12}H_{16}N_2O_3$	3061-90-3	-710,2	-738,2	28,0	-711,1	0,9
N-valylphénylalanine	$C_{14}H_{20}N_2O_3$	75946-40-6	-765,8	-783,9	18,1	-766,1	0,3
3,4-dibenzoyl-1,2,5-oxadiazole	$C_{16}H_{10}N_2O_3$	10349-12-9	104,2	101,9	2,3	-	-
3,4-bis(4-méthylbenzoyl)-1,2,5-oxadiazole	$C_{18}H_{14}N_2O_3$		20,4	32,9	-12,5	-	-
1,2-dinitroéthane	$C_2H_4N_2O_4$	7570-26-5	-178,7	-185,4	6,8	-178,0	-0,7
3-nitroisoxazolidine-2-oxyde	$C_3H_4N_2O_4$	4122-45-6	-51,0	-68,2	17,2	-	-
2,2-dinitropropane	$C_3H_6N_2O_4$	595-49-3	-191,6	-137,9	-53,8	-192,5	0,9
N-nitrosuccinimide	$C_4H_4N_2O_4$	5336-95-8	-325,6	-325,6	0,0	-	-
tartramide	$C_4H_8N_2O_4$	634-63-9	-1193,5	-948,3	-245,2	-947,8	-245,7
1,4-dinitrobutane	$C_4H_8N_2O_4$	4286-49-1	-249,2	-244,9	-4,3	-256,8	7,6
L-asparagine monohydrate	$C_4H_{10}N_2O_4$	5794-13-8	-1086,6	-1105,9	19,3	-	-
5-nitro-2-furamide	$C_5H_4N_2O_4$	701-51-9	-332,2	-237,8	-94,4	-	-
2,2-diméthyl-1,3-dinitropropane	$C_5H_{10}N_2O_4$	762-98-1	-275,1	-272,6	-2,5	-287,7	12,6
1,3-dinitrobenzène	$C_6H_4N_2O_4$	99-65-0	-27,4	-42,8	15,4	-25,4	-2,0
1,2-dinitrobenzène	$C_6H_4N_2O_4$	528-29-0	-1,8	-10,0	8,2	1,7	-3,5
1,4-dinitrobenzène	$C_6H_4N_2O_4$	100-25-4	-38,7	-36,8	-1,9	-38,9	0,2
3,6-bis(hydroxyméthyl)-2,5-pipérazinedione	$C_6H_{10}N_2O_4$	5625-41-2	-875,6	-865,1	-10,5	-897,4	21,8

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Domalski *et al.*	
				$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
2,3-diméthyl-2,3-dinitrobutane	$C_6H_{12}N_2O_4$	3964-18-9	-311,5	-326,0	14,5	-329,0	17,5
1-méthyl-2,4-dinitrobenzène	$C_7H_6N_2O_4$	121-14-2	-66,4	-69,6	3,2	-60,8	-5,7
1-méthyl-2,6-dinitrobenzène	$C_7H_6N_2O_4$	606-20-2	-51,1	-61,9	10,8	-56,8	5,7
(dinitrométhyl)benzène	$C_7H_6N_2O_4$	25321-14-6	-41,4	-41,4	0,0	-	-
méthyl(4-nitrophényl)carbamate	$C_8H_8N_2O_4$	1943-87-9	-427,9	-411,2	-16,7	-	-
2,4-dinitro-1,3-diméthylbenzène	$C_8H_8N_2O_4$	603-02-1	-85,6	-88,7	3,1	-90,1	4,5
4,6-dinitro-1,3-diméthylbenzène	$C_8H_8N_2O_4$	616-72-8	-102,0	-96,4	-5,6	-94,1	-7,9
(1,1'-bipyrrolidine)-2,2',5,5'-tétrone	$C_8H_8N_2O_4$	3741-24-0	-709,4	-709,4	0,0	-709,4	0,0
N,N'-dicarbéthoxy-éthylènediamine	$C_8H_{16}N_2O_4$	539-71-9	-980,9	-908,6	-72,3	-	-
1,5-dinitronaphtalène	$C_{10}H_6N_2O_4$	605-71-0	29,7	12,3	17,4	2,4	27,3
1,8-dinitronaphtalène	$C_{10}H_6N_2O_4$	602-38-0	39,7	60,8	-21,1	2,4	37,3
N-hippuroylglycine	$C_{11}H_{12}N_2O_4$	1145-32-0	-832,7	-829,6	-3,1	-829,2	-3,5
acide 1-amino-2,5-diméthyl-1H-pyrrole-3,4-dicarboxylique diéthyl ester	$C_{12}H_{18}N_2O_4$	4815-44-5	-760,0	-836,7	76,7	-	-
(Z)-1,2-bis(4-nitrophényl)éthylène	$C_{14}H_{10}N_2O_4$	619-93-2	74,1	85,1	-11,0	68,6	5,5
(E)-1,2-bis(4-nitrophényl)éthylène	$C_{14}H_{10}N_2O_4$	736-31-2	54,9	85,1	-30,2	62,8	-7,9
2,2',4,4'-tétraméthyl-3,3'-dicarbéthoxy-dipyrrylméthène	$C_{19}H_{24}N_2O_4$	2407-87-6	-824,0	-935,6	111,6	-	-
4,4'-méthylènebis(acide 2,5-diméthyl-1H-pyrrole-3-carboxylique)diéthyl ester	$C_{19}H_{26}N_2O_4$		-873,9	-872,0	-1,9	-	-
5,5'-méthylènebis(acide 2,4-diméthyl-1H-pyrrole-3-carboxylique)diéthyl ester	$C_{19}H_{26}N_2O_4$	5442-92-2	-853,4	-872,0	18,6	-	-
4,4'-méthylènebis(acide 3,5-diméthyl-1H-pyrrole-2-carboxylique)diéthyl ester	$C_{19}H_{26}N_2O_4$	6285-54-7	-868,4	-851,8	-16,6	-	-
4,4'-éthylènebis(acide 2,5-diméthyl-1H-pyrrole-3-carboxylique)diéthyl ester	$C_{20}H_{28}N_2O_4$		-891,7	-1018,3	126,6	-	-
N,N'-bis(2-méthoxyphényl)téréphtalamide	$C_{22}H_{20}N_2O_4$	36360-34-6	-507,9	-513,4	5,5	-575,6	67,7
N,N'-bis(3-méthoxyphényl)téréphtalamide	$C_{22}H_{20}N_2O_4$	6957-81-9	-549,2	-550,7	1,5	-581,6	32,4
N,N'-bis(4-méthoxyphényl)téréphtalamide	$C_{22}H_{20}N_2O_4$	7144-15-2	-548,4	-550,7	2,3	-585,6	37,2
alloxane monohydrate	$C_4H_4N_2O_5$	2244-11-3	-1000,7	-999,8	-0,9	-	-
2,4-dinitrophénol	$C_6H_4N_2O_5$	51-28-5	-232,7	-219,9	-12,8	-217,2	-15,5
2,6-dinitrophénol	$C_6H_4N_2O_5$	573-56-8	-209,9	-219,9	10,0	-204,2	-5,7
N-serylserine	$C_6H_{12}N_2O_5$	6620-95-7	-1177,7	-1178,8	1,1	-1174,9	-2,8
2,4-dinitro-1-méthoxybenzène	$C_7H_6N_2O_5$	119-27-7	-186,6	-174,9	-11,7	-195,5	8,9
2,6-dinitro-1-méthoxybenzène	$C_7H_6N_2O_5$	3535-67-9	-189,3	-143,4	-45,9	-190,5	1,2
2,4-dinitro-1-éthoxybenzène	$C_8H_8N_2O_5$	610-54-8	-226,4	-197,4	-29,0	-228,5	2,1
2,4-dinitro-1-naphtol	$C_{10}H_6N_2O_5$	605-69-6	-181,4	-164,9	-16,5	-175,9	-5,5
4-hydroxy-5,4'-bis(acide 2-méthyl-1H-pyrrole-3-carboxylique)diéthyl ester	$C_{16}H_{20}N_2O_5$		-1007,8	-1144,2	136,4	-	-
2,4-dinitro-1,3-benzènediol	$C_6H_4N_2O_6$	519-44-8	-415,6	-397,1	-18,5	-393,9	-21,7
4,6-dinitro-1,3-benzènediol	$C_6H_4N_2O_6$	616-74-0	-439,6	-397,1	-42,5	-406,9	-32,7

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Domalski *et al.*	
				$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
acide 3,5-dinitrobenzoïque	$C_7H_4N_2O_6$	99-34-3	-432,6	-455,5	22,9	-422,9	-9,7
2,4-dinitrophénoxyéthanol	$C_8H_8N_2O_6$	2831-60-9	-398,7	-388,6	-10,1	-414,4	15,7
1,2-bis(3-carboxypropanoyl)hydrazine	$C_8H_{12}N_2O_6$	5343-02-2	-1329,4	-1301,2	-28,2	-	-
N,N'-1,2-éthanediylbis-(N-(carboxyméthyl)glycine)	$C_{10}H_{16}N_2O_8$	60-00-4	-1759,5	-1693,1	-66,4	-1843,0	83,5
cytosine	$C_4H_5N_3O$	71-30-7	-221,3	-221,3	0,0	-	-
créatinine	$C_4H_7N_3O$	60-27-5	-238,5	-238,9	0,4	-	-
4-phénylfurazane amine	$C_8H_7N_3O$	10349-14-1	220,9	220,9	0,0	-	-
créatine	$C_4H_9N_3O_2$	57-00-1	-537,2	-521,3	-15,9	-	-
L-histidine	$C_6H_9N_3O_2$	71-00-1	-441,8	-441,8	0,0	-	-
4-phényl-3-furazancarboxamide	$C_9H_7N_3O_2$	18600-75-4	79,2	77,9	1,3	-	-
4-(4-méthylphényl)-3-furazancarboxamide	$C_{10}H_9N_3O_2$		42,1	43,4	-1,3	-	-
1,3,5-triazine-2,4,6(1H,3H,5H)-triol	$C_3H_3N_3O_3$	108-80-5	-703,5	-701,3	-2,3	-423,8	-279,8
3-méthyl-4-nitrofuroxane	$C_3H_3N_3O_4$	49558-02-3	100,7	100,7	0,0	-	-
2,3-dinitroaniline	$C_6H_5N_3O_4$	602-03-9	-11,7	-24,2	12,5	-30,7	19,0
2,4-dinitroaniline	$C_6H_5N_3O_4$	97-02-9	-67,8	-57,0	-10,8	-47,8	-20,0
2,5-dinitroaniline	$C_6H_5N_3O_4$	619-18-1	-44,3	-57,0	12,7	-71,3	27,0
2,6-dinitroaniline	$C_6H_5N_3O_4$	606-22-4	-50,6	-61,2	10,6	-51,8	1,2
3,4-dinitroaniline	$C_6H_5N_3O_4$	610-41-3	-32,6	-20,1	-12,5	-26,7	-5,9
3,5-dinitroaniline	$C_6H_5N_3O_4$	618-87-1	-38,9	-52,8	13,9	-63,8	24,9
N-méthyl-2,6-dinitroaniline	$C_7H_7N_3O_4$	5910-19-0	-14,0	-33,5	19,5	-35,9	21,9
N-méthyl-2,4-dinitroaniline	$C_7H_7N_3O_4$	2044-88-4	-67,5	-33,5	-34,0	-27,4	-40,2
N,N-diméthyl-2,4-dinitroaniline	$C_8H_9N_3O_4$	1670-17-3	-30,7	-30,7	0,0	-14,1	-16,6
N-phényl-2,4-dinitroaniline	$C_{12}H_9N_3O_4$	961-68-2	22,5	38,1	-15,6	70,6	-48,1
N-(N-glycyl-DL-phénylalanyl)alanine	$C_{14}H_{19}N_3O_4$	18828-33-6	-926,8	-963,1	36,3	-962,1	35,3
N-méthyl-N-(2-nitroxyéthyl)nitramine	$C_3H_7N_3O_5$	17096-47-8	-149,8	-149,7	-0,2	-197,7	47,9
trinitrométhane	CHN_3O_6	517-25-9	-48,1	-48,1	0,0	-48,0	-0,1
1,1,1-trinitroéthane	$C_2H_3N_3O_6$	595-86-8	-112,4	-41,6	-70,8	-	-
2-méthyl-2,3,3-trinitrobutane	$C_5H_9N_3O_6$	5324-72-1	-331,5	-265,3	-66,2	-271,6	-60,0
1,3,5-trinitrobenzène	$C_6H_3N_3O_6$	99-35-4	-47,7	-73,5	25,8	-37,4	-10,3
2-méthyl-2,3,3-trinitropentane	$C_6H_{11}N_3O_6$	62154-78-3	-290,3	-289,8	-0,5	-305,2	14,9
2,4,6-trinitrotoluène	$C_7H_5N_3O_6$	118-96-7	-80,5	-92,6	12,1	-68,8	-11,8
2-éthyl-1,3,5-trinitrobenzène	$C_8H_7N_3O_6$	13985-60-9	-90,6	-93,1	2,5	-88,9	-1,7
2,4-diméthyl-1,3,5-trinitrobenzène	$C_8H_7N_3O_6$	632-92-8	-102,7	-111,7	9,0	-98,2	-4,6

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Domalski *et al.*	
				$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
1,1,1-trinitro-2-phényléthane	$C_8H_7N_3O_6$	38677-56-4	-18,5	18,6	-37,1	-	-
1,3,8-trinitronaphtalène	$C_{10}H_5N_3O_6$	2364-46-7	24,3	30,0	-5,7	-23,2	47,5
1,4,5-trinitronaphtalène	$C_{10}H_5N_3O_6$	2243-95-0	36,4	30,0	6,4	-36,7	73,1
2,2,2-trinitroéthanol	$C_2H_3N_3O_7$	918-54-7	-261,0	-231,5	-29,5	-	-
2,4,6-trinitrophénol	$C_6H_3N_3O_7$	88-89-1	-248,5	-250,7	2,2	-216,2	-32,3
3-méthyl-2,4,6-trinitrophénol	$C_7H_5N_3O_7$	602-99-3	-255,9	-269,8	13,9	-245,6	-10,3
2-méthoxy-1,3,5-trinitrobenzène	$C_7H_5N_3O_7$	606-35-9	-157,4	-174,2	16,8	-202,6	45,2
2-éthoxy-1,3,5-trinitrobenzène	$C_8H_7N_3O_7$	4732-14-3	-204,6	-196,8	-7,8	-235,6	31,0
2-méthyl-2-nitro-1,3-propanediol dinitrate	$C_4H_7N_3O_8$	4055-94-1	-374,1	-379,6	5,5	-441,6	67,5
2-(2,4-dinitrophénoxy)-éthanol nitrate	$C_8H_7N_3O_8$	62030-34-6	-292,8	-287,2	-5,6	-338,8	46,0
2-éthyl-2-(hydroxyméthyl)-1,3-propanediol trinitrate	$C_6H_{11}N_3O_9$	2921-92-8	-479,9	-461,6	-18,3	-534,7	54,8
N,N-bis(2-(bis(carboxyméthyl)amino)éthyl)glycine	$C_{14}H_{23}N_3O_{10}$	67-43-6	-2225,2	-2094,5	-130,7	-2331,8	106,6
5-hydroxytétrazole	CH_2N_4O	16421-52-6	6,3	3,9	2,4	-	-
5-méthoxy-1H-tétrazole	$C_2H_4N_4O$	5376-15-8	69,1	69,1	0,0	-	-
1-acétyl-1H-tétrazole	$C_3H_4N_4O$	21565-41-3	81,5	81,5	0,0	-	-
1,4-diméthyl-5-tétrazolone	$C_3H_6N_4O$	13576-20-0	-27,6	-27,6	0,0	-	-
1,7-dihydro-6H-purin-6-one	$C_5H_4N_4O$	68-94-0	-110,8	-110,8	0,0	-	-
1-phényl-5-hydroxytétrazole	$C_7H_4N_4O$	51449-77-5	111,8	114,2	-2,4	-	-
nitroguanidine	$CH_4N_4O_2$	556-88-7	-86,6	-114,1	27,5	-	-
azodicarbonamide	$C_2H_4N_4O_2$	123-77-3	-292,5	-292,5	0,0	-	-
tétrahydro-1,2,4,5-tétrazine-3,6-dione	$C_2H_4N_4O_2$	624-40-8	-261,2	-261,2	0,0	-	-
acide oxalique dihydrazide	$C_2H_6N_4O_2$	996-98-5	-295,2	-278,4	-16,8	-	-
1,2-hydrazinedicarboxamide	$C_2H_6N_4O_2$	110-21-4	-498,7	-492,9	-5,8	-	-
6-amino-1,3,5-triazine-2,4(1H,3H)-dione	$C_3H_4N_4O_2$	645-93-2	-492,8	-466,9	-25,9	-	-
propanedioyl dihydrazide	$C_3H_8N_4O_2$	3815-86-9	-332,6	-332,6	0,0	-	-
glycolurile	$C_4H_6N_4O_2$	496-46-8	-492,8	-492,8	0,0	-	-
1,4-dinitrosopipérazine	$C_4H_8N_4O_2$	140-79-4	93,1	90,2	2,9	-26,0	119,1
butanedioyl dihydrazide	$C_4H_{10}N_4O_2$	4146-43-4	-366,6	-374,9	8,3	-	-
3,7-dihydro-1H-purine-2,6-dione	$C_5H_4N_4O_2$	69-89-6	-379,6	-379,6	0,0	-	-
D-arginine	$C_6H_{14}N_4O_2$	157-06-2	-623,5	-639,4	15,9	-	-
2-phényl-5-carboxytétrazole	$C_8H_6N_4O_2$	54798-92-4	-41,3	-41,3	0,0	-	-
1,2-bis(diphénylcarbamoyl)hydrazine	$C_{26}H_{22}N_4O_2$	75011-84-6	54,4	43,5	10,9	-	-
éthylène-bis-diphénylurée	$C_{28}H_{26}N_4O_2$	6123-88-2	-195,5	-234,6	39,1	-202,5	7,0
acide 8,13-diéthyl-3,7,12,17-tétraméthyl-21H,23H-porphine-2-propanoïque méthyl ester	$C_{32}H_{36}N_4O_2$	5174-83-4	-387,9	-431,1	43,2	-	-

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Domalski *et al.*	
				$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
acide 8,13-diéthyl-3,7,12,17,20-pentaméthyl-21H,23H-porphine-2-propanoïque méthyl ester	$C_{33}H_{38}N_4O_2$	33719-66-3	-381,9	-415,2	33,3	-	-
désoxophylloérythrine monométhyl ester	$C_{34}H_{38}N_4O_2$	33902-83-9	-181,7	-371,2	189,5	-	-
2,5-dioxo-4-imidazolidinylurée	$C_4H_6N_4O_3$	97-59-6	-717,6	-717,6	0,0	-	-
acide urique	$C_5H_4N_4O_3$	69-93-2	-618,8	-618,8	0,0	-	-
pyrophaeophorbide-a-monométhyl ester	$C_{34}H_{36}N_4O_3$	6453-67-4	-374,9	-321,0	-53,9	-	-
phylloérythrine monométhyl ester	$C_{34}H_{36}N_4O_3$	33719-95-8	-368,2	-347,5	-20,7	-	-
N,N'-dinitro-1,2-éthanediamine	$C_2H_6N_4O_4$	505-71-5	-103,8	-103,8	0,0	-101,0	-2,8
1,4-dinitropipérazine	$C_4H_8N_4O_4$	4164-37-8	-55,2	-52,3	-2,9	-56,0	0,8
2,4-dinitrophénylhydrazine	$C_6H_6N_4O_4$	119-26-6	50,0	46,7	3,3	68,7	-18,7
5-nitrofurazone	$C_6H_6N_4O_4$	59-87-0	-223,6	-223,6	0,0	-	-
4,4'-dinitrohydrazobenzène	$C_{12}H_{10}N_4O_4$	22719-28-4	109,7	121,7	-12,0	140,5	-30,8
protoporphyrine	$C_{34}H_{34}N_4O_4$	553-12-8	-521,7	-900,7	379,0	-	-
rhodoporphyrine (XV) diméthyl ester	$C_{34}H_{38}N_4O_4$	22361-85-9	-531,9	-925,8	393,9	-	-
mésoporphyrine (IX) diméthyl ester	$C_{36}H_{42}N_4O_4$	1263-63-4	-842,4	-836,8	-5,6	-	-
N,N'-diméthyl-N,N'-dinitroéthanediamide	$C_4H_6N_4O_6$	14760-99-7	-305,5	-302,6	-2,9	-	-
2,4,6-trinitro-N-méthylaniline	$C_7H_6N_4O_6$	1022-07-7	-49,8	-64,3	14,5	-34,4	-15,4
2,4,N-trinitro-N-méthylaniline	$C_7H_6N_4O_6$	19092-03-6	16,2	25,2	-9,0	86,6	-70,4
2,6,N-trinitro-N-méthylaniline	$C_7H_6N_4O_6$	102153-82-2	39,5	25,2	14,3	78,1	-38,6
chlorin-p6-triméthyl ester	$C_{36}H_{40}N_4O_6$	62786-89-4	-1242,8	-1227,3	-15,5	-	-
chloroporphyrin-e6-triméthyl ester	$C_{37}H_{42}N_4O_6$	28211-96-3	-983,7	-1024,2	40,5	-	-
chlorin-e6-triméthyl ester	$C_{37}H_{42}N_4O_6$	71217-51-1	-946,4	-909,9	-36,5	-	-
1-nitroacétaldéhyde o-(1,1-dinitroéthyl)oxime	$C_4H_6N_4O_7$	10565-52-3	-165,5	-165,5	0,0	-	-
2,2,3,3-tétranitrobutane	$C_4H_6N_4O_8$	20919-97-5	-182,2	-196,6	14,4	-198,6	16,4
1,1,1,4-tétranitrobutane	$C_4H_6N_4O_8$	20919-96-4	-189,7	-155,0	-34,7	-	-
N-nitrobis(2-hydroxyéthyl)amine dinitrate	$C_4H_8N_4O_8$	4185-47-1	-257,4	-289,2	31,8	-342,0	84,6
dinitrobutylèneglycol diuréthane	$C_6H_{10}N_4O_8$		-835,0	-788,9	-46,1	-	-
1,4,5,8-tétranitronaphtalène	$C_{10}H_4N_4O_8$	4793-98-0	47,5	47,8	-0,3	-75,7	123,2
coproporphyrin-(I) tétraméthyl ester	$C_{40}H_{46}N_4O_8$	25767-20-8	-1480,3	-1594,3	114,0	-	-
2,4,6-trinitrophénoxyéthyl nitrate	$C_8H_6N_4O_{10}$	62030-33-5	-292,8	-286,6	-6,2	-345,8	53,0
pentaérythritol tétranitrate	$C_5H_8N_4O_{12}$	78-11-5	-538,6	-521,7	-16,9	-615,5	76,9
5-cyclohexène-(1α,2β,3β,4α)-1,2,3,4-tétrol tétranitrate	$C_6H_6N_4O_{12}$	29585-45-3	-387,6	-355,1	-32,5	-	-
α-époxyconduritol-E tétranitrate	$C_6H_6N_4O_{13}$	23627-80-7	-444,1	-444,1	0,0	-735,5	291,4
α-D-méthyl glucopyranoside-2,3,4,6-tétranitrate	$C_7H_{10}N_4O_{14}$	13225-10-0	-825,8	-840,5	14,7	-945,8	120,0
isouroporphyrine (II) octaméthyl ester	$C_{48}H_{54}N_4O_{16}$	10170-03-3	-2624,0	-2679,5	55,5	-	-

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Domalski *et al.*	
				$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
N-(1H-tétrazol-5-yl)-acétamide	$C_3H_5N_5O$	6158-77-6	-5,1	-17,3	12,2	-	-
4,6-diamino-1,3,5-triazin-2(1H)-one	$C_3H_5N_5O$	645-92-1	-299,7	-208,3	-91,4	-	-
guanine	$C_5H_5N_5O$	73-40-5	-183,9	-157,9	-26,0	-	-
aminonitroguanidine	$CH_5N_5O_2$	27256-18-4	25,0	4,1	21,0	-	-
N-nitro-1H-1,2,4-triazol-3-amine	$C_2H_3N_5O_2$	34815-01-5	112,3	134,8	-22,5	-	-
5-méthyl-N-nitro-1H-1,2,4-triazol-3-amine	$C_3H_5N_5O_2$	42216-41-1	53,3	79,2	-25,9	-	-
5-tétrazolyluréthane	$C_4H_7N_5O_2$	5326-16-9	-220,0	-207,8	-12,2	-	-
3-amino-1,2,4-triazole nitrate	$C_2H_5N_5O_3$	13040-74-9	-171,1	-170,4	-0,7	-	-
1-formamido-2-nitroguanidine	$C_2H_5N_5O_3$		-146,9	-146,9	0,0	-	-
1-nitro-3-guanidinourée	$C_2H_5N_5O_3$	28787-21-5	-313,3	-313,3	0,0	-	-
1-acétamido-2-nitroguanidine	$C_3H_7N_5O_3$	42216-29-5	-193,6	-200,6	7,0	-	-
5-méthyl-1H-1,2,4-triazol-3-amine nitrate	$C_3H_7N_5O_3$	13040-75-0	-228,4	-226,0	-2,4	-	-
acétamidoguanidine nitrate	$C_3H_9N_5O_4$	75011-77-7	-494,0	-263,0	-231,0	-	-
2,4,6-trinitrophénylhydrazine	$C_6H_5N_5O_6$	653-49-6	36,7	15,9	20,8	61,7	-25,0
1,3-diamino-2,4,6-trinitrobenzène	$C_6H_5N_5O_6$	1630-08-6	-97,9	-110,4	12,5	-100,2	2,3
bis(2,2-dinitropropyl)amine	$C_6H_{11}N_5O_8$	1924-47-6	-265,4	-282,0	16,6	-303,0	37,6
N-méthyl-N,2,4,6-tétranitroaniline	$C_7H_5N_5O_8$	479-45-8	26,3	-5,5	31,8	79,6	-53,3
2,4,5,7-tétranitrocarbazole	$C_{12}H_5N_5O_8$	28453-24-9	18,8	3,2	15,6	-22,8	41,6
2,2',4,4',6-pentanitrobenzophénone	$C_{13}H_5N_5O_{11}$	32255-35-9	-114,4	-114,4	0,0	-160,6	46,2
2,2,4,4-tétrakis(hydroxyméthyl nitrate)pyranol nitrate	$C_9H_{13}N_5O_{16}$		-792,9	-807,8	14,9	-931,3	138,4
3-(5-tétrazolylazo)-butan-2-one	$C_5H_8N_6O$	74999-21-6	167,4	167,4	0,0	-	-
nitroguanylazide	$CH_2N_6O_2$	62154-79-4	298,4	305,4	-7,0	-	-
3,7-dinitroso-1,3,5,7-tétraazabicyclo[3.3.1]nonane	$C_5H_{10}N_6O_2$	101-25-7	209,6	209,6	0,0	228,7	-19,1
3-(5-tétrazolylazo)-pentan-2,4-dione	$C_6H_8N_6O_2$	74999-20-5	14,4	14,4	0,0	-	-
5-aminotétrazole nitrate	$CH_4N_6O_3$		-27,6	-37,7	10,1	-	-
guanyl azide nitrate	$CH_4N_6O_3$		15,9	8,9	7,0	-	-
diaminoguanidine nitrate	$CH_8N_6O_3$	37160-07-9	-197,0	-183,0	-14,0	-	-
hexahydro-1,3,5-trinitroso-1,3,5-triazine	$C_3H_6N_6O_3$	13980-04-6	285,9	283,3	2,6	282,3	3,6
hexahydro-1,3,5-trinitro-1,3,5-triazine	$C_3H_6N_6O_6$	121-82-4	66,9	69,5	-2,6	72,0	-5,1
1,3,5-triamino-2,4,6-trinitrobenzène	$C_6H_6N_6O_6$	3058-38-6	-139,5	-128,8	-10,7	-146,6	7,1
hexaméthylènetétramine dinitrate	$C_6H_{14}N_6O_6$		-382,9	-382,9	0,0	-	-
N-nitroso-(2,2-dinitropropyl)amine	$C_6H_{10}N_6O_9$	28464-26-8	-192,4	-161,0	-31,4	-295,8	103,4
N-nitro-bis(2,2-dinitropropyl)amine	$C_6H_{10}N_6O_{10}$	28464-24-6	-231,7	-232,3	0,6	-310,8	79,1
N,N'-dinitro-N,N'-bis(2-hydroxyéthyl)oxamide dinitrate	$C_6H_8N_6O_{12}$	62209-60-3	-561,9	-581,6	19,7	-	-

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Domalski *et al.*	
				$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
2,2',4,4',6,6'-hexanitrobiphényle	$C_{12}H_4N_6O_{12}$	4433-16-3	68,5	27,3	41,2	-33,8	102,3
(E)-2,2',4,4',6,6'-hexanitrostilbène	$C_{14}H_6N_6O_{12}$	20062-22-0	78,2	78,2	0,0	7,7	70,5
bis(2,2,2-trinitroéthoxy)méthane	$C_5H_6N_6O_{14}$	6263-74-7	-403,3	-394,2	-9,1	-	-
éthylènedinitramine diuréthanglycol dinitrate	$C_8H_{12}N_6O_{14}$		-984,3	-1013,6	29,3	-	-
1,1,1,9,9,9-hexanitro-3,5,7-trioxanonane	$C_6H_8N_6O_{15}$		-596,9	-601,5	4,6	-	-
dipentaérythritol hexanitrate	$C_{10}H_{16}N_6O_{19}$	13184-80-0	-979,6	-972,7	-6,9	-1102,1	122,5
3-picrylamino-1,2,4-triazole	$C_8H_5N_7O_6$	18212-12-9	151,5	112,5	39,0	-	-
bis(2,2,2-trinitroéthyl)amine	$C_4H_5N_7O_{12}$	34880-53-0	-33,4	-89,5	56,1	-	-
1,1,1,3,5,5,5-heptanitropentane	$C_5H_5N_7O_{14}$	20919-99-7	-153,7	-153,7	0,0	-	-
5,7-dinitro-1-picrylbenzotriazole	$C_{12}H_4N_8O_{10}$	50892-90-5	299,8	299,8	0,0	-	-
2,2',4,4',6,6'-hexanitroazobenzène	$C_{12}H_4N_8O_{12}$	19159-68-3	241,8	292,4	-50,6	175,4	66,4
3,3'-diamino-2,2',4,4',6,6'-hexanitrobiphényle	$C_{12}H_6N_8O_{12}$	17215-44-0	-14,9	-9,5	-5,4	-82,6	67,7
N-nitrosobis(2,2,2-trinitroéthyl)amine	$C_4H_4N_8O_{13}$	34882-73-0	49,2	31,5	17,7	-	-
N-nitrobis(2,2,2-trinitroéthyl)amine	$C_4H_4N_8O_{14}$	19836-28-3	-27,9	-39,8	11,9	-	-
N,3,3,3-tétranitro-N-(2,2,2-trinitroéthyl)-propylamine	$C_5H_6N_8O_{14}$	71742-94-4	-87,9	-69,6	-18,3	-	-
1,1,1,4,9,9,9-heptanitro-4-aza-6-oxanonane	$C_7H_{10}N_8O_{15}$		-303,7	-279,3	-24,4	-	-
1,1,1,5,9,9,9-heptanitro-3,7-dioxa-5-azanonane	$C_6H_8N_8O_{16}$	80308-88-9	-387,7	-399,9	12,2	-	-
2,2',4,4',4",6,6',6"-octanitroterphényle	$C_{18}H_6N_8O_{16}$	33491-88-2	94,7	94,7	0,0	-	-
saccharose octanitrate	$C_{12}H_{14}N_8O_{27}$	30236-29-4	-1364,1	-1364,1	0,0	-	-
5-nitraminotétrazole guanidinate	$C_2H_7N_9O_2$		111,2	111,2	0,0	-	-
2,4,6-trinitro-1,3,5-tris(méthylnitramino)benzène	$C_9H_9N_9O_{12}$	62030-37-9	118,1	130,5	-12,4	319,5	-201,4
2,2',2",4,4',4",6,6',6"-nonanitroterphényle	$C_{18}H_5N_9O_{18}$	51460-84-5	132,2	128,2	4,0	-28,2	160,4
1,3,5-tripicrylbenzène	$C_{24}H_9N_9O_{18}$	58505-78-5	-244,1	-39,7	-204,4	26,0	-270,1
1-(5-tétrazolyl)-4-guanyltétrazène hydrate	$C_2H_8N_{10}O$	109-27-3	189,1	189,1	0,0	-	-
1,1,1,5,7,9,13,13,13-nonanitro-3,11-dioxa-5,7,9-triazatridécane	$C_8H_{12}N_{12}O_{20}$	80308-90-3	-340,2	-340,2	0,0	-	-
2,2',2",2"',4,4',4",4"',6,6',6",6"'-dodécanitroquatraphényle	$C_{24}H_6N_{12}O_{24}$	23242-92-4	213,1	229,1	-16,0	-22,6	235,7
azo-bis(2,2',4,4',6,6'-hexanitrodiphényl)	$C_{24}H_6N_{14}O_{24}$	23987-32-8	480,0	494,2	-14,2	186,6	293,4
2,2',2",2"',4,4',4",4"',6,6',6",6"'-dodécanitro-3,3'-bis(phénylazo)biphényle	$C_{24}H_6N_{16}O_{24}$	58505-80-9	791,7	759,3	32,4	395,8	395,9

<u>Tableau IV-63</u> : Comparaison des enthalpies standard de formation en phase solide issues de la littérature avec les enthalpies représentées par la méthode développée et avec les enthalpies prévues par la méthode de Domalski *et al.*, concernant 482 molécules contenant carbone, hydrogène, oxygène et azote.

L'ensemble des résultats comparatifs est présenté de la même manière qu'au paragraphe 3.1.1. Les valeurs de résidu moyen et de moyenne quadratique calculées grâce aux contributions de groupes déterminées dans cette étude sont rappelées dans les tableaux qui suivent, à titre comparatif. A noter qu'un nombre conséquent de valeurs de contributions de groupes manque dans la méthode de Domalski *et al.* Les résidus moyens et moyennes quadratiques obtenus grâce à cette dernière technique sont donc calculés à partir d'un nombre inférieur voire très inférieur de molécules, comparé à la totalité des mille dix-sept composés traités dans notre cas. Tous les détails sont fournis dans les paragraphes qui suivent.

a. Détail des résultats de prévision

✓ Composés C_xH_y

Cent quarante-deux enthalpies standard de formation à l'état solide de substances C_xH_y (sur cent quarante-cinq) ont été calculées grâce aux contributions de groupes déterminées par Domalski et Hearing. Trois enthalpies ne peuvent donc être évaluées par cette méthode car les valeurs de contributions des deux groupes suivants n'apparaissent pas dans leur banque de contributions : C_d-$(C_d)_2$ et C_d-$(C_B)(C)$.

Voici les résultats d'estimation calculés et comparés aux résultats de représentation obtenus au moyen de la méthode développée :

Méthode	***Salmon***		***Domalski et al.***	
Unité	**Résidu moyen**	**Moyenne quadratique**	**Résidu moyen**	**Moyenne quadratique**
$kJ.mol^{-1}$	20,2	43,3	26,1	51,0
$J.g^{-1}$	95,5	219,5	119,3	235,6

Tableau IV-64 : Comparaison avec la méthode de Domalski *et al.* des résidus moyens et moyennes quadratiques obtenus sur le calcul des enthalpies standard de formation en phase solide de molécules C_xH_y.

Unité	**Ecart négatif le plus élevé (composé)**	**Ecart positif le plus élevé (composé)**
$kJ.mol^{-1}$	-196,6 (1,1,4,4-tétraphénylbutane)	267,0 ([16]annulène)
$J.g^{-1}$	-649,2 ([18]annulène)	1403,7 (biphénylène)

Tableau IV-65 : Ecarts extrêmes entre les enthalpies standard de formation en phase solide mesurées et prévues par la méthode de Domalski *et al.* de 142 molécules C_xH_y.

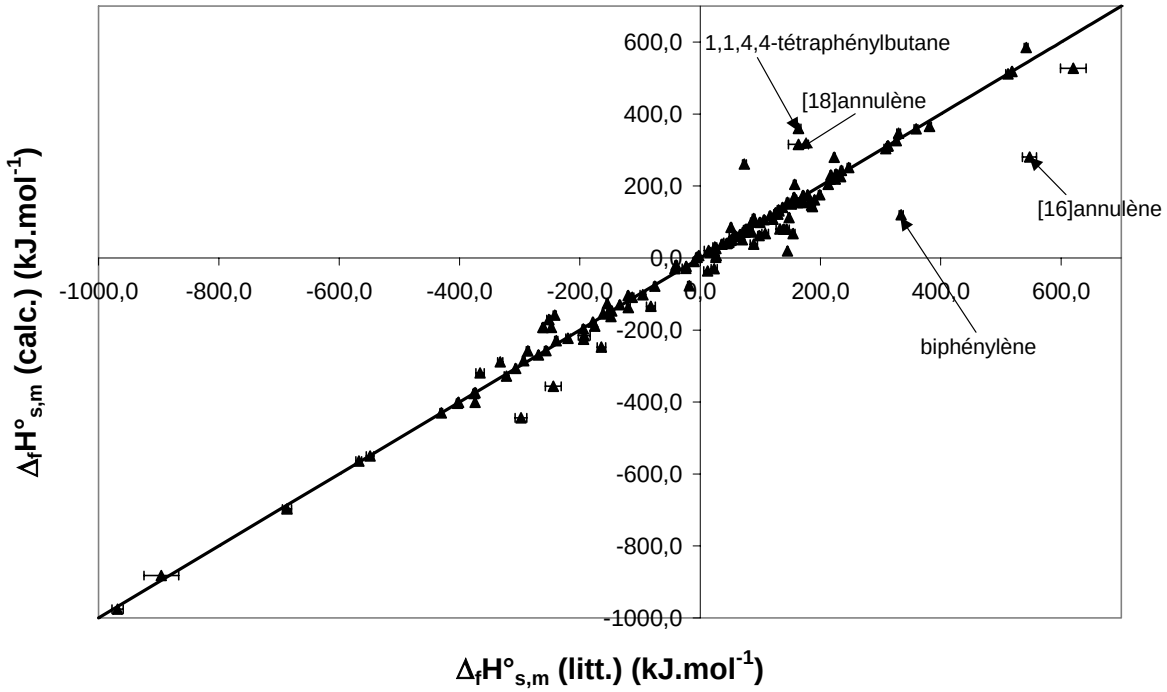


Figure IV-7 : Evaluation globale des résultats de prévision par la méthode de Domalski *et al.* des enthalpies standard de formation en phase solide de 142 composés C_xH_y.

On remarque que la méthode développée dans le cadre de la présente étude permet d'obtenir des résidus moyens et moyennes quadratiques qui sont tous meilleurs que ceux calculés grâce à la méthode de Domalski *et al.*

✓ Composés $C_xH_yO_z$

Les enthalpies standard de formation à l'état solide de trente-neuf molécules (sur les deux cent cinquante-six étudiées) n'ont pu être évaluées grâce à la méthode de Domalski *et al.* Vingt-deux valeurs de contributions de groupes manquant, seules deux cent dix-sept enthalpies standard de formation sont calculées et présentées dans le tableau IV-61. Les résultats de prévision sont ainsi comparés aux résultats de représentation des enthalpies des deux cent cinquante-six composés oxygénés de la liste établie précédemment (*cf.* paragraphe 1.1.).

Méthode	***Salmon***		***Domalski et al.***	
Unité	**Résidu moyen**	**Moyenne quadratique**	**Résidu moyen**	**Moyenne quadratique**
kJ.mol^{-1}	22,2	54,2	21,1	36,2
J.g^{-1}	131,8	335,3	98,9	153,2

Tableau IV-66 : Comparaison avec la méthode de Domalski *et al.* des résidus moyens et moyennes quadratiques obtenus sur le calcul des enthalpies standard de formation en phase solide de molécules $C_xH_yO_z$.

Unité	Ecart négatif le plus élevé (composé)	Ecart positif le plus élevé (composé)
$kJ.mol^{-1}$	-97,8 (4-diamantanol)	212,3 (acide benzènehexacarboxylique hexaméthyl ester)
$J.g^{-1}$	-557,5 (acide perbenzoïque)	972,1 (1,2-anhydro-3,4,5,6-alloinositol)

Tableau IV-67 : Ecarts extrêmes entre les enthalpies standard de formation en phase solide mesurées et prévues par la méthode de Domalski *et al.* de 217 molécules $C_xH_yO_z$.

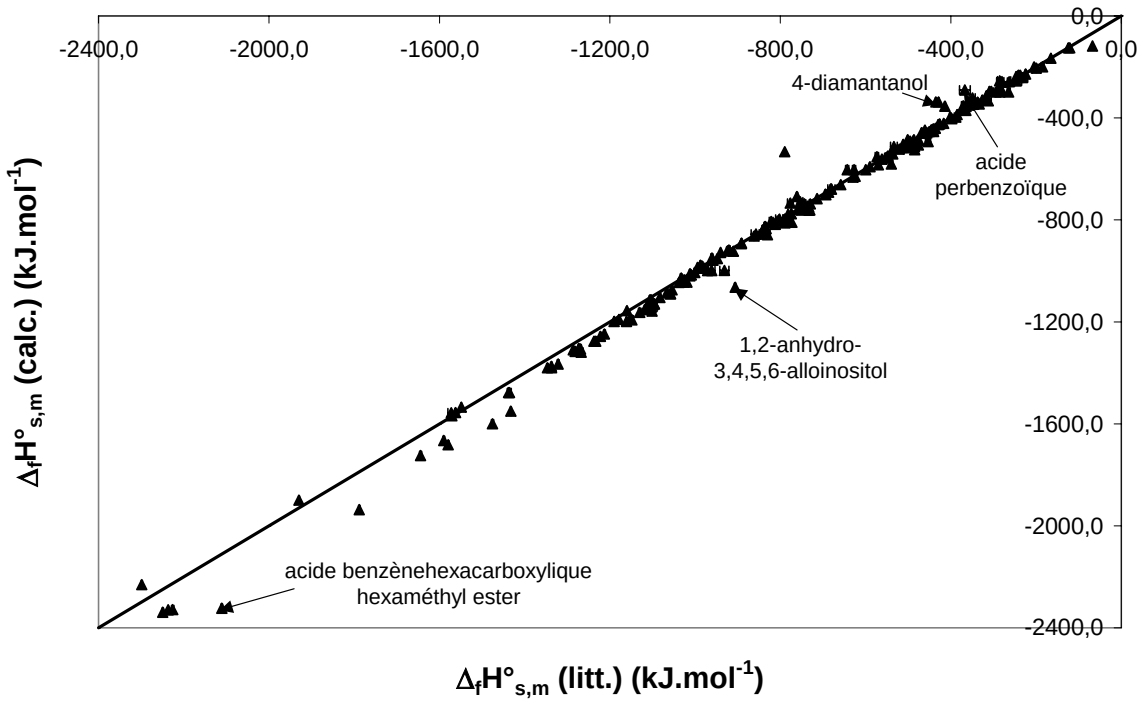


Figure IV-8 : Evaluation globale des résultats de prévision par la méthode de Domalski *et al.* des enthalpies standard de formation en phase solide de 217 composés $C_xH_yO_z$.

Les prévisions d'enthalpies sont, dans l'ensemble, meilleures que les représentations obtenues en utilisant les valeurs de contributions de groupes déterminées au cours de cette étude. En effet, les résidus moyens et moyennes quadratiques calculés sont moins élevés dans le cas de la méthode de Domalski *et al.* mais rappelons que trente-neuf enthalpies standard de formation n'ont pu être évaluées grâce à cette technique.

✓ Composés $C_xH_yN_w$

Seules quarante-deux enthalpies standard de formation en phase solide de molécules azotées ont pu être calculées avec la méthode de Domalski et Hearing. De très nombreuses valeurs de contributions de groupes C-H-N font défaut ; quatre-vingt-quatre contributions manquent afin d'évaluer la totalité des cent trente-quatre enthalpies recherchées.

Voici les résultats d'estimation qui sont comparés aux résultats de représentation :

Méthode	*Salmon*		*Domalski et al.*	
Unité	**Résidu moyen**	**Moyenne quadratique**	**Résidu moyen**	**Moyenne quadratique**
$kJ.mol^{-1}$	27,0	66,2	34,3	63,5
$J.g^{-1}$	183,7	432,0	217,5	378,0

Tableau IV-68 : Comparaison avec la méthode de Domalski *et al.* des résidus moyens et moyennes quadratiques obtenus sur le calcul des enthalpies standard de formation en phase solide de molécules $C_xH_yN_w$.

Unité	**Ecart négatif le plus élevé (composé)**	**Ecart positif le plus élevé (composé)**
$kJ.mol^{-1}$	-192,5 (mélamine)	272,1 (tribenzylamine)
$J.g^{-1}$	-1526,5 (mélamine)	946,6 (tribenzylamine)

Tableau IV-69 : Ecarts extrêmes entre les enthalpies standard de formation en phase solide mesurées et prévues par la méthode de Domalski *et al.* de 42 molécules $C_xH_yN_w$.

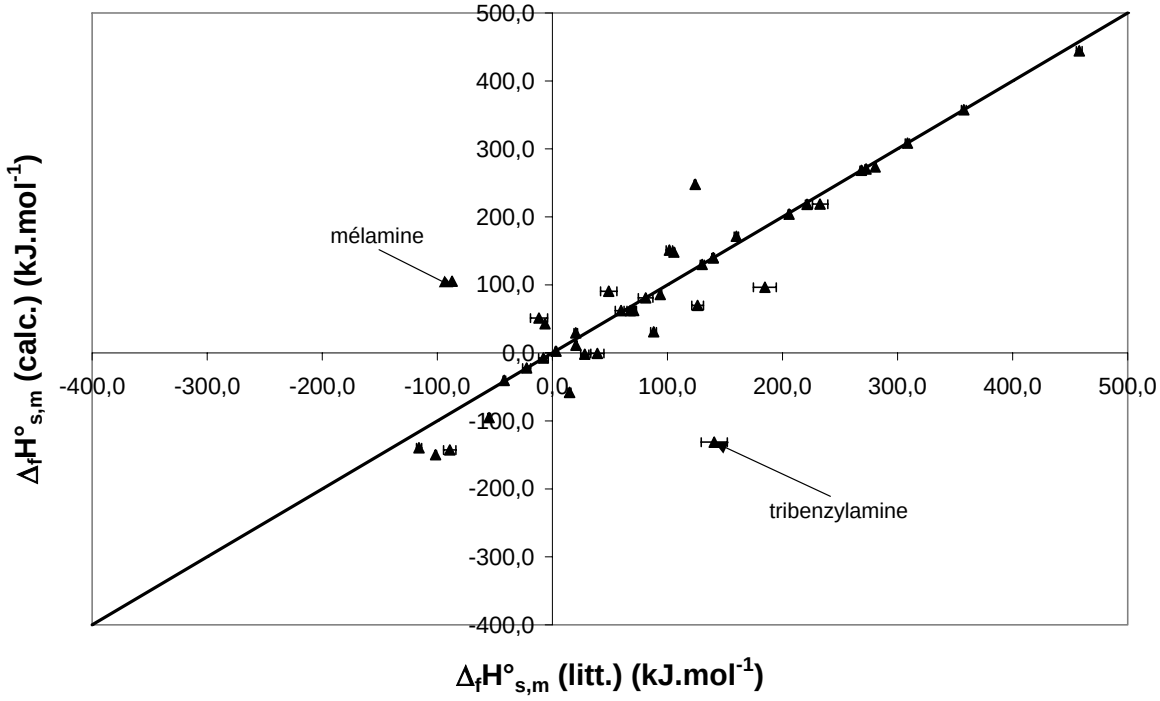


Figure IV-9 : Evaluation globale des résultats de prévision par la méthode de Domalski *et al.* des enthalpies standard de formation en phase solide de 42 composés $C_xH_yN_w$.

Le tableau IV-68 révèle que les représentations d'enthalpies standard de formation à l'état condensé des cent trente-quatre composés $C_xH_yN_w$ sont meilleures ou équivalentes aux prévisions de Domalski *et al.* Une exception apparaît pour la moyenne quadratique exprimée en joules par gramme. Cela précisé, seulement 31% des molécules azotées de la liste complète peuvent être traitées dans le cas de l'application de la méthode proposée par Domalski et Hearing, ce qui est très peu.

✓ Composés $C_xH_yN_wO_z$

La méthode d'estimation établie par Domalski *et al.* n'a permis de calculer les enthalpies standard de formation à l'état solide que de deux cent cinquante-trois substances contenant les atomes de carbone, d'hydrogène, d'oxygène et d'azote. Pas moins de cent quatre-vingt-une valeurs de contributions de groupes manquent et empêchent la prévision d'un grand nombre d'enthalpies recherchées. Rappelons que la représentation de quatre cent quatre-vingt-deux enthalpies concernant les composés mixtes est possible grâce aux contributions de groupes déterminées dans le présent travail.

L'ensemble des résultats est présenté dans ce qui suit :

Méthode	***Salmon***		***Domalski et al.***	
Unité	**Résidu moyen**	**Moyenne quadratique**	**Résidu moyen**	**Moyenne quadratique**
$kJ.mol^{-1}$	21,3	48,4	34,6	65,3
$J.g^{-1}$	106,2	248,6	155,7	290,5

<u>Tableau IV-70</u> : Comparaison avec la méthode de Domalski *et al.* des résidus moyens et moyennes quadratiques obtenus sur le calcul des enthalpies standard de formation en phase solide de molécules $C_xH_yN_wO_z$.

Unité	**Ecart négatif le plus élevé (composé)**	**Ecart positif le plus élevé (composé)**
$kJ.mol^{-1}$	-279,8 (1,3,5-triazine-2,4,6(1H,3H,5H)-triol)	395,9 (2,2',2'',2''',4,4',4'',4''',6,6',6'',6'''-dodécanitro-3,3'-bis(phénylazo)biphényle)
$J.g^{-1}$	-2167,7 (1,3,5-triazine-2,4,6(1H,3H,5H)-triol)	851,7 (α-époxyconduritol-E tétranitrate)

<u>Tableau IV-71</u> : Ecarts extrêmes entre les enthalpies standard de formation en phase solide mesurées et prévues par la méthode de Domalski *et al.* de 253 molécules $C_xH_yN_wO_z$.

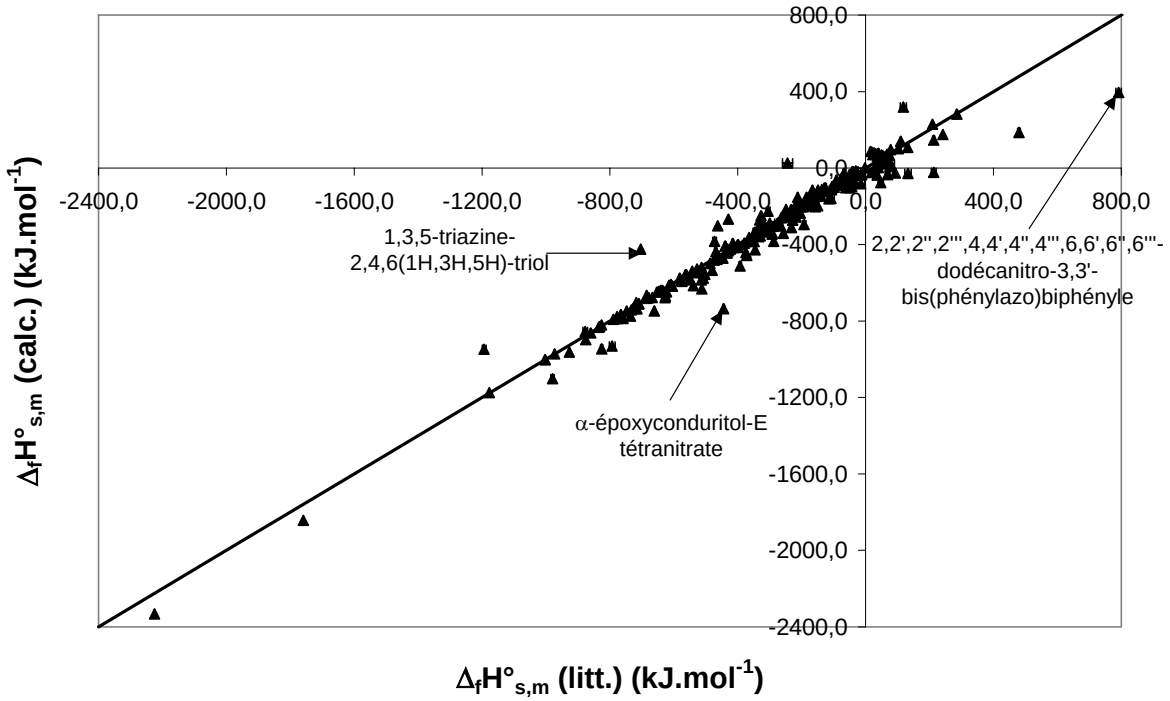


Figure IV-10 : Evaluation globale des résultats de prévision par la méthode de Domalski *et al.* des enthalpies standard de formation en phase solide de 253 composés $C_xH_yN_wO_z$.

Les résidus moyens et moyennes quadratiques calculés grâce à notre méthode sont tous meilleurs comparés à ceux obtenus en appliquant la méthode de contribution de groupes concurrente.

b. Conclusion

La méthode Domalski et Hearing n'a permis de calculer que six cent cinquante-quatre enthalpies standard de formation en phase solide sur mille dix-sept, ce qui ne représente que 64% des données recueillies dans la banque d'enthalpies standard de formation complète. En effet, de très nombreuses valeurs de contributions de groupes manquent dans la technique développée par Domalski *et al.* ce qui empêche l'estimation d'enthalpies de formation d'un nombre considérable de molécules, et en particulier de molécules contenant de l'azote.

Les résultats de représentation et de prévision sont mis en parallèle dans le tableau suivant :

Méthode	***Salmon***		***Domalski et al.***	
Unité	**Résidu moyen**	**Moyenne quadratique**	**Résidu moyen**	**Moyenne quadratique**
$kJ.mol^{-1}$	22,1	51,9	28,3	53,9
$J.g^{-1}$	121,3	298,4	132,9	248,3

Tableau IV-72 : Comparaison avec la méthode de Domalski *et al.* des résidus moyens et moyennes quadratiques obtenus sur le calcul des enthalpies standard de formation en phase solide de molécules C_xH_y, $C_xH_yO_z$, $C_xH_yN_w$ et $C_xH_yN_wO_z$.

Seule la moyenne quadratique exprimée en joules par gramme et calculée en utilisant les contributions de groupes de Domalski et Hearing est inférieure à celle obtenue dans le présent travail. En effet, dans tous les autres cas, la méthode développée dans cette étude permet d'obtenir de meilleurs résultats, et ceci pour un nombre bien supérieur de composés traités.

Par ailleurs, si l'on ne considère que les substances pour lesquelles l'écart entre l'enthalpie standard de formation en phase solide mesurée et calculée est inférieur à 20 $kJ.mol^{-1}$, la technique développée est toujours meilleure que celle de Domalski *et al.* En effet, 75% des mille dix-sept molécules traitées (soit 766/1 017) obtiennent un résidu moyen de 5,7 $kJ.mol^{-1}$. En revanche, seulement 62% des six cent cinquante-quatre molécules dont l'enthalpie a été évaluée grâce aux contributions de groupes de Domalski *et al.* (soit 407/654) obtiennent un résidu moyen un peu plus élevé : 6,0 $kJ.mol^{-1}$.

La méthode développée dans cette étude est donc plus précise et beaucoup plus complète que la seule méthode de contribution de groupes véritablement concurrente, c'est-à-dire celle de Domalski et Hearing, en particulier en ce qui concerne les molécules contenant de l'azote.

La validité de la méthode de contribution de groupes développée dans ces travaux ayant été testée sur de très nombreux composés organiques, il convient à présent de vérifier son applicabilité sur des molécules qui nous intéressent particulièrement : les matériaux énergétiques.

3.2. Prévision d'enthalpies standard de formation en phase solide de molécules énergétiques et comparaison avec des méthodes semi-empiriques

3.2.1. Comparaison avec la méthode de Politzer *et al.*

Les résultats de la méthode prédictive de Politzer *et al.* n'ont été publiés que pour cinq composés (*cf.* paragraphe 2.6.1. a. du chapitre I). La méthode de contribution de groupes développée dans ces travaux permet d'évaluer les enthalpies standard de formation en phase solide de trois de ces molécules. En effet, il manque deux valeurs de contributions de groupes nécessaires à la détermination des enthalpies standard de formation des deux composés restants : le groupe C_I-(NO_2)(N) et la correction azétidine.

Le tableau ci-dessous permet de comparer les valeurs d'enthalpies standard de formation à l'état solide mesurées et calculées grâce aux contributions de groupes déterminées dans ces travaux et grâce à l'étude de Politzer *et al.* On notera qu'un tableau semblable est présenté en annexe 14 dans lequel toutes les enthalpies sont converties en joules par gramme.

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Politzer *et al.*	
				$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
acétamide	C_2H_5NO	60-35-5	-315,6	-312,2	-3,4	-294,1	-21,5
3-nitro-1,2,4-triazole-5-one	$C_2H_2N_4O_3$	932-64-9	-129,7	-	-	-105,4	-24,3
4-nitroaniline	$C_6H_6N_2O_2$	100-01-6	-42,0	-22,1	-19,9	-46,4	4,4
1,3,5-trinitrobenzène	$C_6H_3N_3O_6$	99-35-4	-47,7	-73,5	25,8	-31,4	-16,3
1,3,3-trinitroazétidine	$C_3H_4N_4O_6$	97645-24-4	26,8	-	-	34,7	-7,9

Tableau IV-73 : Comparaison des enthalpies standard de formation en phase solide issues de la littérature avec les enthalpies prévues par la méthode développée et par la méthode de Politzer *et al.*, concernant 5 molécules énergétiques.

Les résultats de prévision obtenus par les deux méthodes considérées sont mis en parallèle dans ce qui suit. A titre d'information, les résidus moyens et moyennes quadratiques calculés grâce à la méthode de Domalski *et al.* sur l'évaluation d'enthalpies standard de formation ont été introduits. A noter que l'enthalpie relative au 3-nitro-1,2,4-triazole-5-one n'a pu être évaluée dans le cas de cette dernière technique.

Méthode	*Salmon*		*Politzer et al.*		*Domalski et al.*	
Unité	**Résidu moyen**	**Moyenne quadratique**	**Résidu moyen**	**Moyenne quadratique**	**Résidu moyen**	**Moyenne quadratique**
kJ.mol^{-1}	16,4	18,9	14,9	16,7	47,0	73,8
J.g^{-1}	107,6	113,7	140,0	187,3	282,1	395,6

Tableau IV-74 : Comparaison avec la méthode de Politzer *et al.* des résidus moyens et moyennes quadratiques obtenus sur le calcul des enthalpies standard de formation en phase solide de molécules énergétiques.

Méthode	*Salmon*		*Politzer et al.*	
Unité	**Ecart négatif le plus élevé (composé)**	**Ecart positif le plus élevé (composé)**	**Ecart négatif le plus élevé (composé)**	**Ecart positif le plus élevé (composé)**
$kJ.mol^{-1}$	-19,9 (4-nitroaniline)	25,8 (1,3,5-trinitrobenzène)	-24,3 (3-nitro-1,2,4-triazole-5-one)	4,4 (4-nitroaniline)
$J.g^{-1}$	-144,3 (4-nitroaniline)	121,3 (1,3,5-trinitrobenzène)	-363,4 (acétamide)	32,2 (4-nitroaniline)

Tableau IV-75 : Ecarts extrêmes entre les enthalpies standard de formation en phase solide mesurées et prévues par la méthode développée et par la méthode de Politzer *et al.* de molécules énergétiques.

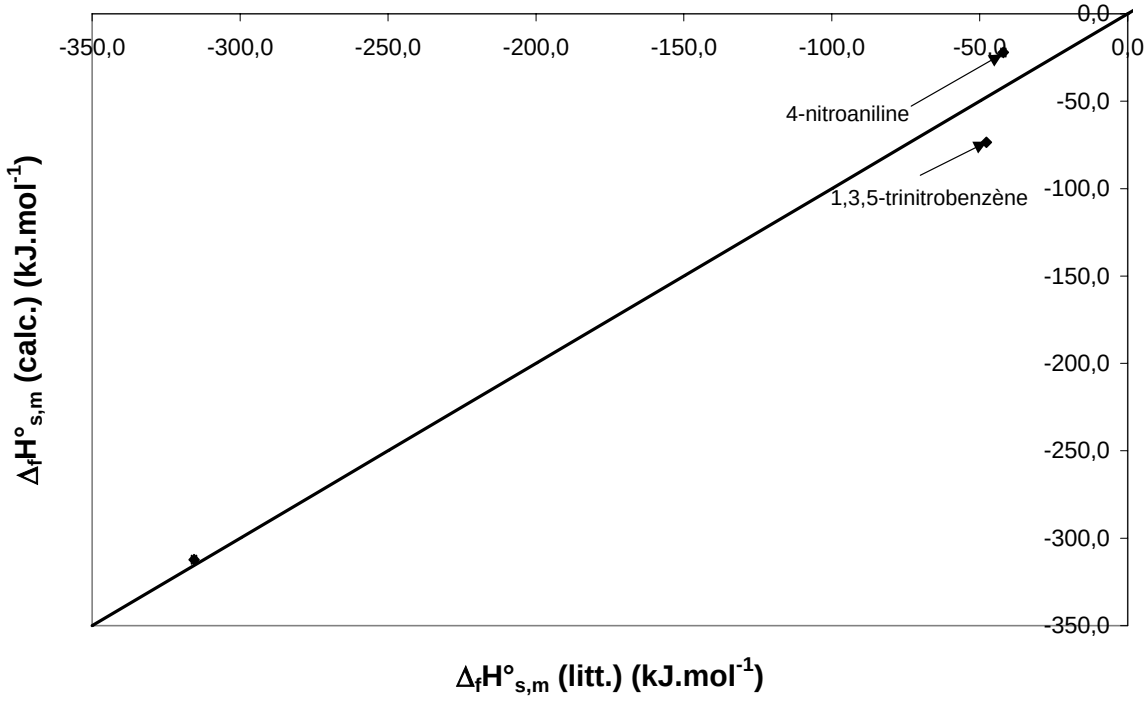
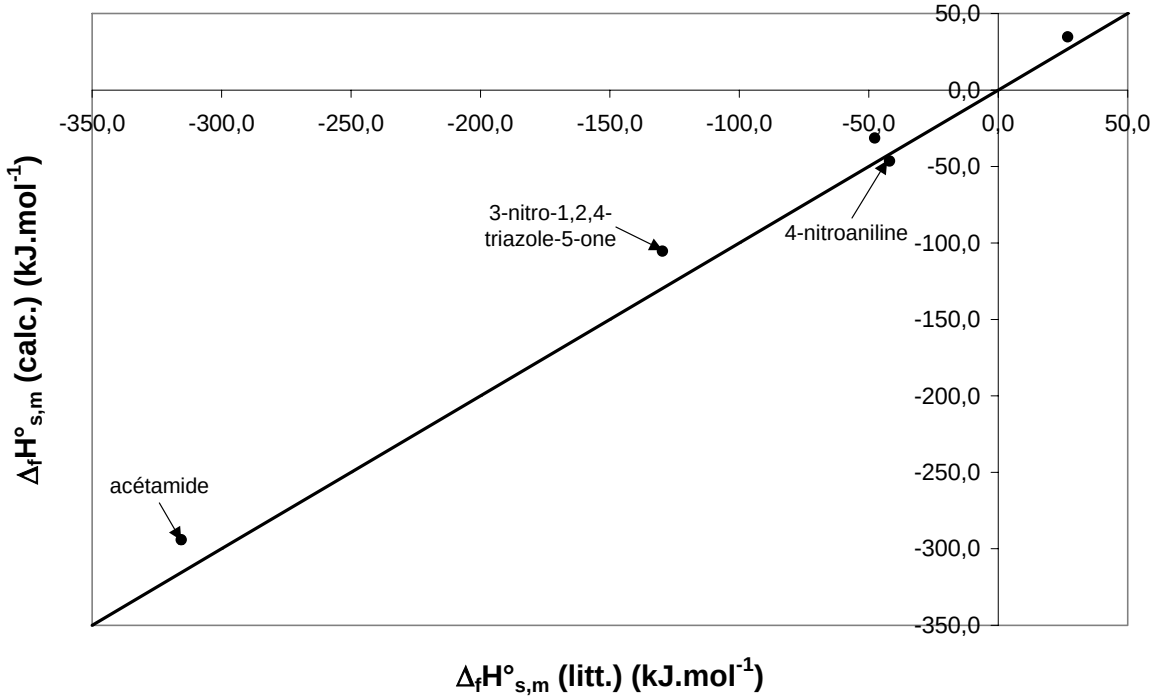


Figure IV-11 : Evaluation globale des résultats de prévision par la méthode développée des enthalpies standard de formation en phase solide de 3 composés énergétiques.



<u>Figure IV-12</u> : Evaluation globale des résultats de prévision par la méthode de Politzer *et al.* des enthalpies standard de formation en phase solide de 5 composés énergétiques.

Les résultats figurant au tableau IV-74 montrent que les résidu moyen et moyenne quadratique calculés en kilojoules par mole sont à peu près équivalents, que la technique utilisée soit celle établie dans cette étude ou celle de Politzer *et al.* Par contre, les moyennes exprimées en joules par gramme sont meilleures dans le cas de l'évaluation des enthalpies standard de formation en phase solide au moyen des contributions de groupes déterminées. La moyenne quadratique ainsi calculée est environ 4,4 fois meilleure à l'objectif fixé pour obtenir des estimations fiables d'enthalpies.

On remarquera que les prévisions effectuées grâce à la méthode de Domalski *et al.* sont très peu satisfaisantes comparées aux résultats obtenus grâce aux deux autres méthodes étudiées dans ce paragraphe.

Les résultats comparatifs peuvent également être représentés de la manière suivante :

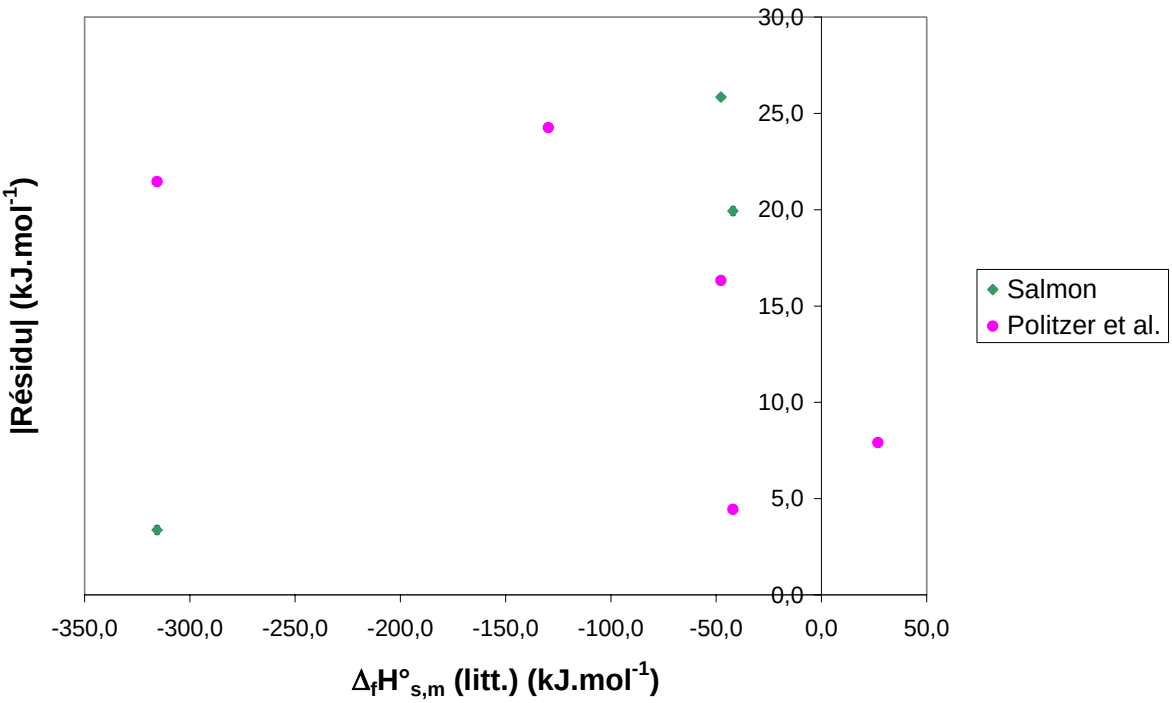


Figure IV-13 : Comparaison de la valeur absolue des résidus obtenus grâce à la méthode développée et à la méthode de Politzer *et al.*

La figure IV-13 montre que le seul composé pour lequel l'écart absolu est plus élevé que ceux calculés au moyen de la méthode de Politzer *et al.* est le 1,3,5-trinitrobenzène. Or, cette molécule peut cristalliser sous plusieurs formes. On notera que Radomska *et al.* [181] ont publié une valeur d'enthalpie de transition de phase pour ce composé : ΔH_{trs} (CI, CII) = 1,9 kJ.mol^{-1} à 370 K.

3.2.2. Comparaison avec la méthode de Rice *et al.*

La méthode de Rice *et al.* a permis de déterminer les valeurs d'enthalpies standard de formation à l'état solide de quarante-quatre molécules énergétiques (*cf.* paragraphe 2.6.1. b. du chapitre I). Quarante-deux de ces enthalpies ont été calculées grâce à la méthode développée dans ces travaux. De nombreuses corrections de structure devant intervenir dans la molécule de CL-20 (ou hexanitrohexaazaisowurtzitane), la méthode de contribution de groupes établie ne peut pas évaluer d'enthalpies pour les formes ε et β de ce composé.

Le tableau IV-76 rassemble les valeurs d'enthalpies standard de formation en phase solide issues de la littérature pour chacune des quarante-quatre substances étudiées. Les calculs d'enthalpies apparaissent également dans ce tableau ainsi que les résidus associés.

L'annexe 15 comporte un tableau semblable dans lequel les valeurs sont données en joules par gramme.

De même que précédemment, l'ensemble des résultats calculés est résumé dans les tableaux IV-77 et IV-78. Les enthalpies standard de formation à l'état condensé de trente-neuf des quarante-quatre molécules étudiées ont pu être évaluées grâce à la technique développée par Domalski *et al.* Les résultats d'estimation sont donc joints aux résultats présentés dans le tableau IV-77. Enfin, les figures IV-14 et IV-15 représentent les enthalpies standard de

formation prévues par les deux méthodes prédictives envisagées (*i.e.* la présente étude et la méthode de Rice *et al.*) en fonction des valeurs mesurées. La figure IV-16 permet, quant à elle, de comparer les écarts entre les enthalpies de formation mesurées et calculées obtenus grâce à la technique développée dans ces travaux et à la méthode de Rice *et al.*

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Rice *et al.*	
				$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
trinitrométhane	CHN_3O_6	517-25-9	-48,1	-48,1	0,0	-47,7	-0,4
hexanitroéthane	$C_2N_6O_{12}$	918-37-6	79,5	-4,1	83,6	101,7	-22,2
nitroguanidine	$CH_4N_4O_2$	556-88-7	-86,6	-114,1	27,5	-31,0	-55,7
diméthylnitramine	$C_2H_6N_2O_2$	4164-28-7	-75,0	-10,2	-64,8	-72,8	-2,2
hexahydro-1,3,5-trinitroso-1,3,5-triazine	$C_3H_6N_6O_3$	13980-04-6	285,9	283,3	2,6	295,8	-9,9
hexahydro-1,3,5-trinitro-1,3,5-triazine	$C_3H_6N_6O_6$	121-82-4	66,9	69,5	-2,6	87,0	-20,1
1,4-dinitrosopipérazine	$C_4H_8N_4O_2$	140-79-4	93,1	90,2	2,9	118,0	-24,9
1,4-dinitropipérazine	$C_4H_8N_4O_4$	4164-37-8	-55,2	-52,3	-2,9	-31,0	-24,2
octahydro-1,3,5,7-tétranitro-1,3,5,7-tétraazacyclooctane	$C_4H_8N_8O_8$	2691-41-0	84,0	119,3	-35,3	107,1	-23,1
2-méthyl-2-nitropropane	$C_4H_9NO_2$	594-70-7	-229,8	-202,6	-27,2	-225,1	-4,7
pentaérythritol tétranitrate	$C_5H_8N_4O_{12}$	78-11-5	-538,6	-521,7	-16,9	-566,1	27,5
1,3,5-trinitrobenzène	$C_6H_3N_3O_6$	99-35-4	-47,7	-73,5	25,8	-68,6	20,9
2,4,6-trinitrophénol	$C_6H_3N_3O_7$	88-89-1	-248,5	-250,7	2,2	-226,8	-21,8
2,4,6-trinitrorésorcinol	$C_6H_3N_3O_8$	82-71-3	-467,5	-427,9	-39,7	-395,0	-72,6
1-nitro-2-nitrosobenzène	$C_6H_4N_2O_3$	612-29-3	102,3	25,4	76,9	207,9	-105,6
1-nitro-3-nitrosobenzène	$C_6H_4N_2O_3$	17122-21-3	104,9	25,4	79,6	91,2	13,7
1,2-dinitrobenzène	$C_6H_4N_2O_4$	528-29-0	-1,8	-10,0	8,2	-12,6	10,8
1,3-dinitrobenzène	$C_6H_4N_2O_4$	99-65-0	-27,4	-42,8	15,4	-50,2	22,8
1,4-dinitrobenzène	$C_6H_4N_2O_4$	100-25-4	-38,7	-36,8	-1,9	-45,6	6,9
2,4-dinitrophénol	$C_6H_4N_2O_5$	51-28-5	-232,7	-219,9	-12,8	-228,9	-3,8
2,6-dinitrophénol	$C_6H_4N_2O_5$	573-56-8	-209,9	-219,9	10,0	-200,0	-9,9
2,4,6-trinitroaniline	$C_6H_4N_4O_6$	489-98-5	-113,0	-92,0	-21,0	-89,1	-23,9
2-nitrophénol	$C_6H_5NO_3$	88-75-5	-204,6	-189,2	-15,4	-190,0	-14,7
3-nitrophénol	$C_6H_5NO_3$	554-84-7	-210,5	-209,0	-1,5	-193,3	-17,2
4-nitrophénol	$C_6H_5NO_3$	100-02-7	-207,1	-209,0	1,9	-208,4	1,3
3-nitroaniline	$C_6H_6N_2O_2$	99-09-2	-34,2	-22,1	-12,1	-26,4	-7,8
2-nitroaniline	$C_6H_6N_2O_2$	88-74-4	-26,1	-26,2	0,1	-32,2	6,1
2,4,6-trinitro-1,3,5-benzènetriamine	$C_6H_6N_6O_6$	3058-38-6	-139,5	-128,8	-10,7	-87,0	-52,5

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Rice *et al.*	
				$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
N-nitro-bis(2,2-dinitropropyl)amine	$C_6H_{10}N_6O_{10}$	28464-24-6	-231,7	-232,3	0,6	-284,1	52,4
2,4,6-trinitrotoluène	$C_7H_5N_3O_6$	118-96-7	-80,5	-92,6	12,1	-87,5	6,9
2-méthoxy-1,3,5-trinitrobenzène	$C_7H_5N_3O_7$	606-35-9	-157,4	-174,2	16,8	-184,1	26,7
N-méthyl-N,2,4,6-tétranitroaniline	$C_7H_5N_5O_8$	479-45-8	26,3	-5,5	31,8	-7,1	33,4
1-méthyl-2,4-dinitrobenzène	$C_7H_6N_2O_4$	121-14-2	-66,4	-69,6	3,2	-84,9	18,5
2-méthyl-1,3-dinitrobenzène	$C_7H_6N_2O_4$	606-20-2	-51,1	-61,9	10,8	-64,0	12,9
(dinitrométhyl)benzène	$C_7H_6N_2O_4$	25321-14-6	-41,4	-41,4	0,0	-45,6	4,2
2-méthyl-4,6-dinitrophénol	$C_7H_6N_2O_5$	534-52-1	-279,1	-254,4	-24,7	-270,3	-8,8
1-méthyl-4-nitrobenzène	$C_7H_7NO_2$	99-99-0	-48,1	-46,5	-1,6	-66,5	18,4
2,4,6-trinitrométaxylène	$C_8H_7N_3O_6$	632-92-8	-102,7	-111,7	9,0	-112,6	9,8
1,3,5-triméthyl-2,4,6-trinitrobenzène	$C_9H_9N_3O_6$	602-96-0	-127,6	-130,8	3,2	-135,6	8,0
1-nitronaphtalène	$C_{10}H_7NO_2$	86-57-7	42,6	43,0	-0,4	34,3	8,3
trans-2,2',4,4',6,6'-hexanitrostilbène	$C_{14}H_6N_6O_{12}$	20062-22-0	78,2	78,2	0,0	-39,8	118,0
ε-hexanitrohexaazaisowurtzitane	$C_6H_6N_{12}O_{12}$	135285-90-4	372,0	-	-	415,1	-43,1
β-hexanitrohexaazaisowurtzitane	$C_6H_6N_{12}O_{12}$	135285-90-4	431,0	-	-	406,3	24,7
diéthylèneglycol dinitrate	$C_4H_8N_2O_7$	693-21-0	-426,8	-436,3	9,5	-472,4	45,6

Tableau IV-76 : Comparaison des enthalpies standard de formation en phase solide issues de la littérature avec les enthalpies prévues par la méthode développée et par la méthode de Rice *et al.*, concernant 44 molécules énergétiques.

Méthode	*Salmon*		*Rice et al.*		*Domalski et al.*	
Unité	**Résidu moyen**	**Moyenne quadratique**	**Résidu moyen**	**Moyenne quadratique**	**Résidu moyen**	**Moyenne quadratique**
kJ.mol^{-1}	17,3	27,9	24,2	34,7	26,1	41,3
J.g^{-1}	101,6	183,6	115,9	172,2	130,0	220,0

Tableau IV-77 : Comparaison avec la méthode de Rice *et al.* des résidus moyens et moyennes quadratiques obtenus sur le calcul des enthalpies standard de formation en phase solide de molécules énergétiques.

Méthode	*Salmon*		*Rice et al.*	
Unité	**Ecart négatif le plus élevé (composé)**	**Ecart positif le plus élevé (composé)**	**Ecart négatif le plus élevé (composé)**	**Ecart positif le plus élevé (composé)**
$kJ.mol^{-1}$	-64,8 (diméthylnitramine)	83,6 (hexanitroéthane)	-105,6 (1-nitro-2-nitrosobenzène)	118,0 (trans-2,2',4,4',6,6'-hexanitrostilbène)
$J.g^{-1}$	-719,9 (diméthylnitramine)	523,1 (1-nitro-3-nitrosobenzène)	-694,5 (1-nitro-2-nitrosobenzène)	262,1 (trans-2,2',4,4',6,6'-hexanitrostilbène)

Tableau IV-78 : Ecarts extrêmes entre les enthalpies standard de formation en phase solide mesurées et prévues par la méthode développée et par la méthode de Rice *et al.* de molécules énergétiques.

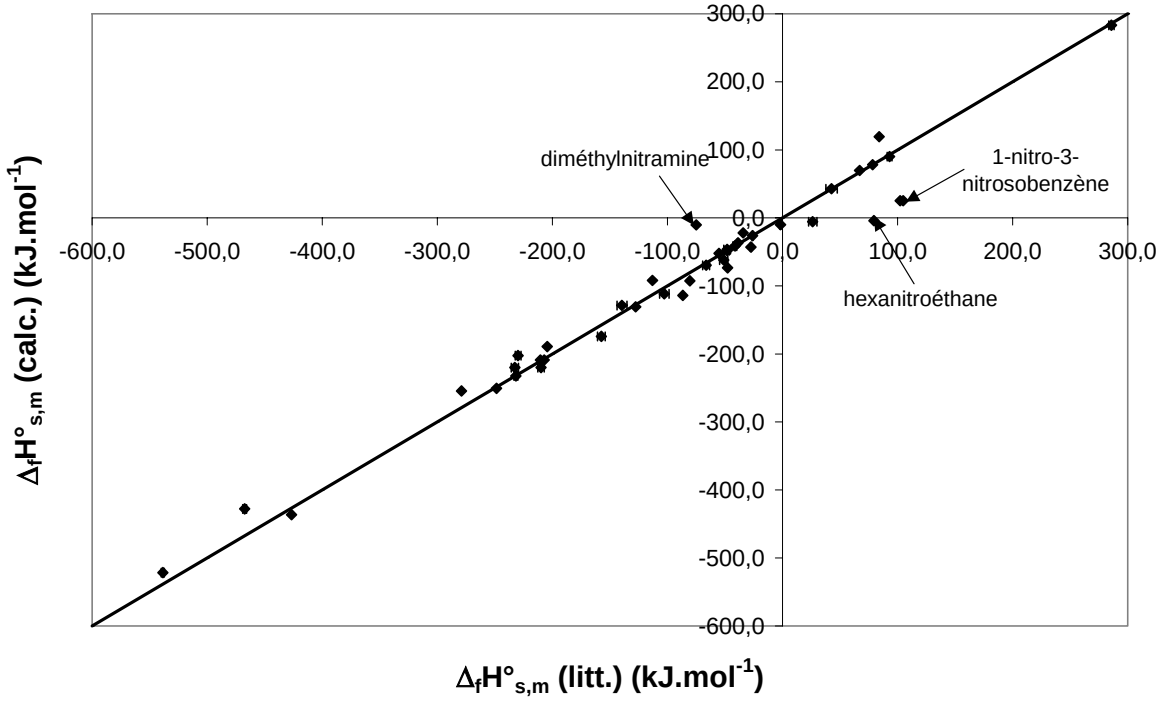


Figure IV-14 : Evaluation globale des résultats de prévision par la méthode développée des enthalpies standard de formation en phase solide de 42 composés énergétiques.

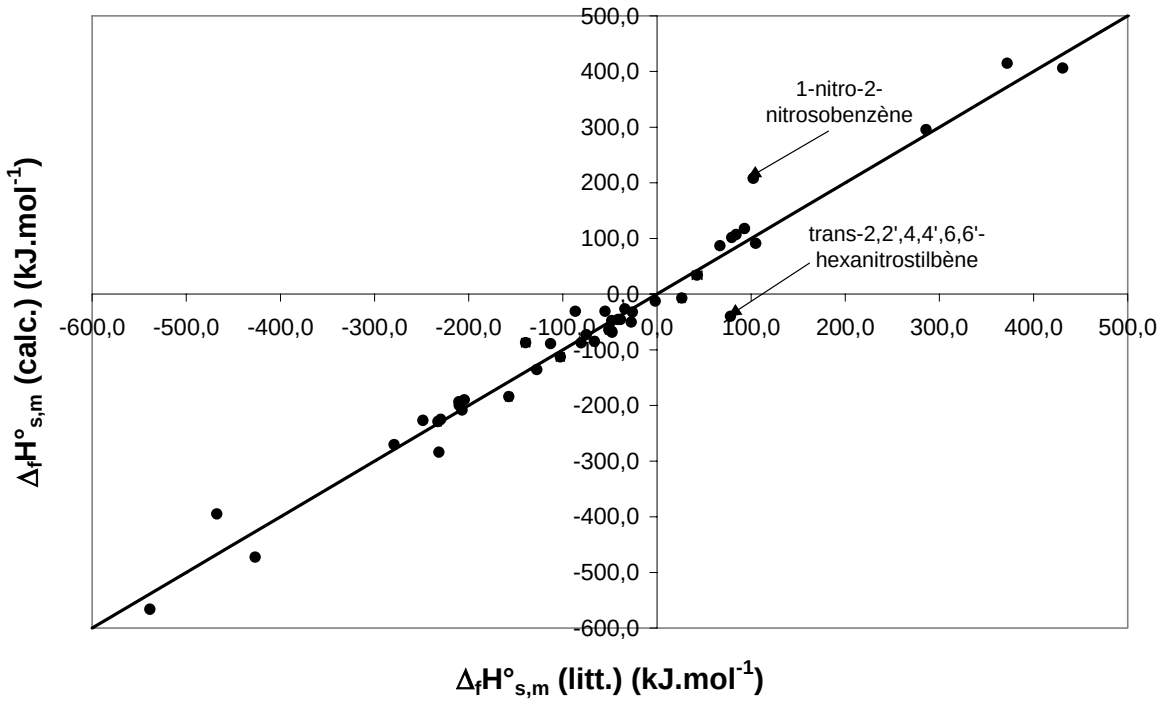


Figure IV-15 : Evaluation globale des résultats de prévision par la méthode de Rice *et al.* des enthalpies standard de formation en phase solide de 44 composés énergétiques.

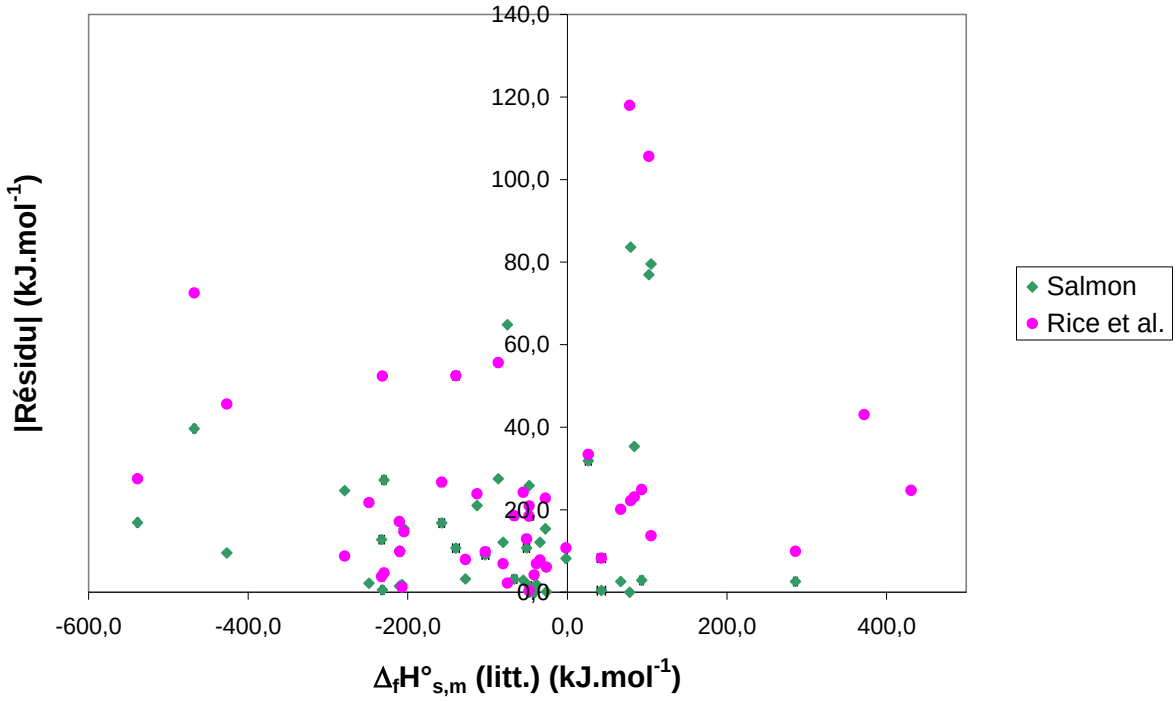


Figure IV-16 : Comparaison de la valeur absolue des résidus obtenus grâce à la méthode développée et à la méthode de Rice *et al.*

Les résultats comparatifs montrent que la méthode de contribution de groupes développée semble plus précise que la méthode de Rice *et al.* En effet, seule la moyenne quadratique exprimée en joules par gramme est un peu plus élevée dans notre cas. On remarquera que les moyennes quadratiques calculées grâce aux deux méthodes sont approximativement 2,8 fois inférieures à la limite acceptable (soit 500 $J.g^{-1}$).

Par ailleurs, le tableau IV-77 montre que la méthode de Domalski *et al.* permet d'obtenir les résultats les moins bons.

La figure IV-16 montre que les écarts absolus observés avec la méthode développée dans cette étude sont globalement plus faibles que ceux calculés grâce à la méthode de Rice *et al.* Dans notre cas, le résidu le plus élevé correspond à l'hexanitroéthane, composé capable de cristalliser sous plusieurs formes. Krien *et al.* [182] ont publié une valeur de l'enthalpie de transition à 291 K pour cette molécule : ΔH_{trs} (CI, CII) = 12,4 $kJ.mol^{-1}$. On notera également l'existence d'au moins trois formes cristallines pour l'octahydro-1,3,5,7-tétranitro-1,3,5,7-tétraazacyclooctane (α, δ et β) [183], ce qui peut expliquer le résidu un peu élevé calculé (-35,3 $kJ.mol^{-1}$). Par ailleurs, le 1,3,5-trinitrobenzène est également polymorphe [181].

Sur le panel des quarante-deux molécules énergétiques testées, il paraît finalement plus avantageux d'utiliser la méthode de contribution de groupes présentée. Rappelons, par ailleurs, que l'emploi des techniques semi-empiriques s'avère beaucoup plus coûteux en temps de calcul que les méthodes de contribution de groupes.

3.2.3. Comparaison avec la méthode de Mathieu *et al.*

La technique de Mathieu *et al.* a permis de calculer l'enthalpie standard de formation à l'état solide de trente-trois composés énergétiques contenant des atomes de carbone, d'hydrogène, d'oxygène et d'azote (*cf.* paragraphe 2.6.1. c. du chapitre I), à l'aide de trois modèles différents (PIMM, PM3 et P2). Trente-et-un de ces composés ont vu leur enthalpie estimée grâce à la méthode de contribution de groupes développée dans cette étude. Seules les enthalpies standard de formation du 1,3,3-trinitroazétidine et du camphre n'ont pu être prévues dans notre cas car il manque quelques valeurs de corrections de structure.

Les enthalpies standard de formation en phase solide indispensables à la comparaison des méthodes étudiées figurent toutes dans le tableau IV-79. L'annexe 16 présente un tableau similaire dans lequel les valeurs d'enthalpies sont exprimées en joules par gramme.

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Mathieu *et al.* (PIMM)		Mathieu *et al.* (PM3)		Mathieu *et al.* (P2)	
				$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}	kJ.mol^{-1}
diphényléthyne	$C_{14}H_{10}$	501-65-5	312,4	302,6	9,8	281,6	30,8	270,9	41,5	281,6	30,8
2,2'-azo-bis-isobutyronitrile	$C_8H_{12}N_4$	78-67-1	246,0	246,0	0,0	159,3	86,7	188,8	57,2	205,3	40,7
2,5-diméthyl-4'-méthoxyazobenzène	$C_{15}H_{16}N_2O$	88578-22-7	201,9	244,5	-42,7	225,9	-24,0	334,0	-132,2	278,8	-76,9
2-naphtyl phénylamine	$C_6H_{13}N$	135-88-6	159,9	134,8	25,1	47,6	112,3	50,6	109,3	51,6	108,3
diphénylamine	$C_{12}H_{11}N$	122-39-4	130,2	79,8	50,4	67,7	62,5	77,8	52,4	77,8	52,4
hexahydro-1,3,5-trinitro-1,3,5-triazine	$C_3H_6N_6O_6$	121-82-4	66,9	69,5	-2,6	8,9	58,1	73,3	-6,4	64,4	2,5
octahydro-1,3,5,7-tétranitro-1,3,5,7-tétraazacyclooctane	$C_4H_8N_8O_8$	2691-41-0	84,0	119,3	-35,3	-130,3	214,3	-5,9	89,9	5,9	78,1
1,3,3-trinitroazétidine	$C_3H_4N_4O_6$	97645-24-4	26,8	-	-	9,6	17,2	48,0	-21,2	-9,6	36,4
flexzone 6H	$C_{18}H_{22}N_2$	101-87-1	-22,5	-79,3	56,9	-125,2	102,7	-63,9	41,5	-98,6	76,1
1,3,5-trinitrobenzène	$C_6H_3N_3O_6$	99-35-4	-47,7	-73,5	25,8	-19,2	-28,5	0,0	-47,7	-51,2	3,5
2,4,6-trinitrotoluène	$C_7H_5N_3O_6$	118-96-7	-80,5	-92,6	12,1	-31,8	-48,7	-29,5	-51,0	-63,6	-16,9
1,3,5-triamino-2,4,6-trinitrobenzène	$C_6H_6N_6O_6$	3058-38-6	-139,5	-128,8	-10,7	87,8	-227,3	92,9	-232,4	-49,1	-90,5
N,N'-diméthyl-N,N'-diphénylurée	$C_{15}H_{16}N_2O$	611-92-7	-73,1	-69,6	-3,5	-132,2	59,1	-129,8	56,7	-129,8	56,7
1,3-diéthyl-1,3-diphénylurée	$C_{17}H_{20}N_2O$	85-98-3	-150,2	-168,9	18,7	-142,2	-8,0	-142,2	-8,0	-142,2	-8,0
1-méthyl-3,3-diphénylurée	$C_{14}H_{14}N_2O$	13114-72-2	-106,8	-105,2	-1,6	-190,1	83,3	-192,3	85,5	-158,4	51,6
N,N-diphénylurée	$C_{13}H_{12}N_2O$	603-54-3	-122,7	-91,4	-31,3	-199,5	76,8	-203,8	81,1	-174,0	51,3
mélamine	$C_3H_6N_6$	108-78-1	-87,1	-81,4	-5,7	-127,4	40,3	-169,0	81,9	-97,1	10,0
N,N-diphényl-N'-éthylurée	$C_{15}H_{16}N_2O$	18168-01-9	-152,6	-154,9	2,3	-257,1	104,5	-249,9	97,3	-213,9	61,3
éthylènedinitramine	$C_2H_6N_4O_4$	505-71-5	-103,8	-103,8	0,0	-234,2	130,3	-220,6	116,8	-85,6	-18,3
diphényluréthane	$C_{15}H_{16}NO_2$	603-52-1	-280,9	-234,5	-46,4	-351,3	70,4	-361,0	80,1	-317,4	36,5
dinitroglycoluril	$C_4H_4N_6O_6$	55510-04-8	-343,7	-412,7	69,1	-394,6	50,9	-318,0	-25,7	-352,8	9,1
diphényl phtalate	$C_{20}H_{14}O_4$	84-62-8	-489,2	-501,4	12,2	-528,4	39,2	-604,8	115,6	-544,3	55,1
2,6-Di-tert-butyl-4-méthylphénol	$C_{15}H_{24}O$	128-37-0	-399,9	-430,6	30,7	-407,7	7,7	-379,0	-20,9	-396,6	-3,3
camphre	$C_{10}H_{16}O$	76-22-2	-319,2	-	-	-374,5	55,3	-363,8	44,6	-371,5	52,2
éthyl-N,N-phényléthylcarbamate	$C_{11}H_{15}NO_2$	1013-75-8	-420,5	-407,4	-13,1	-496,6	76,1	-496,6	76,1	-450,3	29,8
dicyclohexyl phtalate	$C_{20}H_{26}O_4$	84-61-7	-931,4	-949,7	18,3	-1037,5	106,1	-1047,4	116,0	-994,6	63,2
résorcinol	$C_6H_6O_2$	108-46-3	-368,0	-375,2	7,2	-389,8	21,8	-405,2	37,2	-403,0	35,0
acide pyrrole-2,4-dicarboxylique	$C_6H_5NO_4$		-594,1	-854,3	260,2	-667,0	72,9	-677,8	83,8	-618,9	24,8
acide sébacique diméthyl ester	$C_{12}H_{22}O_4$	106-79-6	-1036,0	-1011,1	-24,8	-1089,3	53,4	-1119,3	83,3	-1066,3	30,3
N,N'-dicarbéthoxy-éthylènediamine	$C_8H_{16}N_2O_4$	539-71-9	-980,9	-908,6	-72,3	-1066,1	85,2	-1096,7	115,8	-974,2	-6,8
1,2,5-hexanetriol	$C_6H_{14}O_3$		-710,4	-767,9	57,5	-703,1	-7,4	-700,4	-10,1	-703,1	-7,4
2-éthyl-2-(hydroxyméthyl)-1,3-propanediol	$C_6H_{14}O_3$	77-99-6	-750,9	-764,3	13,4	-742,0	-8,9	-776,9	26,0	-798,3	47,4
triméthyl citrate	$C_9H_{14}O_7$	1587-20-8	-1426,7	-1393,1	-33,7	-1386,5	-40,3	-1527,0	100,3	-1445,0	18,3

Tableau IV-79 : Comparaison des enthalpies standard de formation en phase solide issues de la littérature avec les enthalpies prévues par la méthode développée et par la méthode de Mathieu *et al.*, concernant 33 molécules énergétiques.

Les tableaux suivants rassemblent les résidus moyens et moyennes quadratiques obtenus sur la prévision des enthalpies standard de formation des molécules énergétiques étudiées. Les écarts extrêmes calculés dans chaque cas considéré sont mis en évidence dans le tableau IV-81. A titre d'information, les résultats d'estimation observés pour ce qui est de la méthode de Domalski *et al.* sont ajoutés dans le tableau IV-80. A noter que seules vingt-sept enthalpies standard de formation (sur les trente-trois) ont pu être évaluées dans le cas de cette dernière technique.

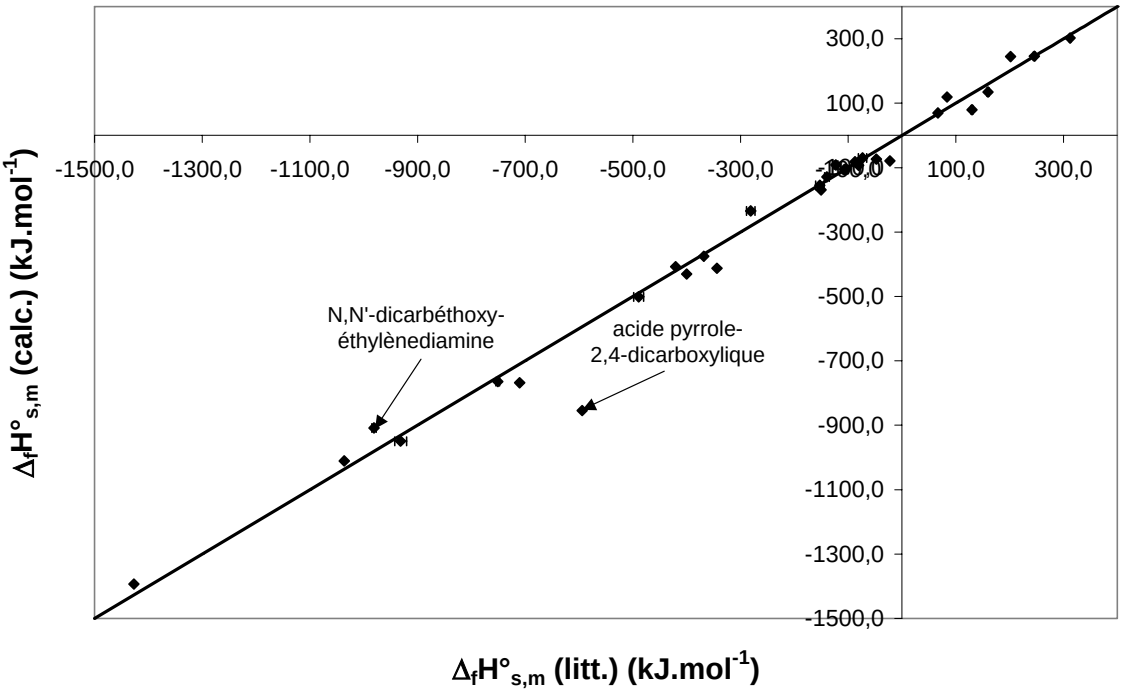
Méthode	***Salmon***		***Mathieu et al. (PIMM)***		***Mathieu et al. (PM3)***		***Mathieu et al. (P2)***		***Domalski et al.***	
Unité	**Résidu moyen**	**Moyenne quadratique**	**Résidu moyen**	**Moyenne quadratique**	**Résidu moyen**	**Moyenne quadratique**	**Résidu moyen**	**Moyenne quadratique**	**Résidu moyen**	**Moyenne quadratique**
$kJ.mol^{-1}$	32,0	56,4	67,0	84,1	71,1	84,4	39,1	47,7	33,1	60,0
$J.g^{-1}$	171,1	341,7	332,6	417,9	357,2	429,1	203,7	278,7	181,8	376,6

Tableau IV-80 : Comparaison avec la méthode de Mathieu *et al.* des résidus moyens et moyennes quadratiques obtenus sur le calcul des enthalpies standard de formation en phase solide de molécules énergétiques.

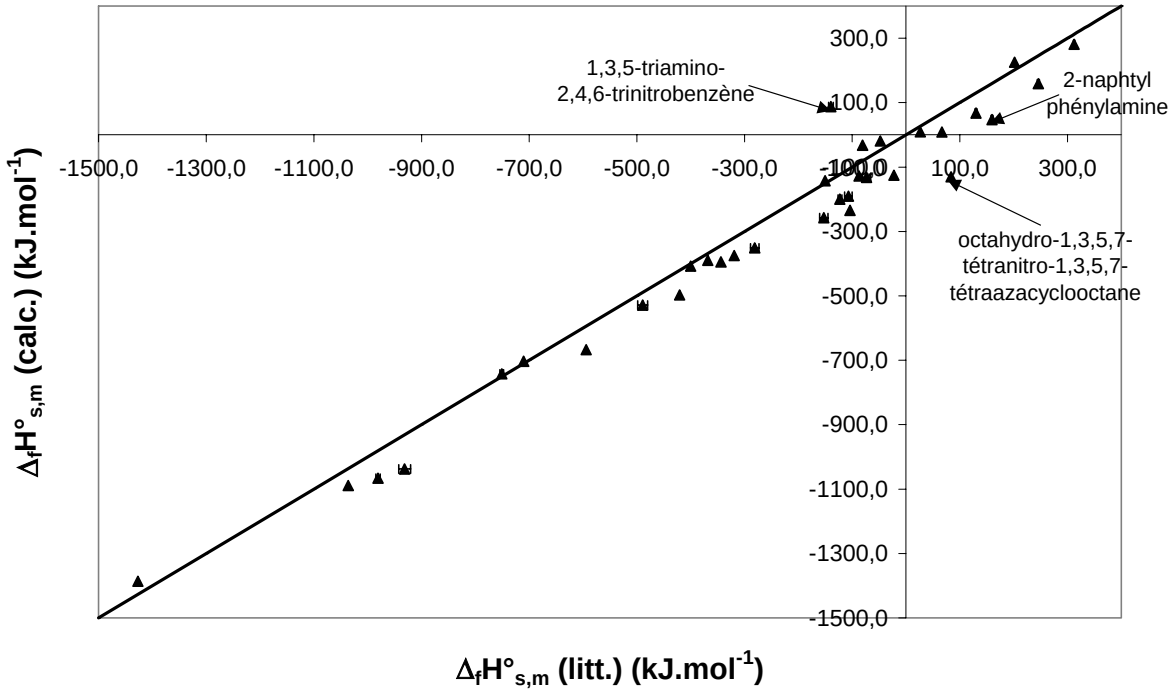
Méthode	***Salmon***		***Mathieu et al. (PIMM)***		***Mathieu et al. (PM3)***		***Mathieu et al. (P2)***	
Unité	**Ecart négatif le plus élevé (composé)**	**Ecart positif le plus élevé (composé)**	**Ecart négatif le plus élevé (composé)**	**Ecart positif le plus élevé (composé)**	**Ecart négatif le plus élevé (composé)**	**Ecart positif le plus élevé (composé)**	**Ecart négatif le plus élevé (composé)**	**Ecart positif le plus élevé (composé)**
$kJ.mol^{-1}$	-72,3 (N,N'-dicarbéthoxy-éthylènediamine)	260,2 (acide pyrrole-2,4-dicarboxylique)	-227,3 (1,3,5-triamino-2,4,6-trinitrobenzène)	214,3 (octahydro-1,3,5,7-tétranitro-1,3,5,7-tétraazacyclooctane)	-232,4 (1,3,5-triamino-2,4,6-trinitrobenzène)	116,8 (éthylènedini-tramine)	-90,4 (1,3,5-triamino-2,4,6-trinitrobenzène)	108,3 (2-naphtyl phénylamine)
$J.g^{-1}$	-354,1 (N,N'-dicarbéthoxy-éthylènediamine)	1677,5 (acide pyrrole-2,4-dicarboxylique)	-880,4 (1,3,5-triamino-2,4,6-trinitrobenzène)	1132,3 (2-naphtyl phénylamine)	-900,4 (1,3,5-triamino-2,4,6-trinitrobenzène)	1102,3 (2-naphtyl phénylamine)	-350,4 (1,3,5-triamino-2,4,6-trinitrobenzène)	1092,3 (2-naphtyl phénylamine)

Tableau IV-81 : Ecarts extrêmes entre les enthalpies standard de formation en phase solide mesurées et prévues par la méthode développée et par la méthode de Mathieu *et al.* de molécules énergétiques.

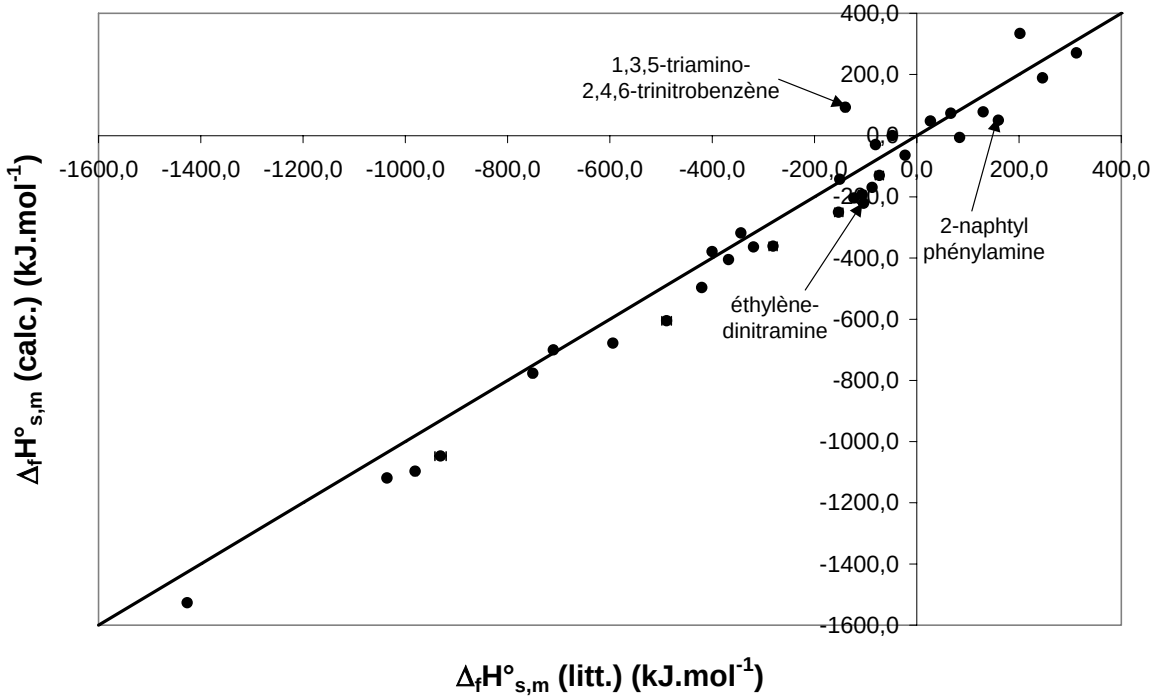
Les figures ci-dessous représentent les valeurs d'enthalpies standard de formation en phase solide calculées en fonction des valeurs issues de la littérature, dans le cas de la méthode développée au cours de cette étude et de la méthode de Mathieu *et al.*



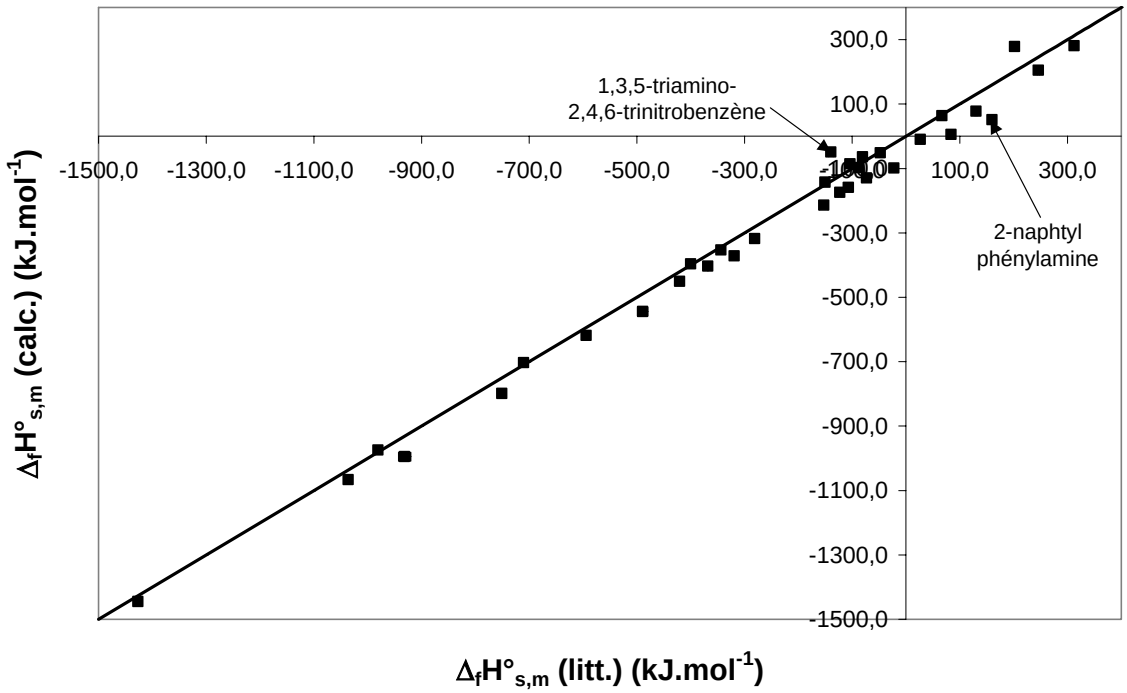
<u>Figure IV-17</u> : Evaluation globale des résultats de prévision par la méthode développée des enthalpies standard de formation en phase solide de 31 composés énergétiques.



<u>Figure IV-18</u> : Evaluation globale des résultats de prévision par la méthode de Mathieu *et al.* (PIMM) des enthalpies standard de formation en phase solide de 33 composés énergétiques.



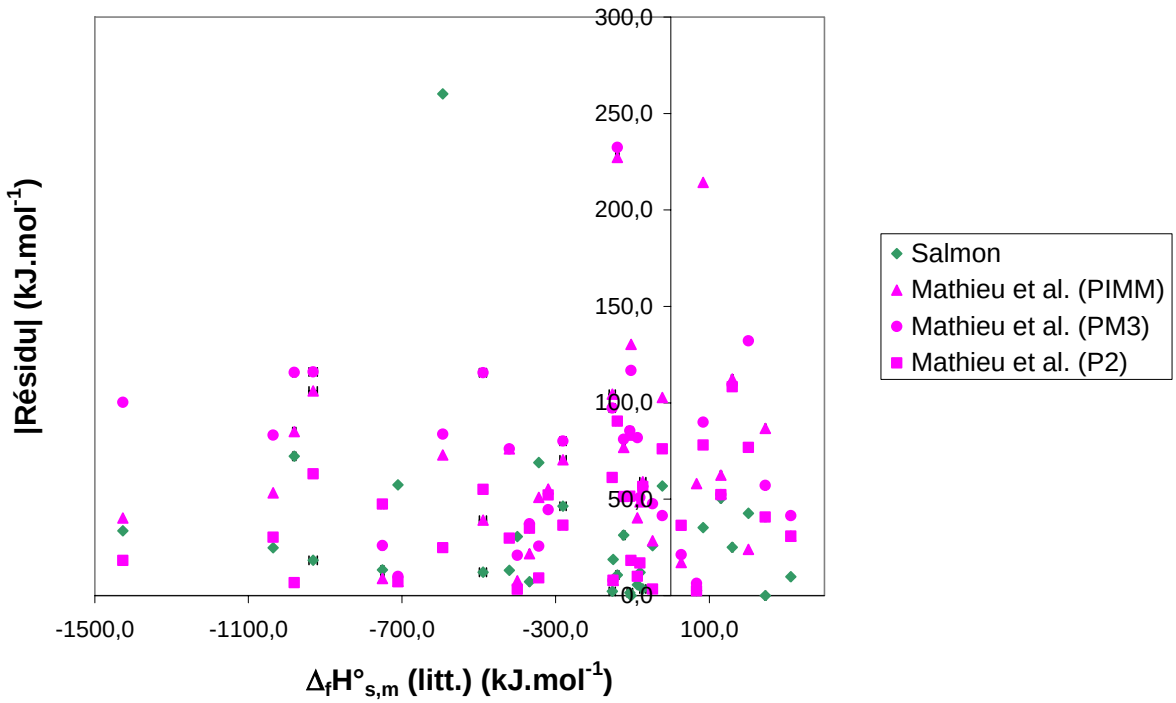
<u>Figure IV-19</u> : Evaluation globale des résultats de prévision par la méthode de Mathieu *et al.* (PM3) des enthalpies standard de formation en phase solide de 33 composés énergétiques.



<u>Figure IV-20</u> : Evaluation globale des résultats de prévision par la méthode de Mathieu *et al.* (P2) des enthalpies standard de formation en phase solide de 33 composés énergétiques.

Le calcul de l'ensemble des résidus moyens prouve que la méthode de contribution de groupes développée permet d'obtenir les meilleurs résultats. Quant aux moyennes quadratiques, elles montrent que les contributions de groupes déterminées permettent d'évaluer les enthalpies recherchées de façon plus précise que la méthode de Mathieu *et al.* utilisant les modèles PIMM et PM3. Par contre, le modèle P2 semble aboutir à de meilleures estimations des enthalpies standard de formation considérées que les autres méthodes.

La figure ci-dessous montre que les écarts absolus calculés grâce à la méthode développée sont globalement inférieurs à ceux obtenus grâce à la technique de Mathieu *et al.* De même que Rice *et al.*, Mathieu *et al.* ont traité les cas de l'octahydro-1,3,5,7-tétranitro-1,3,5,7-tétraazacyclooctane et du 1,3,5-trinitrobenzène, tous deux présentant un caractère polymorphe. Par ailleurs, on remarquera que le résorcinol peut également cristalliser sous plusieurs formes. Son enthalpie de transition a été mesurée à 369 K par Ebisuzaki *et al.* [184] : ΔH_{trs} (CI, CII) = 1,37 kJ.mol^{-1}.



<u>Figure IV-21</u> : Comparaison de la valeur absolue des résidus obtenus grâce à la méthode développée et à la méthode de Mathieu *et al.*

Enfin, la technique prédictive de Domalski *et al.* permet d'obtenir de meilleurs résultats que la méthode de Mathieu *et al.* avec les modèles PIMM et PM3. Mais les évaluations d'enthalpies sont toujours moins satisfaisantes que celles calculées grâce à la méthode développée dans le présent travail.

4. Conclusion

Une étude bibliographique conséquente a permis d'établir une banque de valeurs d'enthalpies standard de formation en phase solide les plus justes possibles (banque de données constituée à partir des références [75], [77] et [163]). Ces enthalpies ont été utilisées afin de déterminer de nombreuses contributions de groupes contenant les atomes de carbone, d'hydrogène, d'oxygène et d'azote.

Il a été montré dans ce chapitre que les représentations d'enthalpies standard de formation permettaient de calculer une moyenne quadratique de 298,4 $J.g^{-1}$, ce qui est tout à fait satisfaisant sachant que l'objectif est de disposer d'une méthode permettant de déterminer les enthalpies recherchées avec une erreur inférieure à 500 $J.g^{-1}$.

Une étude approfondie des valeurs de représentation a mis en évidence le problème posé vraisemblablement par le polymorphisme des substances solides, venant ainsi affecter les résultats prédictifs sur certains composés. Par ailleurs, les familles de molécules pour lesquelles la méthode de contribution de groupes développée semble poser problème ont été mises en exergue. En tenant compte de ces dernières remarques, il a été démontré que les évaluations d'enthalpies standard de formation de composés recueillies dans *The Journal of Chemical Thermodynamics* pouvaient être encore meilleures que les représentations (*cf.* paragraphe 2.1.). Le cas de quatre-vingt-trois molécules a ainsi été traité. Les travaux menés sur la base de données thermochimiques compilées lors d'une étude bibliographique d'ampleur (contenant des valeurs d'enthalpies parues récemment et qui ne sont pas incluses dans la banque de données ayant permis de calculer les contributions contenues dans les tableaux IV-5 à IV-11) ont également conduit à la détermination de nouvelles valeurs de contributions de groupes.

Par ailleurs, les analyses effectuées par calorimétrie de combustion sur les vingt-cinq composés présentées au chapitre II ont permis de prouver non seulement l'efficacité de la démarche mise en place mais également la supériorité de cette méthode sur les autres techniques connues à ce jour utilisant le principe d'additivité des contributions de groupes. De plus, d'autres valeurs de contributions concernant la phase solide ont pu être déterminées grâce aux mesures réalisées au laboratoire.

La méthode prédictive développée a été comparée à plusieurs méthodes concurrentes existantes.

L'étude de deux méthodes de contribution de groupes a tout d'abord permis de démontrer la supériorité de la technique mise en place par rapport à celle de Cohen puis à celle de Domalski et Hearing. En effet, les enthalpies standard de formation à l'état solide sont dans la majorité des cas évaluées de façon plus précise grâce aux contributions calculées dans ces travaux. Par ailleurs, le nombre de valeurs de contributions de groupes déterminées par Cohen et par Domalski *et al.* est insuffisant voire très insuffisant pour estimer les enthalpies de formation nous intéressant. En ce qui concerne la méthode de Cohen, beaucoup de contributions de groupes ont été évaluées (malgré quelques petites lacunes), mais cette technique ne s'applique en aucun cas aux molécules comportant un ou plusieurs atomes d'azote. Or c'est ce qui nous intéresse particulièrement. Pour ce qui est de la méthode de Domalski et Hearing, de très nombreuses valeurs de contributions manquent, et notamment des contributions de groupes contenant de l'azote. C'est pour cette raison qu'un nombre important d'enthalpies standard de formation n'a pu être calculé grâce à cette méthode dans le paragraphe 3.1.2.

Le tableau suivant résume le nombre de valeurs de contributions de groupes déterminées dans chacune des méthodes étudiées :

Méthode	*Salmon*	*Cohen*	*Domalski et al.*
Groupes C-H	44	42	47
Groupes C-H-O	73	85	50
Groupes C-H-N-O	251	-	74
Corrections de structure C-H	37	40	22
Corrections de structure C-H-O	14	61	17
Corrections de structure C-H-N-O	35	-	11
Interactions à longue distance	35	14	36

Tableau IV-82 : Comparaison du nombre de contributions de groupes déterminées dans la méthode développée, la méthode de Cohen et la méthode de Domalski *et al.*

Enfin, une étude comparative de la technique établie avec des méthodes quantiques semi-empiriques a été réalisée sur des molécules énergétiques. Il a alors été démontré que non seulement la méthode développée permettait d'obtenir des résultats très encourageants, mais était souvent meilleure que les méthodes semi-empiriques (excepté l'une des méthodes mise en œuvre par Mathieu *et al.*, *i.e.* celle utilisant le modèle P2). Du point de vue de l'utilisateur, la technique développée au cours de cette étude présente encore d'autres avantages comparés aux méthodes semi-empiriques : simplicité de mise en œuvre et faible temps de calcul requis pour la détermination des enthalpies de formation.

Conclusion

La recherche de nouveaux matériaux énergétiques requiert la connaissance d'un certain nombre de paramètres avant toute synthèse éventuelle. L'enthalpie standard de formation est une grandeur essentielle intervenant dans le calcul des performances de ces substances, qui contiennent pour la plupart de l'azote. La grande majorité des composés intéressant le secteur industriel des matériaux énergétiques étant des solides, l'établissement d'une méthode fiable d'évaluation des enthalpies de formation en phase solide est indispensable. Un travail conséquent a donc été mené à ce sujet, en ayant pour objectif de prévoir les enthalpies de formation en question avec une erreur inférieure à 500 $J.g^{-1}$.

De nombreuses techniques permettant de calculer les enthalpies de formation en phase gazeuse existent (méthodes de contribution de groupes, méthodes quantiques) tandis que la phase condensée n'a pas connu le même engouement. En ce qui concerne les méthodes de contribution de groupes s'appliquant à l'état solide, deux techniques principales ont vu le jour ces quinze dernières années : la méthode de Cohen et la méthode de Domalski et Hearing. Le problème est que la première ne s'intéresse pas aux composés azotés et que la seconde présente une lacune importante de valeurs de contributions de groupes.

Le premier chapitre de ce mémoire, consacré à la présentation des méthodes utilisées au cours de ce travail (méthodes de contribution de groupes et calorimétrie de combustion), montre notamment l'importance des données expérimentales dans le développement d'une méthode de calcul fiable. Qu'il s'agisse des méthodes de contribution de groupes ou des techniques utilisant la théorie quantique, toutes emploient des valeurs mesurées expérimentalement. En effet, même les méthodes dites semi-empiriques ou mixtes les utilisent pour établir leurs paramètres (*cf.* paragraphe 2.6. du chapitre I).

Le deuxième chapitre décrit la technique de mesure des enthalpies standard de formation employée, *i.e.* la calorimétrie de combustion. Celle-ci a permis de mesurer les enthalpies de formation de nombreux composés organiques. Cette partie expérimentale a été exploitée au chapitre IV. Les enthalpies mesurées ont notamment permis de déterminer de nouvelles valeurs de contributions de groupes. Elles ont en outre été utilisées afin de comparer les résultats prévus par différentes méthodes de contribution de groupes.

Deux démarches de détermination des enthalpies de formation à l'état solide ont été envisagées. Leur description fait l'objet des chapitres III et IV.

La première démarche présentée est une méthode prédictive indirecte consistant à évaluer les grandeurs recherchées à partir des enthalpies de formation en phase gazeuse et des enthalpies de sublimation des molécules considérées. Deux méthodes (l'une semi-prédictive et l'autre entièrement prédictive) ont alors été testées. En effet, l'exploitation d'une banque d'enthalpies de formation en phase gazeuse a permis de montrer qu'il n'était pas toujours évident de prévoir ces grandeurs au moyen de la méthode de contribution de groupes du laboratoire. Il a donc été préférable d'envisager deux méthodes indirectes. Seul le cas des composés C_xH_y a alors été traité. La première technique (semi-prédictive), consistant à développer une méthode de contribution de groupes pour l'évaluation des enthalpies de sublimation et à employer les enthalpies de formation en phase vapeur publiées dans la littérature, a permis l'obtention de résultats prometteurs (moyenne quadratique = 50,3 $J.g^{-1}$).

Cependant, cette technique est limitée par le manque de données expérimentales concernant les enthalpies standard de sublimation. Quant à la méthode entièrement prédictive utilisant des valeurs calculées d'enthalpies de sublimation et d'enthalpies de formation en phase gazeuse, elle a permis d'observer des résultats moins convaincants que la méthode précédente (moyenne quadratique = 227,2 $J.g^{-1}$). En effet, il s'est avéré que la technique permettant d'évaluer les enthalpies de formation à l'état gazeux constituait un frein à la précision finale obtenue pour la détermination des enthalpies de formation en phase solide.

La deuxième démarche de détermination a quant à elle montré qu'il était possible d'obtenir de très bons résultats en calculant directement des valeurs de contributions à l'enthalpie standard de formation à l'état solide. La méthode a été développée pour des composés contenant les atomes de carbone, d'hydrogène, d'oxygène et d'azote. La moyenne quadratique calculée sur la représentation d'enthalpies de formation en phase solide d'un ensemble de mille dix-sept molécules est de 298,4 $J.g^{-1}$. L'étude approfondie des cas problématiques a montré que le polymorphisme de certaines molécules solides était, selon toute vraisemblance, la cause essentielle de l'obtention de résultats prédictifs médiocres. Le problème est que l'on ne pourra pas prévoir le polymorphisme d'un composé. Par ailleurs, il a été mis en évidence que quelques familles de molécules présentaient une enthalpie de formation à l'état solide difficilement prévisible par la méthode ainsi développée : les HAP, les diastéréoisomères des acides alcènoïques, les diastéréoisomères de cycles, les composés présentant une structure benzyle et les porphines contenant de l'oxygène.

Le chapitre IV fait également l'objet d'une comparaison de la méthode établie dans ce travail avec les méthodes de contribution de groupes concurrentes. La première technique dont il est question est celle de Cohen. Cette dernière présente un défaut majeur ; en effet, elle ne permet pas d'effectuer des prévisions sur des molécules contenant de l'azote. La seconde méthode de contribution de groupes étudiée est celle de Domalski et Hearing. Cette technique s'applique aux composés azotés mais de très nombreuses valeurs de contributions de groupes manquent. Dans tous les cas, la méthode développée dans ce mémoire est la plus fiable et la plus précise (ceci a été vérifié sur les molécules ayant permis la détermination de nos contributions de groupes, sur les substances analysées au laboratoire et sur les composés étudiés dans le cadre de l'application des méthodes semi-empiriques).

De plus, une comparaison a été effectuée avec plusieurs techniques semi-empiriques (Politzer *et al.*, Rice *et al.* et Mathieu *et al.*) sur des molécules énergétiques. Dans tous les cas, il a encore été démontré que la méthode de contribution de groupes développée dans ces travaux était plus précise que les autres, excepté dans le cas de la méthode de Mathieu *et al.* utilisant le modèle P2.

Au final, une méthode relativement simple d'utilisation a été développée dans ces travaux. Cette technique s'est avérée tout à fait satisfaisante car elle permet l'obtention, dans la plupart des cas, de meilleurs résultats que ceux calculés grâce aux méthodes déjà existantes. Le problème du polymorphisme reste le frein majeur à toutes les méthodes prédictives s'appliquant à la phase solide. Quelques valeurs d'enthalpies de transition de phase de second ordre (issues de la littérature) ont été données dans ce mémoire. On a pu remarquer qu'elles étaient assez variables mais ne dépassaient pas en général la dizaine de kilojoules par mole (soit 50 $J.g^{-1}$ si on utilise une masse molaire moyenne de 200 $g.mol^{-1}$). Cela précisé, il existe des cas où l'enthalpie de transition de phase est plus élevé (*cf.* cas du tricosane et du tétracosane). Prenons l'exemple du CL-20 qui présentent trois polymorphes : α-CL-20, β-CL-20 et ε-CL-20. Plusieurs valeurs d'enthalpies de formation en phase solide ont été publiées concernant les formes β et ε [77]. Si l'on choisit les valeurs extrêmes d'enthalpies issues de la littérature concernant la molécule énergétique de CL-20, on constate qu'elles peuvent varier de 338,99 $kJ.mol^{-1}$ à 430,95 $kJ.mol^{-1}$ (soit 773,62 $J.g^{-1}$ à 983,49 $J.g^{-1}$) [77]. Suivant que l'on

étudie le cas de tel ou tel polymorphe, une différence de 91,96 kJ.mol^{-1} (soit de 209,87 J.g^{-1}) peut être constatée. Sachant que l'on souhaite estimer les enthalpies de formation à l'état solide avec une erreur inférieure à 500 J.g^{-1}, on voit que certaines molécules sont difficiles à traiter. Par ailleurs, on s'aperçoit que même les méthodes semi-empiriques ont du mal à s'accommoder du polymorphisme des molécules. En effet, Rice *et al.* a traité le cas des formes ε et β du CL-20. Les écarts absolus calculés sont respectivement -43,1 kJ.mol^{-1} et 24,7 kJ.mol^{-1} (soit -98,3 J.g^{-1} et 56,3 J.g^{-1}).

Cette étude a donc prouvé que les enthalpies de formation en phase solide de composés organiques, et notamment de molécules énergétiques, peuvent être estimées de façon tout à fait satisfaisante, mais le polymorphisme de certaines molécules pose problème dans quelques cas.

Enfin, il serait intéressant de continuer à développer la méthode établie au cours de cette étude en déterminant des valeurs de contributions de groupes contenant d'autres atomes que C, H, O et N. Cela précisé, plus le nombre d'atomes traités augmente et plus il faut déterminer de valeurs de contributions de groupes. De très nombreuses données expérimentales seraient donc nécessaires au développement de la méthode présentée dans ces travaux afin d'être le plus complet possible. Mais il n'est pas toujours aisé de disposer de ces valeurs d'enthalpies mesurées expérimentalement.

Il serait en outre envisageable de créer un logiciel permettant une automatisation du calcul des enthalpies de formation. Ceci serait fort pratique et permettrait aux personnes non initiées aux méthodes de contribution de groupes d'utiliser notamment les résultats présentés dans ce mémoire. Par ailleurs, l'élaboration d'un logiciel permettrait de valoriser de façon notable les valeurs de contributions de groupes déterminées au cours de la présente étude.

Références bibliographiques

[1] Tauzia J.M. *A Propos des Matériaux Energétiques*, Groupe SNPE.

[2] Davenas A. *Préparation, Formulation et Mise en forme des éléments énergétiques - Chapitre 5 : Chimie des propergols*.

[3] Parks G.S. et Huffmann H.M. *Free Energies of some Organic Compounds*, American Chemical Society, monograph n°60, 1932, The Chemical Catalog Co. Inc., New York.

[4] Benson S.W. et Buss J.H. *Additivity Rules for the Estimation of Molecular Properties. Thermodynamic Properties*, J. Chem. Phys. 1958, 29, 546.

[5] Horvath A.L. *Molecular Design*, 1992, Elsevier, Amsterdam.

[6] Fedors R.F. *A Relationship between Chemical Structure and the Critical Temperature*, Chem. Eng. Commun. 1982, 16, 149.

[7] Daubert T.E. et Danner R.P. *Physical and Thermodynamic Properties of Pure Compounds : Data Compilation*, 1989, Hemisphere, New York.

[8] Jalowka J.W. et Daubert T.E. *Group Contribution Method to Predict Critical Temperature and Pressure of Hydrocarbons*, Ind. Eng. Process Des. Dev. 1986, 25, 139.

[9] Daubert T.E. et Bartakovits R. *Prediction of Critical Temperature and Pressure of Organic Compounds by Group Contribution*, Ind. Eng. Chem. Res. 1989, 28, 638.

[10] Joback K.G. *A Unified Approach to Physical Property Estimation Using Multivariate Statistical Techniques*, S.M. Thesis, Department of Chemical Engineering, Massachussets Institute of Technology, Cambridge, MA, 1984.

[11] Joback K.G. et Reid R.C. *Estimation of Pure-Component Properties from Group-Contributions*, Chem. Eng. Comm. 1987, 57, 233.

[12] Lydersen A.L. *Estimation of Critical Properties of Organic Compounds*, Univ. Wisconsin Coll. Eng., Eng. Exp. Stn. rept. 3, Madison, WI, 1955.

[13] Devotta S. et Pendyala V.R. *Modified Joback Group Contribution Method for Normal Boiling Point of Aliphatic Halogenated Compounds*, Ind. Eng. Chem. Res. 1992, 31, 2042.

[14] Constantinou L. et Gani R. *New Group Contribution Method for Estimating Properties of Pure Compounds*, AIChE J. 1994, 40(10), 1697.

[15] Ourique J.E.S. et Silva Telles A. *Estimation of Properties of Pure Organic Substances with Group and Pair Contributions*, Braz. J. Chem. Eng. 1997, 14(2), ISSN 0104-6632.

[16] Basařová P., Svoboda V. *Prediction of the Enthalpy of Vaporization by the Group Contribution Method*, Fluid Phase Equilib. 1995, 105(1), 27.

[17] Tu Ch.-Hs. *Group-Contribution Estimation of Critical Temperature with only Chemical Structure*, Chem. Eng. Sci. 1995, 50(22), 3515.

[18] Tu Ch.-Hs., Liu Ch.-P. *Group-Contribution Estimation of the Enthalpy of Vaporization of Organic Compounds*, Fluid Phase Equilib. 1996, 121, 45.

[19] Kurata M. et Isida S.I. *Theory of Normal Paraffin Liquids*, J. Chem. Phys. 1955, 23, 1126.

[20] Teja A.S., Lee D.J., Rosenthal D. et Anselme M. *Correlation of the Critical Properties of Alkanes and Alkanols*, Fluid Phase Equilib. 1990, 56, 153.

[21] Graue D.J., Berry V. et Sage B.H. *Heat of Vaporization of Light Hydrocarbons*, Hydrocarbon Process. 1966, 45(6), 191.

[22] Wilson G.M. et Jasperson L.V. *Critical Constants T_c, P_c. Estimation Based on Zero, First, Second-Order Methods*, AIChE Meeting, New Orleans, LA, 1996.

[23] Poling B.E., Prausnitz J.M., O'Connell J.P. *The Properties of Gases and Liquids*, Fifth edition, 2000, McGraw-Hill, New York.

[24] Marrero-Marejón J. et Pardillo-Fontdevila E. *Estimation of Pure Compound Properties using Group-Interaction Contributions*, AIChE J. 1999, 45(3), 615.

[25] Dalmazzone D., Salmon A., Guella S. *A Second Order Group Contribution Method for the Prediction of Critical Temperatures and Enthalpies of Vaporization of Organic Compounds*, Fluid Phase Equilib. 2006, 242(1), 29.

[26] Ducros M., Gruson J.-F., Sannier H. *Estimation des Enthalpies de Vaporisation des Composés Organiques Liquides. Partie 1. Application aux Alcanes, Cycloalcanes, Alcènes, Hydrocarbures Benzéniques, Alcools, Alcanes Thiols, Chloro et Bromoalcanes, Nitriles, Esters, Acides et Aldéhydes*, Thermochim. Acta 1980, 36(1), 39.

[27] Ducros M., Gruson J.-F., Sannier H., Velasco I. *Estimation des Enthalpies de Vaporisation des Composés Organiques Liquides. Partie 2. Applications aux Ethersoxydes, Thioalcanes, Cétones et Amines*, Thermochim. Acta 1981, 44(2), 131.

[28] Ducros M. et Sannier H. *Estimation des Enthalpies de Vaporisation des Composés Organiques Liquides. Partie 3. Applications aux Hydrocarbures Insaturés*, Thermochim. Acta 1982, 54, 153.

[29] Ducros M. et Sannier H. *Estimation des Enthalpies de Vaporisation des Composés Organiques Liquides. Partie 4. Applications aux Composés Organométalliques*, Thermochim. Acta 1984, 75(3), 329.

[30] Langmuir I. *The Distribution and Orientation of Molecules*, Third Colloid Symposium Monograph, 1925, The Chemical Catalog Company, Inc., New York.

[31] Wilson G.M., Deal C.H. *Activity Coefficients and Molecular Structure*, Ind. Eng. Chem. Fundam. 1962, 1, 20.

[32] Tochigi K., Tiegs D., Gmehling J. et Kojima K. *Determination of New ASOG Parameters*, J. Chem. Eng. Jpn. 1990, 23(4), 453.

[33] Redlich O., Derr E.L. et Pierotti G. *Group Interaction. I. A Model for Interaction in Solution*, J. Am. Chem. Soc. 1959, 81, 2283.

[34] Derr E.L. et Papadopoulos M. *Group Interaction. II. A Test of the Group Model on Binary Solutions of Hydrocarbons*, J. Am. Chem. Soc. 1959, 81, 2285.

[35] Wilson G.M. *Vapor Liquid Equilibrium XI : A New Expression for the Excess Gibbs Energy of Mixing*, J. Am Chem. Soc. 1964, 86, 127.

[36] Derr E.L. et Deal C.H. *Analytical Solution of Groups : Correlation of Activity Coefficients through Structural Group Parameters*, Inst. Chem. Eng. Symp. Ser. 1969, 32(3), 40.

[37] Ronc M. et Ratcliff G.A. *Prediction of Excess Free Energies of Liquid Mixtures by an Analytic Group Solution Model*, Can. J. Chem. Eng. 1971, 49, 875.

[38] Flory P.J. *Thermodynamics of High Polymer Solutions*, J. Chem. Phys. 1942, 10, 51.

[39] Kojima K. et Tochigi K. *Prediction of Vapor-Liquid Equilibria by the ASOG Method*, Physical Sciences Data 3, 1979, Kodansha Ltd., Tokyo, Elsevier Scientific Publishing Company.

[40] Fredenslund A., Jones R.L., Prausnitz J.M. *Group-Contribution Estimation of Activity Coefficients in Nonideal Liquid Mixtures*, AIChE J. 1975, 21(6), 1086.

[41] Abrams D.S. et Prausnitz J.M. *Statistical Thermodynamics of Liquid Mixtures. A New Expression for the Excess Gibbs Energy of Partly and Completely Miscible Systems*, AIChE J. 1975, 21, 116.

[42] Bondi A. *Physical Properties of Molecular Crystals, Liquids and Glasses*, 1968, Wiley, New York.

[43] Hansen H.K., Rasmussen P., Fredenslund A., Schiller M. et Gmehling J. *Vapor-Liquid Equilibria by UNIFAC Group Contribution. Revision and Extension 5*, Ind. Eng. Chem. Res. 1991, 30, 2352.

[44] Larsen B.L., Rasmussen P. et Fredenslund A. *A Modified UNIFAC Group-Contribution Model for Prediction of Phase Equilibria and Heats of Mixing*, Ind. Eng. Chem. Res. 1987, 26(11), 2274.

[45] Weidlich U. et Gmehling J. *A Modified UNIFAC Model. 1. Prediction of VLE, h^E, and γ^∞*, Ind. Eng. Chem. Res. 1987, 26, 1372.

[46] Gmehling J., Li J. et Schiller M. *A Modified UNIFAC Model. 2. Present Parameter Matrix and Results for Different Thermodynamic Properties*, Ind. Eng. Chem. Res. 1993, 32, 178.

[47] Lohmann J. et Gmehling J. *Modified UNIFAC (Dortmund) : Reliable Model for the Development of Thermal Separation Processes*, J. Chem. Eng. Jpn. 2001, 34(1), 43.

[48] Benson S.W. *Thermochemical Kinetics*, Second edition, 1976, Wiley, New York.

[49] Klyne W. et Prelog V. *Description of Steric Relationships across Single Bonds*, Experientia 1960, 16, 521.

[50] http://www.faidherbe.org/site/cours/dupuis/conform.htm

[51] http://elements.chimiques.free.fr

[52] Domalski E.S. et Hearing E.D. *Estimation of the Thermodynamic Properties of Hydrocarbons at 298.15 K*, J. Phys. Chem. Ref. Data 1988, 17(4), 1637.

[53] Domalski E.S. et Hearing E.D. *Estimation of the Thermodynamic Properties of C-H-N-O-S-Halogen Compounds at 298.15 K*, J. Phys. Chem. Ref. Data 1993, 22(4), 805.

[54] Cohen N. *Revised Group Additivity Values for Enthalpies of Formation (at 298 K) of Carbon-Hydrogen and Carbon-Hydrogen-Oxygen Compounds*, J. Phys. Chem. Ref. Data 1996, 25(6), 1411.

[55] Politzer P., Murray J.S., Grice M.E., Desalvo M. et Miller E. *Calculation of Heats of Sublimation and Solid Phase Heats of Formation*, Molecular Physics 1997, 91(5), 923.

[56] Rice B.M., Pai S.V. et Hare J. *Predicting Heats of Formation of Energetic Materials using Quantum Mechanical Calculations*, Combustion and Flame 1999, 118(3), 445.

[57] Mathieu D., Simonetti Ph. *Evaluation of Solid-State Formation Enthalpies for Energetic Materials and Related Compounds*, Thermochimica Acta 2002, 384, 369.

[58] DeTar DeL.F. *Thermochemical Values of Oxygen-Containing Compounds from Ab Initio Calculations. 1. Enthalpies of Formation of Ethers and Alcohols*, J. Phys. Chem. A 1999, 103, 7055.

[59] DeTar DeL.F. *Thermochemical Values of Oxygen-Containing Compounds from Ab Initio Calculations. 2. High Accuracy Enthalpies of Formation of Alcohols and Ethers*, J. Phys. Chem. A 2001, 105, 2073.

[60] DeTar DeL.F. *Experimental Formal Steric Enthalpy. 1. Alkanes and Cycloalkanes*, J. Org. Chem. 1991, 56(4), 1463.

[61] DeTar DeL.F. *Experimental Formal Steric Enthalpy. 2. Olefins*, J. Org. Chem. 1991, 56(4), 1470.

[62] DeTar DeL.F. *Experimental Formal Steric Enthalpy. 3. Alcohols and Ethers*, J. Org. Chem. 1991, 56(4), 1474.

[63] DeTar DeL.F. *Experimental Formal Steric Enthalpy. 4. Aldehydes, Ketones, Acids, and Esters*, J. Org. Chem. 1991, 56(4), 1478.

[64] Tachoire H. *Naissance et Premiers Développements de la Calorimétrie Chimique*, Cahiers de thermodynamique chimique - Tome I - ENSTA, 1979.

[65] Parr® *Introduction to Bomb Calorimetry* No. 202M.

[66] Washburn E.W. J. Res. Nat. Bur. Stand. 1933, 10, 525.

[67] Ducros M., Tachoire H. *Calorimétrie de Combustion à Volume Constant dans l'Oxygène*, Rapport de recherche 114 ENSTA, 1979.

[68] http://www.parrinst.com

[69] Parr® *Operating Instructions for the 1341 Oxygen Bomb Calorimeter* No. 204.

[70] Rossini F.D., *Experimental Thermochemistry*, 1956, Interscience, New York.

[71] Tachoire H., Clechet P. *L'actualité chimique*, 1975, 3, 17.

[72] Armstrong G.T., Johnson W.H. *3ème Conférence de Thermodynamique Chimique et Symposium sur les Techniques Physico-Chimiques à Hautes Températures (1 000 à 4 000 K), 3 au 7 septembre 1973*, Baden près de Vienne (Autriche). VIII, manuscrits suppl., pages 55 à 72.

[73] Mosselman C., Dekker H. Recl. Trav. Chim. Pays-Bas, 1969, 88, 161.

[74] Churney K.L., Armstrong G.T. J. Res. Nat. Bur. Stand., 1968, 78A, 453.

[75] http://webbook.nist.gov/chemistry/

[76] *CODATA Recommended Key Values for Thermodynamics, 1977*, J. Chem. Thermodyn. 1978, 10, 903.

[77] ICT Database of Thermochemical Values Version 7.0, Fraunhofer-Institut für Chemische Technologie, 2004.

[78] Barbillon P., Schuffenecker L., Dellacherie J., Balesdent D., Dirande M. *Variation d'Enthalpie subie de 260 K à 340 K par les n-paraffines, comprises entre l'Octadécane et l'Hexacosane*, J. Chim. Phys. Phys.-Chim. Biol. 1991, 88, 91.

[79] Dalmazzone D. Thèse soutenue le 4 avril 1995. *Essai d'Estimation Prédictive des Limites d'Inflammabilité des Vapeurs Organiques : Exploitation de Critères Thermochimiques d'Explosivité*.

[80] Fagley T.F., Myers H.W. *The Heats of Combustion of Cyclopentyl and Cyclohexyl Azides*, J. Am. Chem. Soc. 1954, 76, 6001.

[81] Acree W.E. Jr., Bott S.G., Tucker S.A., Ribeiro da Silva M.D.M.C., Matos M.A.R., Pilcher G. *Enthalpies of Combustion of 5-methoxybenzofurazan, 5-methoxybenzofurazan-1-oxide, 5-methylbenzofurazan-1-oxide, 5-chlorobenzofurazan-1-oxide, 4-nitrobenzofurazan-1-oxide : the Dissociation Enthalpies of the N-O Bonds*, J. Chem. Thermodyn. 1996, 28, 673.

[82] Kamiński M., Zielenkiewicz W. *Vapour Pressures and Molar Enthalpies of Sublimation for 5-alkyl Derivatives of 1,3-dimethyluracil*, J. Chem. Thermodyn. 1996, 28, 153.

[83] Sabbah R., Aguilar A.R. *Combustion Calorimetry on Samples of Mass about 7 mg of Substances Containing Bromine with a CRMT Rocking-Bomb Calorimeter. Application to the Study of p-bromobenzoic Acid*, J. Chem. Thermodyn. 1996, 28, 221.

[84] Papina T.S., Kolesov V.P., Vorobieva V.P., Golovkov V.F. *The Standard Molar Enthalpy of Formation of 2-chlorodibenzo-p-dioxin*, J. Chem. Thermodyn. 1996, 28, 307.

[85] Roux M.V., Jiménez P., Dávalos J.Z., Abboud J.-L.M., Molina M.T. *Structural Effects on the Thermochemical Properties of Cycloalkanones I. Enthalpy of Combustion, Vapour Pressures, and Enthalpy of Sublimation, and Standard Enthalpy of Formation in the Gaseous Phase of Cyclododecanone*, J. Chem. Thermodyn. 1996, 28, 1029.

[86] Ribeiro da Silva M.A.V., Gonçalves J.M., Pilcher G. *Standard Molar Enthalpies of Formation of Nine Fluorinated β-diketones by Rotating Bomb Calorimetry*, J. Chem. Thermodyn. 1997, 29, 253.

[87] Ribeiro da Silva M.A.V., Matos M.A.R., Amaral L.M.P.F. *Enthalpies of Combustion, Vapour Pressures, and Enthalpies of Sublimation of 5-, 6-, and 8-nitroquinoline and 8-nitroquinaldine*, J. Chem. Thermodyn. 1997, 29, 295.

[88] Gudiño R., Torres L.A., Campos M., Santillán R.L., Farfán N. *The Standard Molar Enthalpies of Combustion and Sublimation of Benzothiazino-benzothiazine and Benzoxazino-benzoxazine*, J. Chem. Thermodyn. 1997, 29, 565.

[89] Ribeiro da Silva M.A.V., Santos L.M.N.B.F., Pilcher G. *Standard Enthalpies of Formation of 2-thenoyltrifluoroacetone and Monothio-2-thenoyltrifluoroacetone by Rotating-Bomb Calorimetry*, J. Chem. Thermodyn. 1997, 29, 757.

[90] Verevkin S.P. *Thermochemistry of Amines : Experimental Standard Molar Enthalpies of Formation of some Aliphatic and Aromatic Amines*, J. Chem. Thermodyn. 1997, 29, 891.

[91] Ribeiro da Silva M.A.V., Matos M.A.R., do Rio C.M.A. *Standard Molar Enthalpy of Formation of 2,4,6-trimethylpyridine*, J. Chem. Thermodyn. 1997, 29, 901.

[92] Ribeiro da Silva M.A.V., Ribeiro da Silva M.D.M.C., Gomes M.L.A.C.N., Johnson M., Pilcher G. *Enthalpies of Combustion of Di-n-propylamine, Diisopropylamine, Diisobutylamine, and Di-sec-butylamine*, J. Chem. Thermodyn. 1997, 29, 1025.

[93] Ribeiro da Silva M.A.V., Matos M.A.R., Amaral L.M.P.F. *Enthalpies of Combustion, Vapour Pressures, and Enthalpies of Sublimation of 2-phenylquinoline and 2,2'-biquinoline*, J. Chem. Thermodyn. 1997, 29, 1129.

[94] Verevkin S.P., Morgenthaler J., Rüchardt C. *Thermochemistry of Imines : Experimental Standard Molar Enthalpies of Formation*, J. Chem. Thermodyn. 1997, 29, 1175.

[95] Jiménez P., Roux M.V., Dávalos J.Z., Martín-Luengo M.A., Abboud J.-L.M. *Structural Effects on the Thermochemical Properties of Cycloalkanones - II. Enthalpy of Combustion, Vapour Pressures, Enthalpy of Sublimation, and Standard Molar Enthalpy of Formation in the Gaseous Phase of Cyclopentadecanone*, J. Chem. Thermodyn. 1997, 29, 1281.

[96] Verevkin S.P. *Thermochemistry of Substituted Benzenes. Experimental Standard Molar Enthalpies of Formation of o-, m-, and p-terphenyls and 1,3,5-triphenylbenzene*, J. Chem. Thermodyn. 1997, 29, 1495.

[97] Verevkin S.P. *Thermochemistry of Phenols : Experimental Standard Molar Enthalpies of Formation of 2-phenylphenol, 4-phenylphenol, 2,6-diphenylphenol, and 2,2'- and 4,4'-dihydroxybiphenyl*, J. Chem. Thermodyn. 1998, 30, 389.

[98] Papina T.S., Kolesov V.P., Lukyanova V.A., Golovkov V.F., Chernov C.A., Vorobieva V.P. *The Standard Molar Enthalpy of Formation of 2,3-dichlorodibenzo-p-dioxin*, J. Chem. Thermodyn. 1998, 30, 431.

[99] Gudiño R., Torres L.A., Santillán R.L., Farfán N. *The Standard Molar Enthalpies of Combustion and Vaporization of Three Oxazolidines*, J. Chem. Thermodyn. 1998, 30, 671.

[100] Ribeiro da Silva M.A.V., Carvalho A.P.S.M.C., Monte M.J.S., Giera E. *Enthalpies of Combustion, Vapour Pressures, and Enthalpies of Sublimation of 5-amino-6-nitroquinoline and 4-aminoquinaldine*, J. Chem. Thermodyn. 1998, 30, 815.

[101] Ribeiro da Silva M.D.M.C., Matos M.A.R., Vaz M.C., Santos L.M.N.B.F., Pilcher G., Acree W.E. Jr., Powell J.R. *Enthalpies of Combustion of the Pyridine N-oxide Derivatives : 4-methyl-, 3-cyano-, 4-cyano-, 3-hydroxy-, 2-carboxy-, 4-carboxy-, and 3-methyl-4-nitro, and of the Pyridine Derivatives : 2-carboxy-, and 4-carboxy-. The Dissociation Enthalpies of the N-O Bonds*, J. Chem. Thermodyn. 1998, 30, 869.

[102] Verevkin S.P. *Thermochemistry of Amines : Strain in Six-Membered Rings from Experimental Standard Molar Enthalpies of Formation of Morpholines and Piperazines*, J. Chem. Thermodyn. 1998, 30, 1069.

[103] Kolesov V.P., Pimenova S.M., Lukyanova V.A., Kuznetsova T.S., Kozina M.P. *The Thermochemistry of some Polycyclic Compounds*, J. Chem. Thermodyn. 1998, 30, 1455.

[104] Ribeiro da Silva M.A.V., Ribeiro da Silva M.D.M.C., Matos M.A.R., Jimenez P., Roux M.V., Elguero J., Claramunt R., Cabildo P., Sanchez-Migallón A. *Enthalpies of Combustion, Heat Capacities, and Enthalpies of Vaporization of 1-ethylimidazole and 1-ethylpyrazole*, J. Chem. Thermodyn. 1999, 31, 129.

[105] Jiménez P., Roux M.V., Dávalos J.Z., Abboud J.-L.M., Molina M.T. *Structural Effects on the Thermochemical Properties of Cycloalkanones. III. Enthalpy of Combustion, Vapour Pressures, and Enthalpy of Sublimation, and Standard Enthalpy of Formation in the Gaseous Phase of Pentacyclo-[5.4.0.0^{2,6}.0^{3,10}.0^{5,9}]undecane-8,11-dione*, J. Chem. Thermodyn. 1999, 31, 263.

[106] Verevkin S.P. *Thermochemistry of Phenols : Quantification of the Ortho-, Para-, and Meta-Interactions in Tert-Alkyl Substituted Phenols*, J. Chem. Thermodyn. 1999, 31, 559.

[107] Roux M.V., Dávalos J.Z., Jiménez P., Flores H., Saiz J.-L., Abboud J.-L.M., Juaristi E. *Structural Effects on the Thermochemical Properties of Sulfur Compounds : I. Enthalpy of Combustion, Vapour Pressures, Enthalpy of Sublimation, and Standard Molar Enthalpy of Formation in the Gaseous Phase of 1,3-dithiane*, J. Chem. Thermodyn. 1999, 31, 635.

[108] Ribeiro da Silva M.A.V., Ferrão M.L.C.C.H., Monte M.J.S., Gonçalves J.M., Jiye F. *Standard Molar Enthalpy of Formation, Vapour Pressures, and Standard Molar Enthalpy of Sublimation of Benzanthrone*, J. Chem. Thermodyn. 1999, 31, 1067.

[109] Ribeiro da Silva M.A.V., Monte M.J.S., Ribeiro J.R. *Vapour Pressure and the Enthalpies and Entropies of Sublimation of Five Dicarboxylic Acids*, J. Chem. Thermodyn. 1999, 31, 1093.

[110] Ribeiro da Silva M.A.V., Ferrão M.L.C.C.H., Alves da Silva A.M.R.O. *Standard Molar Enthalpies of Formation of Three Branched Alkyl Carboxylic Acids*, J. Chem. Thermodyn. 1999, 31, 1129.

[111] Ribeiro da Silva M.A.V., Ribeiro da Silva M.D.M.C., Matos M.A.R., Jiménez P., Roux M.V., Martin-Luengo M.A., Elguero J., Claramunt R., Cabildo P. *Enthalpies of Combustion, Heat Capacities, and Enthalpies of Vaporisation of 1-phenylimidazole and 1-phenylpyrazole*, J. Chem. Thermodyn. 2000, 32, 237.

[112] Verevkin S.P. *Thermochemical Study of the Ortho Interactions in Alkyl Substituted Anilines*, J. Chem. Thermodyn. 2000, 32, 247.

[113] Sakiyama M., Kiyobayashi T. *Micro-Bomb Combustion Calorimeter Equipped with an Electric Heater for Aiding Complete Combustion*, J. Chem. Thermodyn. 2000, 32, 269.

[114] Kirklin D.R. *Enthalpy of Combustion of Acetylsalicylic Acid*, J. Chem. Thermodyn. 2000, 32, 701.

[115] Aguilar A.R., Guareño E.O. *Thermochemistry of Methyl-D-glucopyranosides and Methyl-D-galactopyranosides*, J. Chem. Thermodyn. 2000, 32, 767.

[116] Nagano Y. *Micro-Combustion Calorimetry of Coronene*, J. Chem. Thermodyn. 2000, 32, 973.

[117] Della Gatta G., Jóźwiak M., Brunetti B., Abate L. *Enthalpies and Entropies of Fusion and of Sublimation at the Temperature 298.15 K of Thiourea and Seven N-alkylthioureas*, J. Chem. Thermodyn. 2000, 32, 979.

[118] Ribeiro da Silva M.A.V., Ribeiro da Silva M.D.M.C., Santos L.M.N.B.F. *Standard Molar Enthalpies of Formation of Crystalline L-, D- and DL-valine*, J. Chem. Thermodyn. 2000, 32, 1037.

[119] Ribeiro da Silva M.D.M.C., Gonçalves J.M., Acree W.E. Jr. *Standard Molar Enthalpy of Sublimation of Crystalline 3-pyridinecarboxylic Acid*, J. Chem. Thermodyn. 2000, 32, 1071.

[120] Ribeiro da Silva M.A.V., Ribeiro da Silva M.D.M.C., Silva L.C.M., Dietze F., Hoyer E. *Thermochemical Study of Two N-benzoyl-N',N'-dialkylureas*, J. Chem. Thermodyn. 2000, 32, 1113.

[121] Verevkin S.P., Heintz A. *Thermochemistry of Substituted Benzenes : Quantification of Ortho-, Para-, Meta-, and Buttress Interactions in Alkyl-substituted Nitrobenzenes*, J. Chem. Thermodyn. 2000, 32, 1169.

[122] Monte M.J.S., Hillesheim D.M. *Thermodynamic Study on the Sublimation of the Three Iodobenzoic Acids and of 2-fluoro- and 3-fluorobenzoic Acids*, J. Chem. Thermodyn. 2000, 32, 1727.

[123] Kiyobayashi T., Minas da Piedade M.E. *The Standard Molar Enthalpy of Sublimation of η^5-bis-pentamethylcyclopentadienyl Iron Measured with an Electrically Calibrated Vacuum-Drop Sublimation Microcalorimetric Apparatus*, J. Chem. Thermodyn. 2001, 33, 11.

[124] Ribeiro da Silva M.A.V., Monte M.J.S., Ribeiro J.R. *Thermodynamic Study on the Sublimation of Succinic Acid and of Methyl- and Dimethyl-substituted Succinic and Glutaric Acids*, J. Chem. Thermodyn. 2001, 33, 23.

[125] Monte M.J.S., Hillesheim D.M. *Thermodynamic Study on the Sublimation of Six Methylnitrobenzoic Acids*, J. Chem. Thermodyn. 2001, 33, 103.

[126] Monte M.J.S., Hillesheim D.M. *Thermodynamic Study of the Sublimation of Six Aminomethylbenzoic Acids*, J. Chem. Thermodyn. 2001, 33, 745.

[127] Monte M.J.S., Hillesheim D.M. *Thermodynamic Study on the Sublimation of 3-phenylpropionic Acid and of Three Methoxy-Substituted 3-phenylpropionic Acids*, J. Chem. Thermodyn. 2001, 33, 837.

[128] Matos M.A.R., Monte M.J.S., Hillesheim D.M. *Standard Molar Enthalpies of Combustion of Five trans-dimethoxycinnamic Acids*, J. Chem. Thermodyn. 2001, 33, 899.

[129] Boerio-Goates J., Francis M.R., Goldberg R.N., Ribeiro da Silva M.A.V., Ribeiro da Silva M.D.M.C., Tewari Y.B. *Thermochemistry of Adenosine*, J. Chem. Thermodyn. 2001, 33, 929.

[130] Ribeiro da Silva M.D.M.C., Ferreira S.C.C., Rodrigues I.A.P., da Silva L.C.M., Acree W.E. Jr., Pandey S., Roy L.E. *Experimental Standard Molar Enthalpies of Formation of Crystalline 3,5-dimethylpyrazole, 3,5-dimethyl-4-nitrosopyrazole, 1,3,5-trimethyl-4-nitrosopyrazole, and 3,5-dimethyl-1-phenyl-4-nitrosopyrazole*, J. Chem. Thermodyn. 2001, 33, 1227.

[131] Ribeiro da Silva M.D.M.C., Gonçalves J.M., Ferreira S.C.C., da Silva L.C.M. Sottomayor M.J., Pilcher G., Acree W.E. Jr., Roy L.E. *Experimental Thermochemical Study of the Enthalpies of Formation and Sublimation of Isonicotinamide, Picolinamide, Nicotinamide, Isonicotinamide N-oxide, and Nicotinamide N-oxide. The Dissociation Enthalpies of the N-O Bonds*, J. Chem. Thermodyn. 2001, 33, 1263.

[132] Ribeiro da Silva M.A.V., Amaral L.M.P.F., Ferreira A.I.M.C.L. *Standard Molar Enthalpies of Formation of some Trichloroanilines by Rotating-Bomb Calorimetry*, J. Chem. Thermodyn. 2002, 34, 119.

[133] Ribeiro da Silva M.A.V., Ribeiro da Silva M.D.M.C., da Silva L.C.M., Dietze F. *A Calorimetric Study of N,N-diethyl-N'-furoylthiourea and N,N-diisobutyl-N'-furoylthiourea*, J. Chem. Thermodyn. 2002, 34, 155.

[134] Diogo H.P., Minas da Piedade M.E. *Enthalpy of Formation of Benzo[k]fluoranthene*, J. Chem. Thermodyn. 2002, 34, 173.

[135] Torres L.A., Campos M., Enríquez E., Patiño R. *The Enthalpy of Sublimation of 5,10,15,20-tetraphenylporphine and 5,10,15,20-tetrakis(4-methoxyphenyl)porphine*, J. Chem. Thermodyn. 2002, 34, 293.

[136] Nagano Y. *Standard Enthalpies of Formation of Phenanthrene and Naphthacene*, J. Chem. Thermodyn. 2002, 34, 377.

[137] Pimenova S.M., Melkhanova S.V., Kolesov V.P., Demyanov P.I., Fedotov A.N., Vorobieva V.P. *Experimental Determination of the Enthalpy of Formation of Dibenzo-p-dioxin*, J. Chem. Thermodyn. 2002, 34, 385.

[138] Matos M.A.R., Monte M.J.S., Hillesheim D.M. *Standard Molar Enthalpies of Combustion of the Three trans-methoxycinnamic Acids*, J. Chem. Thermodyn. 2002, 34, 499.

[139] Chickos J.S., Webb P., Nichols G., Kiyobayashi T., Cheng P.-C., Scott L. *The Enthalpy of Vaporization and Sublimation of Corannulene, Coronene, and Perylene at T = 298.15 K*, J. Chem. Thermodyn. 2002, 34, 1195.

[140] Chickos J.S., Hillesheim D., Nichols G., Zehe M.J. *The Enthalpies of Vaporization and Sublimation of Exo- and Endo-tetrahydrodicyclopentadienes at T = 298.15 K*, J. Chem. Thermodyn. 2002, 34, 1647.

[141] Pimenova S.M., Melkhanova S.V., Kolesov V.P. *Thermochemical Determination of the Enthalpies of Combustion and Formation of Fullerene C_{70}*, J. Chem. Thermodyn. 2003, 35, 189.

[142] Ribeiro da Silva M.A.V., Lima L.M.S.S., Amaral L.M.P.F., Ferreira A.I.M.C.L., Gomes J.R.B. *Standard Molar Enthalpies of Formation, Vapour Pressures, and Enthalpies of Sublimation of 2-chloro-4-nitroaniline and 2-chloro-5-nitroaniline*, J. Chem. Thermodyn. 2003, 35, 1343.

[143] Lukyanova V.A., Papina T.S., Kolesov V.P., Fedotov A.N., Dem'yanov P.I., Avramenko N.V. *A New Determination of the Standard Molar Enthalpy of Formation of 2-chlorodibenzo-p-dioxin*, J. Chem. Thermodyn. 2003, 35, 1507.

[144] Ribeiro da Silva M.D.M.C., Matos M.A.R., Miranda M.S., Morais V.M.F., Acree W.E. Jr. *Experimental and Theoretical Study of the Dissociation Enthalpy of the N-O Bond on 2-hydroxypyridine N-oxide : Theoretical Analysis of the Energetics of the N-O Bond for Hydroxypyridine N-oxide Isomers*, J. Chem. Thermodyn. 2004, 36, 107.

[145] Morais V.M.F., Miranda M.S., Matos M.A.R. *Thermochemical Study of Chloropyrazines and Chloroquinoxalines*, J. Chem. Thermodyn. 2004, 36, 377.

[146] Monte M.J.S., Almeida A.R.R.P., Ribeiro da Silva M.A.V. *Thermodynamic Study of the Sublimation of Eight 4-n-alkylbenzoic Acids*, J. Chem. Thermodyn. 2004, 36, 385.

[147] Miranda M.S., Morais V.M.F., Matos M.A.R. *Standard Molar Enthalpies of Formation of the Methoxynitrophenol Isomers : a Combined Experimental and Theoretical Investigation*, J. Chem. Thermodyn. 2004, 36, 431.

[148] Ribeiro da Silva M.A.V., Santos L.M.N.B.F. *Standard Molar Enthalpy of Formation of Monothiodibenzoylmethane by Rotating-Bomb Calorimetry*, J. Chem. Thermodyn. 2004, 36, 447.

[149] Rojas-Aguilar A., Flores-Lara H., Martinez-Herrera M., Ginez-Carbajal F. *Thermochemistry of Benzoquinones*, J. Chem. Thermodyn. 2004, 36, 453.

[150] Ribeiro da Silva M.A.V., Santos L.M.N.B.F., Schröder B., Dietze F., Beyer L. *Standard Molar Enthalpies of Formation of Three N-benzoylthiocarbamic-O-alkylesters*, J. Chem. Thermodyn. 2004, 36, 491.

[151] Rojas-Aguilar A. *Enthalpies of Combustion and Formation of Fullerene C_{70} by Isoperibolic Combustion Calorimetry*, J. Chem. Thermodyn. 2004, 36, 519.

[152] Ribeiro da Silva M.A.V., Ribeiro da Silva M.D.M.C., Amaral L.M.P.F., Jiménez P., Roux M.V., Dávalos J.Z., Temprado M., Cabildo P., Claramunt R.M., Elguero J., Mó O., Yáñez M. *Experimental Thermochemical Study of Two 2-alkylbenzimidazole Isomers (Alkyl = Propyl and Isopropyl)*, J. Chem. Thermodyn. 2004, 36, 533.

[153] Ribeiro da Silva M.A.V., Santos L.M.N.B.F., Schröder B., Beyer L. *Thermochemical Studies of Three N-thiocarbamoylbenzamidines*, J. Chem. Thermodyn. 2004, 36, 555.

[154] Flores H., Amador P. *Standard Molar Enthalpies of Formation of Crystalline Stereoisomers of Aldono-1,4-lactones*, J. Chem. Thermodyn. 2004, 36, 1019.

[155] Ribeiro da Silva M.D.M.C., Miranda M.S., Vaz C.M.V., Matos M.A.R., Acree W.E. Jr. *Experimental Thermochemical Study of Three Monosubstituted Pyrazines*, J. Chem. Thermodyn. 2005, 37, 49.

[156] Ribeiro da Silva M.A.V., Ribeiro da Silva M.D.M.C., Amaral L.M.P.F., Elguero J., Jiménez P., Roux M.V., Dávalos J.Z., Temprado M., Cabildo P., Claramunt R.M., Mó O.,

Yáñez M. *Thermochemical Properties of Two Benzimidazole Derivatives : 2-phenyl- and 2-benzylbenzimidazole*, J. Chem. Thermodyn. 2005, 37, 1168.

[157] Boerio-Goates J.A., Hopkins S.D., Monteiro R.A.R., Ribeiro da Silva M.D.M.C., Ribeiro da Silva M.A.V., Goldberg R.N. *Thermochemistry of Inosine*, J. Chem. Thermodyn. 2005, 37, 1239.

[158] Ribeiro da Silva M.A.V., Matos M.A.R., Amaral L.M.P.F. *Thermochemical Studies of 1-hydroxyisoquinoline, 5-hydroxyisoquinoline, 1,5-dihydroxyisoquinoline*, J. Chem. Thermodyn. 2005, 37, 1312.

[159] Ribeiro da Silva M.A.V., Matos M.A.R., Amaral L.M.P.F. *Standard Molar Enthalpies of Formation of 2-chloroquinoline, 4-chloroquinoline, 6-chloroquinoline, 4,7-dichloroquinoline by Rotating-Bomb Calorimetry*, J. Chem. Thermodyn. 2006, 38, 49.

[160] Ribeiro da Silva M.A.V., Amaral L.M.P.F., Santos A.F.L.O.M., Gomes J.R.B. *Thermochemistry of some Alkylsubstituted Anthracenes*, J. Chem. Thermodyn. 2006, 38, 367.

[161] Morais V.M.F., Miranda M.S., Matos M.A.R. *Experimental and Computational Thermochemistry of the Dihydroxypyridine Isomers*, J. Chem. Thermodyn. 2006, 38, 450.

[162] Miranda M.S., Morais V.M.F., Matos M.A.R. *Thermochemical Study of Cyanopyrazines : Experimental and Theoretical Approaches*, J. Chem. Thermodyn. 2006, 38, 559.

[163] Pedley J.B., Naylor R.D. et Kirby S.P. *Thermochemical Data of Organic Compounds*. Second Edition, 1986, Chapman and Hall, London.

[164] NIST Standard Reference Database 85, NIST/TRC Table Database, WinTable, Version 2003.

[165] Wolf K.L., Weghofer H. Z. Phys. Chem. (B) 1938, 39, 194.

[166] Drotloff H., Rotter H., Emeis D. et Möller M. *Mesomorphic State of Cyclotetradecane*, J. Am. Chem. Soc. 1987, 109, 7797.

[167] Enderlin M. *Contribution à l'Etude de la Dissociabilité des Oxydes Organiques sur Quelques Transformations des Tétraarylnaphtacènes et de leurs oxydes*, Ann. Chim. 1938, 10, 5.

[168] Hoyer H., Peperle W. Z. Electrochem. 1958, 62, 61.

[169] Kruerke U., Hoogzand C., Hubel W. *Über Organometall-Komplexe, VI 1,2,4-tri-tert.-butyl-benzol*, Chem. Ber. 1961, 94, 2817.

[170] Stevenson G.R., Forch B.E. *Heats of Formation of the [16]annulene Dianion and Neutral Molecule*, J. Am. Chem. Soc. 1980, 102, 5985.

[171] Cox J.D. et Pilcher G. *Thermochemistry of Organic and Organometallic Compounds*, Academic Press, New York, 1970, 1-636.

[172] Nagano Y. *Standard Enthalpies of Formation of Phenanthrene and Naphthacene*, J. Chem. Thermodyn. 2002, 34, 377.

[173] Dobratz B.M. *LLNL Explosives Handbook*, University of California, Livermore, mars 1981, UCRL-52997 avec UCRL-52997 Change 2, janvier 1985.

[174] Baroody E.E., Peters S.T. Rapport IHSP-87-252 par Naval Ordnance Station, Indian Head, MD, 1987, 1.

[175] Weinheimer R. *Properties of Selected High Explosives Proceedings of the Eighteenth International Pyrotechnics Seminar*, 13-17 juillet 1992, 939.

[176] Fogelzang A.E. Data of Mendeleev University of Chemical Technology, 1996.

[177] Chickos J.S. et Acree W.E. Jr. *Enthalpies of Sublimation of Organic and Organometallic Compounds. 1910-2001*, J. Phys. Chem. Ref. Data. 2002, 31(2), 537.

[178] Fabbiani F.P.A., Allan D.R., Parsons S. et Pulham C.R. *Exploration of the High-Pressure Behaviour of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons : Naphthalene, Phenanthrene and Pyrene*, Acta Crystallogr., Sect. B: Struct. Sci. 2006, B62, 826.

[179] Petropavlov N.N., Tsygankova I.G., Teslenko L.A. *Microcalorimetric Investigation of Polymorphic Transitions in Organic Crystals*, Sov. Phys. Crystallogr. 1988, 33(6), 853.

[180] Wu D., Xu G., Qu S., Xue R., Gu C., Zhang F. *Standard Enthalpies of Combustion and Formation of Porphyrin Derivatives*, Thermochim. Acta. 1989, 154(2), 233.

[181] Radomska M. et Radomski R. *Calorimetric Studies of Binary Systems of 1,3,5-trinitrobenzene with Naphthalene, Anthracene, and Carbazole. I. Phase Transitions and Heat Capacities of the Pure Components and Charge-Transfer Complexes*, Thermochim. Acta. 1980, 40, 405.

[182] Krien G., Licht H.H., Trimborn F. *A Phase Transition of Hexanitroethane (HNE)*, Explosivstoffe. 1970, 9, 203.

[183] Hall P.G. *Thermal Decomposition and Phase Transitions in Solid Nitramines*, Trans. Faraday Soc. 1971, 67(3), 556.

[184] Ebisuzaki Y., Askari L.H., Bryan A.M. *Phase Transitions in Resorcinol*, J. Chem. Phys. 1987, 87, 6659.

[185] http://lasim.univ-lyon.fr/perso/rabilloud/these abinitio.pdf

[186] http://www.lct.jussieu.fr/chaquin/DFT.pdf

Annexe 1

Deux types de méthodes utilisant la chimie quantique ont pour objectif essentiel de calculer des propriétés moléculaires à partir d'approximations mathématiques. Il s'agit des méthodes *ab initio* et des méthodes semi-empiriques. La différence entre ces techniques de calcul réside dans le fait que les méthodes semi-empiriques utilisent des paramètres calculés à partir de données expérimentales, ce qui permet de compenser les erreurs dues au fait que l'on néglige parfois des termes mathématiques intervenant dans l'équation de Schrödinger (car ils sont longs à calculer). Au contraire, les méthodes *ab initio* n'emploient en aucun cas des données expérimentales.

Cette annexe a pour but d'essayer d'éclairer le lecteur, autant que faire se peut, sur le principe de ces méthodes *ab initio*. Sont également évoquées dans ce qui suit les deux grandes familles de calculs quantiques : l'approximation Hartree-Fock et la théorie de la fonctionnelle de la densité.

1. Généralités

En mécanique quantique, l'état d'un système à N noyaux et n électrons est décrit par une fonction d'onde Φ satisfaisant l'équation de Schrödinger :

$$\hat{H}\Phi = i\hbar\frac{\partial\Phi}{\partial t}$$

où $\hbar$: constante de Planck réduite ($\hbar = \frac{h}{2\pi}$)

Dans la plupart des cas, l'hamiltonien $\hat{H}$ ne dépend pas explicitement du temps. La fonction d'onde s'écrit alors comme le produit de deux fonctions, l'une dépendant des coordonnées $\vec{R}$ des noyaux et des coordonnées $\vec{r}$ des électrons, l'autre dépendant uniquement du temps :

$$\Phi = \Psi\left(\vec{R}_A, \vec{R}_B, ..., \vec{R}_N, \vec{r}_1, \vec{r}_2, ..., \vec{r}_n\right)\Theta(t)$$

L'équation stationnaire suivante est alors à résoudre :

$$\hat{H}\Psi = E\Psi$$

L'hamiltonien non relativiste d'un agrégat (*i.e.* système à plusieurs particules) isolé s'écrit de la manière suivante :

$$\hat{H} = -\sum_{A=1}^{N}\frac{\nabla_A^{\,2}}{2M_A} - \sum_{r=1}^{n}\frac{\nabla_r^{\,2}}{2} + \sum_{A=1}^{N}\sum_{B>A}^{N}\frac{Z_A Z_B}{r_{AB}} - \sum_{A=1}^{N}\sum_{r=1}^{n}\frac{Z_A}{r_{Ar}} + \sum_{r=1}^{n}\sum_{s>r}^{n}\frac{1}{r_{rs}}$$

Les lettres majuscules *A, B,…* désignent les noyaux et les lettres minuscules *r, s,…* désignent les électrons.

Les deux premiers termes de cette équation correspondent aux opérateurs d'énergie cinétique des noyaux et des électrons. Quant aux termes suivants, il s'agit des opérateurs d'interaction de Coulomb.

En raison des interactions entre électrons, l'équation de Schrödinger est très compliquée à résoudre avec cet hamiltonien. En effet, elle ne peut être résolue que dans de très rares cas (ex : atome d'hydrogène, ions hydrogénoïdes (He^+, Li^{2+},…)). La recherche d'approximations est donc indispensable.

Born et Oppenheimer ont proposé une approche qui est aujourd'hui à la base de nombreux calculs en physique de la matière. Ils sont partis du constat que les noyaux sont beaucoup plus lourds que les électrons. Le mouvement de ces derniers est donc beaucoup plus rapide. Il est alors possible de considérer que les électrons évoluent dans un potentiel créé par des atomes fixes. La fonction d'onde s'écrit dans ce cas sous la forme d'un produit d'une fonction d'onde nucléaire et d'une fonction d'onde électronique :

$$\Psi\left(\vec{R},\vec{r}\right)=\Psi_N\left(\vec{R}\right)\Psi_e\left(\vec{r},\vec{R}\right)$$

où $\vec{R}$: coordonnées $\left(\vec{R}_A,\vec{R}_B,...,\vec{R}_N\right)$ des noyaux

$\vec{r}$: coordonnées $\left(\vec{r}_A,\vec{r}_B,...,\vec{r}_N\right)$ des électrons

L'équation de Schrödinger s'écrit :

$$\left(T_N+V_{NN}+T_e+V_{Ne}+V_{ee}\right)\left(\Psi_N\Psi_e\right)=E\left(\Psi_N\Psi_e\right), \text{ avec :}$$

$$T_N=-\sum_{A=1}^{N}\frac{\nabla_A^{\,2}}{2M_A},\ V_{NN}=\sum_{A=1}^{N}\sum_{B>A}^{N}\frac{Z_AZ_B}{r_{AB}},\ T_e=-\sum_{r=1}^{n}\frac{\nabla_r^{\,2}}{2},\ V_{Ne}=-\sum_{A=1}^{N}\sum_{r=1}^{n}\frac{Z_A}{r_{Ar}}\ \text{et}\ V_{ee}=\sum_{r=1}^{n}\sum_{s>r}^{n}\frac{1}{r_{rs}}.$$

On suppose que $T_N\left(\Psi_N\Psi_e\right)=\Psi_eT_N\Psi_N$. Cette approximation (dite adiabatique) est valable lorsque la fonction d'onde électronique Ψ_e s'adapte instantanément aux changements de positions des noyaux. On a alors :

$$H\left(\Psi_N\Psi_e\right)=\Psi_e\left(T_N+V_{NN}\right)\Psi_N+\Psi_N\left(T_e+V_{Ne}+V_{ee}\right)\Psi_e=E\Psi_N\Psi_e$$

Deux étapes sont nécessaires à la résolution de cette équation. On résout tout d'abord l'équation électronique en supposant les noyaux fixes :

$$\left(T_e+V_{Ne}+V_{ee}\right)\Psi_e=E_e\Psi_e$$

On résout ensuite l'équation nucléaire dans le potentiel créé par les électrons :

$$\left(T_N+V_{NN}+E_e\right)\Psi_N=E\Psi_N$$

Notons que l'approximation de Born-Oppenheimer n'est valable que lorsque les couplages des mouvements électroniques et nucléaires sont négligeables, *i.e.* lorsque la

fonction d'onde électronique ne subit pas de variations brusques quand les positions des noyaux varient. On précisera que la majorité des études des agrégats se font dans le cadre de cette approximation.

2. Approximation Hartree-Fock

L'énergie est une grandeur qui joue un rôle essentiel dans l'étude des systèmes physico-chimiques. Pour obtenir une expression de celle-ci, on résout l'équation de Schrödinger ($H\Psi = E\Psi$) en supposant les atomes fixes.

L'hamiltonien s'écrit alors en termes d'opérateurs mono-électroniques $h(r)$ et bi-électroniques $\frac{1}{r_{rs}}$:

$$H = \sum_{r=1}^{n} h(r) + \sum_{r=1}^{n} \sum_{s>r} \frac{1}{r_{rs}}$$

La solution est une fonction d'onde poly-électronique dont la forme la plus simple est un déterminant de Slater noté comme suit :

$$\Psi_0 = \left| \phi_1(1)\phi_2(2)...\phi_n(n) \right\rangle$$

où ϕ_i : spin-orbitales mono-électroniques occupées quand le système est dans l'état Ψ_0

En fait, l'état exact du système n'est pas correctement décrit par un unique déterminant de Slater. Cet état doit être développé sur tous les déterminants résultant des différentes combinaisons possibles des *n* électrons dans toutes les spin-orbitales occupées ou virtuelles. Mais l'approximation de Hartree-Fock consiste à écrire la fonction d'onde du système sous la forme d'un seul déterminant de Slater. On cherche ainsi les spin-orbitales mono-électroniques ϕ_i minimisant l'énergie :

$$E_0 = \min_{\{\phi_i\}} \left\langle \Psi_0 \middle| H \middle| \Psi_0 \right\rangle$$

où $\Psi_0 = \left| \phi_1(1)\phi_2(2)...\phi_n(n) \right\rangle$ et $\left\langle \phi_i \middle| \phi_j \right\rangle = \delta_{ij}$

L'énergie a donc pour expression :

$$\left\langle \Psi_0 \middle| H \middle| \Psi_0 \right\rangle = \left\langle \phi_1(1)\phi_2(2)...\phi_n(n) \middle| \sum_{r=1}^{n} h(r) + \sum_{r,s<r}^{n} \frac{1}{r_{rs}} \middle| \phi_1(1)\phi_2(2)...\phi_n(n) \right\rangle = \sum_{i=1}^{n} I_i + \sum_{i=1}^{n} \sum_{j>i}^{n} (J_{ij} - K_{ij}),$$

avec :

$$I_i = \left\langle \phi_i(r) \middle| h(r) \middle| \phi_i(r) \right\rangle,\ J_{ij} = \left\langle \phi_i(r)\phi_j(s) \middle| \frac{1}{r_{rs}} \middle| \phi_i(r)\phi_j(s) \right\rangle \text{ et } K_{ij} = \left\langle \phi_i(r)\phi_j(s) \middle| \frac{1}{r_{rs}} \middle| \phi_j(r)\phi_i(s) \right\rangle$$

Finalement, après application de méthodes itératives (appelées SCF : Self Consistent Field), l'énergie du système, obtenue après convergence, vaut :

$$E_0 = \sum_{i=1}^{n} \varepsilon_i^{'} - \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\left(J_{ij} - K_{ij}\right)$$

où $\varepsilon_i^{'}$: énergies Hartree-Fock des spin-orbitales

En définitive, l'approximation Hartree-Fock remplace un problème à *n* électrons par un problème mono-électronique dans lequel chacun des électrons est soumis à un potentiel moyen engendré par les *n*-1 électrons.

La fonction d'onde Hartree-Fock n'est qu'une approximation de la fonction exacte du système. Cependant, elle donne souvent une bonne approximation de la densité de probabilité pour des configurations proches de l'équilibre. Lorsque l'on s'éloigne des positions d'équilibre, la méthode Hartree-Fock donne de mauvais résultats car les courbes d'énergie potentielle ne peuvent alors être décrites correctement.

Notons que la différence entre l'énergie exacte non relativiste et l'énergie Hartree-Fock est appelée énergie de corrélation. Son évaluation constitue l'un des enjeux majeurs de la chimie quantique.

3. Théorie de la fonctionnelle de la densité

Les méthodes décrivant un système à *n* électrons engendrent des calculs très longs, en particulier pour les systèmes relativement grands. Il est donc légitime de développer des théories moins coûteuses (en termes de temps et de mémoire de processeur), même au risque de perdre une partie de l'information. La théorie de la fonctionnelle de la densité (ou DFT : Density Functional Theory) consiste à décrire un système en considérant la densité $\rho(\vec{r})$ comme variable de base. De cette manière, le problème à *n* électrons est étudié dans l'espace de $\rho(\vec{r})$ qui est tridimensionnel (remplaçant ainsi l'espace de dimension 3*n* de la fonction d'onde $|\Psi\rangle$).

3.1. Principe de la théorie

La densité électronique d'un système à *n* électrons associée à une fonction d'onde $\Psi(\vec{r},\vec{r}_2,...,\vec{r}_n)$ s'écrit :

$$\rho(\vec{r}) = \int \left|\Psi(\vec{r},\vec{r}_2,...,\vec{r}_n)\right|^2 d\vec{r}_2...d\vec{r}_n$$

La théorie DFT repose sur deux théorèmes de Hohenberg et Kohn :

- Théorème 1 : Il existe une fonctionnelle universelle de la densité $F[\rho]$ telle que l'énergie du système puisse s'écrire : $E[\rho] = F[\rho] + \int \rho(\vec{r})v(\vec{r})d\vec{r}$ (où $v(\vec{r})$ est le potentiel externe, par exemple, le champ créé par les noyaux) ;

- Théorème 2 : L'énergie de l'état fondamental est le minimum de la fonctionnelle $E[\rho]$: $E = \min_{\rho(\vec{r})} E[\rho(\vec{r})]$

La fonctionnelle d'énergie s'écrit alors :

$$E[\rho] = T[\rho] + V_{ee}[\rho] + \int \rho(\vec{r}) v(\vec{r}) d\vec{r}$$

où $v(\vec{r})$: potentiel créé par les noyaux
$T[\rho]$: fonctionnelle d'énergie cinétique
$V_{ee}[\rho]$: fonctionnelle d'énergie d'interaction électronique

Les théorèmes de Hohenberg et Kohn démontrent l'existence de la fonctionnelle $E[\rho]$ mais n'en donnent pas une expression analytique. En pratique, on travaille avec des fonctionnelles approchées.

La fonctionnelle $E[\rho]$ est souvent écrite sous une forme qui fait intervenir la contribution cinétique T_0 d'un système d'électrons sans interaction et la contribution coulombienne d'un système classique :

$$E[\rho] = T_0[\rho] + \frac{1}{2}\iint \frac{\rho(\vec{r})\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r} d\vec{r}' + \int \rho(\vec{r}) v(\vec{r}) d\vec{r} + E_{é-c}[\rho]$$

La fonctionnelle $E_{é\text{-}c}$ est la fonctionnelle d'échange-corrélation. Elle contient les effets d'échange et de corrélation, mais aussi les contributions cinétiques et coulombiennes liées à l'interaction entre les électrons :

$$E_{é-c}[\rho] = T[\rho] - T_0[\rho] + V_{ee}[\rho] + \frac{1}{2}\iint \frac{\rho(\vec{r})\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r} d\vec{r}'$$

3.2. Les différents types de fonctionnelles d'échange-corrélation

La détermination de la fonctionnelle $E_{é\text{-}c}$ représente la principale difficulté de la méthode DFT. En effet, son expression analytique exacte est inconnue. Des approximations permettant de décrire convenablement les propriétés étudiées sont donc recherchées. Nombre d'entre elles ont été développées. Celles-ci sont désignées par un groupe de lettres (souvent les initiales des auteurs) dont la première partie désigne la méthode de calcul de l'échange et la deuxième partie correspond à la méthode de calcul de la corrélation. Ces approximations sont essentiellement regroupées en trois générations.

L'approximation de la densité locale (ou LDA : Local Density Approximation) constitue la première génération. Elle consiste à supposer que la densité $\rho(\vec{r})$ est localement uniforme. La fonctionnelle $E_{é\text{-}c}$ s'écrit ainsi :

$$E_{é-c} = \int \rho(\vec{r}) \varepsilon_{é-c}[\rho(\vec{r})] d\vec{r}$$

où $\varepsilon_{é-c}[\rho]$: densité d'énergie d'échange-corrélation par électron

L'utilisation de l'approximation LDA se justifie dans deux cas limites : lorsque la densité électronique varie lentement et lorsque la densité est très grande. Elle permet d'obtenir des résultats relativement convenables pour de nombreux systèmes, y compris dans des cas présentant d'importantes variations de la densité électronique. A coût égal, ces résultats sont en général plus satisfaisants que ceux obtenus par un calcul Hartree-Fock. En effet, les structures géométriques et les fréquences de vibration sont souvent correctes même si les distances inter-atomiques sont généralement sous-estimées. En revanche, les énergies absolues ne sont pas satisfaisantes et les énergies de liaison sont souvent surestimées.

Les fonctionnelles de la deuxième génération dépendent, quant à elles, non seulement de la densité $\rho(\vec{r})$ mais également de ses dérivées. L'idée consiste à effectuer un développement en gradient de la densité (ou GEA : Gradient Expansion Approximation) :

$$E_{é-c}^{GEA}[\rho] = \int \rho(\vec{r}) \varepsilon_{é-c}[\rho(\vec{r})] d\vec{r} + \int B_{é-c}[\rho(\vec{r})] |\nabla \rho(\vec{r})|^2 d\vec{r} + ...$$

Les premiers résultats obtenus avec ces méthodes n'étant pas satisfaisants, des fonctionnelles de gradient corrigé ont ensuite été proposées. Elles sont appelées GGA (approximation du gradient généralisé). Les plus répandues sont celles de A.D. Becke pour l'échange et celle de J.P. Perdew ou de Lee-Yang-Parr pour la corrélation ainsi que celles de Perdew et Wang.

Enfin, la troisième génération des fonctionnelles correspond aux fonctionnelles hybrides. Celles-ci tiennent mieux compte de l'énergie d'échange. Elles contiennent à la fois un terme d'échange calculé en DFT et un terme d'échange exact. Becke a développé des fonctionnelles de la forme suivante :

$$E_{é-c} = aE_{é}^{exact} + (1-a)E_{é}^{LDA} + bE_{é}^{GGA} + cE_{c}^{GGA}$$

Les paramètres *a*, *b* et *c* de cette équation sont optimisés sur un jeu de valeurs connues.

L'une des fonctionnelles les plus couramment employées aujourd'hui est B3LYP ; elle s'écrit de la manière suivante :

$$E_{é}^{B3LYP} = 0{,}2.E_{é}^{exact} + 0{,}8.E_{é}^{LDA} + 0{,}72E_{é}^{Becke} + E_{c}^{VWN} + 0{,}81.E_{c}^{LYP}$$

où $E_{é}^{Becke}$: fonctionnelle d'échange de Becke

E_{c}^{VWN} : fonctionnelle de corrélation de Vosko, Wilk et Nusair

E_{c}^{LYP} : fonctionnelle de corrélation de Lee, Yang et Parr

Ce type de fonctionnelles fournit en général de meilleurs résultats que les fonctionnelles GGA. En effet, les énergies de dissociation ne sont ainsi plus (ou très peu) surestimées.

Enfin, précisons que d'autres fonctionnelles sont en cours de développement. Elles permettent une meilleure description du système électronique mais les calculs réalisés sont ainsi beaucoup plus coûteux que ceux effectués avec les méthodes GGA.

Finalement, la DFT peut être employée pour l'étude de systèmes relativement gros, contenant jusqu'à plusieurs centaines d'électrons. Cette théorie est aujourd'hui très utilisée pour étudier les propriétés de systèmes moléculaires ou même biologiques.

Les travaux réalisés sur les calculs DFT ont montré que cette théorie permettait d'obtenir de bons résultats sur des systèmes très divers (métalliques, ioniques, organo-métalliques,…) et pour de nombreuses propriétés.

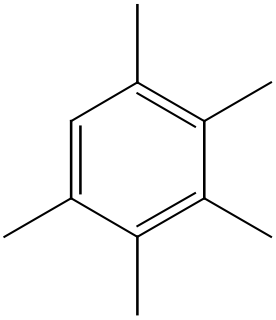
Cependant, plusieurs défauts résident dans les méthodes employant la théorie DFT. En effet, il semblerait que les forces de dispersion ne soient pas correctement traitées. Par ailleurs, les bons ou mauvais résultats obtenus par DFT sur certains systèmes ne sont pas toujours compréhensibles. De plus, il n'existe aucun véritable critère permettant de choisir une fonctionnelle plutôt qu'une autre. Il est en outre difficile de trouver des critères susceptibles d'améliorer une fonctionnelle donnée, ce qui rend parfois l'utilisation de la DFT délicate.

A noter que le calcul *ab initio* de structure électronique le plus simple est l'approche de Hartree-Fock. Quant aux méthodes utilisant la théorie de la fonctionnelle de la densité, elles sont souvent considérées comme étant des méthodes *ab initio* permettant de déterminer la structure électronique d'une molécule, même si la plupart d'entre elles utilise des paramètres dérivés de données empiriques. On parle alors de méthodes semi-empiriques (telles que celles décrites au paragraphe 2.6.1. du chapitre I).

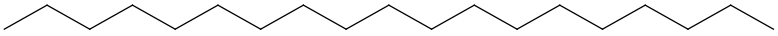
Les références ayant permis la rédaction de cette annexe sont [185] et [186].

Annexe 2

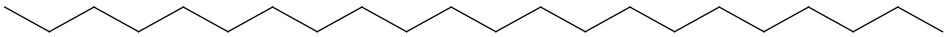
Formules développées des composés C_xH_y analysés



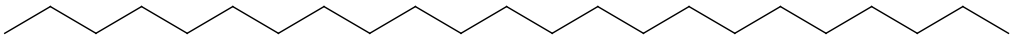
pentaméthylbenzène
[700-12-9]



nonadécane
[629-92-5]



docosane
[629-97-0]

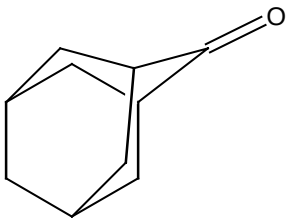


tricosane
[638-67-5]

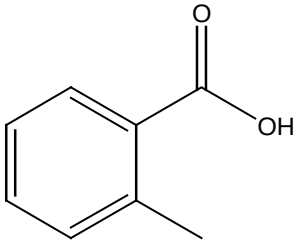


tétracosane
[646-31-1]

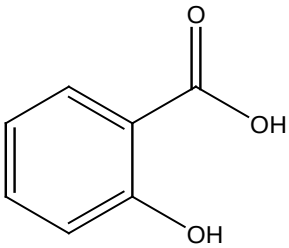
Formules développées des composés $C_xH_yO_z$ analysés



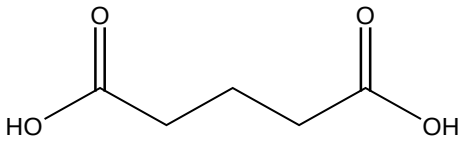
2-adamantanone
[700-58-3]



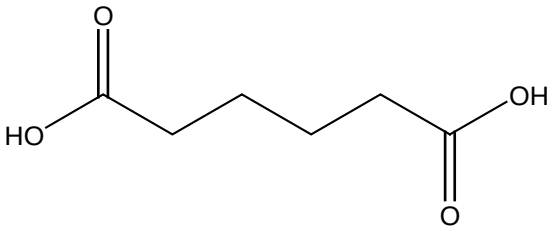
acide 2-méthylbenzoïque
[118-90-1]



acide salicylique
[69-72-7]

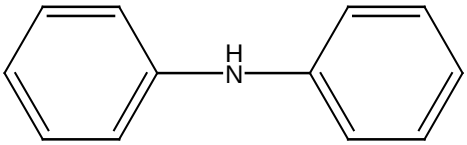


acide pentanedioïque
[110-94-1]

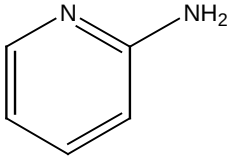


acide hexanedioïque
[124-04-9]

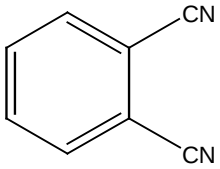
Formules développées des composés $C_xH_yN_wO_z$ analysés



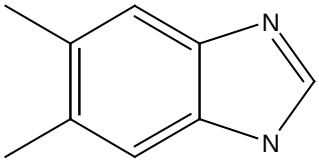
diphénylamine
[122-39-4]



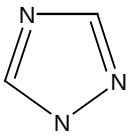
2-aminopyridine
[504-29-0]



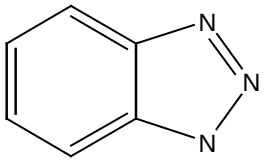
phtalonitrile
[91-15-6]



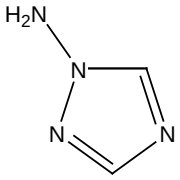
5,6-diméthylbenzimidazole
[582-60-5]



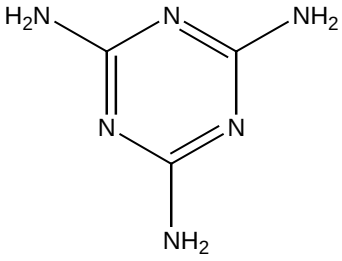
1,2,4-triazole
[288-88-0]



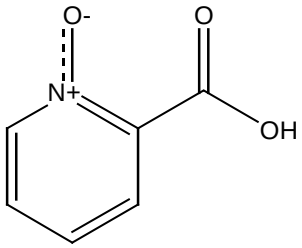
benzotriazole
[95-14-7]



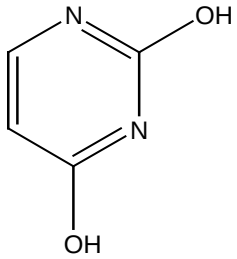
4-amino-1,2,4-triazole
[584-13-4]



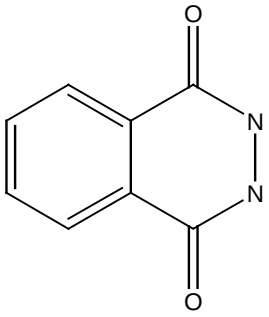
mélamine
[108-78-1]



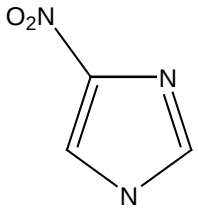
acide picolinique N-oxyde
[824-40-8]



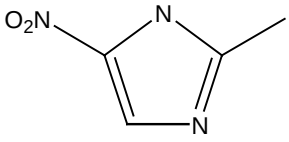
uracile
[66-22-8]



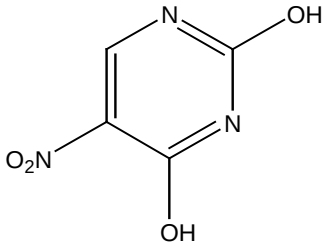
phtalhydrazide



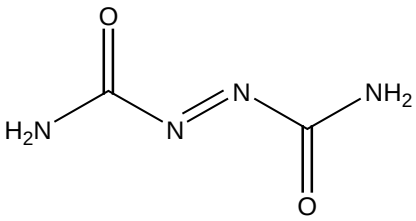
4-nitro-imidazole
[3034-38-6]



2-méthyl-5-nitro-imidazole
[88054-22-2]



5-nitro-uracile
[611-08-5]



azodicarbonamide
[123-77-3]

Annexe 3

Banque de données thermochimiques issues de la littérature concernant 283 molécules organiques - Comparaison des enthalpies standard de formation en phase gazeuse mesurées et calculées

Les résultats sont ici présentés en joules par gramme

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	$\Delta H°_{sub}$ (litt.)	$\Delta_f H°_{g,m}$ (litt.)	$\Delta_f H°_{g,m}$ (calc.)	Résidu
			$g.mol^{-1}$	$J.g^{-1}$	$J.g^{-1}$	$J.g^{-1}$	$J.g^{-1}$	$J.g^{-1}$
1,3,5-triméthyluracile [82]	$C_7H_{10}N_2O_2$		154,2	-	671,4	-	-2030,3	-
1,3-diméthyl-5-éthyluracile [82]	$C_8H_{12}N_2O_2$	31703-08-9	168,2	-	586,8	-	-1979,4	-
1,3-diméthyl-5-propyluracile [82]	$C_9H_{14}N_2O_2$		182,2	-	609,2	-	-1940,2	-
1,3-diméthyl-5-butyluracile [82]	$C_{10}H_{16}N_2O_2$		196,2	-	541,7	-	-1906,7	-
1,3-diméthyl-5-isopropyluracile [82]	$C_9H_{14}N_2O_2$		182,2	-	564,7	-	-1985,9	-
acide p-bromobenzoïque [83]	$C_7H_5O_2Br$	586-76-5	201,0	-1885,4	-	-	-1438,3	-
2-chlorodibenzo-p-dioxine [84]	$C_{12}H_7O_2Cl$	39227-54-8	218,6	-783,5	444,8	-338,9	-422,4	83,2
5-méthoxybenzofurazane [81]	$C_7H_6N_2O_2$	4413-48-3	150,1	385,7	594,1	979,8	899,6	79,9
5-méthoxybenzofurazan-1-oxyde [81]	$C_7H_6N_2O_3$	7791-49-3	166,1	314,8	577,8	892,7	-	-
5-méthylbenzofurazan-1-oxyde [81]	$C_7H_6N_2O_2$	19164-41-1	150,1	1167,0	614,1	1781,1	-	-
5-chlorobenzofurazan-1-oxyde [81]	$C_6H_3N_2O_2Cl$	17348-69-5	170,6	1134,5	476,1	1610,6	-	-
4-nitrobenzofurazan-1-oxyde [81]	$C_6H_3N_3O_4$		181,1	1118,7	537,3	1655,9	-	-
cyclododécanone [85]	$C_{12}H_{22}O$	830-13-7	182,3	-2427,3	456,4	-1970,9	-1908,8	-62,0
1,1,1-trifluoropentan-2,4-dione [86]	$C_5H_5O_2F_3$	367-57-7	154,1	-	-	-6472,3	-6288,7	-183,7
1,1,1-trifluorohexan-2,4-dione [86]	$C_6H_7O_2F_3$	400-54-4	168,1	-	-	-6001,9	-5893,5	-108,3
1,1,1-trifluoro-5-méthylhexan-2,4-dione [86]	$C_7H_9O_2F_3$	30984-28-2	182,1	-	-	-5782,9	-5593,5	-189,4
1,1,1-trifluoro-5,5-diméthylhexan-2,4-dione [86]	$C_8H_{11}O_2F_3$	22767-90-4	196,2	-	-	-5475,4	-5345,0	-130,5
1,1,1-trifluoro-5-méthylheptan-2,4-dione [86]	$C_8H_{11}O_2F_3$		196,2	-	-	-5405,1	-5281,6	-123,4
1,1,1,5,5,5-hexafluoropentan-2,4-dione [86]	$C_5H_2O_2F_6$	1522-22-1	208,1	-	-	-7653,6	-7488,9	-164,9
1,1,1,2,2,3,3-heptafluoro-7,7-diméthyloctan-4,6-dione [86]	$C_{10}H_{11}O_2F_7$	17587-22-3	296,2	-	-	-6560,2	-	-
4,4,4-trifluoro-1-(2-furanyl)-butan-1,3-dione [86]	$C_8H_5O_3F_3$		206,1	-5098,0	339,6	-4759,4	-4553,9	-205,7
4,4,4-trifluoro-1-(2-naphtyl)-butan-1,3-dione [86]	$C_{14}H_9O_2F_3$		266,2	-3384,5	408,3	-2976,2	-2899,7	-76,6
5-nitroquinoline [87]	$C_9H_6N_2O_2$	607-34-1	174,2	627,0	540,9	1167,9	-	-
6-nitroquinoline [87]	$C_9H_6N_2O_2$	613-50-3	174,2	507,6	596,0	1103,6	-	-
8-nitroquinoline [87]	$C_9H_6N_2O_2$	607-35-2	174,2	575,3	612,7	1188,0	-	-
8-nitroquinaldine [87]	$C_{10}H_8N_2O_2$	881-07-2	188,2	294,4	589,9	884,2	-	-
benzothiazino-benzothiazine [88]	$C_{14}H_{12}N_2S_2$		272,4	606,5	452,7	1059,1	-	-
benzoxazino-benzoxazine [88]	$C_{14}H_{12}N_2O_2$		240,3	-752,9	536,9	-216,0	-	-
1,1,1-trifluoro-4-(2-thiényl)-4-hydroxy-3-butèn-2-one [89]	$C_8H_5O_2SF_3$		222,2	-4269,4	387,9	-	-	-

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	$\Delta H°_{sub}$ (litt.)	$\Delta_f H°_{g,m}$ (litt.)	$\Delta_f H°_{g,m}$ (calc.)	Résidu
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}
1,1,1-trifluoro-4-(2-thiényl)-4-mercapto-3-butèn-2-one [89]	$C_8H_5OS_2F_3$		238,2	-3044,7	399,2	-	-	-
N,N-diméthyloctylamine [90]	$C_{10}H_{23}N$	7378-99-6	157,3	-	-	-1137,2	-1127,3	-10,2
2,4-diméthylaniline [90]	$C_8H_{11}N$	95-68-1	121,2	-	-	191,5	178,2	13,2
2,5-diméthylaniline [90]	$C_8H_{11}N$	1300-73-8	121,2	-	-	196,9	178,2	19,0
N-éthylaniline [90]	$C_8H_{11}N$	103-69-5	121,2	-	-	548,8	486,8	61,9
N-benzylaniline [90]	$C_{13}H_{13}N$	103-32-2	183,2	553,3	569,7	1123,1	922,0	201,4
N,N-diméthylaniline [90]	$C_8H_{11}N$	121-69-7	121,2	-	-	825,2	752,7	72,6
tert-butylméthylamine [90]	$C_5H_{13}N$	110-68-9	87,2	-	-	-1262,0	-1372,9	111,3
tert-butylisopropylamine [90]	$C_7H_{17}N$	39099-23-5	115,2	-	-	-1459,0	-1597,8	138,9
2,2,6,6-tétraméthylpipéridine [90]	$C_9H_{19}N$	768-66-1	141,3	-	-	-1149,7	-1350,4	200,3
2,4,6-triméthylpyridine [91]	$C_8H_{11}N$	108-75-8	121,2	-	-	159,3	304,9	-145,2
di-n-propylamine [92]	$C_6H_{15}N$	142-84-7	101,2	-	-	-1151,3	-1160,2	8,9
diisopropylamine [92]	$C_6H_{15}N$	108-18-9	101,2	-	-	-1347,0	-1480,3	133,4
diisobutylamine [92]	$C_8H_{19}N$	110-96-3	129,2	-	-	-1398,9	-1269,0	-130,0
di-sec-butylamine [92]	$C_8H_{19}N$	626-23-3	129,2	-	-	-1420,6	-1426,4	5,4
2-phénylquinoline [93]	$C_{15}H_{11}N$	612-96-4	205,3	885,7	513,5	1399,2	-	-
2,2'-biquinoline [93]	$C_8H_{12}N_2$	119-91-5	136,2	1946,5	989,0	2935,5	-	-
benzophénone-imine [94]	$C_{13}H_{11}N$	1013-88-3	181,2	-	-	1370,6	-	-
N-méthyl-benzaldéhyde-imine [94]	C_8H_9N	622-29-7	119,2	-	-	1318,1	1378,5	-60,4
N-benzyl-benzaldéhyde-imine [94]	$C_{14}H_{13}N$	780-25-6	195,3	-	-	1376,6	1263,0	113,7
N-benzyl-pivalophénone-imine [94]	$C_{18}H_{21}N$		251,4	185,9	436,4	622,2	-	-
N-cyclohexyl-(2,4,6-triméthyl)-benzaldéhyde-imine [94]	$C_{16}H_{23}N$		229,4	-558,1	457,1	-101,2	-71,9	-29,2
N-phényl-benzaldéhyde-imine [94]	$C_{13}H_{11}N$	538-51-2	181,2	1002,0	541,3	1543,3	1662,2	-118,6
N-phényl-4-nitrobenzaldéhyde-imine [94]	$C_{13}H_{10}N_2O_2$		226,2	607,8	557,0	1164,7	1278,0	-113,2
N-phényl-benzophénone-imine [94]	$C_{19}H_{15}N$		257,3	981,2	465,2	1446,4	-	-
cyclopentadécanone [95]	$C_{15}H_{28}O$	502-72-7	224,4	-2234,6	383,3	-1851,3	-1843,4	-8,0
o-terphényle [96]	$C_{18}H_{14}$	84-15-1	230,3	774,2	439,5	1213,6	1213,4	0,4
p-terphényle [96]	$C_{18}H_{14}$	92-94-4	230,3	662,0	522,8	1185,0	1199,8	-14,8
m-terphényle [96]	$C_{18}H_{14}$	92-06-8	230,3	702,6	512,8	1215,4	1199,8	15,6

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	$\Delta H°_{sub}$ (litt.)	$\Delta_f H°_{g,m}$ (litt.)	$\Delta_f H°_{g,m}$ (calc.)	Résidu
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}
1,3,5-triphénylbenzène [96]	$C_{24}H_{18}$	612-71-5	306,4	724,5	490,4	1215,1	1217,5	-2,3
2-phénylphénol [97]	$C_{12}H_{10}O$	90-43-7	170,2	-518,8	520,2	1,2	28,5	-27,6
4-phénylphénol [97]	$C_{12}H_{10}O$	92-69-3	170,2	-623,9	645,1	21,2	20,2	1,2
2,6-diphénylphénol [97]	$C_{18}H_{14}O$	2432-11-3	246,3	-58,9	483,6	424,7	418,2	6,5
2,2'-dihydroxybiphényle [97]	$C_{12}H_{10}O_2$	1806-29-7	186,2	-1578,4	614,4	-964,0	-912,3	-51,6
4,4'-dihydroxybiphényle [97]	$C_{12}H_{10}O_2$	92-88-6	186,2	-1720,1	768,0	-952,2	-927,5	-24,7
2,3-dichlorodibenzo-p-dioxine [98]	$C_{12}H_6O_2Cl_2$	29446-15-9	253,1	-871,3	429,1	-442,2	-482,2	39,9
(4R,5R)-3,4-diméthyl-5-phényl-1,3-oxazolidine [99]	$C_{11}H_{15}NO$		177,2	-	-	-427,1	-400,6	-26,5
(4S,5R)-3,4-diméthyl-5-phényl-1,3-oxazolidine [99]	$C_{11}H_{15}NO$	123618-06-4	177,2	-	-	-383,1	-400,6	17,5
(4R,5R)-2,2,3,4-tétraméthyl-5-phényl-oxazolidine [99]	$C_{13}H_{19}NO$	141271-51-4	205,3	-	-	-850,5	-	-
5-amino-6-nitroquinoline [100]	$C_9H_7N_3O_2$	35975-00-9	189,2	316,6	721,0	1037,7	-	-
4-aminoquinaldine [100]	$C_{10}H_{10}N_2$	6628-04-2	158,2	216,2	728,8	945,0	-	-
4-méthylpyridine N-oxyde [101]	C_6H_7NO	1003-67-4	109,1	51,3	781,7	833,0	-	-
3-cyanopyridine N-oxyde [101]	$C_6H_4N_2O$		120,1	1422,9	848,4	2271,3	-	-
4-cyanopyridine N-oxyde [101]	$C_6H_4N_2O$	14906-59-3	120,1	1355,4	869,2	2224,7	-	-
3-hydroxypyridine N-oxyde [101]	$C_5H_5NO_2$	6602-28-4	111,1	-1541,9	1096,3	-445,5	-	-
acide 2-pyridinecarboxylique N-oxyde [101]	$C_6H_5NO_3$	824-40-8	139,1	-2617,4	678,6	-1938,8	-	-
acide 4-pyridinecarboxylique N-oxyde [101]	$C_6H_5NO_3$	13602-12-5	139,1	-2740,3	978,4	-1761,9	-	-
3-méthyl-4-nitropyridine N-oxyde [101]	$C_6H_6N_2O_3$	1074-98-2	154,1	-126,5	692,3	565,8	-	-
acide 2-pyridinecarboxylique [101]	$C_6H_5NO_2$	98-98-6	123,1	-2769,9	796,0	-1973,9	-2025,6	52,0
acide 4-pyridinecarboxylique [101]	$C_6H_5NO_2$	55-22-1	123,1	-2832,4	925,2	-1907,2	-2025,6	118,6
morpholine [102]	C_4H_9NO	110-91-8	87,1	-	-	-1633,0	-1786,5	153,8
N-méthylmorpholine [102]	$C_5H_{11}NO$	109-02-4	101,1	-	-	-1542,6	-1588,4	45,5
N-éthylmorpholine [102]	$C_6H_{13}NO$	100-74-3	115,2	-	-	-1593,2	-1634,8	41,7
N,N'-diméthylpipérazine [102]	$C_6H_{14}N_2$	106-58-1	114,2	-	-	88,5	194,2	-106,0
pipérazine [102]	$C_4H_{10}N_2$	110-85-0	86,1	-475,6	837,1	361,1	374,0	-12,8
cis-bicyclo[2.1.0]pentane [103]	C_5H_8	185-94-4	68,1	-	-	2329,8	2254,9	74,9
spiro{cyclopropane-1.6-tricyclo[3.2.1.0^{2,4}]}octane [103]	$C_{10}H_{14}$		134,2	-	-	1269,6	1236,0	33,5
dispiro[3.0.2.1]octane [103]	C_8H_{12}		108,2	-	-	2259,2	2363,9	-104,5

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	$\Delta H°_{sub}$ (litt.)	$\Delta_f H°_{g,m}$ (litt.)	$\Delta_f H°_{g,m}$ (calc.)	Résidu
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}
cis-2-phénylcyclopropanecarboxylate éthyl ester [103]	$C_{12}H_{14}O_2$		190,2	-	-	-1204,8	-1198,6	-6,3
trans-2-phénylcyclopropanecarboxylate éthyl ester [103]	$C_{12}H_{14}O_2$		190,2	-1772,5	509,4	-1263,2	-1198,6	-64,7
1-cyclopropylcyclobutène [103]	C_7H_{10}		94,2	-	-	2138,0	2449,9	-312,3
cis-7-méthylènebicyclo[4.1.0]heptène-2 [103]	C_8H_{10}		106,2	-	-	2371,8	2163,2	208,2
bicyclopropylidène [103]	C_6H_8		80,1	-	-	4047,3	2968,0	1079,5
1-éthylimidazole [104]	$C_5H_8N_2$	7098-07-9	96,1	-	-	1152,6	1217,8	-65,5
1-éthylpyrazole [104]	$C_5H_8N_2$		96,1	-	-	1379,4	-	-
pentacyclo[5.4.0.0^{2,6}.0^{3,10}.0^{5,9}]undécane-8,11-dione [105]	$C_{11}H_{10}O_2$	2958-72-7	174,2	-1183,7	531,6	-652,1	-790,9	138,9
2-tert-butylphénol [106]	$C_{10}H_{14}O$	88-18-6	150,2	-	420,7	-1275,5	-1324,1	48,6
2-tert-butyl-5-méthylphénol [106]	$C_{11}H_{16}O$	88-60-8	164,2	-	409,0	-1375,4	-1414,6	39,0
2-tert-butyl-4-méthylphénol [106]	$C_{11}H_{16}O$	2409-55-4	164,2	-1868,6	504,7	-1363,8	-1414,6	50,5
2,4-di-tert-butylphénol [106]	$C_{14}H_{22}O$	96-76-4	206,3	-1858,2	420,3	-1438,0	-1482,8	44,6
2-tert-amylphénol [106]	$C_{11}H_{16}O$	3279-27-4	164,2	-	397,3	-1256,1	-1295,9	39,6
2,4-di-tert-amylphénol [106]	$C_{16}H_{26}O$	120-95-6	234,4	-	322,1	-1400,3	-1424,2	23,9
2-tert-octylphénol [106]	$C_{14}H_{22}O$	3884-95-5	206,3	-	342,5	-1293,6	-1402,7	109,1
2,4-di-tert-octylphénol [106]	$C_{22}H_{38}O$		318,5	-	268,2	-1414,0	-1528,7	114,6
3-tert-butylphénol [106]	$C_{10}H_{14}O$	585-34-2	150,2	-1907,2	572,4	-1334,7	-1333,6	-1,3
4-tert-butylphénol [106]	$C_{10}H_{14}O$	98-54-4	150,2	-1928,5	571,7	-1356,7	-1333,6	-23,3
2-méthyl-4-tert-butylphénol [106]	$C_{11}H_{16}O$	98-27-1	164,2	-	439,1	-1422,3	-1414,6	-7,9
4-tert-amylphénol [106]	$C_{11}H_{16}O$	80-46-6	164,2	-1855,2	537,6	-1317,6	-1304,5	-12,8
4-tert-octylphénol [106]	$C_{14}H_{22}O$	140-66-9	206,3	-1818,0	474,4	-1343,5	-1409,6	65,9
thianthrène [107]	$C_{12}H_8S_2$	92-85-3	216,3	844,6	-	-	1373,2	-
1,3-dithiane [107]	$C_4H_8S_2$	505-23-7	120,2	-545,6	523,1	-22,5	-	-
benzanthrone [108]	$C_{17}H_{10}O$	82-05-3	230,3	-17,8	549,8	-	620,0	-
acide malonique [109]	$C_3H_4O_4$	141-82-2	104,1	-8563,2	1070,5	-7492,7	-7800,2	307,5
acide glutarique [109]	$C_5H_8O_4$	110-94-1	132,1	-7266,4	906,8	-6359,6	-6388,7	28,8
acide pimelique [109]	$C_7H_{12}O_4$	111-16-0	160,2	-6302,1	873,5	-5428,7	-5527,3	98,6
acide azelaïque [109]	$C_9H_{16}O_4$	123-99-9	188,2	-5601,4	849,5	-4751,9	-4922,7	170,5
acide undécanedioïque [109]	$C_{11}H_{20}O_4$	1852-04-6	216,3	-5083,4	751,4	-4332,0	-4474,9	142,9

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	$\Delta H°_{sub}$ (litt.)	$\Delta_f H°_{g,m}$ (litt.)	$\Delta_f H°_{g,m}$ (calc.)	Résidu
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}
acide 2-méthylpropanoïque [110]	$C_4H_8O_2$	79-31-2	88,1	-	-	-5433,3	-5475,5	42,0
acide 2,2-diméthylpropanoïque [110]	$C_5H_{10}O_2$	75-98-9	102,1	-5560,5	716,7	-4843,7	-5014,3	170,4
acide 3-méthylbutanoïque [110]	$C_5H_{10}O_2$	503-74-2	102,1	-	-	-4951,4	-4911,9	-39,2
1-phénylimidazole [111]	$C_9H_8N_2$	7164-98-9	144,2	-	-	1836,0	-	-
1-phénylpyrazole [111]	$C_9H_8N_2$	1126-00-7	144,2	-	-	2021,2	-	-
2-méthylaniline [112]	C_7H_9N	95-53-4	107,2	-	-	496,5	513,5	-16,8
2-éthylaniline [112]	$C_8H_{11}N$	578-54-1	121,2	-	-	295,4	286,2	9,1
2-isopropylaniline [112]	$C_9H_{13}N$	643-28-7	135,2	-	-	60,6	61,0	0,0
2-phénylaniline [112]	$C_{12}H_{11}N$	90-41-5	169,2	-	-	1089,7	1094,3	-4,7
2-tertbutylaniline [112]	$C_{10}H_{15}N$	6310-21-0	149,2	-	-	-10,1	-124,5	114,6
2,4-diméthylaniline [112]	$C_8H_{11}N$	95-68-1	121,2	-	-	191,5	178,2	13,2
2,5-diméthylaniline [112]	$C_8H_{11}N$	1300-73-8	121,2	-	-	197,2	178,2	19,0
2,6-diméthylaniline [112]	$C_8H_{11}N$	87-62-7	121,2	-	-	153,5	189,9	-36,3
2,6-diéthylaniline [112]	$C_{10}H_{15}N$	579-66-8	149,2	-	-	-126,0	-118,3	-7,4
2,6-diisopropylaniline [112]	$C_{12}H_{19}N$	24544-04-5	177,3	-	-	-396,0	-397,9	1,7
2,4,6-tri-tert-butylaniline [112]	$C_{18}H_{31}N$	961-38-6	261,4	-1097,0	353,8	-743,2	-884,3	141,1
4-méthylaniline [112]	C_7H_9N	106-49-0	107,2	-	-	416,2	500,2	-84,0
N,N-diméthyl-4-toluidine [112]	$C_9H_{13}N$	99-97-8	135,2	-	-	509,6	427,4	82,1
3-méthylaniline [112]	C_7H_9N	108-44-1	107,2	-	-	485,3	500,2	-14,9
N,N-diméthyl-3-toluidine [112]	$C_9H_{13}N$	121-72-2	135,2	-	-	537,0	427,4	109,5
N-éthyl-3-toluidine [112]	$C_9H_{13}N$	102-27-2	135,2	-	-	225,6	189,1	36,2
acide salicylique [113]	$C_7H_6O_3$	69-72-7	138,1	-4260,0	-	-	-3459,4	-
acide acétylsalicylique [114]	$C_9H_8O_4$	50-78-2	180,2	-4208,5	-	-3510,8	-3676,4	165,4
méthyl-α-D-glucopyranoside [115]	$C_7H_{14}O_6$	97-30-3	194,2	-6381,4	-	-	-5619,8	-
méthyl-β-D-glucopyranoside [115]	$C_7H_{14}O_6$	709-50-2	194,2	-6392,3	-	-	-5619,8	-
méthyl-α-D-galactopyranoside [115]	$C_7H_{14}O_6$	3396-99-4	194,2	-6371,2	-	-	-5619,8	-
méthyl-β-D-galactopyranoside [115]	$C_7H_{14}O_6$	1824-94-8	194,2	-6435,3	-	-	-5619,8	-
coronène [116]	$C_{24}H_{12}$	191-07-1	300,4	487,8	-	1005,5	1078,2	-72,6
thiourée [117]	CH_4N_2S	62-56-6	76,1	-	1471,3	-	-329,8	-

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	$\Delta H°_{sub}$ (litt.)	$\Delta_f H°_{g,m}$ (litt.)	$\Delta_f H°_{g,m}$ (calc.)	Résidu
			$g.mol^{-1}$	$J.g^{-1}$	$J.g^{-1}$	$J.g^{-1}$	$J.g^{-1}$	$J.g^{-1}$
1-méthyl-2-thiourée [117]	$C_2H_6N_2S$	598-52-7	90,1	-	1252,4	-	-	-
1-éthyl-2-thiourée [117]	$C_3H_8N_2S$		104,2	-	1140,4	-	-	-
1,3-diméthyl-2-thiourée [117]	$C_3H_8N_2S$	534-13-4	104,2	-	1073,2	-	-	-
1,3-diéthyl-2-thiourée [117]	$C_5H_{12}N_2S$	105-55-5	132,2	-	920,4	-	-	-
1,3-di-n-propyl-2-thiourée [117]	$C_7H_{16}N_2S$	26536-60-7	160,3	-	841,7	-	-	-
1,3-di-n-butyl-2-thiourée [117]	$C_9H_{20}N_2S$	109-46-6	188,3	-	748,7	-	-	-
1,1,3,3-tétraméthyl-2-thiourée [117]	$C_5H_{12}N_2S$	2782-91-4	132,2	-	639,1	-	-	-
D-valine [118]	$C_5H_{11}NO_2$	640-68-6	117,1	-5231,9	-	-	-3743,8	-
L-valine [118]	$C_5H_{11}NO_2$	72-18-4	117,1	-5247,3	-	-	-3743,8	-
DL-valine [118]	$C_5H_{11}NO_2$	7004-03-7	117,1	-5267,8	-	-	-3743,8	-
acide 3-pyridinecarboxylique [119]	$C_6H_5NO_2$	59-67-6	123,1	-	1006,4	-	-1974,6	-
N-benzoyl-N',N'-diéthylurée [120]	$C_{12}H_{16}N_2O_2$		220,3	-2175,5	600,2	-1575,4	-1819,9	244,7
N-benzoyl-N',N'-diisobutylurée [120]	$C_{16}H_{24}N_2O_2$		276,4	-2108,7	497,5	-1611,2	-1816,8	205,5
2-méthylnitrobenzène [121]	$C_7H_7NO_2$	88-72-2	137,1	-	-	272,0	409,1	-137,1
2-éthylnitrobenzène [121]	$C_8H_9NO_2$	612-22-6	151,2	-	-	109,8	236,7	-127,0
2-isopropylnitrobenzène [121]	$C_9H_{11}NO_2$	6526-72-3	165,2	-	-	-39,3	56,5	-95,6
2-tert-butylnitrobenzène [121]	$C_{10}H_{13}NO_2$	3282-56-2	179,2	-	-	-78,1	-97,6	19,5
2,6-diméthylnitrobenzène [121]	$C_8H_9NO_2$	81-20-9	151,2	-	-	50,3	274,6	-224,3
2,6-di-isopropylnitrobenzène [121]	$C_{12}H_{17}NO_2$		207,3	-779,2	388,9	-390,3	-251,1	-139,4
2,4,6-tri-tert-butylnitrobenzène [121]	$C_{18}H_{29}NO_2$	4074-25-3	291,4	-1033,9	330,9	-703,1	-729,9	26,8
acide 2-iodobenzoïque [122]	$C_7H_5IO_2$	88-67-5	248,0	-	454,8	-	-924,5	-
acide 3-iodobenzoïque [122]	$C_7H_5IO_2$	618-51-9	248,0	-	448,0	-	-924,5	-
acide 4-iodobenzoïque [122]	$C_7H_5IO_2$	619-58-9	248,0	-	455,2	-	-924,5	-
acide 2-fluorobenzoïque [122]	$C_7H_5FO_2$	445-29-4	140,1	-	673,7	-	-3571,5	-
acide 3-fluorobenzoïque [122]	$C_7H_5FO_2$	455-38-9	140,1	-	668,0	-	-3643,1	-
acide benzoïque [123]	$C_7H_6O_2$	65-85-0	122,1	-	723,1	-	-2552,4	-
acide succinique [124]	$C_4H_6O_4$	110-15-6	118,1	-7963,5	1043,3	-6920,3	-6972,9	52,5
acide méthylsuccinique [124]	$C_5H_8O_4$	498-21-5	132,1	-7252,8	921,2	-6331,6	-6419,4	87,8
acide 2,2-diméthylsuccinique [124]	$C_6H_{10}O_4$	597-43-3	146,1	-6759,2	839,6	-5919,6	-5983,6	64,3

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	$\Delta H°_{sub}$ (litt.)	$\Delta_f H°_{g,m}$ (litt.)	$\Delta_f H°_{g,m}$ (calc.)	Résidu
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}
acide 2-méthylglutarique [124]	$C_6H_{10}O_4$	18069-17-5	146,1	-	865,6	-	-5944,4	-
acide 2,2-diméthylglutarique [124]	$C_7H_{12}O_4$	681-57-2	160,2	-	791,7	-	-5588,4	-
acide 2-méthyl-3-nitrobenzoïque [125]	$C_8H_7NO_4$		181,1	-	659,7	-	-1860,5	-
acide 2-méthyl-6-nitrobenzoïque [125]	$C_8H_7NO_4$	13506-76-8	181,1	-	662,5	-	-1964,4	-
acide 3-méthyl-2-nitrobenzoïque [125]	$C_8H_7NO_4$		181,1	-	686,7	-	-1868,4	-
acide 3-méthyl-4-nitrobenzoïque [125]	$C_8H_7NO_4$	3113-71-1	181,1	-	658,6	-	-1868,4	-
acide 4-méthyl-3-nitrobenzoïque [125]	$C_8H_7NO_4$		181,1	-	654,7	-	-1868,4	-
acide 5-méthyl-2-nitrobenzoïque [125]	$C_8H_7NO_4$		181,1	-	655,3	-	-1972,3	-
acide 2-amino-3-méthylbenzoïque [126]	$C_8H_9NO_2$	4389-45-1	151,2	-	709,8	-	-2179,7	-
acide 2-amino-5-méthylbenzoïque [126]	$C_8H_9NO_2$	2941-78-8	151,2	-	731,7	-	-2189,1	-
acide 2-amino-6-méthylbenzoïque [126]	$C_8H_9NO_2$		151,2	-	768,0	-	-2179,7	-
acide 3-amino-2-méthylbenzoïque [126]	$C_8H_9NO_2$		151,2	-	845,4	-	-2236,7	-
acide 3-amino-4-méthylbenzoïque [126]	$C_8H_9NO_2$	2458-12-0	151,2	-	789,9	-	-2246,1	-
acide 4-amino-3-méthylbenzoïque [126]	$C_8H_9NO_2$	2486-70-6	151,2	-	807,1	-	-2246,1	-
acide 3-phénylpropionique [127]	$C_9H_{10}O_2$	501-52-0	150,2	-	681,9	-	-2263,7	-
acide 3-(2-méthoxyphényl)propionique [127]	$C_{10}H_{12}O_3$	6342-77-4	180,2	-	653,7	-	-2747,0	-
acide 3-(4-méthoxyphenyl)propionique [127]	$C_{10}H_{12}O_3$	1929-29-9	180,2	-	690,9	-	-2754,9	-
acide 3-(3,4-diméthoxyphenyl)propionique [127]	$C_{11}H_{14}O_4$	2107-70-2	210,2	-	683,1	-	-3058,0	-
acide trans-2,3-diméthoxycinnamique [128]	$C_{11}H_{12}O_2$	7461-60-1	176,2	-3747,8	800,2	-2947,6	-3044,0	96,5
acide trans-2,4-diméthoxycinnamique [128]	$C_{11}H_{12}O_2$		176,2	-3876,0	846,7	-3029,3	-3101,0	71,5
acide trans-2,5-diméthoxycinnamique [128]	$C_{11}H_{12}O_2$		176,2	-3775,0	787,7	-2987,3	-3101,0	113,5
acide trans-3,4-diméthoxycinnamique [128]	$C_{11}H_{12}O_2$	2316-26-9	176,2	-3768,2	850,7	-2917,5	-3052,1	134,5
acide trans-3,5-diméthoxycinnamique [128]	$C_{11}H_{12}O_2$		176,2	-3781,2	802,4	-2978,8	-3109,1	130,5
adénosine [129]	$C_{10}H_{13}N_5O_4$	58-61-7	267,2	-2445,7	-	-	-	-
3,5-diméthylpyrazole [130]	$C_5H_8N_2$	67-51-6	96,1	196,6	867,6	1064,2	1014,1	49,9
3,5-diméthyl-4-nitrosopyrazole [130]	$C_5H_7N_3O$		125,1	888,7	822,4	1711,0	-	-
1,3,5-triméthyl-4-nitrosopyrazole [130]	$C_6H_9N_3O$		139,2	804,1	632,4	1436,5	-	-
3,5-diméthyl-1-phényl-4-nitrosopyrazole [130]	$C_{11}H_{11}N_3O$		201,2	1042,1	498,9	1541,1	-	-
picolinamide [131]	$C_6H_6N_2O$	1452-77-3	122,1	-1280,7	762,3	-518,3	-716,4	198,2

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	$\Delta H°_{sub}$ (litt.)	$\Delta_f H°_{g,m}$ (litt.)	$\Delta_f H°_{g,m}$ (calc.)	Résidu
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}
nicotinamide [131]	$C_6H_6N_2O$	98-92-0	122,1	-1229,1	992,4	-236,6	-665,0	428,3
isonicotinamide [131]	$C_6H_6N_2O$	1453-82-3	122,1	-1229,9	950,7	-279,2	-716,4	437,3
nicotinamide N-oxyde [131]	$C_6H_6N_2O_2$		138,1	-1442,2	863,0	-579,2	-	-
isonicotinamide N-oxyde [131]	$C_6H_6N_2O_2$		138,1	-1439,3	907,2	-532,1	-	-
2,3,4-trichloroaniline [132]	$C_6H_4NCl_3$	634-67-3	196,5	-327,3	470,3	143,0	70,3	72,8
2,4,5-trichloroaniline [132]	$C_6H_4NCl_3$	636-30-6	196,5	-312,5	439,3	126,7	36,2	90,6
2,4,6-trichloroaniline [132]	$C_6H_4NCl_3$	634-93-5	196,5	-408,7	434,2	25,5	27,7	-2,0
3,4,5-trichloroaniline [132]	$C_6H_4NCl_3$	634-91-3	196,5	-345,1	472,9	127,8	70,3	57,5
N,N-diéthyl-N'-furoylthiourée [133]	$C_{10}H_{14}N_2O_2S$		226,3	-1352,7	583,3	-769,3	-	-
N,N-diisobutyl-N'-furoylthiourée [133]	$C_{10}H_{22}N_2O_2S$		234,4	-1819,4	604,6	-1214,8	-	-
benzo[k]fluorantène [134]	$C_{20}H_{12}$	207-08-9	252,3	683,3	492,3	1175,5	1403,6	-227,9
5,10,15,20-tétraphénylporphine [135]	$C_{44}H_{30}N_4$	917-23-7	614,7	1065,5	299,3	1364,8	-	-
5,10,15,20-tétrakis(4-méthoxyphényl)porphine [135]	$C_{48}H_{38}N_4O_4$	22112-78-3	734,8	93,9	307,6	401,4	-	-
phénantrène [136]	$C_{14}H_{10}$	85-01-8	178,2	619,4	512,3	1131,7	1173,8	-42,1
naphtacène [136]	$C_{18}H_{12}$	92-24-0	228,3	906,3	546,2	1452,6	1253,6	198,9
antracène [136]	$C_{14}H_{10}$	120-12-7	178,2	710,9	580,2	1291,0	1225,4	65,6
dibenzo-p-dioxine [137]	$C_{12}H_8O_2$	262-12-4	184,2	-768,8	496,5	-272,0	-340,1	67,9
acide trans-2-méthoxycinnamique [138]	$C_{10}H_{10}O_3$	6099-03-2	178,2	-2837,5	718,4	-2119,2	-2188,5	69,0
acide trans-3-méthoxycinnamique [138]	$C_{10}H_{10}O_3$		178,2	-2830,8	692,5	-2138,2	-2196,4	58,4
acide trans-4-méthoxycinnamique [138]	$C_{10}H_{10}O_3$	830-09-1	178,2	-2876,8	748,7	-2128,1	-2196,4	68,5
acide trans-2,3-diméthoxycinnamique [138]	$C_{11}H_{12}O_4$	7461-60-1	208,2	-	-	-2493,1	-2576,2	83,1
acide trans-2,4-diméthoxycinnamique [138]	$C_{11}H_{12}O_4$		208,2	-	-	-2562,3	-2624,4	62,0
acide trans-2,5-diméthoxycinnamique [138]	$C_{11}H_{12}O_4$		208,2	-	-	-2527,2	-2624,4	97,0
acide trans-3,4-diméthoxycinnamique [138]	$C_{11}H_{12}O_4$	2316-26-9	208,2	-	-	-2468,2	-2583,0	114,8
acide trans-3,5-diméthoxycinnamique [138]	$C_{11}H_{12}O_4$		208,2	-	-	-2520,0	-2631,2	111,4
corannulène [139]	$C_{20}H_{10}$	5821-51-2	250,3	1367,6	472,6	1840,2	1178,5	661,6
coronène [139]	$C_{24}H_{12}$	191-07-1	300,4	507,7	516,1	1023,8	1078,2	-54,3
pérylène [139]	$C_{20}H_{12}$	198-55-0	252,3	724,5	547,3	1265,9	1111,0	155,0
exo-tétrahydrodicyclopentadiène [140]	$C_{10}H_{16}$	2825-82-3	136,2	-	-	-541,0	-450,9	-90,3

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	$\Delta H°_{sub}$ (litt.)	$\Delta_f H°_{g,m}$ (litt.)	$\Delta_f H°_{g,m}$ (calc.)	Résidu
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}
endo-tétrahydrodicyclopentadiène [140]	$C_{10}H_{16}$		136,2	-	375,8	-454,4	-450,9	-3,7
fullerène C_{70} [141]	C_{70}	115383-22-7	840,7	2916,4	237,9	3154,3	522,5	2631,8
2-chloro-4-nitroaniline [142]	$C_6H_5N_2O_2Cl$	121-87-9	172,6	-434,0	594,5	160,5	261,8	-101,4
2-chloro-5-nitroaniline [142]	$C_6H_5N_2O_2Cl$	6283-25-6	172,6	-411,4	585,3	173,8	261,8	-88,1
2-chlorodibenzo-p-dioxine [143]	$C_{12}H_7O_2Cl$	39227-54-8	218,6	-859,4	444,8	-414,8	-422,4	7,3
2-hydroxypyridine [144]	C_5H_5NO	72762-00-6	95,1	-	-	-838,1	-706,1	-131,4
3-hydroxypyridine [144]	C_5H_5NO	109-00-2	95,1	-	-	-459,5	-325,6	-133,5
4-hydroxypyridine [144]	C_5H_5NO	626-64-2	95,1	-	-	-429,0	-297,0	-132,5
pyridine N-oxyde [144]	C_5H_5NO	694-59-7	95,1	-	-	1311,3	-	-
2-hydroxypyridine N-oxyde [144]	$C_5H_5NO_2$		111,1	-1788,5	804,7	-983,8	-	-
3-hydroxypyridine N-oxyde [144]	$C_5H_5NO_2$	6602-28-4	111,1	-	-	-445,5	-	-
2-chloropyrazine [145]	$C_4H_3N_2Cl$		114,5	-	-	1467,7	1607,4	-139,7
2,6-dichloropyrazine [145]	$C_4H_2N_2Cl_2$		149,0	500,1	469,2	969,3	994,2	-24,8
2,3-dichloroquinoxaline [145]	$C_8H_4N_2Cl_2$		199,0	558,2	461,2	1019,4	-	-
2,3,6,7-tétrachloroquinoxaline [145]	$C_8H_2N_2Cl_4$		267,9	133,2	395,3	528,5	-	-
acide benzoïque [146]	$C_7H_6O_2$	65-85-0	122,1	-	730,4	-	-2552,4	-
acide 4-méthylbenzoïque [146]	$C_8H_8O_2$	99-94-5	136,1	-	725,7	-	-2535,0	-
acide 4-éthylbenzoïque [146]	$C_9H_{10}O_2$	619-64-7	150,2	-	658,6	-	-2433,7	-
acide 4-pentylbenzoïque [146]	$C_{12}H_{16}O_2$	26311-45-5	192,3	-	614,8	-	-2008,3	-
acide 4-hexylbenzoïque [146]	$C_{13}H_{18}O_2$	21643-38-9	206,3	-	599,2	-	-1971,7	-
2-méthoxy-4-nitrophénol [147]	$C_7H_7NO_4$	3251-56-7	169,1	-2229,0	587,7	-1641,3	-1489,2	-151,9
2-méthoxy-5-nitrophénol [147]	$C_7H_7NO_4$	636-93-1	169,1	-2211,8	627,9	-1583,9	-1489,2	-94,6
4-méthoxy-2-nitrophénol [147]	$C_7H_7NO_4$	1568-70-3	169,1	-2153,9	536,8	-1617,1	-1548,6	-68,6
monothiodibenzoylméthane [148]	$C_{15}H_{12}OS$		240,3	-25,0	522,2	-	-	-
thianthrène [148]	$C_{12}H_8S_2$	92-85-3	216,3	841,8	-	552,4	1373,2	-821,0
dibenzoylméthane [148]	$C_{15}H_{12}O_2$		224,3	-999,8	505,2	-494,5	-	-
p-benzoquinone [149]	$C_6H_4O_2$	106-51-4	108,1	-1720,9	616,9	-1103,7	-1135,7	32,4
duroquinone [149]	$C_6H_4O_2$	527-17-3	108,1	-3345,1	861,7	-2483,0	-2327,8	-155,4
N-benzoylthiocarbamic-O-éthylester [150]	$C_{10}H_{11}NO_2S$		209,3	-1550,7	536,2	-1014,5	-	-

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	$\Delta H°_{sub}$ (litt.)	$\Delta_f H°_{g,m}$ (litt.)	$\Delta_f H°_{g,m}$ (calc.)	Résidu
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}
N-benzoylthiocarbamic-O-n-butylester [150]	$C_{12}H_{15}NO_2S$		237,3	-1534,2	508,6	-1025,6	-	-
N-benzoylthiocarbamic-O-n-hexylester [150]	$C_{14}H_{19}NO_2S$		265,4	-1549,5	526,4	-1023,1	-	-
fullerène C_{70} [151]	C_{70}	115383-22-7	840,7	3037,8	237,9	3275,7	522,5	2753,1
2-propylbenzimidazole [152]	$C_{10}H_{12}N_2$		160,2	-288,4	682,8	394,5	-	-
2-isopropylbenzimidazole [152]	$C_{11}H_{14}N_2$	5851-43-4	174,2	-181,4	630,7	449,4	-	-
N-(diéthylaminothiocarbonyl)-benzamidine [153]	$C_{12}H_{17}N_3S$		235,3	-5,9	535,4	529,4	-	-
N-(diéthylaminothiocarbonyl)-N',N'-diéthylbenzamidine [153]	$C_{16}H_{25}N_3S$		291,5	-124,2	419,3	295,1	-	-
N-(diéthylaminothiocarbonyl)-N'-phénylbenzamidine [153]	$C_{18}H_{21}N_3S$		311,4	366,7	511,8	878,5	-	-
D-galactono-1,4-lactone [154]	$C_6H_{10}O_6$		178,1	-6917,9	-	-	-6327,9	-
L-galactono-1,4-lactone [154]	$C_6H_{10}O_6$		178,1	-6914,7	-	-	-6327,9	-
D-gulono-1,4-lactone [154]	$C_6H_{10}O_6$		178,1	-6905,4	-	-	-6327,9	-
L-gulono-1,4-lactone [154]	$C_6H_{10}O_6$		178,1	-6907,7	-	-	-6327,9	-
L-mannono-1,4-lactone [154]	$C_6H_{10}O_6$		178,1	-6893,6	-	-	-6327,9	-
pyrazinecarbonitrile [155]	$C_5H_3N_3$	19847-12-2	105,1	-	-	3394,9	3443,6	-48,5
acide pyrazinecarboxylique [155]	$C_5H_4N_2O_2$	98-97-5	124,1	-2185,4	834,8	-1350,6	-1456,5	105,6
pyrazinamide [155]	$C_5H_5N_3O$	98-96-4	123,1	-759,5	828,5	69,0	-153,3	222,6
2-phénylbenzimidazole [156]	$C_{13}H_{10}N_2$	716-79-0	194,2	695,0	633,3	1328,3	-	-
2-benzylbenzimidazole [156]	$C_{14}H_{12}N_2$	621-72-7	208,3	494,6	654,0	1148,6	-	-
inosine [157]	$C_{10}H_{12}N_4O_5$	58-63-9	268,2	-3161,1	-	-	-	-
1-hydroxyisoquinoline [158]	C_9H_7NO	491-30-5	145,2	-1011,3	782,6	-228,7	4,3	-232,8
5-hydroxyisoquinoline [158]	C_9H_7NO	2439-04-5	145,2	-598,0	755,0	157,1	296,9	-139,8
1,5-dihydroxyisoquinoline [158]	$C_9H_7NO_2$	5154-02-9	161,2	-2158,8	767,0	-1391,8	-1089,1	-302,8
2-chloroquinoline [159]	C_9H_6NCl		163,6	426,6	515,3	941,9	-	-
4-chloroquinoline [159]	C_9H_6NCl		163,6	523,8	480,4	1004,3	-	-
6-chloroquinoline [159]	C_9H_6NCl		163,6	522,6	493,9	1016,5	-	-
4,7-dichloroquinoline [159]	$C_9H_5NCl_2$		198,0	252,0	451,9	703,9	-	-
9-méthylantracène [160]	$C_{15}H_{12}$	779-02-2	192,3	505,1	529,5	1034,6	962,1	72,3
2-éthylantracène [160]	$C_{16}H_{14}$	52251-71-5	206,3	292,3	521,6	813,9	798,1	16,0
9,10-diméthylantracène [160]	$C_{16}H_{14}$	781-43-1	206,3	340,3	547,8	888,1	734,6	153,7

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	$\Delta H°_{sub}$ (litt.)	$\Delta_f H°_{g,m}$ (litt.)	$\Delta_f H°_{g,m}$ (calc.)	Résidu
			$g.mol^{-1}$	$J.g^{-1}$	$J.g^{-1}$	$J.g^{-1}$	$J.g^{-1}$	$J.g^{-1}$
2,3-dihydroxypyridine [161]	$C_5H_5NO_2$	16867-04-2	109,1	-3418,7	999,9	-2418,7	-2287,5	-131,1
2,3-dicyanopyrazine [162]	$C_6H_2N_4$		130,1	3301,9	684,8	3986,7	3916,9	69,9

Annexe 4

Contributions de groupes C-H permettant d'évaluer des enthalpies standard de formation en phase gazeuse, à T = 298,15 K

Groupe	**Contribution** ($kJ.mol^{-1}$)
$C-(C)(H)_3$	-42,7
$C-(C)_2(H)_2$	-20,6
$C-(C)_3(H)$	-8,0
$C-(C)_4$	2,1
$C-(C_d)(H)_3$	-42,7
$C-(C_d)(C)(H)_2$	-19,9
$C-(C_d)(C)_2(H)$	-6,2
$C-(C_d)(C)_3$	7,0
$C-(C_d)_2(H)_2$	-18,0
$C-(C_d)_2(C)(H)$	13,7
$C-(C_t)(H)_3$	-42,7
$C-(C_t)(C)(H)_2$	-19,8
$C-(C_t)(C)_2(H)$	-7,2
$C-(C_t)(C)_3$	1,9
$C-(C_B)(H)_3$	-42,7
$C-(C_B)(C)(H)_2$	-20,3
$C-(C_B)(C)_2(H)$	-4,1
$C-(C_B)(C)_3$	11,8
$C-(C_B)(C_d)(H)_2$	-18,0
$C-(C_B)_2(H)_2$	-30,3
$C-(C_B)_2(C)(H)$	-3,4
$C-(C_B)_2(C)_2$	19,7
$C-(C_B)_3(H)$	-5,1
$C-(C_B)_3(C)$	25,5
$C-(C_B)_4$	29,5
$C_d-(H)_2$	26,2
$C_d-(C)(H)$	35,9
$C_d-(C)_2$	43,3
$C_d-(C_d)(H)$	28,4
$C_d-(C_d)(C)$	37,2
$C_d-(C_d)_2$	19,3
$C_d-(C_t)(H)$	28,4
$C_d-(C_B)(H)$	28,4

Groupe	Contribution ($kJ.mol^{-1}$)
C_d-(C_B)(C)	36,2
C_d-(C_B)$_2$	33,5
C_t-(H)	112,7
C_t-(C)	115,3
C_t-(C_t)	107,1
C_t-(C_B)	103,2
C_B-(H)	13,8
C_B-(C)	23,1
C_B-(C_d)	23,8
C_B-(C_t)	23,8
C_B-(C_B)	20,8
C_{BF}-(C_{BF})(C_B)$_2$	20,1
C_{BF}-(C_{BF})$_2$(C_B)	15,5
C_{BF}-(C_{BF})$_3$	6,3

Corrections de structure C-H permettant d'évaluer des enthalpies standard de formation en phase gazeuse, à T = 298,15 K

Correction de structure	Contribution ($kJ.mol^{-1}$)
cyclopropane	115,5
méthylènecyclopropane	171,5
cyclopropène	224,7
cyclobutane	109,6
cyclobutène	124,7
cyclopentane	26,4
cyclopentène	24,7
cyclopentadiène	25,1
cyclohexane	-1,5
cyclohexène	5,9
1,3-cyclohexadiène	20,1
1,4-cyclohexadiène	2,1
cycloheptane	26,8
cycloheptène	22,6
1,3-cycloheptadiène	27,6
1,3,5-cycloheptatriène	19,7
cyclooctane	41,4
cyclododécane	18,4

Correction de structure	**Contribution** ($kJ.mol^{-1}$)
1,5,9-cyclododécatriène	3,0
cyclotétradécane	49,5
1,8-cyclotétradécadiyne	55,7
cyclopentadécane	8,0
cyclohexadécane	8,5
cycloheptadécane	-13,6
bicyclo[2.1.0]pentane	231,4
bicyclo[2.2.1]heptane	67,8
bicyclo[2.2.1]hept-2-ène	70,3
bicyclo[2.2.2]octane	40,7
bicyclo[2.2.2]octène	43,5
bicyclo[3.3.3]undécane	112,6
spiropentane	265,7
biphénylène	246,0
[2.2]métacyclophane	49,4
[2.2]métaparacyclophane	97,1
acénaphtène	28,0
acénaphtylène	30,5
benzo[c]phénantrène	17,6

Contributions de groupes C-H-O permettant d'évaluer des enthalpies standard de formation en phase gazeuse, à T = 298,15 K

Groupe	Contribution ($kJ.mol^{-1}$)
$C-(CO)(H)_3$	-42,7
$C-(CO)(C)(H)_2$	-21,8
$C-(CO)(C)_2(H)$	-7,1
$C-(CO)(C)_3$	5,9
$C-(CO)_2(H)_2$	-31,8
$C-(O)(H)_3$	-42,7
$C-(O)(C)(H)_2$	-33,9
$C-(O)(C)_2(H)$	-30,1
$C-(O)(C_B)(C)(H)$	-17,8
C-(O)(CO)(C)(H)	-45,2
$C-(O)_2(C)(H)$	-68,2
$C_d-(CO)(H)$	20,9
$C_d-(CO)(C)$	31,4
$C_d-(O)(H)$	36,0
$C_d-(O)(C_d)$	37,2
$C_d-(O)(C_B)$	38,6
$C_d-(O)(CO)$	48,5
$C_B-(CO)$	15,5
$C_B-(O)$	-3,8
$CO-(C)_2$	-131,4
$CO-(C_d)(C)$	-122,6
$CO-(C_d)_2$	-115,0
$CO-(C_B)(C)$	-129,3
$CO-(C_B)_2$	-108,0
CO-(O)(C)	-146,9
$CO-(O)(C_d)$	-133,9
$CO-(O)(C_B)$	-153,1
O-(C)(H)	-158,5
$O-(C)_2$	-97,1
$O-(C_d)(H)$	-158,6
$O-(C_d)(C)$	-127,6
$O-(C_d)_2$	-138,1
$O-(C_B)(H)$	-158,6
$O-(C_B)(C)$	-96,2
$O-(C_B)_2$	-88,3
O-(CO)(H)	-243,1
O-(CO)(C)	-180,3
$O-(CO)(C_B)$	-153,6

Corrections de structure C-H-O permettant d'évaluer des enthalpies standard de formation en phase gazeuse, à T = 298,15 K

Correction de structure	**Contribution** ($kJ.mol^{-1}$)
tétrahydrofurane	24,7
tétrahydropyrane	2,1
furane	-24,3
cyclopentanone	21,8
cyclododécanone	12,6
cyclopentadécanone	8,8
2,5-cyclohexadièn-1,4-dione	23,5
dibenzoparadioxine	18,5

Contributions de groupes C-H-N-O permettant d'évaluer des enthalpies standard de formation en phase gazeuse, à T = 298,15 K

Groupe	Contribution ($kJ.mol^{-1}$)
$C-(C_I)(H)_3$	-42,7
$C-(N)(H)_3$	-42,7
$C-(N)(C)(H)_2$	-27,6
$C-(N)(C)_2(H)$	-21,8
$C-(N)(C)_3$	-13,4
$C-(N)(C_B)(H)_2$	-52,4
C-(N)(CO)(C)(H)	17,9
$C-(N)(O)(H)_2$	-43,2
$C-(N_I)(C)_2(H)$	-21,3
$C_d-(C_I)(H)$	28,4
$C_d-(N)(H)$	-62,1
$C_d-(N)(C)$	-53,9
$C_d-(N_I)(H)$	28,4
$C_B-(C_I)$	23,8
$C_B-(CN)$	149,8
$C_B-(N)$	-2,1
$C_B-(N_I)$	23,8
$C_B-(NO_2)$	1,7
$C_I-(C_d)(H)$	29,3
$C_I-(C_d)(C)$	34,6
$C_I-(C_d)_2$	26,0
$C_I-(C_B)(H)$	33,2
$C_I-(C_I)(C_d)$	25,9
$C_I-(N)(H)$	-27,5
$C_I-(N_I)(H)$	28,4
$CO-(N)(C_d)$	-132,2
$CO-(N)(C_B)$	-172,0
$CO-(N)_2$	-120,9
$O-(N_I)_2$	-95,9
$N-(C)(H)_2$	20,1
$N-(C)_2(H)$	64,4
$N-(C)_3$	102,1
$N-(C_d)_2(H)$	176,7
$N-(C_B)(H)_2$	20,1
$N-(C_B)(C)(H)$	62,3
$N-(C_B)(C)_2$	109,6
$N-(C_I)(C_d)(C)$	154,4
$N-(CO)(H)_2$	-62,3

Groupe	Contribution ($kJ.mol^{-1}$)
$N-(CO)(C)_2$	25,5
$N-(CO)(C_d)(C)$	77,5
$N-(CO)_2(H)$	-77,4
$N-(CO)_2(C)$	-24,7
$N-(N)(H)_2$	47,7
$N-(N_I)(C_d)(H)$	77,5
$N_I-(H)$	79,0
$N_I-(C)$	80,9
$N_I-(C_d)$	94,1
$N_I-(C_B)$	82,4
$N_I-(O)$	142,0
$N_I-(N)$	96,2

Corrections de structure C-H-N-O permettant d'évaluer des enthalpies standard de formation en phase gazeuse, à T = 298,15 K

Correction de structure	Contribution ($kJ.mol^{-1}$)
pipéridine	4,2
pipérazine	13,8
pyrrole	-0,8
benzofurazane	-56,9
uracile	46,1

Contributions de groupes C-H-N-S permettant d'évaluer des enthalpies standard de formation en phase gazeuse, à *T* = 298,15 K

Groupe	Contribution (kJ.mol^{-1})
C-(S)(C)(H)$_2$	23,6
C$_d$-(S)(H)	35,8
C$_B$-(S)	-7,5
CS-(N)$_2$	-132,1
N-(CS)(H)$_2$	53,5
S-(C)$_2$	48,2
S-(C$_d$)$_2$	-19,0
S-(C$_B$)(C)	80,2
S-(C$_B$)$_2$	108,4

Corrections de structure C-H-S permettant d'évaluer des enthalpies standard de formation en phase gazeuse, à *T* = 298,15 K

Correction de structure	Contribution (kJ.mol^{-1})
thiophène	9,1

Contributions de groupes C-O-X permettant d'évaluer des enthalpies standard de formation en phase gazeuse, à T = 298,15 K

Groupe	**Contribution** ($kJ.mol^{-1}$)
$C\text{-}(F)_3(CO)$	-631,8
$C_B\text{-}(F)$	-184,9
$C_B\text{-}(Cl)$	-15,9
$C_B\text{-}(Br)$	36,4
$C_B\text{-}(I)$	96,2

Interactions à longue distance permettant d'évaluer des enthalpies standard de formation en phase gazeuse, à T = 298,15 K

Interaction à longue distance	**Contribution** ($kJ.mol^{-1}$)
interaction gauche	3,4
structure but-2-ène	0,0
phényl symétrique	0,0
interaction 1,8-alkylnaphtalène	24,6
interaction ortho (non polaire/non polaire)	3,1
interaction ortho (non polaire/polaire)	1,4
interaction ortho (polaire/polaire)	10,0
interaction ortho sur pyridine	-6,3
interaction para sur pyridine	-6,3
interaction ortho CH_3/N sur pyridine	-6,3
interaction para CH_3/N sur pyridine	-1,7
interaction ortho OH/N sur pyridine	-42,5
interaction méta OH/N sur pyridine	-6,3
interaction para OH/N sur pyridine	-3,6
interaction ortho CN/N sur pyridine	5,9
interaction méta CN/N sur pyridine	2,9
interaction ortho alcane/NO_2 ou alcène/NO_2	18,8
interaction ortho NH_2/NO_2	-5,0
interaction ortho Cl/Cl	6,7
interaction méta Cl/Cl	2,5

Annexe 5

Banque de données thermochimiques concernant les 145 molécules C_xH_y étudiées dans le cadre de la démarche indirecte

Les résultats sont ici présentés en joules par gramme

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{g,m}$ (litt.)	$\Delta H°_{sub}$ (litt.)	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}
2-norbornène	C_7H_{10}	498-66-8	94,2	955,9	403,6	561,8
norbornane	C_7H_{12}	279-23-2	96,2	570,9	417,0	-988,9
cubane	C_8H_8	277-10-1	104,1	5973,2	-	5202,2
bicyclo[2.2.2]oct-2-ène	C_8H_{12}	931-64-6	108,2	189,5	404,9	-215,4
bicyclo[2.2.2]octane	C_8H_{14}	280-33-1	110,2	-898,4	435,6	-1333,1
2,2,3,3-tétraméthylbutane	C_8H_{18}	594-82-1	114,2	-1975,0	379,7	-2354,1
7,7-diméthyl-bicyclo[2.2.1]heptane	C_9H_{16}	2034-53-9	124,2	-	-	-1193,0
bicyclo[3.3.1]nonane	C_9H_{16}	280-65-9	124,2	-1026,4	410,6	-1434,5
azulène	$C_{10}H_8$	275-51-4	128,2	2403,0	655,4	1656,4
naphtalène	$C_{10}H_8$	91-20-3	128,2	1172,7	553,9	607,8
1,2,4,5-tétraméthylbenzène	$C_{10}H_{14}$	95-93-2	134,2	-350,9	534,2	-893,3
3a,4,5,6,7,7a-hexahydro-4,7-méthanoindène	$C_{10}H_{14}$	4488-57-7	134,2	-	-	-178,1
octahydro-4,7-méthano-1H-indène	$C_{10}H_{16}$	6004-38-2	136,2	-440,4	389,0	-828,7
adamantane	$C_{10}H_{16}$	281-23-2	136,2	-988,0	433,1	-1424,8
protoadamantane	$C_{10}H_{16}$	53130-19-1	136,2	-630,5	476,0	-1106,9
camphène	$C_{10}H_{16}$	79-92-5	136,2	-209,9	344,0	-553,5
bicyclo[3.3.2]décane	$C_{10}H_{18}$	283-50-1	138,2	-767,5	419,5	-1187,7
2-méthylnaphtalène	$C_{11}H_{10}$	91-57-6	142,2	750,4	462,0	315,8
pentaméthylbenzène	$C_{11}H_{16}$	700-12-9	148,2	-453,3	483,0	-901,2
1-méthyladamantane	$C_{11}H_{18}$	768-91-2	150,3	-1142,0	449,7	-1592,6
2-méthyladamantane	$C_{11}H_{18}$	700-56-1	150,3	-1009,6	449,4	-1461,5
bicyclo[3.3.3]undécane	$C_{11}H_{20}$	29415-95-0	152,3	-584,5	417,7	-1001,5
biphénylène	$C_{12}H_8$	259-79-0	152,2	2762,3	591,4	2194,6
acénaphtylène	$C_{12}H_8$	208-96-8	152,2	1706,4	479,7	1226,7
biphényle	$C_{12}H_{10}$	92-52-4	154,2	1180,2	525,3	644,6
acénaphtène	$C_{12}H_{10}$	83-32-9	154,2	1011,6	539,5	455,9
1,8-diméthylnaphtalène	$C_{12}H_{12}$	569-41-5	156,2	695,8	529,4	165,8
2,3-diméthylnaphtalène	$C_{12}H_{12}$	581-40-8	156,2	487,1	526,2	-14,7
2,6-diméthylnaphtalène	$C_{12}H_{12}$	581-42-0	156,2	-	-	-36,5
2,7-diméthylnaphtalène	$C_{12}H_{12}$	582-16-1	156,2	508,9	-	-34,6

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{g,m}$ (litt.)	$\Delta H°_{sub}$ (litt.)	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}
hexacyclo[6.2.1.1^{3,6}.0^{2,7}.0^{4,10}.0^{5,9}]dodécane	$C_{12}H_{14}$	704-02-9	158,2	-	-	322,9
hexaméthylbenzène	$C_{12}H_{18}$	87-85-4	162,3	-477,0	493,0	-995,2
(E,E,E)-1,5,9-cyclododécatriène	$C_{12}H_{18}$	676-22-2	162,3	624,3	460,2	163,9
2,2,7,7-tétraméthylocta-3,5-diyne	$C_{12}H_{18}$	6130-98-9	162,3	-	-	962,0
2,2-diméthyladamantane	$C_{12}H_{20}$	19740-34-2	164,3	-1112,1	450,4	-1560,1
1,3-diméthyladamantane	$C_{12}H_{20}$	702-79-4	164,3	-1331,2	413,9	-1743,3
cyclododécane	$C_{12}H_{24}$	294-62-2	168,3	-1367,6	453,9	-1821,5
4-méthyl-1,1'-biphényle	$C_{13}H_{12}$	644-08-6	168,2	821,5	476,7	329,3
diphénylméthane	$C_{13}H_{12}$	101-81-5	168,2	979,6	487,4	425,0
1,3,5-triméthyladamantane	$C_{13}H_{22}$	707-35-7	178,3	-1427,3	437,4	-1863,6
diphényléthyne	$C_{14}H_{10}$	501-65-5	178,2	2160,1	-	1752,8
anthracène	$C_{14}H_{10}$	120-12-7	178,2	1295,5	549,9	724,9
phénantrène	$C_{14}H_{10}$	85-01-8	178,2	1128,9	510,6	652,0
9,10-dihydro-anthracène	$C_{14}H_{12}$	613-31-0	180,2	886,0	521,0	368,4
(E)-stilbène	$C_{14}H_{12}$	103-30-0	180,2	1309,9	558,7	759,5
4,4'-diméthylbiphényle	$C_{14}H_{14}$	613-33-2	182,3	610,7	521,8	77,4
bibenzyle	$C_{14}H_{14}$	103-29-7	182,3	784,0	501,4	282,6
1,4,5,8-tétraméthylnaphtalène	$C_{14}H_{16}$	2717-39-7	184,3	442,8	541,6	-98,8
1,2,3,4,5,6,7,8-octahydro-anthracène	$C_{14}H_{18}$	1079-71-6	186,3	-199,7	440,2	-641,5
1,8-cyclotétradécadiyne	$C_{14}H_{20}$	1540-80-3	188,3	1666,4	-	784,9
diadamantane	$C_{14}H_{20}$	2292-79-7	188,3	-774,8	509,5	-1284,1
1,1,4,6,7-pentaméthylindane	$C_{14}H_{20}$	6682-67-3	188,3	-	-	-929,9
trans-anti-trans-tétradécahydro-anthracène	$C_{14}H_{24}$	28071-99-0	192,3	-1146,9	378,0	-1524,9
1,3,5,7-tétraméthyladamantane	$C_{14}H_{24}$	1687-36-1	192,3	-1473,4	421,8	-1901,8
cyclotétradécane	$C_{14}H_{28}$	295-17-0	196,4	-1218,1	411,2	-1904,5
cis-1,4-Di-tert-butyl-cyclohexane	$C_{14}H_{28}$	4789-34-8	196,4	-	-	-1905,1
trans-1,4-Di-tert-butyl-cyclohexane	$C_{14}H_{28}$	4789-35-9	196,4	-	-	-2046,1
1,4-diméthyl-7-(1-méthyléthyl)-azulène	$C_{15}H_{18}$	489-84-9	198,3	-	-	308,1
4-méthyldiadamantane	$C_{15}H_{22}$	30545-28-9	202,3	-900,0	392,5	-1292,4
3-méthyldiadamantane	$C_{15}H_{22}$	28375-86-2	202,3	-777,4	509,6	-1287,0

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{g,m}$ (litt.)	$\Delta H°_{sub}$ (litt.)	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}
1-méthyldiadamantane	$C_{15}H_{22}$	26460-76-4	202,3	-823,9	398,5	-1222,7
cyclopentadécane	$C_{15}H_{30}$	295-48-7	210,4	-1432,5	354,6	-1787,6
1,1'-(1,3-butadiyne-1,4-diyl)bis-benzène	$C_{16}H_{10}$	886-66-8	202,3	-	-	2563,2
fluoranthène	$C_{16}H_{10}$	206-44-0	202,3	1428,9	486,0	938,9
pyrène	$C_{16}H_{10}$	129-00-0	202,3	1115,9	484,1	620,5
bis-(2-méthylphényl)-acétylène	$C_{16}H_{14}$	5294-03-1	206,3	-	-	1138,2
Di-p-tolylacétylène	$C_{16}H_{14}$	2789-88-0	206,3	-	-	1094,6
(Z,Z)-1,4-diphénylbutadiène	$C_{16}H_{14}$	5807-76-1	206,3	-	-	963,7
(E,E)-1,4-diphénylbutadiène	$C_{16}H_{14}$	538-81-8	206,3	-	-	866,8
2,7-diméthylphénantrène	$C_{16}H_{14}$	1576-69-8	206,3	693,7	517,3	176,5
4,5-diméthylphénantrène	$C_{16}H_{14}$	3674-69-9	206,3	938,5	415,4	431,4
9,10-diméthylphénantrène	$C_{16}H_{14}$	604-83-1	206,3	810,1	579,3	230,8
1,1-Di-o-tolyléthylène	$C_{16}H_{16}$	2919-19-9	208,3	-	-	427,3
cis-1,2-Di-o-tolyléthène	$C_{16}H_{16}$	10311-74-7	208,3	-	-	412,4
trans-1,2-Di-o-tolyléthène	$C_{16}H_{16}$	36888-18-3	208,3	-	-	359,6
1,1-Di-p-tolyléthylène	$C_{16}H_{16}$	2919-20-2	208,3	-	-	412,4
(Z)-1,2-bis(4-méthylphényl)éthène	$C_{16}H_{16}$	2510-76-1	208,3	-	-	470,0
(E)-1,2-bis(4-méthylphényl)éthène	$C_{16}H_{16}$	18869-29-9	208,3	-	-	278,0
[2.2]métacyclophane	$C_{16}H_{16}$	2319-97-3	208,3	818,5	441,7	376,9
[2.2]paracyclophane	$C_{16}H_{16}$	1633-22-3	208,3	1174,8	461,8	696,6
[2.2]métaparacyclophane	$C_{16}H_{16}$	5385-36-4	208,3	1048,5	420,1	628,4
[16]annulène	$C_{16}H_{16}$	3332-38-5	208,3	-	-	2628,4
1,2-Di-o-tolyléthane	$C_{16}H_{18}$	952-80-7	210,3	-	-	-190,2
1,2-Di-p-tolyléthane	$C_{16}H_{18}$	538-39-6	210,3	-	-	-200,2
1,4-diphénylbutane	$C_{16}H_{18}$	1083-56-3	210,3	-	-	-47,1
tricyclo[8.2.2.2^{4,7}]hexadécane	$C_{16}H_{28}$	283-68-1	220,4	-691,5	417,4	-1107,6
cyclohexadécane	$C_{16}H_{32}$	295-65-8	224,4	-1433,4	364,5	-1797,5
cycloheptadécane	$C_{17}H_{34}$	295-97-6	238,5	-1527,8	277,2	-1805,0
triphénylène	$C_{18}H_{12}$	217-59-4	228,3	1201,1	501,6	664,9
chrysène	$C_{18}H_{12}$	218-01-9	228,3	1181,8	520,4	636,5

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{g,m}$ (litt.)	$\Delta H°_{sub}$ (litt.)	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}
benzo[c]phénantrène	$C_{18}H_{12}$	195-19-7	228,3	1275,6	464,3	809,9
benzo[a]anthracène	$C_{18}H_{12}$	56-55-3	228,3	1283,5	505,9	748,2
naphtacène	$C_{18}H_{12}$	92-24-0	228,3	1276,5	556,3	695,6
5,12-dihydro-naphtacène	$C_{18}H_{14}$	959-02-4	230,3	965,2	503,7	462,0
[18]annulène	$C_{18}H_{18}$	2040-73-5	234,3	1194,9	512,1	697,3
3,4,5,6-tétraméthylphénantrène	$C_{18}H_{18}$	7343-06-8	234,3	682,8	569,7	99,9
2,4,5,7-tétraméthylphénantrène	$C_{18}H_{18}$	7396-38-5	234,3	554,8	487,3	52,1
[3.3]paracyclophane	$C_{18}H_{20}$	2913-24-8	236,4	548,3	437,1	111,3
1,2,3,4,5,6,7,8,9,10,11,12-dodécahydro-triphénylène	$C_{18}H_{24}$	1610-39-5	240,4	-	-	-806,6
1,2,4-Tri-tert-butylbenzène	$C_{18}H_{30}$	1459-11-6	246,4	-	-	-1021,0
1,3,5-Tri-tert-butylbenzène	$C_{18}H_{30}$	1460-02-2	246,4	-	323,4	-1306,2
octadécane	$C_{18}H_{38}$	593-45-3	254,5	-1629,1	600,0	-2229,5
triphénylméthane	$C_{19}H_{16}$	519-73-3	244,3	1110,0	429,7	700,7
2,2',4,4',5,5'-hexaméthyldiphénylméthane	$C_{19}H_{24}$	4957-16-8	252,4	-	-	-611,7
pérylène	$C_{20}H_{12}$	198-55-0	252,3	1284,1	488,3	724,5
9,10-dihydro-9,10[1',2']benzénoanthracène	$C_{20}H_{14}$	477-75-8	254,3	1264,9	412,9	853,6
triphényléthylène	$C_{20}H_{16}$	58-72-0	256,3	-	-	910,5
5,8-diméthylbenzo[c]phénantrène	$C_{20}H_{16}$	54986-63-9	256,3	-	-	422,1
1,12-diméthylbenzo[c]phénantrène	$C_{20}H_{16}$	4076-43-1	256,3	-	-	602,7
3,9-diméthylbenz[a]anthracène	$C_{20}H_{16}$	316-51-8	256,3	737,3	440,8	297,3
1,12-diméthylbenz[a]anthracène	$C_{20}H_{16}$	313-74-6	256,3	981,1	438,9	542,2
9,10-diméthyl-1,2-benzanthracène	$C_{20}H_{16}$	57-97-6	256,3	1083,3	522,7	561,0
5,6-diméthylchrysène	$C_{20}H_{16}$	3697-27-6	256,3	1023,6	507,1	516,9
1,1,1-triphényléthane	$C_{20}H_{18}$	5271-39-6	258,4	972,7	-	608,5
1,1,2-triphényléthane	$C_{20}H_{18}$	1520-42-9	258,4	988,2	-	504,0
1-(2-naphtalénylméthyl)naphtalène	$C_{21}H_{16}$	611-48-3	268,4	-	-	603,7
1',2',3',4'-tétrahydro-1,2-dinaphtylméthane	$C_{21}H_{20}$	56818-06-5	272,4	-	-	161,9
[1.8]paracyclophane	$C_{21}H_{26}$	6169-94-4	278,4	104,2	398,3	-294,1
1,2,4,5-Tétra-tert-butylbenzène	$C_{22}H_{38}$	796-97-4	302,5	-	-	-984,7
tris(2-méthylphényl)éthylène	$C_{23}H_{22}$	62155-47-9	298,4	-	-	419,5

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{g,m}$ (litt.)	$\Delta H°_{sub}$ (litt.)	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)
			$g.mol^{-1}$	$J.g^{-1}$	$J.g^{-1}$	$J.g^{-1}$
tris(4-méthylphényl)éthylène	$C_{23}H_{22}$	6629-83-0	298,4	-	-	406,1
1,1,2-Tri-o-tolyléthane	$C_{23}H_{24}$		300,4	-	-	81,2
1,1,2-Tri-p-tolyléthane	$C_{23}H_{24}$	27497-47-8	300,4	-	-	54,6
1,3,5-triphénylbenzène	$C_{24}H_{18}$	612-71-5	306,4	1199,4	496,1	733,0
[6.6]paracyclophane	$C_{24}H_{32}$	4384-23-0	320,5	-242,4	359,1	-601,2
tétraphénylméthane	$C_{25}H_{20}$	630-76-2	320,4	1241,5	471,2	771,2
1,3,6-triphénylcycloheptatriène	$C_{25}H_{20}$	17760-68-8	320,4	-	-	854,8
9,10-diphénylanthracène	$C_{26}H_{18}$	1499-10-1	330,4	1409,1	416,1	934,3
tétraphényléthylène	$C_{26}H_{20}$	632-51-9	332,4	-	-	937,0
1,1,1,2-tétraphényléthane	$C_{26}H_{22}$	2294-94-2	334,5	1091,3	396,5	666,8
1,1,2,2-tétraphényléthane	$C_{26}H_{22}$	632-50-8	334,5	1067,4	409,0	645,8
3-phényléicosane	$C_{26}H_{46}$	2400-02-4	358,6	-	-	-1530,2
9,9'-bianthracène	$C_{28}H_{18}$	1055-23-8	354,4	1281,7	362,3	920,3
9,9'-biphénanthryl	$C_{28}H_{18}$	20532-03-0	354,4	-	427,4	600,4
1,1,4,4-tétraphényl-1,3-butadiène	$C_{28}H_{22}$	1450-63-1	358,5	-	-	920,3
1,2,3,4-tétraphényl-1,3-butadiène	$C_{28}H_{22}$	806-71-3	358,5	-	-	1001,2
1,1,4,4-tétraphénylbutane	$C_{28}H_{26}$	1483-64-3	362,5	-	-	450,5
tétra-p-tolyléthène	$C_{30}H_{28}$	5831-43-6	388,5	-	-	441,4
1,1,2,2-Tétra-p-tolyléthane	$C_{30}H_{30}$	40673-57-2	390,6	-	-	188,4
cyclotriacontane	$C_{30}H_{60}$	297-35-8	420,8	-	-	-2128,6
13-phénylpentacosane	$C_{31}H_{56}$	6006-90-2	428,8	-	-	-1602,2
pentaphényléthane	$C_{32}H_{26}$	19112-42-6	410,5	-	-	928,5
dotriacontane	$C_{32}H_{66}$	544-85-4	450,9	-1545,0	601,3	-2147,6
hexaphényléthane	$C_{38}H_{30}$	17854-07-8	486,6	-	-	1051,7
5,6,11,12-tétraphénylnaphtacène	$C_{42}H_{28}$	517-51-1	532,7	1466,0	-	1164,5

Annexe 6

Représentations des enthalpies standard de sublimation de 89 molécules C_xH_y, à T = 298,15 K

Les résultats sont ici présentés en joules par gramme

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta H°_{sub}$ (litt.)	$\Delta H°_{sub}$ (calc.)	Résidu
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}
2-norbornène	C_7H_{10}	498-66-8	94,2	403,6	403,6	0,0
norbornane	C_7H_{12}	279-23-2	96,2	417,0	417,1	-0,2
bicyclo[2.2.2]oct-2-ène	C_8H_{12}	931-64-6	108,2	404,9	404,9	0,0
bicyclo[2.2.2]octane	C_8H_{14}	280-33-1	110,2	435,6	435,6	0,0
2,2,3,3-tétraméthylbutane	C_8H_{18}	594-82-1	114,2	379,7	379,7	0,0
bicyclo[3.3.1]nonane	C_9H_{16}	280-65-9	124,2	410,6	440,0	-29,4
azulène	$C_{10}H_8$	275-51-4	128,2	655,4	655,4	0,0
naphtalène	$C_{10}H_8$	91-20-3	128,2	553,9	554,5	-0,6
1,2,4,5-tétraméthylbenzène	$C_{10}H_{14}$	95-93-2	134,2	534,2	567,7	-33,5
octahydro-4,7-méthano-1H-indène	$C_{10}H_{16}$	6004-38-2	136,2	389,0	388,9	0,1
adamantane	$C_{10}H_{16}$	281-23-2	136,2	433,1	473,9	-40,8
protoadamantane	$C_{10}H_{16}$	53130-19-1	136,2	476,0	476,1	-0,1
camphène	$C_{10}H_{16}$	79-92-5	136,2	344,0	344,0	0,0
bicyclo[3.3.2]décane	$C_{10}H_{18}$	283-50-1	138,2	419,5	419,5	0,0
2-méthylnaphtalène	$C_{11}H_{10}$	91-57-6	142,2	462,0	535,9	-73,9
pentaméthylbenzène	$C_{11}H_{16}$	700-12-9	148,2	483,0	533,4	-50,4
1-méthyladamantane	$C_{11}H_{18}$	768-91-2	150,3	449,7	456,8	-7,1
2-méthyladamantane	$C_{11}H_{18}$	700-56-1	150,3	449,4	524,7	-75,2
bicyclo[3.3.3]undécane	$C_{11}H_{20}$	29415-95-0	152,3	417,7	417,7	0,0
biphénylène	$C_{12}H_8$	259-79-0	152,2	591,4	591,4	0,0
acénaphtylène	$C_{12}H_8$	208-96-8	152,2	479,7	479,7	0,0
biphényle	$C_{12}H_{10}$	92-52-4	154,2	525,3	528,7	-3,4
acénaphtène	$C_{12}H_{10}$	83-32-9	154,2	539,5	539,5	0,0
1,8-diméthylnaphtalène	$C_{12}H_{12}$	569-41-5	156,2	529,4	543,4	-14,0
2,3-diméthylnaphtalène	$C_{12}H_{12}$	581-40-8	156,2	526,2	519,5	6,7
hexaméthylbenzène	$C_{12}H_{18}$	87-85-4	162,3	493,0	516,6	-23,6
(E,E,E)-1,5,9-cyclododécatriène	$C_{12}H_{18}$	676-22-2	162,3	460,2	460,2	0,0
2,2-diméthyladamantane	$C_{12}H_{20}$	19740-34-2	164,3	450,4	504,7	-54,3
1,3-diméthyladamantane	$C_{12}H_{20}$	702-79-4	164,3	413,9	442,6	-28,7
cyclododécane	$C_{12}H_{24}$	294-62-2	168,3	453,9	453,9	0,0
4-méthyl-1,1'-biphényle	$C_{13}H_{12}$	644-08-6	168,2	476,7	515,1	-38,4
diphénylméthane	$C_{13}H_{12}$	101-81-5	168,2	487,4	524,7	-37,3
1,3,5-triméthyladamantane	$C_{13}H_{22}$	707-35-7	178,3	437,4	430,7	6,7
anthracène	$C_{14}H_{10}$	120-12-7	178,2	549,9	493,8	56,1
phénantrène	$C_{14}H_{10}$	85-01-8	178,2	510,6	523,2	-12,6
9,10-dihydro-anthracène	$C_{14}H_{12}$	613-31-0	180,2	521,0	511,4	9,5
(E)-stilbène	$C_{14}H_{12}$	103-30-0	180,2	558,7	558,7	0,0
4,4'-diméthylbiphényle	$C_{14}H_{14}$	613-33-2	182,3	521,8	503,6	18,2
bibenzyle	$C_{14}H_{14}$	103-29-7	182,3	501,4	538,6	-37,2
1,4,5,8-tétraméthylnaphtalène	$C_{14}H_{16}$	2717-39-7	184,3	541,6	535,6	5,9
1,2,3,4,5,6,7,8-octahydro-anthracène	$C_{14}H_{18}$	1079-71-6	186,3	440,2	440,2	0,0
diadamantane	$C_{14}H_{20}$	2292-79-7	188,3	509,5	417,9	91,6
trans-anti-trans-tétradécahydro-anthracène	$C_{14}H_{24}$	28071-99-0	192,3	378,0	469,5	-91,5
1,3,5,7-tétraméthyladamantane	$C_{14}H_{24}$	1687-36-1	192,3	421,8	420,5	1,3
cyclotétradécane	$C_{14}H_{28}$	295-17-0	196,4	411,2	411,2	0,0
4-méthyldiadamantane	$C_{15}H_{22}$	30545-28-9	202,3	392,5	409,1	-16,6

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta H°_{sub}$ (litt.)	$\Delta H°_{sub}$ (calc.)	Résidu
			$g.mol^{-1}$	$J.g^{-1}$	$J.g^{-1}$	$J.g^{-1}$
3-méthyldiadamantane	$C_{15}H_{22}$	28375-86-2	202,3	509,6	409,1	100,4
1-méthyldiadamantane	$C_{15}H_{22}$	26460-76-4	202,3	398,5	409,1	-10,6
cyclopentadécane	$C_{15}H_{30}$	295-48-7	210,4	354,6	354,6	0,0
fluoranthène	$C_{16}H_{10}$	206-44-0	202,3	486,0	486,0	0,0
pyrène	$C_{16}H_{10}$	129-00-0	202,3	484,1	478,8	5,2
2,7-diméthylphénantrène	$C_{16}H_{14}$	1576-69-8	206,3	517,3	501,8	15,4
4,5-diméthylphénantrène	$C_{16}H_{14}$	3674-69-9	206,3	415,4	501,8	-86,4
9,10-diméthylphénantrène	$C_{16}H_{14}$	604-83-1	206,3	579,3	500,9	78,4
[2.2]métacyclophane	$C_{16}H_{16}$	2319-97-3	208,3	441,7	441,7	0,0
[2.2]paracyclophane	$C_{16}H_{16}$	1633-22-3	208,3	461,8	422,7	39,2
[2.2]métaparacyclophane	$C_{16}H_{16}$	5385-36-4	208,3	420,1	420,1	0,0
tricyclo[8.2.2.2^{4,7}]hexadécane	$C_{16}H_{28}$	283-68-1	220,4	417,4	460,5	-43,1
cyclohexadécane	$C_{16}H_{32}$	295-65-8	224,4	364,5	364,5	0,0
cycloheptadécane	$C_{17}H_{34}$	295-97-6	238,5	277,2	277,2	0,0
triphénylène	$C_{18}H_{12}$	217-59-4	228,3	501,6	528,6	-27,0
chrysène	$C_{18}H_{12}$	218-01-9	228,3	520,4	505,6	14,8
benzo[c]phénantrène	$C_{18}H_{12}$	195-19-7	228,3	464,3	464,3	0,0
benzo[a]anthracène	$C_{18}H_{12}$	56-55-3	228,3	505,9	482,6	23,3
naphtacène	$C_{18}H_{12}$	92-24-0	228,3	556,3	459,7	96,6
5,12-dihydro-naphtacène	$C_{18}H_{14}$	959-02-4	230,3	503,7	473,8	29,9
[18]annulène	$C_{18}H_{18}$	2040-73-5	234,3	512,1	512,1	0,0
3,4,5,6-tétraméthylphénantrène	$C_{18}H_{18}$	7343-06-8	234,3	569,7	484,0	85,7
2,4,5,7-tétraméthylphénantrène	$C_{18}H_{18}$	7396-38-5	234,3	487,3	485,6	1,8
[3.3]paracyclophane	$C_{18}H_{20}$	2913-24-8	236,4	437,1	434,1	3,0
1,3,5-Tri-tert-butylbenzène	$C_{18}H_{30}$	1460-02-2	246,4	323,4	323,4	0,0
octadécane	$C_{18}H_{38}$	593-45-3	254,5	600,0	612,5	-12,5
triphénylméthane	$C_{19}H_{16}$	519-73-3	244,3	429,7	406,3	23,5
pérylène	$C_{20}H_{12}$	198-55-0	252,3	488,3	492,5	-4,2
9,10-dihydro-9,10[1',2']benzénoanthracène	$C_{20}H_{14}$	477-75-8	254,3	412,9	424,1	-11,3
3,9-diméthylbenz[a]anthracène	$C_{20}H_{16}$	316-51-8	256,3	440,8	469,9	-29,1
1,12-diméthylbenz[a]anthracène	$C_{20}H_{16}$	313-74-6	256,3	438,9	469,9	-31,0
9,10-diméthyl-1,2-benzanthracène	$C_{20}H_{16}$	57-97-6	256,3	522,7	477,3	45,5
5,6-diméthylchrysène	$C_{20}H_{16}$	3697-27-6	256,3	507,1	489,6	17,5
[1.8]paracyclophane	$C_{21}H_{26}$	6169-94-4	278,4	398,3	437,6	-39,3
1,3,5-triphénylbenzène	$C_{24}H_{18}$	612-71-5	306,4	496,1	444,8	51,3
[6.6]paracyclophane	$C_{24}H_{32}$	4384-23-0	320,5	359,1	359,1	0,0
tétraphénylméthane	$C_{25}H_{20}$	630-76-2	320,4	471,2	471,2	0,0
9,10-diphénylanthracène	$C_{26}H_{18}$	1499-10-1	330,4	416,1	437,8	-21,7
1,1,1,2-tétraphényléthane	$C_{26}H_{22}$	2294-94-2	334,5	396,5	396,5	0,0
1,1,2,2-tétraphényléthane	$C_{26}H_{22}$	632-50-8	334,5	409,0	409,0	0,0
9,9'-bianthracène	$C_{28}H_{18}$	1055-23-8	354,4	362,3	421,1	-58,9
9,9'-biphénanthryl	$C_{28}H_{18}$	20532-03-0	354,4	427,4	450,7	-23,3
dotriacontane	$C_{32}H_{66}$	544-85-4	450,9	601,3	571,8	29,5

Annexe 7

Prévisions des enthalpies standard de formation en phase solide de 91 molécules C_xH_y, à T = 298,15 K, grâce à la méthode semi-prédictive

Les résultats sont ici présentés en joules par gramme

A noter que les écarts entre les enthalpies de formation en phase solide mesurées et calculées étant strictement supérieurs à 500 $J.g^{-1}$ en valeur absolue (soit l'erreur limite acceptable) sont mis en évidence. Ils sont inscrits en gras dans les tableaux qui suivent.

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{g,m}$ (litt.)	$\Delta H°_{sub}$ (litt.)	$\Delta H°_{sub}$ (calc.)	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}
2-norbornène	C_7H_{10}	498-66-8	94,2	955,9	403,6	403,6	561,8	552,3	9,6
norbornane	C_7H_{12}	279-23-2	96,2	-570,9	417,0	417,0	-988,9	-987,8	-1,0
bicyclo[2.2.2]oct-2-ène	C_8H_{12}	931-64-6	108,2	189,5	404,9	404,9	-215,4	-215,4	0,0
bicyclo[2.2.2]octane	C_8H_{14}	280-33-1	110,2	-898,4	435,6	435,6	-1333,1	-1334,0	0,9
2,2,3,3-tétraméthylbutane	C_8H_{18}	594-82-1	114,2	-1975,0	379,7	379,9	-2354,1	-2354,9	0,9
bicyclo[3.3.1]nonane	C_9H_{16}	280-65-9	124,2	-1026,4	410,6	440,3	-1434,5	-1466,7	32,2
azulène	$C_{10}H_8$	275-51-4	128,2	2403,0	655,4	655,4	1656,4	1747,7	-91,3
naphtalène	$C_{10}H_8$	91-20-3	128,2	1172,7	553,9	554,7	607,8	617,9	-10,1
1,2,4,5-tétraméthylbenzène	$C_{10}H_{14}$	95-93-2	134,2	-350,9	534,2	567,7	-893,3	-918,7	25,3
octahydro-4,7-méthano-1H-indène	$C_{10}H_{16}$	6004-38-2	136,2	-440,4	389,0	389,0	-828,7	-829,5	0,7
adamantane	$C_{10}H_{16}$	281-23-2	136,2	-988,0	433,1	474,2	-1424,8	-1462,2	37,4
protoadamantane	$C_{10}H_{16}$	53130-19-1	136,2	-630,5	476,0	476,4	-1106,9	-1106,9	0,0
camphène	$C_{10}H_{16}$	79-92-5	136,2	-209,9	344,0	344,3	-553,5	-554,2	0,7
bicyclo[3.3.2]décane	$C_{10}H_{18}$	283-50-1	138,2	-767,5	419,5	419,5	-1187,7	-1187,0	-0,7
2-méthylnaphtalène	$C_{11}H_{10}$	91-57-6	142,2	750,4	462,0	535,9	315,8	214,5	101,3
pentaméthylbenzène	$C_{11}H_{16}$	700-12-9	148,2	-453,3	483,0	533,6	-901,2	-986,9	85,7
1-méthyladamantane	$C_{11}H_{18}$	768-91-2	150,3	-1142,0	449,7	456,5	-1592,6	-1598,6	6,0
2-méthyladamantane	$C_{11}H_{18}$	700-56-1	150,3	-1009,6	449,4	524,4	-1461,5	-1534,0	72,5
bicyclo[3.3.3]undécane	$C_{11}H_{20}$	29415-95-0	152,3	-584,5	417,7	417,7	-1001,5	-1002,1	0,7
biphénylène	$C_{12}H_8$	259-79-0	152,2	2762,3	591,4	591,4	2194,6	2170,9	23,7
acénaphtylène	$C_{12}H_8$	208-96-8	152,2	1706,4	479,7	479,7	1226,7	1226,7	0,0
biphényle	$C_{12}H_{10}$	92-52-4	154,2	1180,2	525,3	528,5	644,6	651,7	-7,1
acénaphtène	$C_{12}H_{10}$	83-32-9	154,2	1011,6	539,5	539,5	455,9	472,1	-16,2
1,8-diméthylnaphtalène	$C_{12}H_{12}$	569-41-5	156,2	695,8	529,4	543,5	165,8	152,3	13,4
2,3-diméthylnaphtalène	$C_{12}H_{12}$	581-40-8	156,2	487,1	526,2	519,8	-14,7	-32,6	17,9
2,7-diméthylnaphtalène[(1)]	$C_{12}H_{12}$	582-16-1	156,2	508,9	-	520,4	-34,6	-11,5	-23,0
hexaméthylbenzène	$C_{12}H_{18}$	87-85-4	162,3	-477,0	493,0	516,4	-995,2	-993,4	-1,8
(E,E,E)-1,5,9-cyclododécatriène	$C_{12}H_{18}$	676-22-2	162,3	624,3	460,2	460,3	163,9	163,9	0,0
2,2-diméthyladamantane	$C_{12}H_{20}$	19740-34-2	164,3	-1112,1	450,4	504,6	-1560,1	-1616,7	56,6
1,3-diméthyladamantane	$C_{12}H_{20}$	702-79-4	164,3	-1331,2	413,9	442,5	-1743,3	-1773,7	30,4
cyclododécane	$C_{12}H_{24}$	294-62-2	168,3	-1367,6	453,9	453,9	-1821,5	-1821,5	0,0

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{g,m}$ (litt.)	$\Delta H°_{sub}$ (litt.)	$\Delta H°_{sub}$ (calc.)	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}
4-méthyl-1,1'-biphényle	$C_{13}H_{12}$	644-08-6	168,2	821,5	476,7	515,4	329,3	306,1	23,2
diphénylméthane	$C_{13}H_{12}$	101-81-5	168,2	979,6	487,4	524,9	425,0	454,7	-29,7
1,3,5-triméthyladamantane	$C_{13}H_{22}$	707-35-7	178,3	-1427,3	437,4	430,7	-1863,6	-1858,0	-5,6
anthracène	$C_{14}H_{10}$	120-12-7	178,2	1295,5	549,9	493,7	724,9	801,8	-76,9
phénantrène	$C_{14}H_{10}$	85-01-8	178,2	1128,9	510,6	522,9	652,0	606,0	46,0
9,10-dihydro-anthracène	$C_{14}H_{12}$	613-31-0	180,2	886,0	521,0	511,5	368,4	374,5	-6,1
(E)-stilbène	$C_{14}H_{12}$	103-30-0	180,2	1309,9	558,7	558,7	759,5	751,2	8,3
4,4'-diméthylbiphényle	$C_{14}H_{14}$	613-33-2	182,3	610,7	521,8	503,7	77,4	107,0	-29,6
bibenzyle	$C_{14}H_{14}$	103-29-7	182,3	784,0	501,4	538,8	282,6	245,3	37,3
1,4,5,8-tétraméthylnaphtalène	$C_{14}H_{16}$	2717-39-7	184,3	442,8	541,6	535,6	-98,8	-92,8	-6,0
1,2,3,4,5,6,7,8-octahydro-anthracène	$C_{14}H_{18}$	1079-71-6	186,3	-199,7	440,2	440,2	-641,5	-639,9	-1,6
diadamantane	$C_{14}H_{20}$	2292-79-7	188,3	-774,8	509,5	417,9	-1284,1	-1192,7	-91,3
trans-anti-trans-tétradécahydro-anthracène	$C_{14}H_{24}$	28071-99-0	192,3	-1146,9	378,0	469,5	-1524,9	-1616,4	91,5
1,3,5,7-tétraméthyladamantane	$C_{14}H_{24}$	1687-36-1	192,3	-1473,4	421,8	420,6	-1901,8	-1894,0	-7,8
cyclotétradécane	$C_{14}H_{28}$	295-17-0	196,4	-1218,1	411,2	411,5	-1904,5	-1629,6	-275,0
4-méthyldiadamantane	$C_{15}H_{22}$	30545-28-9	202,3	-900,0	392,5	409,2	-1292,4	-1309,2	16,8
3-méthyldiadamantane	$C_{15}H_{22}$	28375-86-2	202,3	-777,4	509,6	409,2	-1287,0	-1186,6	-100,3
1-méthyldiadamantane	$C_{15}H_{22}$	26460-76-4	202,3	-823,9	398,5	409,2	-1222,7	-1233,1	10,4
cyclopentadécane	$C_{15}H_{30}$	295-48-7	210,4	-1432,5	354,6	354,6	-1787,6	-1787,1	-0,5
fluoranthène	$C_{16}H_{10}$	206-44-0	202,3	1428,9	486,0	486,0	938,9	942,9	-4,0
pyrène	$C_{16}H_{10}$	129-00-0	202,3	1115,9	484,1	478,6	620,5	637,3	-16,8
2,7-diméthylphénantrène	$C_{16}H_{14}$	1576-69-8	206,3	693,7	517,3	501,7	176,5	192,0	-15,5
4,5-diméthylphénantrène	$C_{16}H_{14}$	3674-69-9	206,3	938,5	415,4	501,7	431,4	436,8	-5,3
9,10-diméthylphénantrène	$C_{16}H_{14}$	604-83-1	206,3	810,1	579,3	500,8	230,8	309,3	-78,5
[2.2]métacyclophane	$C_{16}H_{16}$	2319-97-3	208,3	818,5	441,7	441,7	376,9	376,9	0,0
[2.2]paracyclophane	$C_{16}H_{16}$	1633-22-3	208,3	1174,8	461,8	422,5	696,6	752,3	-55,7
[2.2]métaparacyclophane	$C_{16}H_{16}$	5385-36-4	208,3	1048,5	420,1	420,1	628,4	628,4	0,0
tricyclo[8.2.2.2^{4,7}]hexadécane	$C_{16}H_{28}$	283-68-1	220,4	-691,5	417,4	460,5	-1107,6	-1152,0	44,5
cyclohexadécane	$C_{16}H_{32}$	295-65-8	224,4	-1433,4	364,5	364,5	-1797,5	-1797,9	0,4
cycloheptadécane	$C_{17}H_{34}$	295-97-6	238,5	-1527,8	277,2	277,2	-1805,0	-1805,0	0,0
triphénylène	$C_{18}H_{12}$	217-59-4	228,3	1201,1	501,6	528,7	664,9	672,4	-7,4

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{g,m}$ (litt.)	$\Delta H°_{sub}$ (litt.)	$\Delta H°_{sub}$ (calc.)	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			$g.mol^{-1}$	$J.g^{-1}$	$J.g^{-1}$	$J.g^{-1}$	$J.g^{-1}$	$J.g^{-1}$	$J.g^{-1}$
chrysène	$C_{18}H_{12}$	218-01-9	228,3	1181,8	520,4	505,5	636,5	676,3	-39,9
benzo[c]phénantrène	$C_{18}H_{12}$	195-19-7	228,3	1275,6	464,3	464,3	809,9	811,3	-1,3
benzo[a]anthracène	$C_{18}H_{12}$	56-55-3	228,3	1283,5	505,9	482,7	748,2	800,7	-52,6
naphtacène	$C_{18}H_{12}$	92-24-0	228,3	1276,5	556,3	459,5	695,6	817,0	-121,3
5,12-dihydro-naphtacène	$C_{18}H_{14}$	959-02-4	230,3	965,2	503,7	473,7	462,0	491,5	-29,5
[18]annulène	$C_{18}H_{18}$	2040-73-5	234,3	1194,9	512,1	512,1	697,3	682,8	14,5
3,4,5,6-tétraméthylphénantrène	$C_{18}H_{18}$	7343-06-8	234,3	682,8	569,7	483,9	99,9	198,9	-99,0
2,4,5,7-tétraméthylphénantrène	$C_{18}H_{18}$	7396-38-5	234,3	554,8	487,3	485,6	52,1	69,1	-17,1
[3.3]paracyclophane	$C_{18}H_{20}$	2913-24-8	236,4	548,3	437,1	434,1	111,3	114,2	-3,0
octadécane	$C_{18}H_{38}$	593-45-3	254,5	-1629,1	600,0	612,6	-2229,5	-2241,7	12,2
triphénylméthane	$C_{19}H_{16}$	519-73-3	244,3	1110,0	429,7	406,4	700,7	703,6	-2,9
pérylène	$C_{20}H_{12}$	198-55-0	252,3	1284,1	488,3	492,6	724,5	791,5	-67,0
9,10-dihydro-9,10[1',2']benzénoanthracène	$C_{20}H_{14}$	477-75-8	254,3	1264,9	412,9	424,3	853,6	840,7	13,0
3,9-diméthylbenz[a]anthracène	$C_{20}H_{16}$	316-51-8	256,3	737,3	440,8	470,1	297,3	267,2	30,0
1,12-diméthylbenz[a]anthracène	$C_{20}H_{16}$	313-74-6	256,3	981,1	438,9	470,1	542,2	511,0	31,2
9,10-diméthyl-1,2-benzanthracène	$C_{20}H_{16}$	57-97-6	256,3	1083,3	522,7	477,1	561,0	606,2	-45,3
5,6-diméthylchrysène	$C_{20}H_{16}$	3697-27-6	256,3	1023,6	507,1	489,6	516,9	534,1	-17,2
1,1,1-triphényléthane[(1)]	$C_{20}H_{18}$	5271-39-6	258,4	972,7	-	399,4	608,5	573,2	35,2
1,1,2-triphényléthane[(1)]	$C_{20}H_{18}$	1520-42-9	258,4	988,2	-	454,8	504,0	533,4	-29,4
[1.8]paracyclophane	$C_{21}H_{26}$	6169-94-4	278,4	104,2	398,3	437,5	-294,1	-333,3	39,1
1,3,5-triphénylbenzène	$C_{24}H_{18}$	612-71-5	306,4	1199,4	496,1	444,8	733,0	754,6	-21,5
[6.6]paracyclophane	$C_{24}H_{32}$	4384-23-0	320,5	-242,4	359,1	359,1	-601,2	-601,5	0,3
tétraphénylméthane	$C_{25}H_{20}$	630-76-2	320,4	1241,5	471,2	471,2	771,2	770,2	0,9
9,10-diphénylanthracène	$C_{26}H_{18}$	1499-10-1	330,4	1409,1	416,1	437,9	934,3	971,2	-36,9
1,1,1,2-tétraphényléthane	$C_{26}H_{22}$	2294-94-2	334,5	1091,3	396,5	396,5	666,8	694,9	-28,1
1,1,2,2-tétraphényléthane	$C_{26}H_{22}$	632-50-8	334,5	1067,4	409,0	409,0	645,8	658,4	-12,6
9,9'-bianthracène	$C_{28}H_{18}$	1055-23-8	354,4	1281,7	362,3	421,2	920,3	860,5	59,8
dotriacontane	$C_{32}H_{66}$	544-85-4	450,9	-1545,0	601,3	571,8	-2147,6	-2116,8	-30,8
5,6,11,12-tétraphénylnaphtacène[(1)]	$C_{42}H_{28}$	517-51-1	532,7	1466,0	-	416,0	1164,5	1050,0	114,5

[(1)] Composés n'ayant pas été utilisés dans la phase de détermination des contributions de groupes C-H à l'enthalpie standard de sublimation.

Annexe 8

Prévisions des enthalpies standard de formation en phase solide de 122 molécules C_xH_y, à T = 298,15 K, grâce à la méthode entièrement prédictive

Les résultats sont ici présentés en joules par gramme

A noter que les écarts entre les enthalpies de formation en phase solide mesurées et calculées étant strictement supérieurs à 500 $J.g^{-1}$ en valeur absolue (soit l'erreur limite acceptable) sont mis en évidence. Ils sont inscrits en gras dans les tableaux qui suivent.

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{g,m}$ (litt.)	$\Delta_f H°_{g,m}$ (calc.)	$\Delta H°_{sub}$ (litt.)	$\Delta H°_{sub}$ (calc.)	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}
2-norbornène	C_7H_{10}	498-66-8	955,9	721,2	403,6	403,6	561,8	317,6	244,3
norbornane	C_7H_{12}	279-23-2	-570,9	-533,4	417,0	417,1	-988,9	-950,6	-38,3
bicyclo[2.2.2]oct-2-ène	C_8H_{12}	931-64-6	189,5	189,5	404,9	404,9	-215,4	-215,4	0,0
bicyclo[2.2.2]octane	C_8H_{14}	280-33-1	-898,4	-898,4	435,6	435,6	-1333,1	-1334,0	0,9
2,2,3,3-tétraméthylbutane	C_8H_{18}	594-82-1	-1975,0	-2029,3	379,7	379,7	-2354,1	-2408,9	54,9
7,7-diméthyl-bicyclo[2.2.1]heptane(1)	C_9H_{16}	2034-53-9	-	-701,2	-	-37,1	-1193,0	-664,0	**-529,0**
bicyclo[3.3.1]nonane	C_9H_{16}	280-65-9	-1026,4	-1290,4	410,6	440,0	-1434,5	-1730,4	295,9
azulène	$C_{10}H_8$	275-51-4	2403,0	2420,2	655,4	655,4	1656,4	1764,8	-108,4
naphtalène	$C_{10}H_8$	91-20-3	1172,7	1175,0	553,9	554,5	607,8	620,5	-12,7
1,2,4,5-tétraméthylbenzène	$C_{10}H_{14}$	95-93-2	-350,9	-332,3	534,2	567,7	-893,3	-900,0	6,6
octahydro-4,7-méthano-1H-indène	$C_{10}H_{16}$	6004-38-2	-440,4	-450,7	389,0	388,9	-828,7	-839,6	10,9
adamantane	$C_{10}H_{16}$	281-23-2	-988,0	-1186,2	433,1	473,9	-1424,8	-1660,1	235,3
protoadamantane	$C_{10}H_{16}$	53130-19-1	-630,5	-773,7	476,0	476,1	-1106,9	-1249,8	142,9
camphène	$C_{10}H_{16}$	79-92-5	-209,9	-125,5	344,0	344,0	-553,5	-469,5	-84,0
bicyclo[3.3.2]décane	$C_{10}H_{18}$	283-50-1	-767,5	-621,3	419,5	419,5	-1187,7	-1040,8	-146,9
2-méthylnaphtalène	$C_{11}H_{10}$	91-57-6	750,4	824,2	462,0	535,9	315,8	288,3	27,5
pentaméthylbenzène	$C_{11}H_{16}$	700-12-9	-453,3	-484,3	483,0	533,4	-901,2	-1017,7	116,5
1-méthyladamantane	$C_{11}H_{18}$	768-91-2	-1142,0	-1292,4	449,7	456,8	-1592,6	-1749,2	156,7
2-méthyladamantane	$C_{11}H_{18}$	700-56-1	-1009,6	-1275,1	449,4	524,7	-1461,5	-1799,8	338,3
bicyclo[3.3.3]undécane	$C_{11}H_{20}$	29415-95-0	-584,5	-584,5	417,7	417,7	-1001,5	-1002,1	0,7
biphénylène	$C_{12}H_8$	259-79-0	2762,3	2887,8	591,4	591,4	2194,6	2296,4	-101,8
acénaphtylène	$C_{12}H_8$	208-96-8	1706,4	1693,3	479,7	479,7	1226,7	1213,6	13,1
biphényle	$C_{12}H_{10}$	92-52-4	1180,2	1164,7	525,3	528,7	644,6	636,0	8,6
acénaphtène	$C_{12}H_{10}$	83-32-9	1011,6	1014,9	539,5	539,5	455,9	475,3	-19,5
1,8-diméthylnaphtalène	$C_{12}H_{12}$	569-41-5	695,8	693,9	529,4	543,4	165,8	150,5	15,3
2,3-diméthylnaphtalène	$C_{12}H_{12}$	581-40-8	487,1	556,3	526,2	519,5	-14,7	36,8	-51,5
2,6-diméthylnaphtalène(1)	$C_{12}H_{12}$	581-42-0	-	536,4	-	520,7	-36,5	15,8	-52,2
2,7-diméthylnaphtalène(1)	$C_{12}H_{12}$	582-16-1	508,9	536,4	-	520,7	-34,6	15,8	-50,3
hexaméthylbenzène	$C_{12}H_{18}$	87-85-4	-477,0	-609,5	493,0	516,6	-995,2	-1126,1	130,9
(E,E,E)-1,5,9-cyclododécatriène	$C_{12}H_{18}$	676-22-2	624,3	611,3	460,2	460,2	163,9	151,1	12,8
2,2-diméthyladamantane	$C_{12}H_{20}$	19740-34-2	-1112,1	-1364,7	450,4	504,7	-1560,1	-1869,4	309,3

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{g,m}$ (litt.)	$\Delta_f H°_{g,m}$ (calc.)	$\Delta H°_{sub}$ (litt.)	$\Delta H°_{sub}$ (calc.)	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}
1,3-diméthyladamantane	$C_{12}H_{20}$	702-79-4	-1331,2	-1381,1	413,9	442,6	-1743,3	-1823,8	80,5
cyclododécane	$C_{12}H_{24}$	294-62-2	-1367,6	-1361,1	453,9	453,9	-1821,5	-1815,0	-6,5
4-méthyl-1,1'-biphényle	$C_{13}H_{12}$	644-08-6	821,5	868,4	476,7	515,1	329,3	353,3	-24,0
diphénylméthane	$C_{13}H_{12}$	101-81-5	979,6	914,8	487,4	524,7	425,0	390,1	34,9
1,3,5-triméthyladamantane	$C_{13}H_{22}$	707-35-7	-1427,3	-1455,3	437,4	430,7	-1863,6	-1886,0	22,4
anthracène	$C_{14}H_{10}$	120-12-7	1295,5	1225,4	549,9	493,8	724,9	731,6	-6,7
phénantrène	$C_{14}H_{10}$	85-01-8	1128,9	1173,8	510,6	523,2	652,0	650,6	1,4
9,10-dihydro-anthracène	$C_{14}H_{12}$	613-31-0	886,0	800,0	521,0	511,4	368,4	288,6	79,8
(E)-stilbène	$C_{14}H_{12}$	103-30-0	1309,9	1344,3	558,7	558,7	759,5	785,6	-26,1
4,4'-diméthylbiphényle	$C_{14}H_{14}$	613-33-2	610,7	618,3	521,8	503,6	77,4	114,7	-37,4
bibenzyle	$C_{14}H_{14}$	103-29-7	784,0	787,3	501,4	538,6	282,6	248,8	33,8
1,4,5,8-tétraméthylnaphtalène	$C_{14}H_{16}$	2717-39-7	442,8	358,7	541,6	535,6	-98,8	-176,9	78,2
1,2,3,4,5,6,7,8-octahydro-anthracène	$C_{14}H_{18}$	1079-71-6	-199,7	-173,4	440,2	440,2	-641,5	-613,6	-27,9
diadamantane	$C_{14}H_{20}$	2292-79-7	-774,8	-1043,0	509,5	417,9	-1284,1	-1460,9	176,8
trans-anti-trans-tétradécahydro-anthracène	$C_{14}H_{24}$	28071-99-0	-1146,9	-1261,3	378,0	469,5	-1524,9	-1730,8	205,9
1,3,5,7-tétraméthyladamantane	$C_{14}H_{24}$	1687-36-1	-1473,4	-1518,7	421,8	420,5	-1901,8	-1939,2	37,3
cyclotétradécane	$C_{14}H_{28}$	295-17-0	-1218,1	-1218,6	411,2	411,2	-1904,5	-1629,8	-274,7
cis-1,4-Di-tert-butyl-cyclohexane[1]	$C_{14}H_{28}$	4789-34-8	-	-1791,5	-	646,1	-1905,1	-2437,6	**532,5**
trans-1,4-Di-tert-butyl-cyclohexane[1]	$C_{14}H_{28}$	4789-35-9	-	-1791,5	-	646,1	-2046,1	-2437,6	391,5
4-méthyldiadamantane	$C_{15}H_{22}$	30545-28-9	-900,0	-1131,8	392,5	409,1	-1292,4	-1540,9	248,5
3-méthyldiadamantane	$C_{15}H_{22}$	28375-86-2	-777,4	-1131,8	509,6	409,1	-1287,0	-1540,9	253,9
1-méthyldiadamantane	$C_{15}H_{22}$	26460-76-4	-823,9	-1131,8	398,5	409,1	-1222,7	-1540,9	318,2
cyclopentadécane	$C_{15}H_{30}$	295-48-7	-1432,5	-1432,5	354,6	354,6	-1787,6	-1787,1	-0,5
fluoranthène	$C_{16}H_{10}$	206-44-0	1428,9	1416,1	486,0	486,0	938,9	930,0	8,9
pyrène	$C_{16}H_{10}$	129-00-0	1115,9	1142,1	484,1	478,8	620,5	663,3	-42,8
(Z,Z)-1,4-diphénylbutadiène[1]	$C_{16}H_{14}$	5807-76-1	-	1450,0	-	568,1	963,7	881,9	81,8
(E,E)-1,4-diphénylbutadiène[1]	$C_{16}H_{14}$	538-81-8	-	1450,0	-	537,5	866,8	912,4	-45,6
2,7-diméthylphénantrène	$C_{16}H_{14}$	1576-69-8	693,7	689,8	517,3	501,8	176,5	188,0	-11,6
4,5-diméthylphénantrène	$C_{16}H_{14}$	3674-69-9	938,5	689,8	415,4	501,8	431,4	188,0	243,4
9,10-diméthylphénantrène	$C_{16}H_{14}$	604-83-1	810,1	705,3	579,3	500,9	230,8	204,4	26,3
cis-1,2-Di-o-tolyléthène[1]	$C_{16}H_{16}$	10311-74-7	-	872,8	-	531,0	412,4	341,8	70,6

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{g,m}$ (litt.)	$\Delta_f H°_{g,m}$ (calc.)	$\Delta H°_{sub}$ (litt.)	$\Delta H°_{sub}$ (calc.)	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}
trans-1,2-Di-o-tolyléthène[1]	$C_{16}H_{16}$	36888-18-3	-	872,8	-	531,0	359,6	341,8	17,8
(Z)-1,2-bis(4-méthylphényl)éthène[1]	$C_{16}H_{16}$	2510-76-1	-	842,5	-	532,7	470,0	309,8	160,2
(E)-1,2-bis(4-méthylphényl)éthène[1]	$C_{16}H_{16}$	18869-29-9	-	842,5	-	532,7	278,0	309,8	-31,8
[2.2]métacyclophane	$C_{16}H_{16}$	2319-97-3	818,5	819,5	441,7	441,7	376,9	377,8	-1,0
[2.2]paracyclophane	$C_{16}H_{16}$	1633-22-3	1174,8	582,3	461,8	422,7	696,6	159,7	**536,9**
[2.2]métaparacyclophane	$C_{16}H_{16}$	5385-36-4	1048,5	1048,5	420,1	420,1	628,4	628,4	0,0
[16]annulène[1]	$C_{16}H_{16}$	3332-38-5	-	2179,1	-	512,1	2628,4	1667,0	**961,4**
1,2-Di-o-tolyléthane[1]	$C_{16}H_{18}$	952-80-7	-	394,2	-	513,8	-190,2	-119,6	-70,6
1,2-Di-p-tolyléthane[1]	$C_{16}H_{18}$	538-39-6	-	364,7	-	515,5	-200,2	-150,8	-49,3
1,4-diphénylbutane[1]	$C_{16}H_{18}$	1083-56-3	-	486,4	-	535,9	-47,1	-49,5	2,5
tricyclo[8.2.2.2^{4,7}]hexadécane	$C_{16}H_{28}$	283-68-1	-691,5	-1280,9	417,4	460,5	-1107,6	-1741,4	**633,8**
cyclohexadécane	$C_{16}H_{32}$	295-65-8	-1433,4	-1433,0	364,5	364,5	-1797,5	-1797,5	0,0
cycloheptadécane	$C_{17}H_{34}$	295-97-6	-1527,8	-1527,8	277,2	277,2	-1805,0	-1805,0	0,0
triphénylène	$C_{18}H_{12}$	217-59-4	1201,1	1132,8	501,6	528,6	664,9	604,2	60,7
chrysène	$C_{18}H_{12}$	218-01-9	1181,8	1173,1	520,4	505,6	636,5	667,5	-31,0
benzo[c]phénantrène	$C_{18}H_{12}$	195-19-7	1275,6	1229,6	464,3	464,3	809,9	765,3	44,7
benzo[a]anthracène	$C_{18}H_{12}$	56-55-3	1283,5	1213,4	505,9	482,6	748,2	730,7	17,4
naphtacène	$C_{18}H_{12}$	92-24-0	1276,5	1253,7	556,3	459,7	695,6	794,0	-98,4
5,12-dihydro-naphtacène	$C_{18}H_{14}$	959-02-4	965,2	920,5	503,7	473,8	462,0	446,7	15,3
[18]annulène	$C_{18}H_{18}$	2040-73-5	1194,9	2178,9	512,1	512,1	697,3	1666,8	**-969,6**
3,4,5,6-tétraméthylphénantrène	$C_{18}H_{18}$	7343-06-8	682,8	349,1	569,7	484,0	99,9	-134,9	234,8
2,4,5,7-tétraméthylphénantrène	$C_{18}H_{18}$	7396-38-5	554,8	322,2	487,3	485,6	52,1	-163,4	215,4
[3.3]paracyclophane	$C_{18}H_{20}$	2913-24-8	548,3	338,9	437,1	434,1	111,3	-95,2	206,5
1,2,3,4,5,6,7,8,9,10,11,12-dodécahydro-triphénylène[1]	$C_{18}H_{24}$	1610-39-5	-	-374,0	-	399,1	-806,6	-773,1	-33,6
1,2,4-Tri-tert-butylbenzène[1]	$C_{18}H_{30}$	1459-11-6	-	-148,9	-	-131,2	-1021,0	-17,7	**-1003,3**
1,3,5-Tri-tert-butylbenzène	$C_{18}H_{30}$	1460-02-2	-	-966,6	323,4	323,4	-1306,2	-1290,0	-16,2
octadécane	$C_{18}H_{38}$	593-45-3	-1629,1	-1632,3	600,0	612,5	-2229,5	-2244,8	15,3
triphénylméthane	$C_{19}H_{16}$	519-73-3	1110,0	1110,0	429,7	406,3	700,7	703,7	-3,0
2,2',4,4',5,5'-hexaméthyldiphénylméthane[1]	$C_{19}H_{24}$	4957-16-8	-	-110,5	-	467,4	-611,7	-577,9	-33,8
pérylène	$C_{20}H_{12}$	198-55-0	1284,1	1110,9	488,3	492,5	724,5	618,5	106,1
9,10-dihydro-9,10[1',2']benzénoanthracène	$C_{20}H_{14}$	477-75-8	1264,9	1180,4	412,9	424,1	853,6	756,2	97,4

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{g,m}$ (litt.)	$\Delta_f H°_{g,m}$ (calc.)	$\Delta H°_{sub}$ (litt.)	$\Delta H°_{sub}$ (calc.)	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}
5,8-diméthylbenzo[c]phénantrène[(1)]	$C_{20}H_{16}$	54986-63-9	-	765,8	-	489,3	422,1	276,5	145,6
1,12-diméthylbenzo[c]phénantrène[(1)]	$C_{20}H_{16}$	4076-43-1	-	765,8	-	489,3	602,7	276,5	326,2
3,9-diméthylbenz[a]anthracène	$C_{20}H_{16}$	316-51-8	737,3	819,6	440,8	469,9	297,3	349,7	-52,5
1,12-diméthylbenz[a]anthracène	$C_{20}H_{16}$	313-74-6	981,1	819,6	438,9	469,9	542,2	349,7	192,5
9,10-diméthyl-1,2-benzanthracène	$C_{20}H_{16}$	57-97-6	1083,3	819,6	522,7	477,3	561,0	342,4	218,6
5,6-diméthylchrysène	$C_{20}H_{16}$	3697-27-6	1023,6	796,2	507,1	489,6	516,9	306,6	210,3
1,1,1-triphényléthane[(1)]	$C_{20}H_{18}$	5271-39-6	972,7	1002,9	-	399,6	608,5	603,3	5,1
1,1,2-triphényléthane[(1)]	$C_{20}H_{18}$	1520-42-9	988,2	977,7	-	454,7	504,0	523,0	-19,0
1-(2-naphtalénylméthyl)naphtalène[(1)]	$C_{21}H_{16}$	611-48-3	-	1078,4	-	455,2	603,7	623,3	-19,6
1',2',3',4'-tétrahydro-1,2-dinaphtylméthane[(1)]	$C_{21}H_{20}$	56818-06-5	-	651,7	-	472,3	161,9	179,3	-17,4
[1.8]paracyclophane	$C_{21}H_{26}$	6169-94-4	104,2	28,4	398,3	437,6	-294,1	-409,2	115,0
1,2,4,5-Tétra-tert-butylbenzène[(1)]	$C_{22}H_{38}$	796-97-4	-	-1120,5	-	290,4	-984,7	-1410,9	426,2
1,1,2-Tri-o-tolyléthane[(1)]	$C_{23}H_{24}$		-	538,2	-	440,5	81,2	97,8	-16,5
1,1,2-Tri-p-tolyléthane[(1)]	$C_{23}H_{24}$	27497-47-8	-	506,9	-	442,3	54,6	64,6	-10,1
1,3,5-triphénylbenzène	$C_{24}H_{18}$	612-71-5	1199,4	1217,4	496,1	444,8	733,0	772,5	-39,5
[6.6]paracyclophane	$C_{24}H_{32}$	4384-23-0	-242,4	-136,3	359,1	359,1	-601,2	-495,5	-105,8
tétraphénylméthane	$C_{25}H_{20}$	630-76-2	1241,5	1241,5	471,2	471,2	771,2	770,2	0,9
9,10-diphénylanthracène	$C_{26}H_{18}$	1499-10-1	1409,1	1246,6	416,1	437,8	934,3	808,8	125,5
1,1,1,2-tétraphényléthane	$C_{26}H_{22}$	2294-94-2	1091,3	1116,7	396,5	396,5	666,8	720,3	-53,5
1,1,2,2-tétraphényléthane	$C_{26}H_{22}$	632-50-8	1067,4	1081,5	409,0	409,0	645,8	672,4	-26,6
9,9'-bianthracène	$C_{28}H_{18}$	1055-23-8	1281,7	1271,6	362,3	421,1	920,3	850,5	69,9
9,9'-biphénanthryl	$C_{28}H_{18}$	20532-03-0	-	1219,7	427,4	450,7	600,4	769,0	-168,6
1,1,4,4-tétraphényl-1,3-butadiène[(1)]	$C_{28}H_{26}$	1483-64-3	-	1043,0	-	308,2	450,5	734,8	-284,3
1,1,2,2-Tétra-p-tolyléthane[(1)]	$C_{30}H_{30}$	40673-57-2	-	731,5	-	301,4	188,4	430,1	-241,7
cyclotriacontane[(1)]	$C_{30}H_{60}$	297-35-8	-	-1470,5	-	519,0	-2128,6	-1989,5	-139,1
pentaphényléthane[(1)]	$C_{32}H_{26}$	19112-42-6	-	1175,5	-	370,0	928,5	805,5	123,1
dotriacontane	$C_{32}H_{66}$	544-85-4	-1545,0	-1561,9	601,3	571,8	-2147,6	-2133,7	-14,0
hexaphényléthane[(1)]	$C_{38}H_{30}$	17854-07-8	-	1240,3	-	343,3	1051,7	897,1	154,6
5,6,11,12-tétraphénylnaphtacène[(1)]	$C_{42}H_{28}$	517-51-1	1466,0	1356,0	-	416,0	1164,5	940,0	224,5

[(1)] Composés n'ayant pas été utilisés dans la phase de détermination des contributions de groupes C-H à l'enthalpie standard de sublimation.

Annexe 9

Banque d'enthalpies standard de formation en phase solide concernant les 1 025 molécules C-H-N-O étudiées dans le cadre de la démarche directe

Les résultats sont ici présentés en joules par gramme

Banque d'enthalpies standard de formation en phase solide concernant les 145 molécules C_xH_y étudiées dans le cadre de la démarche directe

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_fH°_{s,m}$ (litt.)
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}
2-norbornène	C_7H_{10}	498-66-8	94,2	561,8
norbornane	C_7H_{12}	279-23-2	96,2	-988,9
cubane	C_8H_8	277-10-1	104,1	5202,2
bicyclo[2.2.2]oct-2-ène	C_8H_{12}	931-64-6	108,2	-215,4
bicyclo[2.2.2]octane	C_8H_{14}	280-33-1	110,2	-1333,1
2,2,3,3-tétraméthylbutane	C_8H_{18}	594-82-1	114,2	-2354,1
7,7-diméthyl-bicyclo[2.2.1]heptane	C_9H_{16}	2034-53-9	124,2	-1193,0
bicyclo[3.3.1]nonane	C_9H_{16}	280-65-9	124,2	-1434,5
azulène	$C_{10}H_8$	275-51-4	128,2	1656,4
naphtalène	$C_{10}H_8$	91-20-3	128,2	607,8
1,2,4,5-tétraméthylbenzène	$C_{10}H_{14}$	95-93-2	134,2	-893,3
3a,4,5,6,7,7a-hexahydro-4,7-méthanoindène	$C_{10}H_{14}$	4488-57-7	134,2	-178,1
octahydro-4,7-méthano-1H-indène	$C_{10}H_{16}$	6004-38-2	136,2	-828,7
adamantane	$C_{10}H_{16}$	281-23-2	136,2	-1424,8
protoadamantane	$C_{10}H_{16}$	53130-19-1	136,2	-1106,9
camphène	$C_{10}H_{16}$	79-92-5	136,2	-553,5
bicyclo[3.3.2]décane	$C_{10}H_{18}$	283-50-1	138,2	-1187,7
2-méthylnaphtalène	$C_{11}H_{10}$	91-57-6	142,2	315,8
pentaméthylbenzène	$C_{11}H_{16}$	700-12-9	148,2	-901,2
1-méthyladamantane	$C_{11}H_{18}$	768-91-2	150,3	-1592,6
2-méthyladamantane	$C_{11}H_{18}$	700-56-1	150,3	-1461,5
bicyclo[3.3.3]undécane	$C_{11}H_{20}$	29415-95-0	152,3	-1001,5
biphénylène	$C_{12}H_8$	259-79-0	152,2	2194,6
acénaphtylène	$C_{12}H_8$	208-96-8	152,2	1226,7
biphényle	$C_{12}H_{10}$	92-52-4	154,2	644,6
acénaphtène	$C_{12}H_{10}$	83-32-9	154,2	455,9
1,8-diméthylnaphtalène	$C_{12}H_{12}$	569-41-5	156,2	165,8
2,3-diméthylnaphtalène	$C_{12}H_{12}$	581-40-8	156,2	-14,7
2,6-diméthylnaphtalène	$C_{12}H_{12}$	581-42-0	156,2	-36,5
2,7-diméthylnaphtalène	$C_{12}H_{12}$	582-16-1	156,2	-34,6
hexacyclo[6.2.1.1^{3,6}.0^{2,7}.0^{4,10}.0^{5,9}]dodécane	$C_{12}H_{14}$	704-02-9	158,2	322,9
hexaméthylbenzène	$C_{12}H_{18}$	87-85-4	162,3	-995,2
(E,E,E)-1,5,9-cyclododécatriène	$C_{12}H_{18}$	676-22-2	162,3	163,9
2,2,7,7-tétraméthylocta-3,5-diyne	$C_{12}H_{18}$	6130-98-9	162,3	962,0
2,2-diméthyladamantane	$C_{12}H_{20}$	19740-34-2	164,3	-1560,1
1,3-diméthyladamantane	$C_{12}H_{20}$	702-79-4	164,3	-1743,3

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}
cyclododécane	$C_{12}H_{24}$	294-62-2	168,3	-1821,5
4-méthyl-1,1'-biphényle	$C_{13}H_{12}$	644-08-6	168,2	329,3
diphénylméthane	$C_{13}H_{12}$	101-81-5	168,2	425,0
1,3,5-triméthyladamantane	$C_{13}H_{22}$	707-35-7	178,3	-1863,6
diphényléthyne	$C_{14}H_{10}$	501-65-5	178,2	1752,8
anthracène	$C_{14}H_{10}$	120-12-7	178,2	724,9
phénantrène	$C_{14}H_{10}$	85-01-8	178,2	652,0
9,10-dihydro-anthracène	$C_{14}H_{12}$	613-31-0	180,2	368,4
(E)-stilbène	$C_{14}H_{12}$	103-30-0	180,2	759,5
4,4'-diméthylbiphényle	$C_{14}H_{14}$	613-33-2	182,3	77,4
bibenzyle	$C_{14}H_{14}$	103-29-7	182,3	282,6
1,4,5,8-tétraméthylnaphtalène	$C_{14}H_{16}$	2717-39-7	184,3	-98,8
1,2,3,4,5,6,7,8-octahydro-anthracène	$C_{14}H_{18}$	1079-71-6	186,3	-641,5
1,8-cyclotétradécadiyne	$C_{14}H_{20}$	1540-80-3	188,3	784,9
diadamantane	$C_{14}H_{20}$	2292-79-7	188,3	-1284,1
1,1,4,6,7-pentaméthylindane	$C_{14}H_{20}$	6682-67-3	188,3	-929,9
trans-anti-trans-tétradécahydro-anthracène	$C_{14}H_{24}$	28071-99-0	192,3	-1524,9
1,3,5,7-tétraméthyladamantane	$C_{14}H_{24}$	1687-36-1	192,3	-1901,8
cyclotétradécane	$C_{14}H_{28}$	295-17-0	196,4	-1904,5
cis-1,4-Di-tert-butyl-cyclohexane	$C_{14}H_{28}$	4789-34-8	196,4	-1905,1
trans-1,4-Di-tert-butyl-cyclohexane	$C_{14}H_{28}$	4789-35-9	196,4	-2046,1
1,4-diméthyl-7-(1-méthyléthyl)-azulène	$C_{15}H_{18}$	489-84-9	198,3	308,1
4-méthyldiadamantane	$C_{15}H_{22}$	30545-28-9	202,3	-1292,4
3-méthyldiadamantane	$C_{15}H_{22}$	28375-86-2	202,3	-1287,0
1-méthyldiadamantane	$C_{15}H_{22}$	26460-76-4	202,3	-1222,7
cyclopentadécane	$C_{15}H_{30}$	295-48-7	210,4	-1787,6
1,1'-(1,3-butadiyne-1,4-diyl)bis-benzène	$C_{16}H_{10}$	886-66-8	202,3	2563,2
fluoranthène	$C_{16}H_{10}$	206-44-0	202,3	938,9
pyrène	$C_{16}H_{10}$	129-00-0	202,3	620,5
bis-(2-méthylphényl)-acétylène	$C_{16}H_{14}$	5294-03-1	206,3	1138,2
Di-p-tolylacétylène	$C_{16}H_{14}$	2789-88-0	206,3	1094,6
(Z,Z)-1,4-diphénylbutadiène	$C_{16}H_{14}$	5807-76-1	206,3	963,7
(E,E)-1,4-diphénylbutadiène	$C_{16}H_{14}$	538-81-8	206,3	866,8
2,7-diméthylphénantrène	$C_{16}H_{14}$	1576-69-8	206,3	176,5
4,5-diméthylphénantrène	$C_{16}H_{14}$	3674-69-9	206,3	431,4
9,10-diméthylphénantrène	$C_{16}H_{14}$	604-83-1	206,3	230,8
1,1-Di-o-tolyléthylène	$C_{16}H_{16}$	2919-19-9	208,3	427,3
cis-1,2-Di-o-tolyléthène	$C_{16}H_{16}$	10311-74-7	208,3	412,4
trans-1,2-Di-o-tolyléthène	$C_{16}H_{16}$	36888-18-3	208,3	359,6
1,1-Di-p-tolyléthylène	$C_{16}H_{16}$	2919-20-2	208,3	412,4
(Z)-1,2-bis(4-méthylphényl)éthène	$C_{16}H_{16}$	2510-76-1	208,3	470,0
(E)-1,2-bis(4-méthylphényl)éthène	$C_{16}H_{16}$	18869-29-9	208,3	278,0
[2.2]métacyclophane	$C_{16}H_{16}$	2319-97-3	208,3	376,9
[2.2]paracyclophane	$C_{16}H_{16}$	1633-22-3	208,3	696,6
[2.2]métaparacyclophane	$C_{16}H_{16}$	5385-36-4	208,3	628,4
[16]annulène	$C_{16}H_{16}$	3332-38-5	208,3	2628,4
1,2-Di-o-tolyléthane	$C_{16}H_{18}$	952-80-7	210,3	-190,2
1,2-Di-p-tolyléthane	$C_{16}H_{18}$	538-39-6	210,3	-200,2
1,4-diphénylbutane	$C_{16}H_{18}$	1083-56-3	210,3	-47,1
tricyclo[8.2.2.2^{4,7}]hexadécane	$C_{16}H_{28}$	283-68-1	220,4	-1107,6
cyclohexadécane	$C_{16}H_{32}$	295-65-8	224,4	-1797,5

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}
cycloheptadécane	$C_{17}H_{34}$	295-97-6	238,5	-1805,0
triphénylène	$C_{18}H_{12}$	217-59-4	228,3	664,9
chrysène	$C_{18}H_{12}$	218-01-9	228,3	636,5
benzo[c]phénantrène	$C_{18}H_{12}$	195-19-7	228,3	809,9
benzo[a]anthracène	$C_{18}H_{12}$	56-55-3	228,3	748,2
naphtacène	$C_{18}H_{12}$	92-24-0	228,3	695,6
5,12-dihydro-naphtacène	$C_{18}H_{14}$	959-02-4	230,3	462,0
[18]annulène	$C_{18}H_{18}$	2040-73-5	234,3	697,3
3,4,5,6-tétraméthylphénantrène	$C_{18}H_{18}$	7343-06-8	234,3	99,9
2,4,5,7-tétraméthylphénantrène	$C_{18}H_{18}$	7396-38-5	234,3	52,1
[3.3]paracyclophane	$C_{18}H_{20}$	2913-24-8	236,4	111,3
1,2,3,4,5,6,7,8,9,10,11,12-dodécahydro-triphénylène	$C_{18}H_{24}$	1610-39-5	240,4	-806,6
1,2,4-Tri-tert-butylbenzène	$C_{18}H_{30}$	1459-11-6	246,4	-1021,0
1,3,5-Tri-tert-butylbenzène	$C_{18}H_{30}$	1460-02-2	246,4	-1306,2
octadécane	$C_{18}H_{38}$	593-45-3	254,5	-2229,5
triphénylméthane	$C_{19}H_{16}$	519-73-3	244,3	700,7
2,2',4,4',5,5'-hexaméthyldiphénylméthane	$C_{19}H_{24}$	4957-16-8	252,4	-611,7
pérylène	$C_{20}H_{12}$	198-55-0	252,3	724,5
9,10-dihydro-9,10[1',2']benzénoanthracène	$C_{20}H_{14}$	477-75-8	254,3	853,6
triphényléthylène	$C_{20}H_{16}$	58-72-0	256,3	910,5
5,8-diméthylbenzo[c]phénantrène	$C_{20}H_{16}$	54986-63-9	256,3	422,1
1,12-diméthylbenzo[c]phénantrène	$C_{20}H_{16}$	4076-43-1	256,3	602,7
3,9-diméthylbenz[a]anthracène	$C_{20}H_{16}$	316-51-8	256,3	297,3
1,12-diméthylbenz[a]anthracène	$C_{20}H_{16}$	313-74-6	256,3	542,2
9,10-diméthyl-1,2-benzanthracène	$C_{20}H_{16}$	57-97-6	256,3	561,0
5,6-diméthylchrysène	$C_{20}H_{16}$	3697-27-6	256,3	516,9
1,1,1-triphényléthane	$C_{20}H_{18}$	5271-39-6	258,4	608,5
1,1,2-triphényléthane	$C_{20}H_{18}$	1520-42-9	258,4	504,0
1-(2-naphtalénylméthyl)naphtalène	$C_{21}H_{16}$	611-48-3	268,4	603,7
1',2',3',4'-tétrahydro-1,2-dinaphtylméthane	$C_{21}H_{20}$	56818-06-5	272,4	161,9
[1.8]paracyclophane	$C_{21}H_{26}$	6169-94-4	278,4	-294,1
1,2,4,5-Tétra-tert-butylbenzène	$C_{22}H_{38}$	796-97-4	302,5	-984,7
tris(2-méthylphényl)éthylène	$C_{23}H_{22}$	62155-47-9	298,4	419,5
tris(4-méthylphényl)éthylène	$C_{23}H_{22}$	6629-83-0	298,4	406,1
1,1,2-Tri-o-tolyléthane	$C_{23}H_{24}$		300,4	81,2
1,1,2-Tri-p-tolyléthane	$C_{23}H_{24}$	27497-47-8	300,4	54,6
1,3,5-triphénylbenzène	$C_{24}H_{18}$	612-71-5	306,4	733,0
[6.6]paracyclophane	$C_{24}H_{32}$	4384-23-0	320,5	-601,2
tétraphénylméthane	$C_{25}H_{20}$	630-76-2	320,4	771,2
1,3,6-triphénylcycloheptatriène	$C_{25}H_{20}$	17760-68-8	320,4	854,8
9,10-diphénylanthracène	$C_{26}H_{18}$	1499-10-1	330,4	934,3
tétraphényléthylène	$C_{26}H_{20}$	632-51-9	332,4	937,0
1,1,1,2-tétraphényléthane	$C_{26}H_{22}$	2294-94-2	334,5	666,8
1,1,2,2-tétraphényléthane	$C_{26}H_{22}$	632-50-8	334,5	645,8
3-phényléicosane	$C_{26}H_{46}$	2400-02-4	358,6	-1530,2
9,9'-bianthracène	$C_{28}H_{18}$	1055-23-8	354,4	920,3
9,9'-biphénanthryl	$C_{28}H_{18}$	20532-03-0	354,4	600,4
1,1,4,4-tétraphényl-1,3-butadiène	$C_{28}H_{22}$	1450-63-1	358,5	920,3
1,2,3,4-tétraphényl-1,3-butadiène	$C_{28}H_{22}$	806-71-3	358,5	1001,2
1,1,4,4-tétraphénylbutane	$C_{28}H_{26}$	1483-64-3	362,5	450,5
tétra-p-tolyléthène	$C_{30}H_{28}$	5831-43-6	388,5	441,4

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}
1,1,2,2-Tétra-p-tolyléthane	$C_{30}H_{30}$	40673-57-2	390,6	188,4
cyclotriacontane	$C_{30}H_{60}$	297-35-8	420,8	-2128,6
13-phénylpentacosane	$C_{31}H_{56}$	6006-90-2	428,8	-1602,2
pentaphényléthane	$C_{32}H_{26}$	19112-42-6	410,5	928,5
dotriacontane	$C_{32}H_{66}$	544-85-4	450,9	-2147,6
hexaphényléthane	$C_{38}H_{30}$	17854-07-8	486,6	1051,7
5,6,11,12-tétraphénylnaphtacène	$C_{42}H_{28}$	517-51-1	532,7	1164,5

Banque d'enthalpies standard de formation en phase solide concernant les 259 molécules $C_xH_yO_z$ étudiées dans le cadre de la démarche directe

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}
phénol	C_6H_6O	108-95-2	94,1	-1754,3
2-méthylphénol	C_7H_8O	95-48-7	108,1	-1892,0
4-méthylphénol	C_7H_8O	106-44-5	108,1	-1843,0
4-éthylphénol	$C_8H_{10}O$	123-07-9	122,2	-1836,9
2,3-diméthylphénol	$C_8H_{10}O$	526-75-0	122,2	-1974,4
2,5-diméthylphénol	$C_8H_{10}O$	95-87-4	122,2	-2018,6
2,6-diméthylphénol	$C_8H_{10}O$	576-26-1	122,2	-1943,3
3,4-diméthylphénol	$C_8H_{10}O$	95-65-8	122,2	-1983,4
3,5-diméthylphénol	$C_8H_{10}O$	108-68-9	122,2	-2000,6
2-isopropylphénol	$C_9H_{12}O$	88-69-7	136,2	-1810,7
3-isopropylphénol	$C_9H_{12}O$	618-45-1	136,2	-1931,1
4-isopropylphénol	$C_9H_{12}O$	99-89-8	136,2	-2053,7
1-naphtol	$C_{10}H_8O$	90-15-3	144,2	-839,3
2-naphtol	$C_{10}H_8O$	135-19-3	144,2	-861,5
1,2,3,4-tétrahydro-1-naphtol	$C_{10}H_{12}O$	529-33-9	148,2	-1628,9
5,6,7,8-tétrahydro-1-naphtol	$C_{10}H_{12}O$	529-35-1	148,2	-1925,1
2-isopropyl-5-méthylphénol	$C_{10}H_{14}O$	89-83-8	150,2	-1866,2
1-adamantanol	$C_{10}H_{16}O$	768-95-6	152,2	-2611,8
2-adamantanol	$C_{10}H_{16}O$	700-57-2	152,2	-2548,7
exo-4-hydroxy-exo-exo-tétracyclo[6.2.1.1^{3,6}.0^{2,7}]dodécane	$C_{12}H_{18}O$	74007-11-7	178,3	-1598,1
exo-4-hydroxy-exo-endo-tétracyclo[6.2.1.1^{3,6}.0^{2,7}]dodécane	$C_{12}H_{18}O$	107133-43-7	178,3	-1650,9
exo-4-hydroxy-endo-endo-tétracyclo[6.2.1.1^{3,6}.0^{2,7}]dodécane	$C_{12}H_{18}O$	7273-98-5	178,3	-1482,0
(1,1'-biphényl)méthanol	$C_{13}H_{12}O$	41376-19-6	184,2	-568,8
1-tridécanol	$C_{13}H_{28}O$	112-70-9	200,4	-2991,6
1-diamantanol	$C_{14}H_{20}O$	30545-19-8	204,3	-2098,8
3-diamantanol	$C_{14}H_{20}O$	30545-24-5	204,3	-2025,4
4-diamantanol	$C_{14}H_{20}O$	30651-03-7	204,3	-2128,6
1-tétradécanol	$C_{14}H_{30}O$	112-72-1	214,4	-2936,7
1-pentadécanol	$C_{15}H_{32}O$	629-76-5	228,4	-2881,6
1-hexadécanol	$C_{16}H_{34}O$	36653-82-4	242,4	-2831,6
α,α-diphényl-benzèneméthanol	$C_{19}H_{16}O$	76-84-6	260,3	-9,6
alcool 4,4',4"-triméthyltrityl	$C_{22}H_{22}O$	3247-00-5	302,4	-222,9
3',5'-diisopropyl-4,4-diméthyl-3-phényl-1,2-benzocyclobutèn-3-ol	$C_{22}H_{28}O$	33574-16-2	308,5	-709,3
ergostérol	$C_{28}H_{44}O$	57-87-4	396,6	-1991,2
acide 3-butynoïque	$C_4H_4O_2$	2345-51-9	84,1	-2876,1
acide 3-pentynoïque	$C_5H_6O_2$	36781-65-4	98,1	-2979,6
cis-1,2-cyclopentanediol	$C_5H_{10}O_2$	5057-98-7	102,1	-4749,7
trans-1,2-cyclopentanediol	$C_5H_{10}O_2$	5057-99-8	102,1	-4798,7
2,2-diméthyl-1,3-propanediol	$C_5H_{12}O_2$	126-30-7	104,1	-5292,5
hydroquinone	$C_6H_6O_2$	123-31-9	110,1	-3310,3
résorcinol	$C_6H_6O_2$	108-46-3	110,1	-3342,1
1,6-hexanediol	$C_6H_{14}O_2$	629-11-8	118,2	-4822,5
acide benzoïque	$C_7H_6O_2$	65-85-0	122,1	-3154,2
2-hydroxy-2,4,6-cycloheptatrièn-1-one	$C_7H_6O_2$	533-75-5	122,1	-1959,5
1-(2-hydroxyphényl)éthanone	$C_8H_8O_2$	118-93-4	136,1	-2626,6
1-(3-hydroxyphényl)éthanone	$C_8H_8O_2$	121-71-1	136,1	-2722,0
1-(4-hydroxyphényl)éthanone	$C_8H_8O_2$	99-93-4	136,1	-2675,8
acide 2-méthylbenzoïque	$C_8H_8O_2$	118-90-1	136,1	-3059,2
acide 3-méthylbenzoïque	$C_8H_8O_2$	99-04-7	136,1	-3129,7
acide 4-méthylbenzoïque	$C_8H_8O_2$	99-94-5	136,1	-3152,5
1,4-benzènediméthanol	$C_8H_{10}O_2$	589-29-7	138,2	-2851,0
2,5-diméthyl-3-hexyne-2,5-diol	$C_8H_{14}O_2$	142-30-3	142,2	-2712,5
2,5-diméthyl-2,5-hexanediol	$C_8H_{18}O_2$	110-03-2	146,2	-4661,9

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}
acide (Z)-3-phényl-2-propénoïque	$C_9H_8O_2$	102-94-3	148,2	-2106,5
acide (E)-3-phényl-2-propénoïque	$C_9H_8O_2$	140-10-3	148,2	-2273,9
acide 2,3-diméthylbenzoïque	$C_9H_{10}O_2$	603-79-2	150,2	-2999,2
acide 2,4-diméthylbenzoïque	$C_9H_{10}O_2$	611-01-8	150,2	-3053,1
acide 2,5-diméthylbenzoïque	$C_9H_{10}O_2$	610-72-0	150,2	-3037,1
acide 2,6-diméthylbenzoïque	$C_9H_{10}O_2$	632-46-2	150,2	-2934,6
acide 3,4-diméthylbenzoïque	$C_9H_{10}O_2$	619-04-5	150,2	-3121,7
acide 3,5-diméthylbenzoïque	$C_9H_{10}O_2$	499-06-9	150,2	-3105,7
acide 2-éthylbenzoïque	$C_9H_{10}O_2$	612-19-1	150,2	-2938,6
acide 3-éthylbenzoïque	$C_9H_{10}O_2$	619-20-5	150,2	-2968,5
acide 4-éthylbenzoïque	$C_9H_{10}O_2$	619-64-7	150,2	-3067,8
2,6-diméthyl-2,6-heptanediol	$C_9H_{20}O_2$	6257-51-8	160,3	-4749,3
2,7-naphtalènediol	$C_{10}H_8O_2$	582-17-2	160,2	-2036,0
2,3-naphtalènediol	$C_{10}H_8O_2$	92-44-4	160,2	-1975,4
acide 2,4-diméthylphénylacétique	$C_{10}H_{12}O_2$	6331-04-0	164,2	-3019,5
acide 2,3,4-triméthylbenzoïque	$C_{10}H_{12}O_2$	1076-47-7	164,2	-2963,4
acide 2,3,5-triméthylbenzoïque	$C_{10}H_{12}O_2$	2437-66-3	164,2	-2976,2
acide 2,3,6-triméthylbenzoïque	$C_{10}H_{12}O_2$	2529-36-4	164,2	-2897,1
acide 2,4,5-triméthylbenzoïque	$C_{10}H_{12}O_2$	528-90-5	164,2	-3018,9
acide 2,4,6-triméthylbenzoïque	$C_{10}H_{12}O_2$	480-63-7	164,2	-2910,5
acide 3,4,5-triméthylbenzoïque	$C_{10}H_{12}O_2$	1076-88-6	164,2	-3050,5
2-hydroxy-4-isopropyl-2,4,6-cycloheptatrièn-1-one	$C_{10}H_{12}O_2$	499-44-5	164,2	-2074,3
acide décanoïque	$C_{10}H_{20}O_2$	334-48-5	172,3	-4143,0
1,10-décanediol	$C_{10}H_{22}O_2$	112-47-0	174,3	-3979,2
2,7-diméthyl-2,7-octanediol	$C_{10}H_{22}O_2$	19781-07-8	174,3	-4188,7
acide 1-naphtalènecarboxylique	$C_{11}H_8O_2$	86-55-5	172,2	-1936,9
acide 2-naphtalènecarboxylique	$C_{11}H_8O_2$	93-09-4	172,2	-2010,1
acide 2,3,4,5-tétraméthylbenzoïque	$C_{11}H_{14}O_2$	2529-39-7	178,2	-2886,2
acide 2,3,4,6-tétraméthylbenzoïque	$C_{11}H_{14}O_2$	2408-38-0	178,2	-2848,6
acide 2,3,5,6-tétraméthylbenzoïque	$C_{11}H_{14}O_2$	2604-45-7	178,2	-2839,6
acide 3,5-diéthylbenzoïque	$C_{11}H_{14}O_2$	3854-90-8	178,2	-2872,2
acide 2-tert-butylbenzoïque	$C_{11}H_{14}O_2$	1077-58-3	178,2	-2671,9
acide 3-tert-butylbenzoïque	$C_{11}H_{14}O_2$	7498-54-6	178,2	-2829,5
acide 4-tert-butylbenzoïque	$C_{11}H_{14}O_2$	98-73-7	178,2	-2821,7
acide adamantane-1-carboxylique	$C_{11}H_{16}O_2$	828-51-3	180,2	-3568,0
acide adamantane-2-carboxylique	$C_{11}H_{16}O_2$	15897-81-1	180,2	-3479,7
acide undécanoïque	$C_{11}H_{22}O_2$	112-37-8	186,3	-3950,3
1-naphtyl acétate	$C_{12}H_{10}O_2$	830-81-9	186,2	-1638,0
2-naphtyl acétate	$C_{12}H_{10}O_2$	1523-11-1	186,2	-1662,7
acide 1-naphtalèneacétique	$C_{12}H_{10}O_2$	86-87-3	186,2	-1929,0
acide 2-naphtalèneacétique	$C_{12}H_{10}O_2$	581-96-4	186,2	-1997,2
acide pentaméthylbenzoïque	$C_{12}H_{16}O_2$	2243-32-5	192,3	-2788,5
3,6-diéthyloct-4-yne-3,6-diol	$C_{12}H_{22}O_2$	2044-37-3	198,3	-2428,1
acide dodécanoïque	$C_{12}H_{24}O_2$	143-07-7	200,3	-3866,9
2,9-diméthyl-2,9-décanediol	$C_{12}H_{26}O_2$	22092-57-5	202,3	-3902,5
acide phényl ester benzoïque	$C_{13}H_{10}O_2$	93-99-2	198,2	-1218,9
acide 2-phénylbenzoïque	$C_{13}H_{10}O_2$	947-84-2	198,2	-1761,2
acide tridécanoïque	$C_{13}H_{26}O_2$	638-53-9	214,3	-3763,1
2,10-diméthyl-2,10-undécanediol	$C_{13}H_{28}O_2$	22092-58-6	216,4	-3863,0
2-hydroxy-1,2-diphényléthanone	$C_{14}H_{12}O_2$	119-53-9	212,2	-1167,1
acide tétradécanoïque	$C_{14}H_{28}O_2$	544-63-8	228,4	-3649,8
2,11-diméthyl-2,11-dodécanediol	$C_{14}H_{30}O_2$	22092-59-7	230,4	-3673,0
2,2'-bis(4-hydroxyphényl)propane	$C_{15}H_{16}O_2$	80-05-7	228,3	-1614,6
acide 3,5-Di-tert-butylbenzoïque	$C_{15}H_{22}O_2$	16225-26-6	234,3	-2665,4
acide pentadécanoïque	$C_{15}H_{30}O_2$	1002-84-2	242,4	-3554,9

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}
acide hexadécanoïque	$C_{16}H_{32}O_2$	57-10-3	256,4	-3476,7
acide 2-naphtyl ester benzoïque	$C_{17}H_{12}O_2$	93-44-7	248,3	-744,3
acide heptadécanoïque	$C_{17}H_{34}O_2$	506-12-7	270,5	-3418,0
acide octadécanoïque	$C_{18}H_{36}O_2$	57-11-4	284,5	-3331,4
acide nonadécanoïque	$C_{19}H_{38}O_2$	646-30-0	298,5	-3296,4
acide éicosanoïque	$C_{20}H_{40}O_2$	506-30-9	312,5	-3237,8
acide (E)-13-docosénoïque	$C_{22}H_{42}O_2$	506-33-2	338,6	-2837,5
acide (S)-2-hydroxypropanoïque	$C_3H_6O_3$	79-33-4	90,1	-7704,4
acide furancarboxylique	$C_5H_4O_3$	26447-28-9	112,1	-4446,7
2-(hydroxyméthyl)-2-méthyl-1,3-propanediol	$C_5H_{12}O_3$	77-85-0	120,1	-6197,4
2-éthyl-2-(hydroxyméthyl)-1,3-propanediol	$C_6H_{14}O_3$	77-99-6	134,2	-5596,5
acide perbenzoïque	$C_7H_6O_3$	93-59-4	138,1	-2657,1
acide salicylique	$C_7H_6O_3$	69-72-7	138,1	-4270,9
acide 3-(2-furanyl)-2-propénoïque	$C_7H_6O_3$	539-47-9	138,1	-3323,2
3-hydroxy-4-méthoxy-benzaldéhyde	$C_8H_8O_3$	621-59-0	152,1	-2980,0
2,4-dihydroxyacétophénone	$C_8H_8O_3$	89-84-9	152,1	-3769,4
acide (R,S)-α-hydroxybenzèneacétique	$C_8H_8O_3$	611-72-3	152,1	-3808,2
acide (S)-α-hydroxybenzèneacétique	$C_8H_8O_3$	17199-29-0	152,1	-3816,0
acide 2-méthoxybenzoïque	$C_8H_8O_3$	579-75-9	152,1	-3539,3
acide 3-méthoxybenzoïque	$C_8H_8O_3$	586-38-9	152,1	-3637,9
acide 4-méthoxybenzoïque	$C_8H_8O_3$	100-09-4	152,1	-3691,8
acide 3-hydroxy-2-naphtoïque	$C_{11}H_8O_3$	92-70-6	188,2	-2911,1
acide dodécanepéroxoïque	$C_{12}H_{24}O_3$	2388-12-7	216,3	-3144,9
phényl-2-hydroxybenzoate	$C_{13}H_{10}O_3$	118-55-8	214,2	-2038,1
diphényl carbonate	$C_{13}H_{10}O_3$	102-09-0	214,2	-1872,9
acide carbonique dicyclohexyl ester	$C_{13}H_{22}O_3$	4427-97-8	226,3	-3668,4
acide tétradécanepéroxoïque	$C_{14}H_{28}O_3$	19816-73-0	244,4	-3068,7
acide 2-méthylbenzoïque anhydride	$C_{16}H_{14}O_3$	607-86-3	254,3	-2098,1
acide 4-méthylbenzoïque anhydride	$C_{16}H_{14}O_3$	13222-85-0	254,3	-2048,9
acide 1-méthyl-1-phényléthyl ester benzènecarbopéroxoïque	$C_{16}H_{16}O_3$	7074-00-2	256,3	-903,3
acide hexadécanepéroxoïque	$C_{16}H_{32}O_3$	7311-29-7	272,4	-2943,6
acide 3-phényl-2-propénoïque anhydride	$C_{18}H_{14}O_3$	538-56-7	278,3	-1249,7
acide octadécanepéroxoïque	$C_{18}H_{36}O_3$	5796-86-1	300,5	-2853,1
acide oxalique	$C_2H_2O_4$	144-62-7	90,0	-9126,5
dioxybisméthanol	$C_2H_6O_4$	17088-73-2	94,1	-7078,0
acide malonique	$C_3H_4O_4$	141-82-2	104,1	-8562,2
acide 2-butynedioïque	$C_4H_2O_4$	142-45-0	114,1	-5062,4
3,4-dihydroxy-3-cyclobutène-1,2-dione	$C_4H_2O_4$	2892-51-5	114,1	-5244,8
acide (Z)-2-butènedioïque	$C_4H_4O_4$	110-16-7	116,1	-6800,9
acide (E)-2-butènedioïque	$C_4H_4O_4$	110-17-8	116,1	-6993,1
acide butanedioïque	$C_4H_6O_4$	110-15-6	118,1	-7964,4
acide éthanedioïque diméthyl ester	$C_4H_6O_4$	553-90-2	118,1	-6404,5
2(R),3(S)-1,2,3,4-butanetétrol	$C_4H_{10}O_4$	149-32-6	122,1	-7455,0
acide (E)-2-méthyl-2-butènedioïque	$C_5H_6O_4$	498-24-8	130,1	-6336,7
acide méthylènebutanedioïque	$C_5H_6O_4$	97-65-4	130,1	-6465,1
acide méthylbutanedioïque	$C_5H_8O_4$	498-21-5	132,1	-7252,8
acide pentanedioïque	$C_5H_8O_4$	110-94-1	132,1	-7266,4
2,2-bis(hydroxyméthyl)-1,3-propanediol	$C_5H_{12}O_4$	115-77-5	136,1	-6761,8
acide 2,2-diméthylbutanedioïque	$C_6H_{10}O_4$	597-43-3	146,1	-6759,2
acide méso-2,3-diméthylbutanedioïque	$C_6H_{10}O_4$	608-39-9	146,1	-6688,7
acide racémique-2,3-diméthylbutanedioïque	$C_6H_{10}O_4$	608-40-2	146,1	-6731,8
acide (-)-2,3-diméthylbutanedioïque	$C_6H_{10}O_4$	57694-62-9	146,1	-6723,0
acide 2-éthylbutanedioïque	$C_6H_{10}O_4$	636-48-6	146,1	-6768,8
acide hexanedioïque	$C_6H_{10}O_4$	124-04-9	146,1	-6803,7
5-(1α,2β,3β,4α,)-1,2,3,4-cyclohexènetétrol	$C_6H_{10}O_4$	526-87-4	146,1	-5722,5

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}
acide triméthylbutanedioïque	$C_7H_{12}O_4$	2103-16-4	160,2	-6248,4
acide heptanedioïque	$C_7H_{12}O_4$	111-16-0	160,2	-6302,1
acide 1,2-benzènedicarboxylique	$C_8H_6O_4$	88-99-3	166,1	-4707,1
acide 1,3-benzènedicarboxylique	$C_8H_6O_4$	121-91-5	166,1	-4833,5
acide 1,4-benzènedicarboxylique	$C_8H_6O_4$	100-21-0	166,1	-4912,4
acide cis-cyclohexane-1,2-dicarboxylique	$C_8H_{12}O_4$	610-09-3	172,2	-5582,0
acide trans-cyclohexane-1,2-dicarboxylique	$C_8H_{12}O_4$	2305-32-0	172,2	-5637,8
acide tétraméthylbutanedioïque	$C_8H_{14}O_4$	630-51-3	174,2	-5811,9
acide 2,2-diéthylbutanedioïque	$C_8H_{14}O_4$	5692-97-7	174,2	-5928,4
acide méso-2,3-diéthylbutanedioïque	$C_8H_{14}O_4$	35392-80-4	174,2	-5850,9
acide racémique-2,3-diéthylbutanedioïque	$C_8H_{14}O_4$	35392-77-9	174,2	-5891,7
acide octanedioïque	$C_8H_{14}O_4$	505-48-6	174,2	-5958,9
acide 2-acétoxybenzoïque	$C_9H_8O_4$	50-78-2	180,2	-4208,2
acide nonanedioïque	$C_9H_{16}O_4$	123-99-9	188,2	-5601,4
acide phénylbutanedioïque	$C_{10}H_{10}O_4$	635-51-8	194,2	-4330,9
2,4-diacétyl-1,3-benzènediol	$C_{10}H_{10}O_4$	2163-12-4	194,2	-3880,3
4,6-diacétyl-1,3-benzènediol	$C_{10}H_{10}O_4$	2161-85-5	194,2	-3998,8
acide 1,3-benzènedicarboxylique diméthyl ester	$C_{10}H_{10}O_4$	1459-93-4	194,2	-3764,0
acide 1,4-benzènedicarboxylique diméthyl ester	$C_{10}H_{10}O_4$	120-61-6	194,2	-3772,7
1,2,3-propanetriol 1-benzoate	$C_{10}H_{12}O_4$	3376-59-8	196,2	-3961,8
1,2,3-propanetriol 2-benzoate	$C_{10}H_{12}O_4$		196,2	-3938,8
acide triéthylbutanedioïque	$C_{10}H_{18}O_4$	2103-18-6	202,2	-5272,3
acide décanedioïque	$C_{10}H_{18}O_4$	111-20-6	202,2	-5352,8
acide undécanedioïque	$C_{11}H_{20}O_4$	1852-04-6	216,3	-5083,4
acide tétraéthylsuccinique	$C_{12}H_{22}O_4$	4111-60-8	230,3	-4761,2
acide dodécanedioïque	$C_{12}H_{22}O_4$	693-23-2	230,3	-4906,6
acide tridécanedioïque	$C_{13}H_{24}O_4$	505-52-2	244,3	-4699,8
1,2,3-propanetriol 1-décanoate	$C_{13}H_{26}O_4$	2277-23-8	246,3	-4501,9
1,2,3-propanetriol 2-décanoate	$C_{13}H_{26}O_4$	3376-48-5	246,3	-4447,9
acide oxalique diphényl ester	$C_{14}H_{10}O_4$	3155-16-6	242,2	-2228,1
1,2,3-propanetriol 1-dodécanoate	$C_{15}H_{30}O_4$	142-18-7	274,4	-4230,7
1,2,3-propanetriol 2-dodécanoate	$C_{15}H_{30}O_4$	1678-45-1	274,4	-4200,5
acide méso-2,3-diphénylbutanedioïque	$C_{16}H_{14}O_4$	1225-13-4	270,3	-2713,9
acide racémique-2,3-diphénylbutanedioïque	$C_{16}H_{14}O_4$	7584-72-7	270,3	-2738,3
(-)α-desmotroposantonin acétate	$C_{17}H_{20}O_4$	14794-71-9	288,3	-3019,4
(+)β-desmotroposantonin acétate	$C_{17}H_{20}O_4$	14794-69-5	288,3	-3049,2
1,2,3-propanetriol 1-tétradécanoate	$C_{17}H_{34}O_4$	589-68-4	302,4	-4042,3
1,2,3-propanetriol 2-tétradécanoate	$C_{17}H_{34}O_4$	3443-83-2	302,4	-4010,3
1,2,3-propanetriol 1-hexadécanoyl ester	$C_{19}H_{38}O_4$	542-44-9	330,5	-3877,4
1,2,3-propanetriol 2-hexadécanoyl ester	$C_{19}H_{38}O_4$	23470-00-0	330,5	-3838,7
acide 1,2-benzènedicarboxylique diphényl ester	$C_{20}H_{14}O_4$	84-62-8	318,3	-1536,8
acide 1,2-benzènedicarboxylique dicyclohexyl ester	$C_{20}H_{26}O_4$	84-61-7	330,4	-2818,9
1,2,3-propanetriol 1-octadécanoyl ester	$C_{21}H_{42}O_4$	123-94-4	358,6	-3730,0
1,2,3-propanetriol 2-octadécanoyl ester	$C_{21}H_{42}O_4$	621-61-4	358,6	-3685,1
acide (R)-hydroxybutanedioïque	$C_4H_6O_5$	636-61-3	134,1	-8246,1
acide (S)-hydroxybutanedioïque	$C_4H_6O_5$	97-67-6	134,1	-8230,5
acide 2-oxopentanedioïque	$C_5H_6O_5$	328-50-7	146,1	-7024,0
α-D-xylose	$C_5H_{10}O_5$	31178-70-8	150,1	-7045,9
D-ribose	$C_5H_{10}O_5$	50-69-1	150,1	-7001,3
D-arabinose	$C_5H_{10}O_5$	10323-20-3	150,1	-7046,6
xylitol	$C_5H_{12}O_5$	87-99-0	152,1	-7351,5
1,2-anhydro-3,4,5,6-alloinositol	$C_6H_{10}O_5$	23559-36-6	162,1	-5589,0
2-(diacétoxyméthyl)furane	$C_9H_{10}O_5$	613-75-2	198,2	-4451,2
benzoylcarboxypéroxyde phényl ester	$C_{14}H_{10}O_5$	962-16-3	258,2	-1877,8
benzoyl(cyclohexyloxy)carbonylpéroxyde	$C_{14}H_{16}O_5$	20666-86-8	264,3	-2805,8

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}
acide (E)-1-propène-1,2,3-tricarboxylique	$C_6H_6O_6$	4023-65-8	174,1	-7080,1
acide (Z)-1-propène-1,2,3-tricarboxylique	$C_6H_6O_6$	585-84-2	174,1	-7032,4
acide L-ascorbique	$C_6H_8O_6$	50-81-7	176,1	-6612,4
α-D-glucose	$C_6H_{12}O_6$	26655-34-5	180,2	-7067,8
L-sorbose	$C_6H_{12}O_6$	87-79-6	180,2	-7057,8
β-D-fructose	$C_6H_{12}O_6$	57-48-7	180,2	-7025,0
D-mannose	$C_6H_{12}O_6$	3458-28-4	180,2	-7010,6
α-D-galactose	$C_6H_{12}O_6$	3646-73-9	180,2	-7139,9
D-mannitol	$C_6H_{14}O_6$	69-65-8	182,2	-7339,8
galactitol	$C_6H_{14}O_6$	608-66-2	182,2	-7392,5
α-D-méthylglucopyranoside	$C_7H_{14}O_6$	97-30-3	194,2	-6351,2
β-D-méthylglucopyranoside	$C_7H_{14}O_6$	709-50-2	194,2	-6372,9
acide 1,2,3-benzènetricarboxylique	$C_9H_6O_6$	569-51-7	210,1	-5521,5
acide 1,2,4-benzènetricarboxylique	$C_9H_6O_6$	528-44-9	210,1	-5611,0
acide 1,3,5-benzènetricarboxylique	$C_9H_6O_6$	554-95-0	210,1	-5663,4
4-hydroxy-2H-pyran-3,3,5,5,(4H,6H)-tétraméthanol	$C_9H_{18}O_6$	4744-47-2	222,2	-5704,3
acide 1,3,5-benzènetricarboxylique triméthyl ester	$C_{12}H_{12}O_6$	2672-58-4	252,2	-4365,6
acide péroxydicarbonique dicyclohexyl ester	$C_{14}H_{22}O_6$	1561-49-5	286,3	-3850,6
acide 2-hydroxy-1,2,3-propanetricarboxylique	$C_6H_8O_7$	77-92-9	192,1	-8035,5
acide D-glutarique 1,4-lactone	$C_6H_8O_7$	389-36-6	192,1	-7473,3
acide D-glutarique 3,6-lactone	$C_6H_8O_7$	2782-04-9	192,1	-7482,2
α-D-glucose hydrate	$C_6H_{14}O_7$	16824-90-1	198,2	-7933,5
dipentaérythritol	$C_{10}H_{22}O_7$	126-58-9	254,3	-6183,4
acide citrique monohydrate	$C_6H_{10}O_8$	5949-29-1	210,1	-8744,2
acide 1,2,3,4-benzènetétracarboxylique	$C_{10}H_6O_8$	476-73-3	254,1	-6093,3
acide 1,2,3,5-benzènetétracarboxylique	$C_{10}H_6O_8$	479-47-0	254,1	-6147,2
acide 1,2,4,5-benzènetétracarboxylique	$C_{10}H_6O_8$	89-05-4	254,1	-6180,6
acide 1,2,4,5-benzènetétracarboxylique diméthyl ester	$C_{12}H_{10}O_8$	39900-53-3	282,2	-5228,5
acide 1,2,4,5-benzènetétracarboxylique tétraméthyl ester	$C_{14}H_{14}O_8$	635-10-9	310,3	-4617,2
acide 1,2,4,5-benzènetétracarboxylique diéthyl ester	$C_{14}H_{14}O_8$	50853-29-7	310,3	-5124,2
acide 1,2,4,5-benzènetétracarboxylique dipropyl ester	$C_{16}H_{18}O_8$	56941-72-1	338,3	-4860,0
acide 1,2,4,5-benzènetétracarboxylique tétraéthyl ester	$C_{18}H_{22}O_8$	6634-01-1	366,4	-4311,6
acide benzènepentacarboxylique	$C_{11}H_6O_{10}$	1585-40-6	298,2	-6472,0
acide benzènepentacarboxylique pentaméthyl ester	$C_{16}H_{16}O_{10}$	3327-06-8	368,3	-4855,1
D-sucrose	$C_{12}H_{22}O_{11}$	57-50-1	342,3	-6503,4
β-lactose	$C_{12}H_{22}O_{11}$	5965-66-2	342,3	-6534,4
α-D-glucose 2,3,4,5,6-pentaacétate	$C_{16}H_{22}O_{11}$	3891-59-6	390,3	-5762,7
acide benzènehexacarboxylique	$C_{12}H_6O_{12}$	517-60-2	342,2	-6718,0
β-maltose monohydrate	$C_{12}H_{24}O_{12}$	6363-53-7	360,3	-6826,3
α-lactose monohydrate	$C_{12}H_{24}O_{12}$	10639-26-6	360,3	-6894,3
acide benzènehexacarboxylique hexaméthyl ester	$C_{18}H_{18}O_{12}$	6237-59-8	426,3	-4951,1

Banque d'enthalpies standard de formation en phase solide concernant les 134 molécules $C_xH_yN_w$ étudiées dans le cadre de la démarche directe

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}
méthanetétracarbonitrile	C_5N_4	24331-09-7	116,1	5268,8
éthènetétracarbonitrile	C_6N_4	670-54-2	128,1	4870,0
quinuclidine	$C_7H_{13}N$	100-76-5	111,2	-494,7
indole	C_8H_7N	120-72-9	117,1	740,1
endo-bicyclo[2.2.1]heptane-2-carbonitrile	$C_8H_{11}N$	3211-87-8	121,2	167,5
3-azabicyclo[3.2.2]nonane	$C_8H_{15}N$	283-24-9	125,2	-810,6
3-éthyl-2,4,5-triméthyl-1H-pyrrole	$C_9H_{15}N$	520-69-4	137,2	-650,0
1-naphtylamine	$C_{10}H_9N$	134-32-7	143,2	472,8
2-naphtylamine	$C_{10}H_9N$	91-59-8	143,2	416,9
1-phényl-1H-pyrrole	$C_{10}H_9N$	635-90-5	143,2	1077,6
2-phényl-1H-pyrrole	$C_{10}H_9N$	3042-22-6	143,2	972,2
2,3-diméthyl-1H-indole	$C_{10}H_{11}N$	91-55-4	145,2	28,9
9H-carbazole	$C_{12}H_9N$	86-74-8	167,2	608,2
2-aminobiphényle	$C_{12}H_{11}N$	90-41-5	169,2	554,3
4-aminobiphényle	$C_{12}H_{11}N$	92-67-1	169,2	478,7
diphénylamine	$C_{12}H_{11}N$	122-39-4	169,2	769,4
acridine	$C_{13}H_9N$	260-94-6	179,2	1001,1
biphényl-2-carbonitrile	$C_{13}H_9N$	24973-49-7	179,2	1298,4
6,7-benzoquinoline	$C_{13}H_9N$	260-36-6	179,2	830,8
benzo[f]quinoline	$C_{13}H_9N$	85-02-9	179,2	840,3
benzo[h]quinoline	$C_{13}H_9N$	230-27-3	179,2	893,9
p-benzylidèneaniline	$C_{13}H_{11}N$	538-51-2	181,2	1020,8
9-méthyl-9H-carbazole	$C_{13}H_{11}N$	1484-12-4	181,2	582,1
4-méthyldiphénylamine	$C_{13}H_{13}N$	620-84-8	183,2	266,8
4,4'-diméthyldiphénylamine	$C_{14}H_{15}N$	620-93-9	197,3	-58,8
N-phényl-2-naphtylamine	$C_{16}H_{13}N$	135-88-6	219,3	729,2
5-méthyl-5H-indéno[2,1-b]quinoline	$C_{17}H_{13}N$	6626-64-8	231,3	888,1
N-benzyldiphénylamine	$C_{19}H_{17}N$	606-87-1	259,3	712,2
tribenzylamine	$C_{21}H_{21}N$	620-40-6	287,4	489,6
cyanamide	CH_2N_2	420-04-2	42,0	1398,7
malononitrile	$C_3H_2N_2$	109-77-3	66,1	2844,3
1H-pyrazole	$C_3H_4N_2$	288-13-1	68,1	1548,2
1H-imidazole	$C_3H_4N_2$	288-32-4	68,1	731,5
(E)-butènedinitrile	$C_4H_2N_2$	764-42-1	78,1	3435,3
pyrazine	$C_4H_4N_2$	290-37-9	80,1	1745,6
succinonitrile	$C_4H_4N_2$	110-61-2	80,1	1744,3
pipérazine	$C_4H_{10}N_2$	110-85-0	86,1	-485,3
2,3-diazabicyclo[2.2.1]hept-2-ène	$C_5H_8N_2$	2721-32-6	96,1	1581,2
3-pyridinecarbonitrile	$C_6H_4N_2$	100-54-9	104,1	1976,8
2-butyne-1,4-dicarbonitrile	$C_6H_4N_2$		104,1	3523,2
1,4-benzènediamine	$C_6H_8N_2$	106-50-3	108,1	28,7
1,2-benzènediamine	$C_6H_8N_2$	95-54-5	108,1	361,6
1,3-benzènediamine	$C_6H_8N_2$	108-45-2	108,1	-72,1
triéthylènediamine	$C_6H_{12}N_2$	280-57-9	112,2	251,4
tétraméthyldiazétine	$C_6H_{12}N_2$	54166-22-2	112,2	784,5
3,3,5,5-tétraméthyl-1-pyrazoline	$C_7H_{14}N_2$	2721-31-5	126,2	-177,5
phtalonitrile	$C_8H_4N_2$	91-15-6	128,1	2190,0
1,3-benzènedicarbonitrile	$C_8H_4N_2$	626-17-5	128,1	2126,7
1,4-benzènedicarbonitrile	$C_8H_4N_2$	623-26-7	128,1	2095,5
tétraméthylbutanedinitrile	$C_8H_{12}N_2$	3333-52-6	136,2	109,4
1,4-diméthyl-2,3-diaza-bicyclo[2.2.2]oct-2-ène	$C_8H_{14}N_2$	49570-30-1	138,2	147,6
Di-2-pyrrolylméthane	$C_9H_{10}N_2$	21211-65-4	146,2	863,3
phénazine	$C_{12}H_8N_2$	92-82-0	180,2	1353,5
benzo[c]cinnoline	$C_{12}H_8N_2$	230-17-1	180,2	1637,6
(E)-azobenzène	$C_{12}H_{10}N_2$	17082-12-1	182,2	1693,5

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}
(Z)-azobenzène	$C_{12}H_{10}N_2$	1080-16-6	182,2	1963,0
1,2-diphénylhydrazine	$C_{12}H_{12}N_2$	122-66-7	184,2	1201,2
4,4'-diaminobiphényle	$C_{12}H_{12}N_2$	92-87-5	184,2	383,7
2,2',5,5'-tétraméthyl-1,1'-bipyrrole	$C_{12}H_{16}N_2$	10507-71-8	188,3	702,7
9-aminoacridine	$C_{13}H_{10}N_2$	90-45-9	194,2	819,6
2-aminoacridine	$C_{13}H_{10}N_2$	581-28-2	194,2	856,7
N,N'-dibenzylidène-hydrazine	$C_{14}H_{12}N_2$	588-68-1	208,3	1629,2
dibenzylidène-1,2-éthylènediamine	$C_{16}H_{16}N_2$	104-71-2	236,3	1148,5
tétraphénylhydrazine	$C_{24}H_{20}N_2$	632-52-0	336,4	1361,1
guanidine	CH_5N_3	113-00-8	59,1	-948,0
éthylènetricarbonitrile	C_5HN_3	997-76-2	103,1	4261,7
1,1,1-éthanetricarbonitrile	$C_5H_3N_3$	10359-20-3	105,1	3316,9
2,6-pyridinediamine	$C_5H_7N_3$	141-86-6	109,1	-59,6
1H-benzotriazole	$C_6H_5N_3$	95-14-7	119,1	1985,3
1,1,1-tricyano-3-butyne	$C_7H_3N_3$	10359-26-9	129,1	4691,0
pyridinium dicyanométhylide	$C_8H_5N_3$	27032-01-5	143,1	2779,7
1H-naphto[2,3-d]triazole	$C_{10}H_7N_3$	269-12-5	169,2	1620,7
1H-naphto[1,2-d]triazole	$C_{10}H_7N_3$	233-59-0	169,2	1539,8
1,3-diphényltriazène	$C_{12}H_{11}N_3$	136-35-6	197,2	1681,2
3,6-diaminoacridine	$C_{13}H_{11}N_3$	92-62-6	209,2	607,9
1H-tétrazole	CH_2N_4	288-94-8	70,1	3369,1
dicyandiamide	$C_2H_4N_4$	461-58-5	84,1	253,3
1H-1,2,4-triazole-3-amine	$C_2H_4N_4$	61-82-5	84,1	913,4
1,5-diméthyltétrazole	$C_3H_6N_4$	5144-11-6	98,1	1897,8
hexaméthylènetétramine	$C_6H_{12}N_4$	100-97-0	140,2	885,3
1,1,2,2-cyclopropane-tétracarbonitrile	$C_7H_2N_4$	2424-32-0	142,1	4163,5
1-phényl-1H-tétrazole	$C_7H_6N_4$	5378-52-9	146,1	2359,0
5-phényl-1H-tétrazole	$C_7H_6N_4$	18039-42-4	146,1	2039,0
1-phényl-5-méthyl-1H-tétrazole	$C_8H_8N_4$	14213-16-2	160,2	1807,4
1-méthyl-5-phényl-1H-tétrazole	$C_8H_8N_4$	20743-50-4	160,2	1825,5
2-phényl-5-méthyl-2H-tétrazole	$C_8H_8N_4$	22706-20-3	160,2	1715,6
2,2'-azo-bis-isobutyronitrile	$C_8H_{12}N_4$	78-67-1	164,2	1498,1
1,2-bis(2-cyano-2-propyl)-hydrazine	$C_8H_{14}N_4$	6869-07-4	166,2	719,5
1,4,8,11-tétraazacyclotétradécane	$C_{10}H_{24}N_4$	295-37-4	200,3	-578,6
bicyclo[2.2.1]hept-5-ène-2,2,3,3-tétracarbonitrile	$C_{11}H_6N_4$	6343-21-1	194,2	3207,1
3-méthyl-4-cyclohexène-1,1,2,2-tétracarbonitrile	$C_{11}H_8N_4$	13358-02-6	196,2	2623,2
tétracyano-p-quinodiméthane	$C_{12}H_4N_4$	1518-16-7	204,2	3262,2
bicyclo[2.2.2]oct-5-ène-2,2,3,3-tétracarbonitrile	$C_{12}H_8N_4$	1017-93-2	208,2	2766,8
4,5-diméthyl-4-cyclohexène-1,1,2,2-tétracarbonitrile	$C_{12}H_{10}N_4$	69155-29-9	210,2	2247,0
1,3-diphényl-1-tétrazène	$C_{12}H_{12}N_4$	35364-31-9	212,3	1941,6
1,5-diphényl-1H-tétrazole	$C_{13}H_{10}N_4$	7477-73-8	222,2	1830,8
2,5-diphényl-2H-tétrazole	$C_{13}H_{10}N_4$	18039-45-7	222,2	1778,7
1,5-diphénylformazane	$C_{13}H_{12}N_4$	1885-34-3	224,3	2041,8
1,3,5-triphénylformazane	$C_{19}H_{16}N_4$	531-52-2	300,4	1808,2
9,10-dihydro-9,10-éthanoanthracène-11,11,12,12-tétracarbonitrile	$C_{20}H_{10}N_4$	1625-84-9	306,3	2326,0
21H,23H-porphine	$C_{20}H_{14}N_4$	101-60-0	310,4	-3566,6
2,7,12,17-tétraéthyl-3,8,13,18-tétraméthyl-21H,23H-porphine	$C_{32}H_{38}N_4$	448-71-5	478,7	-52,6
2,8,12,18-tétraéthyl-3,7,13,18-tétraméthyl-21H,23H-porphine	$C_{32}H_{38}N_4$	448-70-4	478,7	3,3
2,3,7,8,12,13,17,18-octaéthyl-21H,23H-porphine	$C_{36}H_{46}N_4$	2683-82-1	534,8	-342,6
5-amino-1H-tétrazole	CH_3N_5	4418-61-5	85,1	2459,2
5-cyano-1H-tétrazole	C_2HN_5	74418-40-9	95,1	4228,8
1-méthyl-5-aminotétrazole	$C_2H_5N_5$	5422-44-6	99,1	1838,6
5-amino-2-méthyl-2H-tétrazole	$C_2H_5N_5$	6154-04-7	99,1	2086,9
5-méthylamino-1H-tétrazole	$C_2H_5N_5$	53010-03-0	99,1	2043,5
1-méthyl-5-méthylaminotétrazole	$C_3H_7N_5$	17267-51-5	113,1	1769,8
5-(diméthylamino)-tétrazole	$C_3H_7N_5$	5422-45-7	113,1	1614,2
5-amino-1-(2-propényl)-1H-tétrazole	$C_4H_7N_5$	74999-22-7	125,1	2121,0

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}
5-amino-2-(2-propényl)-2H-tétrazole	$C_4H_7N_5$	74999-26-1	125,1	2260,8
adénine	$C_5H_5N_5$	73-24-5	135,1	717,1
5-amino-1-phényl-1H-tétrazole	$C_7H_7N_5$	5467-78-7	161,2	1929,7
1-amino-5-phényl-1H-tétrazole	$C_7H_7N_5$	23579-46-6	161,2	1893,1
1-(2-propényl)-5-(2-propénylamino)tétrazole	$C_7H_{11}N_5$	66907-70-8	165,2	2119,9
5-(di(2-propényl)amino)-1H-tétrazole	$C_7H_{11}N_5$	6280-33-7	165,2	2125,4
benzal-3-hydrazino-5-méthyl-1,2,4-triazole	$C_{10}H_{11}N_5$	87123-46-4	201,2	1282,1
mélamine	$C_3H_6N_6$	108-78-1	126,1	-690,4
N'-(5-tétrazolyl)-benzalhydrazone	$C_8H_8N_6$	10444-59-4	188,2	2434,3
benzal-5-hydrazinotétrazole	$C_8H_8N_6$	108480-28-0	188,2	2343,4
3-hexyne-1,1,1,6,6,6-hexacarbonitrile	$C_{12}H_4N_6$	10350-89-7	232,2	4313,1
3-hexène-1,1,1,6,6,6-hexacarbonitrile	$C_{12}H_6N_6$		234,2	3575,3
3,5-octadiyne-1,1,1,8,8,8-hexacarbonitrile	$C_{14}H_4N_6$	10350-90-0	256,2	4756,0
1-(1H-tétrazol-5-yl)-guanidine	$C_2H_5N_7$	66591-60-4	127,1	1066,5
5,5'-bitétrazole	$C_2H_2N_8$	2783-98-4	138,1	3851,0
1,2-bis-(5-tétrazolyl)-éthane	$C_4H_6N_8$	26670-16-6	166,1	2674,8
5,5'-hydrazotétrazole	$C_2H_4N_{10}$	74999-19-2	168,1	3364,3
cis-1,1'-diméthyl-5,5'-azotétrazole	$C_4H_6N_{10}$	41463-68-7	194,2	3728,1
trans-1,1'-diméthyl-5,5'-azotétrazole	$C_4H_6N_{10}$	74999-23-8	194,2	4080,2
2,2'-diméthyl-5,5'-azotétrazole	$C_4H_6N_{10}$	41463-69-8	194,2	3886,5
2,5,8-triamino-1,3,4,6,7,9,9b-heptaazaphénalène	$C_6H_6N_{10}$	1502-47-2	218,2	72,0
2,2'-diéthyl-5,5'-azotétrazole	$C_6H_{10}N_{10}$	74999-25-0	222,2	2949,0

Banque d'enthalpies standard de formation en phase solide concernant les 487 molécules $C_xH_yN_wO_z$ étudiées dans le cadre de la démarche directe

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_fH°_{s,m}$ (litt.)
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}
3,4-dicyano-1,2,4-oxadiazole	C_4N_4O	55644-07-0	120,1	3798,6
3,4-dicyanofuroxane	$C_4N_4O_2$	17557-81-2	136,1	3419,3
trinitroacétonitrile	$C_2N_4O_6$	630-72-8	176,0	989,0
3-cyano-5-(cyanofurazanyl)-1,2,4-oxadiazole N-oxyde	$C_6N_6O_3$	56092-91-2	204,1	2769,2
benzotrifuroxane	$C_6N_6O_6$	3470-17-5	252,1	2489,5
hexanitroéthane	$C_2N_6O_{12}$	918-37-6	300,1	265,0
acétamide	C_2H_5NO	60-35-5	59,1	-5343,1
propanamide	C_3H_7NO	79-05-0	73,1	-4626,9
butanamide	C_4H_9NO	541-35-5	87,1	-4182,7
1H-pyrrole-2-carboxaldéhyde	C_5H_5NO	1003-29-8	95,1	-1118,8
2-pyridinol	C_5H_5NO	72762-00-6	95,1	-1748,7
3-pyridinol	C_5H_5NO	109-00-2	95,1	-1388,0
4-pyridinol	C_5H_5NO	626-64-2	95,1	-1565,7
2-pipéridone	C_5H_9NO	675-20-7	99,1	-3092,9
pentanamide	$C_5H_{11}NO$	626-97-1	101,1	-3752,0
2-méthyl-3-hydroxypyridine	C_6H_7NO	1121-25-1	109,1	-1590,8
2-méthyl-4-hydroxypyridine	C_6H_7NO	18615-86-6	109,1	-1692,5
2-méthyl-5-hydroxypyridine	C_6H_7NO	1121-78-4	109,1	-1521,2
2-méthyl-6-hydroxypyridine	C_6H_7NO	3279-76-3	109,1	-1945,5
2-hexynamide	C_6H_9NO	62155-28-6	111,1	-1060,8
ε-caprolactame	$C_6H_{11}NO$	105-60-2	113,2	-2911,0
hexanamide	$C_6H_{13}NO$	628-02-4	115,2	-3672,7
benzamide	C_7H_7NO	55-21-0	121,1	-1668,7
2-amino-2,4,6-cycloheptatrièn-1-one	C_7H_7NO	33504-43-7	121,1	-260,9
hexahydro-5-méthyl-2H-azépin-2-one	$C_7H_{13}NO$	2210-07-3	127,2	-2862,0

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}
hexahydro-7-méthyl-2H-azépin-2-one	$C_7H_{13}NO$	1985-48-4	127,2	-2848,6
hexahydro-2(1H)-azocinone	$C_7H_{13}NO$	673-66-5	127,2	-2740,1
α-oxobenzèneacétonitrile	C_8H_5NO	613-90-1	131,1	296,6
N-phénylacétamide	C_8H_9NO	103-84-4	135,2	-1550,7
1-(4-aminophényl)éthanone	C_8H_9NO	99-92-3	135,2	-1347,3
1-(3-aminophényl)éthanone	C_8H_9NO	99-03-6	135,2	-1282,2
octanamide	$C_8H_{17}NO$	629-01-6	143,2	-3303,9
5-phénylisoxazole	C_9H_7NO	1006-67-3	145,2	554,6
8-quinolinol	C_9H_7NO	148-24-3	145,2	-571,8
β-oxobenzènepropanenitrile	C_9H_7NO	614-16-4	145,2	-153,6
4-(diméthylamino)-benzaldéhyde	$C_9H_{11}NO$	100-10-7	149,2	-917,1
4-éthyl-3,5-diméthyl-1H-pyrrole-2-carboxaldéhyde	$C_9H_{13}NO$	6250-80-2	151,2	-1685,1
2,2,6,6-tétraméthyl-4-pipéridinone	$C_9H_{17}NO$	826-36-8	155,2	-2152,8
N-butylpentanamide	$C_9H_{19}NO$	2763-67-9	157,3	-2957,6
3-méthyl-5-phénylisoxazole	$C_{10}H_9NO$	1008-75-9	159,2	115,0
3-phényl-5-méthylisoxazole	$C_{10}H_9NO$	1008-74-8	159,2	86,1
β-cyanopropiophénone	$C_{10}H_9NO$	5343-98-6	159,2	-448,5
2-méthyl-1',2'-naphtoxazole	$C_{12}H_9NO$	85-15-4	183,2	-478,2
2-méthylnapht[2,3-d]oxazole	$C_{12}H_9NO$	20686-66-2	183,2	-286,0
N,N-diphénylacétamide	$C_{14}H_{13}NO$	519-87-9	211,3	-203,1
N-acétyl-N-cyclohexyl-phénylamine	$C_{14}H_{19}NO$	5769-11-9	217,3	-1380,5
3,5-diphénylisoxazole	$C_{15}H_{11}NO$	2039-49-8	221,3	654,5
glycine	$C_2H_5NO_2$	56-40-6	75,1	-7028,4
N-méthylglycine	$C_3H_7NO_2$	107-97-1	89,1	-5761,4
L-alanine	$C_3H_7NO_2$	56-41-7	89,1	-6293,0
DL-alanine	$C_3H_7NO_2$	302-72-7	89,1	-6326,0
D-alanine	$C_3H_7NO_2$	338-69-2	89,1	-6299,0

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}
succinimide	$C_4H_5NO_2$	123-56-8	99,1	-4644,8
acide 4-aminobutanoïque	$C_4H_9NO_2$	56-12-2	103,1	-5604,2
n-propylcarbamate	$C_4H_9NO_2$	627-12-3	103,1	-5358,8
2-méthyl-2-nitropropane	$C_4H_9NO_2$	594-70-7	103,1	-2228,5
DL-proline	$C_5H_9NO_2$	609-36-9	115,1	-4553,1
L-proline	$C_5H_9NO_2$	147-85-3	115,1	-4408,2
acide 5-aminopentanoïque	$C_5H_{11}NO_2$	660-88-8	117,1	-5156,8
L-valine	$C_5H_{11}NO_2$	72-18-4	117,1	-5247,4
acide 3-pyridinecarboxylique	$C_6H_5NO_2$	59-67-6	123,1	-2801,6
L-leucine	$C_6H_{13}NO_2$	61-90-5	131,2	-4859,2
DL-leucine	$C_6H_{13}NO_2$	328-39-2	131,2	-4883,6
D-leucine	$C_6H_{13}NO_2$	328-38-1	131,2	-4858,5
L-isoleucine	$C_6H_{13}NO_2$	73-32-5	131,2	-4884,0
DL-isoleucine	$C_6H_{13}NO_2$	443-79-8	131,2	-4841,9
acide 2-aminohexanoïque	$C_6H_{13}NO_2$	616-06-8	131,2	-4872,2
acide 4-aminohexanoïque	$C_6H_{13}NO_2$	5415-99-6	131,2	-4926,3
acide 5-aminohexanoïque	$C_6H_{13}NO_2$	628-47-7	131,2	-4904,2
acide 6-aminohexanoïque	$C_6H_{13}NO_2$	60-32-2	131,2	-4858,9
2-hydroxybenzaldoxime	$C_7H_7NO_2$	94-67-7	137,1	-1339,5
acide 2-aminobenzoïque	$C_7H_7NO_2$	118-92-3	137,1	-2923,4
acide 3-aminobenzoïque	$C_7H_7NO_2$	99-05-8	137,1	-3001,4
acide 4-aminobenzoïque	$C_7H_7NO_2$	150-13-0	137,1	-3010,2
1-méthyl-4-nitrobenzène	$C_7H_7NO_2$	99-99-0	137,1	-350,7
éthylméthyl maléimide	$C_7H_9NO_2$	29720-92-1	139,2	-3375,4
acide 7-aminoheptanoïque	$C_7H_{15}NO_2$	929-17-9	145,2	-4596,4
1H-indole-2,3-dione	$C_8H_5NO_2$	91-56-5	147,1	-1783,0
1-nitro-2-phényléthène	$C_8H_7NO_2$	102-96-5	149,1	204,5

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}
méthyl phénylcarbamate	$C_8H_9NO_2$	2603-10-3	151,2	-1235,1
acide 2-méthyl-1H-pyrrole-3-carboxylique éthyl ester	$C_8H_{11}NO_2$	936-12-9	153,2	-2683,1
acide 2,4-diméthyl-1H-pyrrole-3-carboxylique méthyl ester	$C_8H_{11}NO_2$	52459-90-2	153,2	-2756,9
acide 2,4-diméthyl-1H-pyrrole-5-carboxylique méthyl ester	$C_8H_{11}NO_2$	74999-36-3	153,2	-2756,9
2-nitro-1-phénylpropène	$C_9H_9NO_2$	705-60-2	163,2	-94,4
L-phénylalanine	$C_9H_{11}NO_2$	63-91-2	165,2	-2826,5
DL-phénylalanine	$C_9H_{11}NO_2$	150-30-1	165,2	-2788,3
acide 4-aminobenzoïque éthyl ester	$C_9H_{11}NO_2$	94-09-7	165,2	-2529,8
acide 2,5-diméthyl-1H-pyrrole-3-carboxylique éthyl ester	$C_9H_{13}NO_2$	2199-52-2	167,2	-2863,0
acide 3,5-diméthyl-1H-pyrrole-2-carboxylique éthyl ester	$C_9H_{13}NO_2$	2199-44-2	167,2	-2837,8
acide 4,5-diméthyl-1H-pyrrole-3-carboxylique éthyl ester	$C_9H_{13}NO_2$	2199-53-3	167,2	-2812,7
acide 2,4-diméthyl-1H-pyrrole-3-carboxylique éthyl ester	$C_9H_{13}NO_2$	2199-51-1	167,2	-2770,3
acide 4,5-diméthyl-1H-pyrrole-2-carboxylique éthyl ester	$C_9H_{13}NO_2$	2199-45-3	167,2	-2687,7
2,2,6,6-tétraméthyl-4-oxo-1-pipéridinyloxy	$C_9H_{16}NO_2$	2896-70-0	170,2	-1753,5
1-hydroxy-2,2,6,6-tétraméthyl-4-pipéridinone	$C_9H_{17}NO_2$	3637-11-4	171,2	-2208,1
2,2,6,6-tétraméthyl-4-hydroxypipéridine-1-oxyde	$C_9H_{18}NO_2$	2226-96-2	172,2	-2279,3
1-hydroxy-2,2,6,6-tétraméthyl-4-pipéridinol	$C_9H_{19}NO_2$	3637-10-3	173,3	-2571,4
acide 9-aminononanoïque	$C_9H_{19}NO_2$	1120-12-3	173,3	-4200,8
1-nitronaphtalène	$C_{10}H_7NO_2$	86-57-7	173,2	246,0
4-nitroso-1-naphtol	$C_{10}H_7NO_2$	605-60-7	173,2	-622,5
2-nitroso-1-naphtol	$C_{10}H_7NO_2$	132-53-6	173,2	-356,9
1-nitroso-2-naphtol	$C_{10}H_7NO_2$	131-91-9	173,2	-291,6
N,N-diacétylaniline	$C_{10}H_{11}NO_2$	1563-87-7	177,2	-2046,3
acide phénylcarbamique isopropyl ester	$C_{10}H_{13}NO_2$	122-42-9	179,2	-2466,9
acide 2,4,5-triméthyl-1H-pyrrole-3-carboxylique éthyl ester	$C_{10}H_{15}NO_2$	2199-54-4	181,2	-2702,6
acide phénylcarbamique butyl ester	$C_{11}H_{15}NO_2$	1538-74-5	193,2	-2046,7
acide 3,5-diméthyl-4-vinyl-1H-pyrrole-2-carboxylique éthyl ester	$C_{11}H_{15}NO_2$	25894-11-5	193,2	-2445,1

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}
acide 3,5-diméthyl-4-éthyl-1H-pyrrole-2-carboxylique éthyl ester	$C_{11}H_{17}NO_2$	2199-47-5	195,3	-2734,8
3-nitrobiphényle	$C_{12}H_9NO_2$	2113-58-8	199,2	326,8
4-nitrobiphényle	$C_{12}H_9NO_2$	92-93-3	199,2	203,3
acide 3,5-diméthyl-4-propyl-1H-pyrrole-2-carboxylique éthyl ester	$C_{12}H_{19}NO_2$	4758-64-9	209,3	-2718,8
cis-4-nitrostilbène	$C_{14}H_{11}NO_2$	6624-53-9	225,2	586,0
trans-4-nitrostilbène	$C_{14}H_{11}NO_2$	1694-20-8	225,2	456,0
éthyl-N,N-diphénylcarbamate	$C_{15}H_{15}NO_2$	603-52-1	241,3	-1164,2
N,N-diphénylacétoacétamide	$C_{16}H_{15}NO_2$	2540-31-0	253,3	-899,7
acide 3-N-phénylamino-2-naphtoïque	$C_{17}H_{13}NO_2$	6973-58-6	263,3	-1001,2
1-nitro-2-propanone	$C_3H_5NO_3$	10230-68-9	103,1	-2859,0
L-serine	$C_3H_7NO_3$	56-45-1	105,1	-6971,9
2-nitrofurane	$C_4H_3NO_3$	609-39-2	113,1	-920,7
3-méthyl-2,5-oxazolidine-dione	$C_4H_5NO_3$	5840-76-6	115,1	-5216,9
2-méthyl-2-nitro-1-propanol	$C_4H_9NO_3$	76-39-1	119,1	-3442,8
L-thréonine	$C_4H_9NO_3$	72-19-5	119,1	-6517,0
DL-thréonine	$C_4H_9NO_3$	80-68-2	119,1	-6370,1
2-amino-2-(hydroxyméthyl)-1,3-propanediol	$C_4H_{11}NO_3$	77-86-1	121,1	-5925,6
1-hydroxy-L-proline	$C_5H_9NO_3$	18610-59-8	131,1	-5041,6
acide 4-hydroxy-5-méthyl-1H-pyrrole-3-carboxylique éthyl ester	$C_8H_{11}NO_3$	74999-30-7	169,2	-3616,9
N-benzoylglycine	$C_9H_9NO_3$	495-69-2	179,2	-3397,8
L-tyrosine	$C_9H_{11}NO_3$	60-18-4	181,2	-3781,1
acide 2,4-diméthyl-5-hydroxy-1H-pyrrole-3-carboxylique éthyl ester	$C_9H_{13}NO_3$	74999-31-8	183,2	-3736,3
4-benzyl-2,5-oxazolidinedione	$C_{10}H_9NO_3$	1892-35-9	191,2	-2889,4
2-méthyl-2-nitro-1-phényl-1-propanol	$C_{10}H_{13}NO_3$	33687-74-0	195,2	-1623,8
2-méthyl-2-nitro-3-phényl-1-propanol	$C_{10}H_{13}NO_3$	62030-36-8	195,2	-1780,1
acide 4-formyl-3,5-diméthyl-1H-pyrrole-2-carboxylique éthyl ester	$C_{10}H_{13}NO_3$	2199-64-6	195,2	-3282,5
acide 5-formyl-2,4-diméthyl-1H-pyrrole-3-carboxylique éthyl ester	$C_{10}H_{13}NO_3$	2199-59-9	195,2	-3308,1

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}
acide 4-acétyl-3,5-diméthyl-1H-pyrrole-2-carboxylique éthyl ester	$C_{11}H_{15}NO_3$	2386-26-7	209,2	-3128,0
acide 3,5-diméthyl-4-(1-oxopropyl)-1H-pyrrole-2-carboxylique éthyl ester	$C_{12}H_{17}NO_3$	40484-82-0	223,3	-3043,0
acide 2,4-diméthyl-5-(1-oxopropyl)-1H-pyrrole-3-carboxylique éthyl ester	$C_{12}H_{17}NO_3$	78956-69-1	223,3	-3052,4
acide aspartique	$C_4H_7NO_4$	56-84-8	133,1	-7312,4
2-méthyl-2-nitro-1,3-propanediol	$C_4H_9NO_4$	77-49-6	135,1	-4251,1
5-nitro-2-furancarboxaldéhyde	$C_5H_3NO_4$	698-63-5	141,1	-1608,3
acide L-glutamique	$C_5H_9NO_4$	56-86-0	147,1	-6819,3
acide D-glutamique	$C_5H_9NO_4$	6893-26-1	147,1	-6813,7
2-éthyl-2-nitro-1,3-propanediol	$C_5H_{11}NO_4$	597-09-1	149,1	-4065,8
2-nitro-2-propyl-1,3-propanediol	$C_6H_{13}NO_4$	5638-92-6	163,2	-3831,5
2-isopropyl-2-nitro-1,3-propanediol	$C_6H_{13}NO_4$	62155-31-1	163,2	-3818,1
acide 2-nitrobenzoïque	$C_7H_5NO_4$	552-16-9	167,1	-2384,5
acide 3-nitrobenzoïque	$C_7H_5NO_4$	121-92-6	167,1	-2477,3
acide 4-nitrobenzoïque	$C_7H_5NO_4$	62-23-7	167,1	-2554,5
3-(5-nitro-2-furyl)-2-propénal	$C_7H_5NO_4$	1874-22-2	167,1	-973,9
acide 3,5-diméthyl-1H-pyrrole-2,4-dicarboxylique 4-méthyl ester	$C_9H_{11}NO_4$	50296-60-1	197,2	-4269,0
acide 3,5-diméthyl-1H-pyrrole-2,4-dicarboxylique diméthyl ester	$C_{10}H_{13}NO_4$	5448-17-9	211,2	-4006,8
acide 5-carbométhoxy-2,4-diméthyl-1H-pyrrole-3-acrylique	$C_{11}H_{13}NO_4$		223,2	-3621,5
acide phénylalanine-N-carboxylique diméthyl ester	$C_{12}H_{15}NO_4$	70288-75-4	237,3	-3230,3
acide 3,5-diméthyl-2-carboxy-1H-pyrrole-4-propanoïque diméthyl ester	$C_{12}H_{17}NO_4$	16132-20-0	239,3	-3551,3
acide 3,5-diméthyl-1H-pyrrole-2,4-dicarboxylique diéthyl ester	$C_{12}H_{17}NO_4$	2436-79-5	239,3	-3831,3
acide 2,4-diméthyl-5-carboxy-1H-pyrrole-3-propanoïque 5-éthyl ester	$C_{12}H_{17}NO_4$	37789-64-3	239,3	-3911,5
2-(hydroxyméthyl)-2-nitro-1,3-propanediol	$C_4H_9NO_5$	126-11-4	151,1	-4867,1
acide 5-nitrofuran-2-carboxylique	$C_5H_3NO_5$	645-12-5	157,1	-3292,2
acide 5-nitro-2-furancarboxylique méthyl ester	$C_6H_5NO_5$	1874-23-3	171,1	-2753,2
acide 5-(hydroxyméthyl)-3-méthyl-1H-pyrrole-2,4-dicarboxylique diéthyl ester	$C_{12}H_{17}NO_5$	5422-89-9	255,3	-4143,5
acide 2,4-diméthyl-5-carboxy-α-oxo-1H-pyrrole-3-oxoacétique diéthyl ester	$C_{13}H_{17}NO_5$	21898-53-3	267,3	-3798,3

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}
acide 3-méthyl-5-(1-hydroxyéthyl)-1H-pyrrole-2,4-dicarboxylique diéthyl ester	$C_{13}H_{19}NO_5$	74999-34-1	269,3	-4217,7
acide 3-méthyl-5-(1-hydroxypropyl)-1H-pyrrole-2,4-dicarboxylique diéthyl ester	$C_{14}H_{21}NO_5$		283,3	-3828,2
acide 5-carbéthoxy-2,4-diméthyl-1H-pyrrole-3-méthylmalonique diéthyl ester	$C_{17}H_{25}NO_6$		339,4	-4132,5
acide 5-nitro-2-acétoxy-2,5-dihydro-2-furancarboxylique méthyl ester	$C_8H_9NO_7$	22401-53-2	231,2	-3977,3
2-(diacétoxyméthyl)-5-nitrofurane	$C_9H_9NO_7$	92-55-7	243,2	-3692,1
2-(3,3-diacétoxypropényl)-5-nitrofurane	$C_{11}H_{11}NO_7$	1874-14-2	269,2	-3240,3
2-acétoxy-2-bis(acétoxy)méthyl-2,5-dihydro-5-nitrofurane	$C_{11}H_{13}NO_9$		303,2	-4531,7
urée	CH_4N_2O	57-13-6	60,1	-5546,7
1,3-diazétidin-2-one	$C_2H_4N_2O$	5265-50-9	72,1	-4538,9
3-amino-5-méthylisoxazole	$C_4H_6N_2O$	1072-67-9	98,1	-629,9
triméthylurée	$C_4H_{10}N_2O$	632-14-4	102,1	-3235,9
1-acétyl-1H-imidazole	$C_5H_6N_2O$	2466-76-4	110,1	-1086,1
1H-pyrrole-2-carboxaldéhyde oxime	$C_5H_6N_2O$	32597-34-5	110,1	109,9
5-amino-3,4-diméthylisoxazole	$C_5H_8N_2O$	19947-75-2	112,1	-737,5
1,2,3-benzoxadiazole	$C_6H_4N_2O$	273-59-6	120,1	1963,2
2-(diéthylamino)acétamide	$C_6H_{14}N_2O$	7409-48-5	130,2	-2699,9
phénylfurazane	$C_8H_6N_2O$	10349-06-1	146,1	1627,8
3-méthyl-4-phénylfurazane	$C_9H_8N_2O$	10349-09-4	160,2	1172,5
benzyl-1,2,4-oxadiazole	$C_9H_8N_2O$	37216-04-9	160,2	232,2
3-méthyl-5-phényl-1,2,4-oxadiazole	$C_9H_8N_2O$	1199-00-4	160,2	644,9
5-méthyl-3-phényl-1,2,4-oxadiazole	$C_9H_8N_2O$	1198-98-7	160,2	608,1
2,2'-carbonylbis-(1H-pyrrole)	$C_9H_8N_2O$	15770-21-5	160,2	-157,3
N,N'-diméthyl-N-phénylurée	$C_9H_{12}N_2O$	938-91-0	164,2	-1326,4
N'-éthyl-N-méthyl-N-phénylurée	$C_{10}H_{14}N_2O$	52073-04-8	178,2	-1709,6
4-nitroso-diphénylamine	$C_{12}H_{10}N_2O$	156-10-5	198,2	1075,1
N-nitroso-diphénylamine	$C_{12}H_{10}N_2O$	86-30-6	198,2	1146,2

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}
N,N-diphénylurée	$C_{13}H_{12}N_2O$	603-54-3	212,2	-578,1
tétrahydrocarbazole urée	$C_{13}H_{14}N_2O$	67242-61-9	214,3	-5025,6
diphénylfurazane	$C_{14}H_{10}N_2O$	19768-02-6	222,2	1479,9
3,5-diphényl-1,2,4-oxadiazole	$C_{14}H_{10}N_2O$	888-71-1	222,2	931,9
2,5-diphényl-1,3,4-oxadiazole	$C_{14}H_{10}N_2O$	725-12-2	222,2	743,8
N,N-diphényl-N'-méthylurée	$C_{14}H_{14}N_2O$	13114-72-2	226,3	-472,0
acide acétique 1,2-diphénylhydrazide	$C_{14}H_{14}N_2O$	22293-38-5	226,3	-49,5
4-acétamidobiphényle	$C_{14}H_{14}N_2O$	3366-61-8	226,3	-709,8
N,N'-diméthyl-N,N'-diphénylurée	$C_{15}H_{16}N_2O$	611-92-7	240,3	-304,2
N,N-diphényl-N'-éthylurée	$C_{15}H_{16}N_2O$	18168-01-9	240,3	-635,0
N,N'-diheptylurée	$C_{15}H_{32}N_2O$	1798-20-5	256,4	-2445,9
N,N-diphényl-N'-allylurée	$C_{16}H_{16}N_2O$	101279-92-9	252,3	-153,4
N-éthyl-N'-méthyl-N,N'-diphénylurée	$C_{16}H_{18}N_2O$	4474-03-7	254,3	-497,8
N,N'-diéthyl-N,N'-diphénylurée	$C_{17}H_{20}N_2O$	85-98-3	268,4	-559,7
2,2',4,4'-tétraméthyl-3,3'-diéthyldipyrryl cétone	$C_{17}H_{24}N_2O$	13228-22-3	272,4	-931,8
N,N'-dioctylurée	$C_{17}H_{36}N_2O$	1943-08-4	284,5	-2514,1
N-pipéridyl-N,N'-diphénylformamide	$C_{18}H_{20}N_2O$	75534-73-5	280,4	-385,9
N,N'-didécylurée	$C_{21}H_{44}N_2O$	1943-09-5	340,6	-2576,1
N'-(2-naphtyl)-N,N-diphénylurée	$C_{23}H_{18}N_2O$	112322-16-4	338,4	189,1
N'-(1-naphtyl)-N,N-diphénylurée	$C_{23}H_{18}N_2O$	60302-02-5	338,4	231,1
oxamide	$C_2H_4N_2O_2$	471-46-5	88,1	-5667,9
glyoxime	$C_2H_4N_2O_2$	557-30-2	88,1	-1007,2
N-nitrodiméthylamine	$C_2H_6N_2O_2$	4164-28-7	90,1	-832,8
propanediamide	$C_3H_6N_2O_2$	108-13-4	102,1	-5316,7
méthylglyoxime	$C_3H_6N_2O_2$	1804-15-5	102,1	-1241,0
uracile	$C_4H_4N_2O_2$	66-22-8	112,1	-3831,0
5-méthyl-2,4-imidazolidinedione	$C_4H_6N_2O_2$	616-03-5	114,1	-4264,6

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}
2,5-pipérazinedione	$C_4H_6N_2O_2$	106-57-0	114,1	-3913,1
butanediamide	$C_4H_8N_2O_2$	110-14-5	116,1	-5005,2
2,3-butanedione dioxime	$C_4H_8N_2O_2$	95-45-4	116,1	-1532,1
5-méthyluracile	$C_5H_6N_2O_2$	65-71-4	126,1	-3669,7
5,5-diméthyl-2,4-imidazolidinedione	$C_5H_8N_2O_2$	77-71-4	128,1	-4162,2
DL-ornithine	$C_5H_{12}N_2O_2$	616-07-9	132,2	-4937,9
2-nitroaniline	$C_6H_6N_2O_2$	88-74-4	138,1	-189,0
3-nitroaniline	$C_6H_6N_2O_2$	99-09-2	138,1	-247,5
4-nitroaniline	$C_6H_6N_2O_2$	100-01-6	138,1	-304,1
DL-5-éthyl-5-méthyl-2,4-imidazolidinedione	$C_6H_{10}N_2O_2$	16820-12-5	142,2	-3982,3
DL-lysine	$C_6H_{14}N_2O_2$	70-54-2	146,2	-4642,7
2-méthyl-5-nitroaniline	$C_7H_8N_2O_2$	99-55-8	152,2	-600,1
4-méthyl-3-nitroaniline	$C_7H_8N_2O_2$	119-32-4	152,2	-471,2
3-isopropyl-2,5-pipérazinedione	$C_7H_{12}N_2O_2$	14771-77-8	156,2	-3220,0
3-phényl-1,2,4-oxadiazol-5(4H)-one	$C_8H_6N_2O_2$	1456-22-0	162,1	-674,7
5-phényl-1,2,4-oxadiazol-3(2H)-one	$C_8H_6N_2O_2$	21084-84-4	162,1	-27,1
α-phénylglyoxime	$C_8H_8N_2O_2$	4589-97-3	164,2	258,3
β-phénylglyoxime	$C_8H_8N_2O_2$	4589-97-3	164,2	-124,3
1,4-benzènedicarboxamide	$C_8H_8N_2O_2$	3010-82-0	164,2	-2638,3
1,3-benzènedicarboxamide	$C_8H_8N_2O_2$	1740-57-4	164,2	-2661,4
3-isopropyl-6-méthyl-2,5-pipérazinedione	$C_8H_{14}N_2O_2$	15136-26-2	170,2	-3021,6
α-(4-méthylphényl)-glyoxime	$C_9H_{10}N_2O_2$		178,2	-234,8
β-(4-méthylphényl)-glyoxime	$C_9H_{10}N_2O_2$		178,2	140,9
N-(4-éthoxyphényl)urée	$C_9H_{12}N_2O_2$	150-69-6	180,2	-2601,5
N-(3-éthoxyphényl)urée	$C_9H_{12}N_2O_2$	13142-86-4	180,2	-2383,4
2,6-diméthylbenzo-[1,2-d,5,4-d]bisoxazole	$C_{10}H_8N_2O_2$	55850-41-4	188,2	-1129,2
2,7-diméthylbenzo-[1,2-d,3,4-d]bisoxazole	$C_{10}H_8N_2O_2$	53816-93-6	188,2	-1102,7

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}
3-méthyl-4-benzoylfurazane	$C_{10}H_8N_2O_2$	10349-11-8	188,2	634,5
L-tryptophane	$C_{11}H_{12}N_2O_2$	73-22-3	204,2	-2033,5
3-benzyl-2,5-pipérazinedione	$C_{11}H_{12}N_2O_2$	5037-75-2	204,2	-1691,3
acide 2,4-diméthyl-3-méthylcarbonitrile-1H-pyrrole-carboxylique éthyl ester	$C_{11}H_{14}N_2O_2$		206,2	-1877,9
3-isopropyl-6-(2-méthyl-propyl)-2,5-pipérazinedione	$C_{11}H_{20}N_2O_2$	5625-50-3	212,3	-2948,8
2-nitrodiphénylamine	$C_{12}H_{10}N_2O_2$	119-75-5	214,2	368,7
3-benzyl-6-méthyl-2,5-pipérazinedione	$C_{12}H_{14}N_2O_2$	14474-78-3	218,3	-1704,5
(Z,Z)-diphényléthanedione dioxime	$C_{14}H_{12}N_2O_2$	572-45-2	240,3	174,0
(E,E)-diphényléthanedione dioxime	$C_{14}H_{12}N_2O_2$	522-34-9	240,3	74,9
(E,Z)-diphényléthanedione dioxime	$C_{14}H_{12}N_2O_2$	572-43-0	240,3	221,0
acide benzoïque 2-benzoylhydrazide	$C_{14}H_{12}N_2O_2$	787-84-8	240,3	-839,4
3-benzyl-6-isopropyl-2,5-pipérazinedione	$C_{14}H_{18}N_2O_2$	14474-71-6	246,3	-1594,4
1,1'-méthylènebis(4-isocyanatobenzène)	$C_{15}H_{10}N_2O_2$	101-68-8	250,3	-211,0
N,N-diphényl-N'-2-hydroxyéthylurée	$C_{15}H_{16}N_2O_2$	6123-87-1	256,3	-1245,4
1,2-diacétyl-1,2-diphénylhydrazine	$C_{16}H_{16}N_2O_2$	793-25-9	268,3	-702,2
biphényl-4,4'-diacétamide	$C_{16}H_{16}N_2O_2$	613-35-4	268,3	-1761,0
4-diphénylamino-carbonylmorpholine	$C_{17}H_{18}N_2O_2$	75125-45-0	282,3	-770,7
2-anilinométhyl-3-méthyl-4-éthyl-5-carbéthoxypyrrole	$C_{17}H_{22}N_2O_2$		286,4	-1330,1
3,6-dibenzyl-2,5-pipérazinedione	$C_{18}H_{18}N_2O_2$	2308-61-4	294,3	-977,1
bis(hydroxyméthyl)urée	$C_3H_8N_2O_3$	25155-29-7	120,1	-5969,7
L-asparagine	$C_4H_8N_2O_3$	70-47-3	132,1	-5975,0
N-glycylglycine	$C_4H_8N_2O_3$	556-50-3	132,1	-5659,3
L-glutamine	$C_5H_{10}N_2O_3$	56-85-9	146,1	-5654,7
N-DL-alanylglycine	$C_5H_{10}N_2O_3$	1188-01-8	146,1	-5322,1
N-glycyl-DL-valine	$C_7H_{14}N_2O_3$	2325-17-9	174,2	-4793,4
N-DL-leucylglycine	$C_8H_{16}N_2O_3$	615-82-7	188,2	-4568,0
3-benzoyl-5-hydroxy-1,2,4-oxadiazole	$C_9H_6N_2O_3$		190,2	-1419,4

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}
3-((4-hydroxyphényl)méthyl)-2,5-pipérazinedione	$C_{11}H_{12}N_2O_3$	5845-66-9	220,2	-2326,3
N-glycylphénylalanine	$C_{11}H_{14}N_2O_3$	6491-52-7	222,2	-3079,5
N-alanylphénylalanine	$C_{12}H_{16}N_2O_3$	3061-90-3	236,3	-3005,9
N-valylphénylalanine	$C_{14}H_{20}N_2O_3$	75946-40-6	264,3	-2897,2
3,4-dibenzoyl-1,2,5-oxadiazole	$C_{16}H_{10}N_2O_3$	10349-12-9	278,3	374,5
3,4-bis(4-méthylbenzoyl)-1,2,5-oxadiazole	$C_{18}H_{14}N_2O_3$		306,3	66,6
1,2-dinitroéthane	$C_2H_4N_2O_4$	7570-26-5	120,1	-1488,0
3-nitroisoxazolidine-2-oxyde	$C_3H_4N_2O_4$	4122-45-6	132,1	-386,1
2,2-dinitropropane	$C_3H_6N_2O_4$	595-49-3	134,1	-1429,1
N-nitrosuccinimide	$C_4H_4N_2O_4$	5336-95-8	144,1	-2259,8
tartramide	$C_4H_8N_2O_4$	634-63-9	148,1	-8057,8
1,4-dinitrobutane	$C_4H_8N_2O_4$	4286-49-1	148,1	-1682,5
L-asparagine monohydrate	$C_4H_{10}N_2O_4$	5794-13-8	150,1	-7237,6
5-nitro-2-furamide	$C_5H_4N_2O_4$	701-51-9	156,1	-2128,2
2,2-diméthyl-1,3-dinitropropane	$C_5H_{10}N_2O_4$	762-98-1	162,1	-1696,6
1,3-dinitrobenzène	$C_6H_4N_2O_4$	99-65-0	168,1	-163,0
1,2-dinitrobenzène	$C_6H_4N_2O_4$	528-29-0	168,1	-10,7
1,4-dinitrobenzène	$C_6H_4N_2O_4$	100-25-4	168,1	-230,2
3,6-bis(hydroxyméthyl)-2,5-pipérazinedione	$C_6H_{10}N_2O_4$	5625-41-2	174,2	-5027,7
2,3-diméthyl-2,3-dinitrobutane	$C_6H_{12}N_2O_4$	3964-18-9	176,2	-1768,2
1-méthyl-2,4-dinitrobenzène	$C_7H_6N_2O_4$	121-14-2	182,1	-364,6
1-méthyl-2,6-dinitrobenzène	$C_7H_6N_2O_4$	606-20-2	182,1	-280,6
(dinitrométhyl)benzène	$C_7H_6N_2O_4$	25321-14-6	182,1	-227,3
méthyl(4-nitrophényl)carbamate	$C_8H_8N_2O_4$	1943-87-9	196,2	-2181,4
2,4-dinitro-1,3-diméthylbenzène	$C_8H_8N_2O_4$	603-02-1	196,2	-436,4
4,6-dinitro-1,3-diméthylbenzène	$C_8H_8N_2O_4$	616-72-8	196,2	-520,0
(1,1'-bipyrrolidine)-2,2',5,5'-tétrone	$C_8H_8N_2O_4$	3741-24-0	196,2	-3616,4

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}
N,N'-dicarbéthoxy-éthylènediamine	$C_8H_{16}N_2O_4$	539-71-9	204,2	-4803,1
1,5-dinitronaphtalène	$C_{10}H_6N_2O_4$	605-71-0	218,2	136,1
1,8-dinitronaphtalène	$C_{10}H_6N_2O_4$	602-38-0	218,2	182,0
N-hippuroylglycine	$C_{11}H_{12}N_2O_4$	1145-32-0	236,2	-3525,0
acide 1-amino-2,5-diméthyl-1H-pyrrole-3,4-dicarboxylique diéthyl ester	$C_{12}H_{18}N_2O_4$	4815-44-5	254,3	-2988,8
(Z)-1,2-bis(4-nitrophényl)éthylène	$C_{14}H_{10}N_2O_4$	619-93-2	270,2	274,2
(E)-1,2-bis(4-nitrophényl)éthylène	$C_{14}H_{10}N_2O_4$	736-31-2	270,2	203,2
2,2',4,4'-tétraméthyl-3,3'-dicarbéthoxy-dipyrrylméthène	$C_{19}H_{24}N_2O_4$	2407-87-6	344,4	-2392,5
4,4'-méthylènebis(acide 2,5-diméthyl-1H-pyrrole-3-carboxylique)diéthyl ester	$C_{19}H_{26}N_2O_4$		346,4	-2522,7
5,5'-méthylènebis(acide 2,4-diméthyl-1H-pyrrole-3-carboxylique)diéthyl ester	$C_{19}H_{26}N_2O_4$	5442-92-2	346,4	-2463,5
4,4'-méthylènebis(acide 3,5-diméthyl-1H-pyrrole-2-carboxylique)diéthyl ester	$C_{19}H_{26}N_2O_4$	6285-54-7	346,4	-2506,8
4,4'-éthylènebis(acide 2,5-diméthyl-1H-pyrrole-3-carboxylique)diéthyl ester	$C_{20}H_{28}N_2O_4$		360,4	-2473,9
N,N'-bis(2-méthoxyphényl)téréphtalamide	$C_{22}H_{20}N_2O_4$	36360-34-6	376,4	-1349,3
N,N'-bis(3-méthoxyphényl)téréphtalamide	$C_{22}H_{20}N_2O_4$	6957-81-9	376,4	-1459,1
N,N'-bis(4-méthoxyphényl)téréphtalamide	$C_{22}H_{20}N_2O_4$	7144-15-2	376,4	-1456,9
alloxane monohydrate	$C_4H_4N_2O_5$	2244-11-3	160,1	-6251,1
2,4-dinitrophénol	$C_6H_4N_2O_5$	51-28-5	184,1	-1263,9
2,6-dinitrophénol	$C_6H_4N_2O_5$	573-56-8	184,1	-1140,1
N-serylserine	$C_6H_{12}N_2O_5$	6620-95-7	192,2	-6128,4
2,4-dinitro-1-méthoxybenzène	$C_7H_6N_2O_5$	119-27-7	198,1	-941,8
2,6-dinitro-1-méthoxybenzène	$C_7H_6N_2O_5$	3535-67-9	198,1	-955,4
2,4-dinitro-1-éthoxybenzène	$C_8H_8N_2O_5$	610-54-8	212,2	-1067,1
2,4-dinitro-1-naphtol	$C_{10}H_6N_2O_5$	605-69-6	234,2	-774,7
4-hydroxy-5,4'-bis(acide 2-méthyl-1H-pyrrole-3-carboxylique)diéthyl ester	$C_{16}H_{20}N_2O_5$		320,3	-3146,0
2,4-dinitro-1,3-benzènediol	$C_6H_4N_2O_6$	519-44-8	200,1	-2076,9
4,6-dinitro-1,3-benzènediol	$C_6H_4N_2O_6$	616-74-0	200,1	-2196,8
acide 3,5-dinitrobenzoïque	$C_7H_4N_2O_6$	99-34-3	212,1	-2039,4

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}
2,4-dinitrophénoxyéthanol	$C_8H_8N_2O_6$	2831-60-9	228,2	-1747,5
1,2-bis(3-carboxypropanoyl)hydrazine	$C_8H_{12}N_2O_6$	5343-02-2	232,2	-5725,5
N,N'-1,2-éthanediylbis-(N-(carboxyméthyl)glycine)	$C_{10}H_{16}N_2O_8$	60-00-4	292,2	-6020,7
cytosine	$C_4H_5N_3O$	71-30-7	111,1	-1991,9
créatinine	$C_4H_7N_3O$	60-27-5	113,1	-2108,4
4-phénylfurazane amine	$C_8H_7N_3O$	10349-14-1	161,2	1370,7
créatine	$C_4H_9N_3O_2$	57-00-1	131,1	-4096,6
L-histidine	$C_6H_9N_3O_2$	71-00-1	155,2	-2847,7
4-phényl-3-furazancarboxamide	$C_9H_7N_3O_2$	18600-75-4	189,2	418,7
4-(4-méthylphényl)-3-furazancarboxamide	$C_{10}H_9N_3O_2$		203,2	207,2
1,3,5-triazine-2,4,6(1H,3H,5H)-triol	$C_3H_3N_3O_3$	108-80-5	129,1	-5450,7
3-méthyl-4-nitrofuroxane	$C_3H_3N_3O_4$	49558-02-3	145,1	694,1
2,3-dinitroaniline	$C_6H_5N_3O_4$	602-03-9	183,1	-63,9
2,4-dinitroaniline	$C_6H_5N_3O_4$	97-02-9	183,1	-370,2
2,5-dinitroaniline	$C_6H_5N_3O_4$	619-18-1	183,1	-241,9
2,6-dinitroaniline	$C_6H_5N_3O_4$	606-22-4	183,1	-276,3
3,4-dinitroaniline	$C_6H_5N_3O_4$	610-41-3	183,1	-178,0
3,5-dinitroaniline	$C_6H_5N_3O_4$	618-87-1	183,1	-212,4
N-méthyl-2,6-dinitroaniline	$C_7H_7N_3O_4$	5910-19-0	197,1	-71,0
N-méthyl-2,4-dinitroaniline	$C_7H_7N_3O_4$	2044-88-4	197,1	-342,4
N,N-diméthyl-2,4-dinitroaniline	$C_8H_9N_3O_4$	1670-17-3	211,2	-145,4
N-phényl-2,4-dinitroaniline	$C_{12}H_9N_3O_4$	961-68-2	259,2	86,8
N-(N-glycyl-DL-phénylalanyl)alanine	$C_{14}H_{19}N_3O_4$	18828-33-6	293,3	-3159,7
N-méthyl-N-(2-nitroxyéthyl)nitramine	$C_3H_7N_3O_5$	17096-47-8	165,1	-907,5
trinitrométhane	CHN_3O_6	517-25-9	151,0	-318,5
1,1,1-trinitroéthane	$C_2H_3N_3O_6$	595-86-8	165,1	-681,0

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}
2-méthyl-2,3,3-trinitrobutane	$C_5H_9N_3O_6$	5324-72-1	207,1	-1600,4
1,3,5-trinitrobenzène	$C_6H_3N_3O_6$	99-35-4	213,1	-223,8
2-méthyl-2,3,3-trinitropentane	$C_6H_{11}N_3O_6$	62154-78-3	221,2	-1312,6
2,4,6-trinitrotoluène	$C_7H_5N_3O_6$	118-96-7	227,1	-354,6
2-éthyl-1,3,5-trinitrobenzène	$C_8H_7N_3O_6$	13985-60-9	241,2	-375,6
2,4-diméthyl-1,3,5-trinitrobenzène	$C_8H_7N_3O_6$	632-92-8	241,2	-425,9
1,1,1-trinitro-2-phényléthane	$C_8H_7N_3O_6$	38677-56-4	241,2	-76,7
1,3,8-trinitronaphtalène	$C_{10}H_5N_3O_6$	2364-46-7	263,2	92,3
1,4,5-trinitronaphtalène	$C_{10}H_5N_3O_6$	2243-95-0	263,2	138,3
2,2,2-trinitroéthanol	$C_2H_3N_3O_7$	918-54-7	181,1	-1441,5
2,4,6-trinitrophénol	$C_6H_3N_3O_7$	88-89-1	229,1	-1084,8
3-méthyl-2,4,6-trinitrophénol	$C_7H_5N_3O_7$	602-99-3	243,1	-1052,5
2-méthoxy-1,3,5-trinitrobenzène	$C_7H_5N_3O_7$	606-35-9	243,1	-647,4
2-éthoxy-1,3,5-trinitrobenzène	$C_8H_7N_3O_7$	4732-14-3	257,2	-795,6
2-méthyl-2-nitro-1,3-propanediol dinitrate	$C_4H_7N_3O_8$	4055-94-1	225,1	-1661,8
2-(2,4-dinitrophénoxy)-éthanol nitrate	$C_8H_7N_3O_8$	62030-34-6	273,2	-1071,9
2-éthyl-2-(hydroxyméthyl)-1,3-propanediol trinitrate	$C_6H_{11}N_3O_9$	2921-92-8	269,2	-1782,9
N,N-bis(2-(bis(carboxyméthyl)amino)éthyl)glycine	$C_{14}H_{23}N_3O_{10}$	67-43-6	393,3	-5657,1
5-hydroxytétrazole	CH_2N_4O	16421-52-6	86,1	73,2
5-méthoxy-1H-tétrazole	$C_2H_4N_4O$	5376-15-8	100,1	690,5
1-acétyl-1H-tétrazole	$C_3H_4N_4O$	21565-41-3	112,1	727,1
1,4-diméthyl-5-tétrazolone	$C_3H_6N_4O$	13576-20-0	114,1	-241,9
1,7-dihydro-6H-purin-6-one	$C_5H_4N_4O$	68-94-0	136,1	-814,0
1-phényl-5-hydroxytétrazole	$C_7H_4N_4O$	51449-77-5	160,1	698,2
nitroguanidine	$CH_4N_4O_2$	556-88-7	104,1	-832,2
azodicarbonamide	$C_2H_4N_4O_2$	123-77-3	116,1	-2519,8
tétrahydro-1,2,4,5-tétrazine-3,6-dione	$C_2H_4N_4O_2$	624-40-8	116,1	-2250,2

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}
acide oxalique dihydrazide	$C_2H_6N_4O_2$	996-98-5	118,1	-2499,7
1,2-hydrazinedicarboxamide	$C_2H_6N_4O_2$	110-21-4	118,1	-4222,9
6-amino-1,3,5-triazine-2,4(1H,3H)-dione	$C_3H_4N_4O_2$	645-93-2	128,1	-3847,3
propanedioyl dihydrazide	$C_3H_8N_4O_2$	3815-86-9	132,1	-2517,4
glycolurile	$C_4H_6N_4O_2$	496-46-8	142,1	-3467,6
1,4-dinitrosopipérazine	$C_4H_8N_4O_2$	140-79-4	144,1	645,9
butanedioyl dihydrazide	$C_4H_{10}N_4O_2$	4146-43-4	146,1	-2508,4
3,7-dihydro-1H-purine-2,6-dione	$C_5H_4N_4O_2$	69-89-6	152,1	-2495,5
D-arginine	$C_6H_{14}N_4O_2$	157-06-2	174,2	-3579,2
2-phényl-5-carboxytétrazole	$C_8H_6N_4O_2$	54798-92-4	190,2	-217,2
1,2-bis(diphénylcarbamoyl)hydrazine	$C_{26}H_{22}N_4O_2$	75011-84-6	422,5	128,8
éthylène-bis-diphénylurée	$C_{28}H_{26}N_4O_2$	6123-88-2	450,5	-433,9
acide 8,13-diéthyl-3,7,12,17-tétraméthyl-21H,23H-porphine-2-propanoïque méthyl ester	$C_{32}H_{36}N_4O_2$	5174-83-4	508,7	-762,6
acide 8,13-diéthyl-3,7,12,17,20-pentaméthyl-21H,23H-porphine-2-propanoïque méthyl ester	$C_{33}H_{38}N_4O_2$	33719-66-3	522,7	-730,7
désoxophylloérythrine monométhyl ester	$C_{34}H_{38}N_4O_2$	33902-83-9	534,7	-339,8
2,5-dioxo-4-imidazolidinylurée	$C_4H_6N_4O_3$	97-59-6	158,1	-4538,5
acide urique	$C_5H_4N_4O_3$	69-93-2	168,1	-3680,9
pyrophaeophorbide-a-monométhyl ester	$C_{34}H_{36}N_4O_3$	6453-67-4	548,7	-683,3
phylloérythrine monométhyl ester	$C_{34}H_{36}N_4O_3$	33719-95-8	548,7	-671,1
N,N'-dinitro-1,2-éthanediamine	$C_2H_6N_4O_4$	505-71-5	150,1	-691,6
1,4-dinitropipérazine	$C_4H_8N_4O_4$	4164-37-8	176,1	-313,3
2,4-dinitrophénylhydrazine	$C_6H_6N_4O_4$	119-26-6	198,1	252,4
5-nitrofurazone	$C_6H_6N_4O_4$	59-87-0	198,1	-1128,5
4,4'-dinitrohydrazobenzène	$C_{12}H_{10}N_4O_4$	22719-28-4	274,2	400,0
protoporphyrine	$C_{34}H_{34}N_4O_4$	553-12-8	562,7	-927,2
rhodoporphyrine (XV) diméthyl ester	$C_{34}H_{38}N_4O_4$	22361-85-9	566,7	-938,6
mésoporphyrine (IX) diméthyl ester	$C_{36}H_{42}N_4O_4$	1263-63-4	594,7	-1416,4

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}
N,N'-diméthyl-N,N'-dinitroéthanediamide	$C_4H_6N_4O_6$	14760-99-7	206,1	-1482,2
2,4,6-trinitro-N-méthylaniline	$C_7H_6N_4O_6$	1022-07-7	242,1	-205,7
2,4,N-trinitro-N-méthylaniline	$C_7H_6N_4O_6$	19092-03-6	242,1	66,9
2,6,N-trinitro-N-méthylaniline	$C_7H_6N_4O_6$	102153-82-2	242,1	163,1
méthylphaeophorbide-b	$C_{36}H_{36}N_4O_6$		620,7	-1388,6
chlorin-p6-triméthyl ester	$C_{36}H_{40}N_4O_6$	62786-89-4	624,7	-1989,4
chloroporphyrin-e6-triméthyl ester	$C_{37}H_{42}N_4O_6$	28211-96-3	638,8	-1540,0
chlorin-e6-triméthyl ester	$C_{37}H_{42}N_4O_6$	71217-51-1	638,8	-1481,6
1-nitroacétaldéhyde o-(1,1-dinitroéthyl)oxime	$C_4H_6N_4O_7$	10565-52-3	222,1	-745,1
2,2,3,3-tétranitrobutane	$C_4H_6N_4O_8$	20919-97-5	238,1	-765,2
1,1,1,4-tétranitrobutane	$C_4H_6N_4O_8$	20919-96-4	238,1	-796,7
N-nitrobis(2-hydroxyéthyl)amine dinitrate	$C_4H_8N_4O_8$	4185-47-1	240,1	-1071,9
dinitrobutylèneglycol diuréthane	$C_6H_{10}N_4O_8$		266,2	-3137,1
1,4,5,8-tétranitronaphtalène	$C_{10}H_4N_4O_8$	4793-98-0	308,2	154,1
coproporphyrin-(I) tétraméthyl ester	$C_{40}H_{46}N_4O_8$	25767-20-8	710,8	-2082,5
2,4,6-trinitrophénoxyéthyl nitrate	$C_8H_6N_4O_{10}$	62030-33-5	318,2	-920,3
pentaérythritol tétranitrate	$C_5H_8N_4O_{12}$	78-11-5	316,1	-1703,7
5-cyclohexène-(1α,2β,3β,4α)-1,2,3,4-tétrol tétranitrate	$C_6H_6N_4O_{12}$	29585-45-3	326,1	-1188,5
α-époxyconduritol-E tétranitrate	$C_6H_6N_4O_{13}$	23627-80-7	342,1	-1298,0
α-D-méthyl glucopyranoside-2,3,4,6-tétranitrate	$C_7H_{10}N_4O_{14}$	13225-10-0	374,2	-2207,0
isouroporphyrine (II) octaméthyl ester	$C_{48}H_{54}N_4O_{16}$	10170-03-3	943,0	-2782,7
N-(1H-tétrazol-5-yl)-acétamide	$C_3H_5N_5O$	6158-77-6	127,1	-39,8
4,6-diamino-1,3,5-triazin-2(1H)-one	$C_3H_5N_5O$	645-92-1	127,1	-2357,9
guanine	$C_5H_5N_5O$	73-40-5	151,1	-1216,9
aminonitroguanidine	$CH_5N_5O_2$	27256-18-4	119,1	210,1
N-nitro-1H-1,2,4-triazol-3-amine	$C_2H_3N_5O_2$	34815-01-5	129,1	870,0
5-méthyl-N-nitro-1H-1,2,4-triazol-3-amine	$C_3H_5N_5O_2$	42216-41-1	143,1	372,5

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}
5-tétrazolyluréthane	$C_4H_7N_5O_2$	5326-16-9	157,1	-1400,1
3-amino-1,2,4-triazole nitrate	$C_2H_5N_5O_3$	13040-74-9	147,1	-1163,2
1-formamido-2-nitroguanidine	$C_2H_5N_5O_3$		147,1	-998,7
1-nitro-3-guanidinourée	$C_2H_5N_5O_3$	28787-21-5	147,1	-2129,9
1-acétamido-2-nitroguanidine	$C_3H_7N_5O_3$	42216-29-5	161,1	-1201,6
5-méthyl-1H-1,2,4-triazol-3-amine nitrate	$C_3H_7N_5O_3$	13040-75-0	161,1	-1417,6
acétamidoguanidine nitrate	$C_3H_9N_5O_4$	75011-77-7	179,1	-2757,7
2,4,6-trinitrophénylhydrazine	$C_6H_5N_5O_6$	653-49-6	243,1	150,9
1,3-diamino-2,4,6-trinitrobenzène	$C_6H_5N_5O_6$	1630-08-6	243,1	-402,7
bis(2,2-dinitropropyl)amine	$C_6H_{11}N_5O_8$	1924-47-6	281,2	-943,9
N-méthyl-N,2,4,6-tétranitroaniline	$C_7H_5N_5O_8$	479-45-8	287,1	91,6
2,4,5,7-tétranitrocarbazole	$C_{12}H_5N_5O_8$	28453-24-9	347,2	54,1
2,2',4,4',6-pentanitrobenzophénone	$C_{13}H_5N_5O_{11}$	32255-35-9	407,2	-280,9
2,2,4,4-tétrakis(hydroxyméthyl nitrate)pyranol nitrate	$C_9H_{13}N_5O_{16}$		447,2	-1772,9
3-(5-tétrazolylazo)-butan-2-one	$C_5H_8N_6O$	74999-21-6	168,2	995,5
nitroguanylazide	$CH_2N_6O_2$	62154-79-4	130,1	2294,2
3,7-dinitroso-1,3,5,7-tétraazabicyclo[3.3.1]nonane	$C_5H_{10}N_6O_2$	101-25-7	186,2	1125,9
3-(5-tétrazolylazo)-pentan-2,4-dione	$C_6H_8N_6O_2$	74999-20-5	196,2	73,4
5-aminotétrazole nitrate	$CH_4N_6O_3$		148,1	-186,4
guanyl azide nitrate	$CH_4N_6O_3$		148,1	107,4
diaminoguanidine nitrate	$CH_8N_6O_3$	37160-07-9	152,1	-1295,1
hexahydro-1,3,5-trinitroso-1,3,5-triazine	$C_3H_6N_6O_3$	13980-04-6	174,1	1642,0
hexahydro-1,3,5-trinitro-1,3,5-triazine	$C_3H_6N_6O_6$	121-82-4	222,1	301,4
1,3,5-triamino-2,4,6-trinitrobenzène	$C_6H_6N_6O_6$	3058-38-6	258,1	-540,4
hexaméthylènetétramine dinitrate	$C_6H_{14}N_6O_6$		266,2	-1438,3
N-nitroso-(2,2-dinitropropyl)amine	$C_6H_{10}N_6O_9$	28464-26-8	310,2	-620,3
N-nitro-bis(2,2-dinitropropyl)amine	$C_6H_{10}N_6O_{10}$	28464-24-6	326,2	-710,3

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}
N,N'-dinitro-N,N'-bis(2-hydroxyéthyl)oxamide dinitrate	$C_6H_8N_6O_{12}$	62209-60-3	356,2	-1577,7
2,2',4,4',6,6'-hexanitrobiphényle	$C_{12}H_4N_6O_{12}$	4433-16-3	424,2	161,5
(E)-2,2',4,4',6,6'-hexanitrostilbène	$C_{14}H_6N_6O_{12}$	20062-22-0	450,2	173,8
bis(2,2,2-trinitroéthoxy)méthane	$C_5H_6N_6O_{14}$	6263-74-7	374,1	-1078,0
éthylènedinitramine diuréthanglycol dinitrate	$C_8H_{12}N_6O_{14}$		416,2	-2364,9
1,1,1,9,9,9-hexanitro-3,5,7-trioxanonane	$C_6H_8N_6O_{15}$		404,2	-1476,9
dipentaérythritol hexanitrate	$C_{10}H_{16}N_6O_{19}$	13184-80-0	524,3	-1868,5
3-picrylamino-1,2,4-triazole	$C_8H_5N_7O_6$	18212-12-9	295,2	513,3
bis(2,2,2-trinitroéthyl)amine	$C_4H_5N_7O_{12}$	34880-53-0	343,1	-97,3
1,1,1,3,5,5,5-heptanitropentane	$C_5H_5N_7O_{14}$	20919-99-7	387,1	-397,0
5,7-dinitro-1-picrylbenzotriazole	$C_{12}H_4N_8O_{10}$	50892-90-5	420,2	713,5
2,2',4,4',6,6'-hexanitroazobenzène	$C_{12}H_4N_8O_{12}$	19159-68-3	452,2	534,8
3,3'-diamino-2,2',4,4',6,6'-hexanitrobiphényle	$C_{12}H_6N_8O_{12}$	17215-44-0	454,2	-32,8
N-nitrosobis(2,2,2-trinitroéthyl)amine	$C_4H_4N_8O_{13}$	34882-73-0	372,1	132,2
N-nitrobis(2,2,2-trinitroéthyl)amine	$C_4H_4N_8O_{14}$	19836-28-3	388,1	-71,9
N,3,3,3-tétranitro-N-(2,2,2-trinitroéthyl)-propylamine	$C_5H_6N_8O_{14}$	71742-94-4	402,1	-218,5
1,1,1,4,9,9,9-heptanitro-4-aza-6-oxanonane	$C_7H_{10}N_8O_{15}$		446,2	-680,6
1,1,1,5,9,9,9-heptanitro-3,7-dioxa-5-azanonane	$C_6H_8N_8O_{16}$	80308-88-9	448,2	-865,1
2,2',4,4',4",6,6',6"-octanitroterphényle	$C_{18}H_6N_8O_{16}$	33491-88-2	590,3	160,4
saccharose octanitrate	$C_{12}H_{14}N_8O_{27}$	30236-29-4	702,3	-1942,4
5-nitraminotétrazole guanidinate	$C_2H_7N_9O_2$		189,1	587,9
2,4,6-trinitro-1,3,5-tris(méthylnitramino)benzène	$C_9H_9N_9O_{12}$	62030-37-9	435,2	271,4
2,2',2",4,4',4",6,6',6"-nonanitroterphényle	$C_{18}H_5N_9O_{18}$	51460-84-5	635,3	208,1
1,3,5-tripicrylbenzène	$C_{24}H_9N_9O_{18}$	58505-78-5	711,4	-343,1
1-(5-tétrazolyl)-4-guanyltétrazène hydrate	$C_2H_8N_{10}O$	109-27-3	188,2	1005,0
2,6-bis(picrylamino)-3,5-dinitropyridine	$C_{17}H_7N_{11}O_{16}$	38082-89-2	621,3	129,6
2,4,6-tripicryl-1,3,5-triazine	$C_{21}H_6N_{12}O_{18}$	49753-54-0	714,3	420,0

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}
1,1,1,5,7,9,13,13,13-nonanitro-3,11-dioxa-5,7,9-triazatridécane	$C_8H_{12}N_{12}O_{20}$	80308-90-3	596,2	-570,6
2,2',2",2"',4,4',4",4"',6,6',6",6"'-dodécanitroquatraphényle	$C_{24}H_6N_{12}O_{24}$	23242-92-4	846,4	251,8
2,6-bis(picrylazo)-3,5-dinitropyridine	$C_{17}H_5N_{13}O_{16}$	55106-96-2	647,3	953,7
azo-bis(2,2',4,4',6,6'-hexanitrodiphényl)	$C_{24}H_6N_{14}O_{24}$	23987-32-8	874,4	549,0
2,2',2",2"',4,4',4",4"',6,6',6",6"'-dodécanitro-3,3'-bis(phénylazo)biphényle	$C_{24}H_6N_{16}O_{24}$	58505-80-9	902,4	877,3

Annexe 10

Comparaison des enthalpies standard de formation en phase solide issues de la littérature avec les enthalpies calculées, concernant 127 molécules contenant carbone, hydrogène, oxygène et azote

Les résultats sont ici présentés en joules par gramme

A noter que les écarts entre les enthalpies de formation en phase solide mesurées et calculées étant strictement supérieurs à 500 $J.g^{-1}$ en valeur absolue (soit l'erreur limite acceptable) sont mis en évidence. Ils sont inscrits en gras dans les tableaux qui suivent.

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}
fullerène C_{70}	C_{70}	115383-22-7	840,7	2916,4	-	-
fullerène C_{70}	C_{70}	115383-22-7	840,7	3037,8	-	-
phénantrène	$C_{14}H_{10}$	85-01-8	178,2	619,4	644,5	-25,0
antracène	$C_{14}H_{10}$	120-12-7	178,2	710,9	722,8	-11,9
9-méthylantracène	$C_{15}H_{12}$	779-02-2	192,3	505,1	490,4	14,6
2-éthylantracène	$C_{16}H_{14}$	52251-71-5	206,3	292,3	455,0	-162,7
9,10-diméthylantracène	$C_{16}H_{14}$	781-43-1	206,3	340,3	289,7	50,7
naphtacène	$C_{18}H_{12}$	92-24-0	228,3	906,3	805,4	100,9
o-terphényle	$C_{18}H_{14}$	84-15-1	230,3	774,2	721,1	53,1
p-terphényle	$C_{18}H_{14}$	92-94-4	230,3	662,0	739,9	-77,9
m-terphényle	$C_{18}H_{14}$	92-06-8	230,3	702,6	713,8	-11,2
corannulène	$C_{20}H_{10}$	5821-51-2	250,3	1367,6	521,7	**845,9**
benzo[k]fluorantène	$C_{20}H_{12}$	207-08-9	252,3	683,3	970,8	-287,5
pérylène	$C_{20}H_{12}$	198-55-0	252,3	724,5	641,9	82,6
coronène	$C_{24}H_{12}$	191-07-1	300,4	487,8	672,4	-184,6
coronène	$C_{24}H_{12}$	191-07-1	300,4	507,7	672,4	-164,7
1,3,5-triphénylbenzène	$C_{24}H_{18}$	612-71-5	306,4	724,5	774,2	-49,6
3-tert-butylphénol	$C_{10}H_{14}O$	585-34-2	150,2	-1907,2	-1911,8	4,6
4-tert-butylphénol	$C_{10}H_{14}O$	98-54-4	150,2	-1928,5	-1911,8	-16,7
4-tert-amylphénol	$C_{11}H_{16}O$	80-46-6	164,2	-1855,2	-1921,6	66,5
2-tert-butyl-4-méthylphénol	$C_{11}H_{16}O$	2409-55-4	164,2	-1868,6	-1958,4	89,9
2-phénylphénol	$C_{12}H_{10}O$	90-43-7	170,2	-518,8	-618,9	100,1
4-phénylphénol	$C_{12}H_{10}O$	92-69-3	170,2	-623,9	-619,2	-4,7
cyclododécanone	$C_{12}H_{22}O$	830-13-7	182,3	-2427,3	-	-
2,4-di-tert-butylphénol	$C_{14}H_{22}O$	96-76-4	206,3	-1858,2	-1919,8	61,5
4-tert-octylphénol	$C_{14}H_{22}O$	140-66-9	206,3	-1818,0	-1958,6	140,6
cyclopentadécanone	$C_{15}H_{28}O$	502-72-7	224,4	-2234,6	-	-

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}
benzanthrone	$C_{17}H_{10}O$	82-05-3	230,3	-17,8	-	-
2,6-diphénylphénol	$C_{18}H_{14}O$	2432-11-3	246,3	-58,9	-131,8	72,9
acide 2,2-diméthylpropanoïque	$C_5H_{10}O_2$	75-98-9	102,1	-5560,5	-5347,2	-213,3
p-benzoquinone	$C_6H_4O_2$	106-51-4	108,1	-1720,9	-	-
duroquinone	$C_6H_4O_2$	527-17-3	108,1	-3345,1	-	-
pentacyclo[5.4.0.0^{2,6}.0^{3,10}.0^{5,9}]undécane-8,11-dione	$C_{11}H_{10}O_2$	2958-72-7	174,2	-1183,7	-	-
acide trans-2,3-diméthoxycinnamique	$C_{11}H_{12}O_2$	7461-60-1	176,2	-3747,8	-3507,6	-240,1
acide trans-2,4-diméthoxycinnamique	$C_{11}H_{12}O_2$		176,2	-3876,0	-3501,1	-374,9
acide trans-2,5-diméthoxycinnamique	$C_{11}H_{12}O_2$		176,2	-3775,0	-3501,1	-273,9
acide trans-3,4-diméthoxycinnamique	$C_{11}H_{12}O_2$	2316-26-9	176,2	-3768,2	-3508,0	-260,2
acide trans-3,5-diméthoxycinnamique	$C_{11}H_{12}O_2$		176,2	-3781,2	-3501,4	-279,8
dibenzo-p-dioxine	$C_{12}H_8O_2$	262-12-4	184,2	-768,8	-	-
2,2'-dihydroxybiphényle	$C_{12}H_{10}O_2$	1806-29-7	186,2	-1578,4	-1623,2	44,8
4,4'-dihydroxybiphényle	$C_{12}H_{10}O_2$	92-88-6	186,2	-1720,1	-1623,9	-96,3
trans-2-phénylcyclopropanecarboxylate éthyl ester	$C_{12}H_{14}O_2$		190,2	-1772,5	-978,3	**-794,2**
dibenzoylméthane	$C_{15}H_{12}O_2$		224,3	-999,8	-	-
acide salicylique	$C_7H_6O_3$	69-72-7	138,1	-4260,0	-3999,8	-260,2
acide trans-2-méthoxycinnamique	$C_{10}H_{10}O_3$	6099-03-2	178,2	-2837,5	-2544,8	-292,7
acide trans-3-méthoxycinnamique	$C_{10}H_{10}O_3$		178,2	-2830,8	-2545,2	-285,6
acide trans-4-méthoxycinnamique	$C_{10}H_{10}O_3$	830-09-1	178,2	-2876,8	-2545,2	-331,6
acide malonique	$C_3H_4O_4$	141-82-2	104,1	-8563,2	-8557,4	-5,8
acide undécanedioïque	$C_3H_4O_4$	1852-04-6	104,1	-10564,9	-10575,8	10,9
acide succinique	$C_4H_6O_4$	110-15-6	118,1	-7963,5	-8022,0	58,5
acide glutarique	$C_5H_8O_4$	110-94-1	132,1	-7266,4	-7285,4	19,0
acide méthylsuccinique	$C_5H_8O_4$	498-21-5	132,1	-7252,8	-7286,9	34,1
acide 2,2-diméthylsuccinique	$C_6H_{10}O_4$	597-43-3	146,1	-6759,2	-6761,7	2,4
acide pimelique	$C_7H_{12}O_4$	111-16-0	160,2	-6302,1	-6290,1	-12,1

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}
acide acétylsalicylique	$C_9H_8O_4$	50-78-2	180,2	-4208,5	-4145,7	-62,8
acide azelaïque	$C_9H_{16}O_4$	123-99-9	188,2	-5601,4	-5599,8	-1,6
D-galactono-1,4-lactone	$C_6H_{10}O_6$		178,1	-6917,9	-6979,0	61,1
L-galactono-1,4-lactone	$C_6H_{10}O_6$		178,1	-6914,7	-6979,0	64,3
D-gulono-1,4-lactone	$C_6H_{10}O_6$		178,1	-6905,4	-6979,0	73,6
L-gulono-1,4-lactone	$C_6H_{10}O_6$		178,1	-6907,7	-6979,0	71,3
L-mannono-1,4-lactone	$C_6H_{10}O_6$		178,1	-6893,6	-6979,0	85,5
méthyl-α-D-glucopyranoside	$C_7H_{14}O_6$	97-30-3	194,2	-6381,4	-6415,8	34,5
méthyl-β-D-glucopyranoside	$C_7H_{14}O_6$	709-50-2	194,2	-6392,3	-6415,8	23,5
méthyl-α-D-galactopyranoside	$C_7H_{14}O_6$	3396-99-4	194,2	-6371,2	-6415,8	44,6
méthyl-β-D-galactopyranoside	$C_7H_{14}O_6$	1824-94-8	194,2	-6435,3	-6415,8	-19,5
N-phényl-benzaldéhyde-imine	$C_{13}H_{11}N$	538-51-2	181,2	1002,0	-	-
N-benzylaniline	$C_{13}H_{13}N$	103-32-2	183,2	553,3	-	-
2-phénylquinoline	$C_{15}H_{11}N$	612-96-4	205,3	885,7	-	-
N-cyclohexyl-(2,4,6-triméthyl)-benzaldéhyde-imine	$C_{16}H_{23}N$		229,4	-558,1	-	-
N-benzyl-pivalophénone-imine	$C_{18}H_{21}N$		251,4	185,9	-	-
2,4,6-tri-tert-butylaniline	$C_{18}H_{31}N$	961-38-6	261,4	-1097,0	-1216,7	119,7
N-phényl-benzophénone-imine	$C_{19}H_{15}N$		257,3	981,2	-	-
pipérazine	$C_4H_{10}N_2$	110-85-0	86,1	-475,6	-1761,1	**1285,4**
3,5-diméthylpyrazole	$C_5H_8N_2$	67-51-6	96,1	196,6	-3232,7	**3429,3**
2,2'-biquinoline	$C_8H_{12}N_2$	119-91-5	136,2	1946,5	-	-
4-aminoquinaldine	$C_{10}H_{10}N_2$	6628-04-2	158,2	216,2	283,1	-66,9
2-propylbenzimidazole	$C_{10}H_{12}N_2$		160,2	-288,4	-136,3	-152,0
2-isopropylbenzimidazole	$C_{11}H_{14}N_2$	5851-43-4	174,2	-181,4	-	-
2-phénylbenzimidazole	$C_{13}H_{10}N_2$	716-79-0	194,2	695,0	628,0	67,0
2-benzylbenzimidazole	$C_{14}H_{12}N_2$	621-72-7	208,3	494,6	538,8	-44,2
2,3-dicyanopyrazine	$C_6H_2N_4$		130,1	3301,9	-	-

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			$g.mol^{-1}$	$J.g^{-1}$	$J.g^{-1}$	$J.g^{-1}$
5,10,15,20-tétraphénylporphine	$C_{44}H_{30}N_4$	917-23-7	614,7	1065,5	-	-
4-méthylpyridine N-oxyde	C_6H_7NO	1003-67-4	109,1	51,3	-	-
1-hydroxyisoquinoline	C_9H_7NO	491-30-5	145,2	-1011,3	-788,4	-222,9
5-hydroxyisoquinoline	C_9H_7NO	2439-04-5	145,2	-598,0	-431,7	-166,3
3-hydroxypyridine N-oxyde	$C_5H_5NO_2$	6602-28-4	111,1	-1541,9	-	-
2-hydroxypyridine N-oxyde	$C_5H_5NO_2$		111,1	-1788,5	-	-
2,3-dihydroxypyridine	$C_5H_5NO_2$	16867-04-2	111,1	-3357,4	-3416,0	58,6
D-valine	$C_5H_{11}NO_2$	640-68-6	117,1	-5231,9	-5091,5	-140,4
L-valine	$C_5H_{11}NO_2$	72-18-4	117,1	-5247,3	-5091,5	-155,8
DL-valine	$C_5H_{11}NO_2$	7004-03-7	117,1	-5267,8	-5091,5	-176,3
acide 2-pyridinecarboxylique	$C_6H_5NO_2$	98-98-6	123,1	-2769,9	-	-
acide 4-pyridinecarboxylique	$C_6H_5NO_2$	55-22-1	123,1	-2832,4	-	-
1,5-dihydroxyisoquinoline	$C_9H_7NO_2$	5154-02-9	161,2	-2158,8	-1932,4	-226,4
2,6-di-isopropylnitrobenzène	$C_{12}H_{17}NO_2$		207,3	-779,2	-482,7	-296,5
2,4,6-tri-tert-butylnitrobenzène	$C_{18}H_{29}NO_2$	4074-25-3	291,4	-1033,9	-1110,0	76,1
acide 2-pyridinecarboxylique N-oxyde	$C_6H_5NO_3$	824-40-8	139,1	-2617,4	-	-
acide 4-pyridinecarboxylique N-oxyde	$C_6H_5NO_3$	13602-12-5	139,1	-2740,3	-	-
2-méthoxy-4-nitrophénol	$C_7H_7NO_4$	3251-56-7	169,1	-2229,0	-2091,8	-137,2
2-méthoxy-5-nitrophénol	$C_7H_7NO_4$	636-93-1	169,1	-2211,8	-2091,8	-120,0
4-méthoxy-2-nitrophénol	$C_7H_7NO_4$	1568-70-3	169,1	-2153,9	-2085,0	-68,9
3-cyanopyridine N-oxyde	$C_6H_4N_2O$		120,1	1422,9	-	-
4-cyanopyridine N-oxyde	$C_6H_4N_2O$	14906-59-3	120,1	1355,4	-	-
nicotinamide	$C_6H_6N_2O$	98-92-0	122,1	-1229,1	-1184,7	-44,4
isonicotinamide	$C_6H_6N_2O$	1453-82-3	122,1	-1229,9	-	-
picolinamide	$C_6H_6N_2O$	1452-77-3	122,1	-1280,7	-	-
acide pyrazinecarboxylique	$C_5H_4N_2O_2$	98-97-5	124,1	-2185,4	-	-
nicotinamide N-oxyde	$C_6H_6N_2O_2$		138,1	-1442,2	-	-

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}
isonicotinamide N-oxyde	$C_6H_6N_2O_2$		138,1	-1439,3	-	-
5-méthoxybenzofurazane	$C_7H_6N_2O_2$	4413-48-3	150,1	385,7	-	-
5-nitroquinoline	$C_9H_6N_2O_2$	607-34-1	174,2	627,0	407,3	219,7
6-nitroquinoline	$C_9H_6N_2O_2$	613-50-3	174,2	507,6	407,3	100,3
8-nitroquinoline	$C_9H_6N_2O_2$	607-35-2	174,2	575,3	407,3	168,1
8-nitroquinaldine	$C_{10}H_8N_2O_2$	881-07-2	188,2	294,4	166,2	128,2
N-benzoyl-N',N'-diéthylurée	$C_{12}H_{16}N_2O_2$		220,3	-2175,5	-2230,0	54,5
N-phényl-4-nitrobenzaldéhyde-imine	$C_{13}H_{10}N_2O_2$		226,2	607,8	-	-
benzoxazino-benzoxazine	$C_{14}H_{12}N_2O_2$		240,3	-752,9	-	-
N-benzoyl-N',N'-diisobutylurée	$C_{16}H_{24}N_2O_2$		276,4	-2108,7	-2117,7	9,0
3-méthyl-4-nitropyridine N-oxyde	$C_6H_6N_2O_3$	1074-98-2	154,1	-126,5	-	-
pyrazinamide	$C_5H_5N_3O$	98-96-4	123,1	-759,5	-	-
3,5-diméthyl-4-nitrosopyrazole	$C_5H_7N_3O$		125,1	888,7	-	-
1,3,5-triméthyl-4-nitrosopyrazole	$C_6H_9N_3O$		139,2	804,1	-	-
3,5-diméthyl-1-phényl-4-nitrosopyrazole	$C_{11}H_{11}N_3O$		201,2	1042,1	-	-
5-amino-6-nitroquinoline	$C_9H_7N_3O_2$	35975-00-9	189,2	316,6	194,9	121,7
5,10,15,20-tétrakis(4-méthoxyphényl)porphine	$C_{48}H_{38}N_4O_4$	22112-78-3	734,8	93,9	-685,9	**779,8**
inosine	$C_{10}H_{12}N_4O_5$	58-63-9	268,2	-3161,1	-	-
adénosine	$C_{10}H_{13}N_5O_4$	58-61-7	267,2	-2445,7	-	-

Annexe 11

Enthalpies standard de formation en phase solide mesurées et calculées des 25 molécules C-H-N-O analysées

Les résultats sont ici présentés en joules par gramme

A noter que les écarts entre les enthalpies de formation en phase solide mesurées et calculées étant strictement supérieurs à 500 $J.g^{-1}$ en valeur absolue (soit l'erreur limite acceptable) sont mis en évidence. Ils sont inscrits en gras dans les tableaux qui suivent.

Enthalpies standard de formation en phase solide mesurées et calculées des 5 molécules C_xH_y analysées

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_fH°_{s,m}$ (exp.)	Salmon		Domalski *et al.*		Cohen	
					$\Delta_fH°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_fH°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_fH°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}
pentaméthylbenzène	$C_{11}H_{16}$	700-12-9	148,2	-972,6	-993,2	20,6	-874,7	-97,9	-908,6	-63,9
nonadécane	$C_{19}H_{40}$	629-92-5	268,5	-2147,4	-2163,6	16,2	-2210,1	62,7	-2170,0	22,7
docosane	$C_{22}H_{46}$	629-97-0	310,6	-2188,7	-2157,8	-30,8	-2194,7	6,0	-2159,0	-29,6
tricosane	$C_{23}H_{48}$	638-67-5	324,6	-2273,2	-2156,3	-116,9	-2190,5	-82,6	-2156,0	-117,1
tétracosane	$C_{24}H_{50}$	646-31-1	338,7	-2161,2	-2154,8	-6,4	-2186,6	25,4	-2153,2	-8,0

Enthalpies standard de formation en phase solide mesurées et calculées des 5 molécules $C_xH_yO_z$ analysées

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_fH°_{s,m}$ (exp.)	Salmon		Domalski *et al.*		Cohen	
					$\Delta_fH°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_fH°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_fH°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}
2-adamantanone	$C_{10}H_{14}O$	700-58-3	150,2	-2106,9	-	-	-2095,0	-11,9	-2069,7	-37,2
acide 2-méthylbenzoïque	$C_8H_8O_2$	118-90-1	136,1	-3105,4	-3146,9	41,4	-3090,2	-15,3	-3008,5	-96,9
acide salicylique	$C_7H_6O_3$	69-72-7	138,1	-4351,0	-3999,8 (-4286,8)*	-351,1 (-64,1)*	-4279,8	-71,2	-4192,0	-159,0
acide pentanedioïque	$C_5H_8O_4$	110-94-1	132,1	-7353,8	-7285,4	-68,3	-7241,5	-112,2	-7283,8	-69,9
acide hexanedioïque	$C_6H_{10}O_4$	124-04-9	146,1	-6842,8	-6789,7	-53,1	-6747,7	-95,1	-6785,9	-56,9

* *cf.* explications fournies dans le paragraphe 2.2.1. b. du chapitre IV

Enthalpies standard de formation en phase solide mesurées et calculées des 8 molécules $C_xH_yN_w$ analysées

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_fH°_{s,m}$ (exp.)	Salmon		Domalski *et al.*	
					$\Delta_fH°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_fH°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}
diphénylamine	$C_{12}H_{11}N$	122-39-4	169,2	664,7	471,6	193,1	769,4	-104,7
2-aminopyridine	$C_5H_6N_2$	504-29-0	94,1	386,4	290,2	96,3	757,3	-370,8
phtalonitrile	$C_8H_4N_2$	91-15-6	128,1	2077,9	2133,4	-55,4	2134,7	-56,7
5,6-diméthylbenzimidazole	$C_9H_{10}N_2$	582-60-5	146,2	-61,9	-36,5	-25,5	-	-
1,2,4-triazole	$C_2H_3N_3$	288-88-0	69,1	1419,6	-	-	-	-
benzotriazole	$C_6H_5N_3$	95-14-7	119,1	1782,2	1850,0	-67,8	-	-
4-amino-1,2,4-triazole	$C_2H_2N_4$	584-13-4	82,1	2714,7	-	-	-	-
mélamine	$C_3H_6N_6$	108-78-1	126,1	-642,0	-645,2	3,2	836,1	**-1478,1**

Enthalpies standard de formation en phase solide mesurées et calculées des 7 molécules $C_xH_yN_wO_z$ analysées

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_fH°_{s,m}$ (exp.)	Salmon		Domalski *et al.*	
					$\Delta_fH°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_fH°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}
acide picolinique N-oxyde	$C_6H_5NO_3$	824-40-8	139,1	-2866,7	-	-	-	-
uracile	$C_4H_4N_2O_2$	66-22-8	112,1	-4022,1	-3831,0	-191,2	-2386,0	**-1636,1**
phtalhydrazide	$C_8H_6N_2O_2$		162,1	-1838,6	-	-	-	-
4-nitro-imidazole	$C_3H_3N_3O_2$	3034-38-6	113,1	-239,0	-	-	-	-
2-méthyl-5-nitro-imidazole	$C_4H_5N_3O_2$	88054-22-2	127,1	-545,5	-	-	-	-
5-nitro-uracile	$C_4H_3N_3O_4$	611-08-5	157,1	-2995,6	-2929,4	-66,2	-1868,2	**-1127,4**
azodicarbonamide	$C_2H_4N_4O_2$	123-77-3	116,1	-2767,8	-2519,8	-247,9	-	-

Annexe 12

Comparaison des enthalpies standard de formation en phase solide issues de la littérature avec les enthalpies représentées par la méthode développée et avec les enthalpies prévues par la méthode de Cohen, concernant 401 molécules C-H-O

Les résultats sont ici présentés en joules par gramme

A noter que les écarts entre les enthalpies de formation en phase solide mesurées et calculées étant strictement supérieurs à 500 $J.g^{-1}$ en valeur absolue (soit l'erreur limite acceptable) sont mis en évidence. Ils sont inscrits en gras dans les tableaux qui suivent.

Comparaison des enthalpies standard de formation en phase solide issues de la littérature avec les enthalpies représentées par la méthode développée et avec les enthalpies prévues par la méthode de Cohen, concernant 145 molécules contenant carbone et hydrogène

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Cohen	
					$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}
2-norbornène	C_7H_{10}	498-66-8	94,2	561,8	1706,2	**-1144,4**	562,9	-1,1
norbornane	C_7H_{12}	279-23-2	96,2	-988,9	-991,4	2,5	-1000,3	11,4
cubane	C_8H_8	277-10-1	104,1	5202,2	5190,4	11,7	-1282,8	**6484,9**
bicyclo[2.2.2]oct-2-ène	C_8H_{12}	931-64-6	108,2	-215,4	-215,4	0,0	-214,5	-0,9
bicyclo[2.2.2]octane	C_8H_{14}	280-33-1	110,2	-1333,1	-1333,1	0,0	-1898,4	**565,4**
2,2,3,3-tétraméthylbutane	C_8H_{18}	594-82-1	114,2	-2354,1	-2195,7	-158,4	-2242,9	-111,2
7,7-diméthyl-bicyclo[2.2.1]heptane	C_9H_{16}	2034-53-9	124,2	-1193,0	-1208,5	15,5	-1160,8	-32,2
bicyclo[3.3.1]nonane	C_9H_{16}	280-65-9	124,2	-1434,5	-1434,5	0,0	-1431,3	-3,2
azulène	$C_{10}H_8$	275-51-4	128,2	1656,4	1452,3	204,1	1654,8	1,6
naphtalène	$C_{10}H_8$	91-20-3	128,2	607,8	575,8	32,0	667,9	-60,1
1,2,4,5-tétraméthylbenzène	$C_{10}H_{14}$	95-93-2	134,2	-893,3	-819,8	-73,5	-806,2	-87,2
3a,4,5,6,7,7a-hexahydro-4,7-méthanoindène	$C_{10}H_{14}$	4488-57-7	134,2	-178,1	35,6	-213,7	-55,1	-122,9
octahydro-4,7-méthano-1H-indène	$C_{10}H_{16}$	6004-38-2	136,2	-828,7	-809,3	-19,4	-951,3	122,6
adamantane	$C_{10}H_{16}$	281-23-2	136,2	-1424,8	-1421,0	-3,8	-1421,1	-3,7
protoadamantane	$C_{10}H_{16}$	53130-19-1	136,2	-1106,9	-999,5	-107,5	-1780,8	**673,8**
camphène	$C_{10}H_{16}$	79-92-5	136,2	-553,5	-605,2	51,7	-	-
bicyclo[3.3.2]décane	$C_{10}H_{18}$	283-50-1	138,2	-1187,7	-1240,7	53,0	-1186,3	-1,5
2-méthylnaphtalène	$C_{11}H_{10}$	91-57-6	142,2	315,8	276,1	39,7	345,3	-29,5
pentaméthylbenzène	$C_{11}H_{16}$	700-12-9	148,2	-901,2	-993,2	92,0	-908,6	7,4
1-méthyladamantane	$C_{11}H_{18}$	768-91-2	150,3	-1592,6	-1573,0	-19,5	-1432,8	-159,7
2-méthyladamantane	$C_{11}H_{18}$	700-56-1	150,3	-1461,5	-1403,4	-58,1	-1429,5	-31,9
bicyclo[3.3.3]undécane	$C_{11}H_{20}$	29415-95-0	152,3	-1001,5	-1001,5	0,0	-1000,2	-1,3
biphénylène	$C_{12}H_8$	259-79-0	152,2	2194,6	2194,6	0,0	2197,9	-3,3
acénaphtylène	$C_{12}H_8$	208-96-8	152,2	1226,7	1226,7	0,0	992,2	234,6
biphényle	$C_{12}H_{10}$	92-52-4	154,2	644,6	593,9	50,7	647,2	-2,6
acénaphtène	$C_{12}H_{10}$	83-32-9	154,2	455,9	455,9	0,0	459,1	-3,2

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Cohen	
					$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}
1,8-diméthylnaphtalène	$C_{12}H_{12}$	569-41-5	156,2	165,8	175,5	-9,7	214,4	-48,7
2,3-diméthylnaphtalène	$C_{12}H_{12}$	581-40-8	156,2	-14,7	40,9	-55,7	96,7	-111,4
2,6-diméthylnaphtalène	$C_{12}H_{12}$	581-42-0	156,2	-36,5	-36,5	0,0	80,7	-117,1
2,7-diméthylnaphtalène	$C_{12}H_{12}$	582-16-1	156,2	-34,6	-34,6	0,0	80,7	-115,2
hexacyclo[6.2.1.1^{3,6}.0^{2,7}.0^{4,10}.0^{5,9}]dodécane	$C_{12}H_{14}$	704-02-9	158,2	322,9	369,2	-46,3	-1584,9	**1907,9**
hexaméthylbenzène	$C_{12}H_{18}$	87-85-4	162,3	-995,2	-1099,6	104,3	-1024,2	29,0
(E,E,E)-1,5,9-cyclododécatriène	$C_{12}H_{18}$	676-22-2	162,3	163,9	1111,2	**-947,2**	170,1	-6,2
2,2,7,7-tétraméthylocta-3,5-diyne	$C_{12}H_{18}$	6130-98-9	162,3	962,0	1461,1	-499,2	967,5	-5,6
2,2-diméthyladamantane	$C_{12}H_{20}$	19740-34-2	164,3	-1560,1	-1544,0	-16,1	-1470,6	-89,5
1,3-diméthyladamantane	$C_{12}H_{20}$	702-79-4	164,3	-1743,3	-1699,1	-44,2	-1463,3	-280,0
cyclododécane	$C_{12}H_{24}$	294-62-2	168,3	-1821,5	-1821,5	0,0	-1815,6	-5,9
4-méthyl-1,1'-biphényle	$C_{13}H_{12}$	644-08-6	168,2	329,3	339,1	-9,8	376,3	-47,0
diphénylméthane	$C_{13}H_{12}$	101-81-5	168,2	425,0	340,7	84,3	369,1	55,9
1,3,5-triméthyladamantane	$C_{13}H_{22}$	707-35-7	178,3	-1863,6	-1805,4	-58,2	-1450,8	-412,8
diphényléthyne	$C_{14}H_{10}$	501-65-5	178,2	1752,8	1697,8	55,0	1714,7	38,2
anthracène	$C_{14}H_{10}$	120-12-7	178,2	724,9	722,8	2,1	748,5	-23,6
phénantrène	$C_{14}H_{10}$	85-01-8	178,2	652,0	644,5	7,5	686,8	-34,8
9,10-dihydro-anthracène	$C_{14}H_{12}$	613-31-0	180,2	368,4	312,2	56,2	350,6	17,8
(E)-stilbène	$C_{14}H_{12}$	103-30-0	180,2	759,5	813,5	-54,0	759,0	0,6
4,4'-diméthylbiphényle	$C_{14}H_{14}$	613-33-2	182,3	77,4	123,5	-46,1	147,0	-69,7
bibenzyle	$C_{14}H_{14}$	103-29-7	182,3	282,6	234,5	48,1	180,0	102,6
1,4,5,8-tétraméthylnaphtalène	$C_{14}H_{16}$	2717-39-7	184,3	-98,8	-102,9	4,1	-100,9	2,2
1,2,3,4,5,6,7,8-octahydro-anthracène	$C_{14}H_{18}$	1079-71-6	186,3	-641,5	141,0	**-782,4**	-643,1	1,6
1,8-cyclotétradécadiyne	$C_{14}H_{20}$	1540-80-3	188,3	784,9	1467,2	**-682,3**	781,7	3,2
diadamantane	$C_{14}H_{20}$	2292-79-7	188,3	-1284,1	-1168,6	-115,4	-1220,9	-63,2
1,1,4,6,7-pentaméthylindane	$C_{14}H_{20}$	6682-67-3	188,3	-929,9	-924,0	-5,9	-912,3	-17,5
trans-anti-trans-tétradécahydro-anthracène	$C_{14}H_{24}$	28071-99-0	192,3	-1524,9	-1655,0	130,1	-1715,7	190,8
1,3,5,7-tétraméthyladamantane	$C_{14}H_{24}$	1687-36-1	192,3	-1901,8	-1896,1	-5,7	-1563,9	-337,9

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Cohen	
					$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}
cyclotétradécane	$C_{14}H_{28}$	295-17-0	196,4	-1904,5	-1904,6	0,0	-1905,6	1,0
cis-1,4-Di-tert-butyl-cyclohexane	$C_{14}H_{28}$	4789-34-8	196,4	-1905,1	-1970,9	65,9	-2035,9	130,9
trans-1,4-Di-tert-butyl-cyclohexane	$C_{14}H_{28}$	4789-35-9	196,4	-2046,1	-1970,9	-75,2	-2123,5	77,4
1,4-diméthyl-7-(1-méthyléthyl)-azulène	$C_{15}H_{18}$	489-84-9	198,3	308,1	1506,4	**-1198,3**	310,1	**-618,2**
4-méthyldiadamantane	$C_{15}H_{22}$	30545-28-9	202,3	-1292,4	-1299,0	6,6	-1260,3	-32,1
3-méthyldiadamantane	$C_{15}H_{22}$	28375-86-2	202,3	-1287,0	-1299,0	12,1	-1260,3	-26,7
1-méthyldiadamantane	$C_{15}H_{22}$	26460-76-4	202,3	-1222,7	-1299,0	76,3	-1209,9	-12,9
cyclopentadécane	$C_{15}H_{30}$	295-48-7	210,4	-1787,6	-1787,6	0,0	-1790,4	2,9
1,1'-(1,3-butadiyne-1,4-diyl)bis-benzène	$C_{16}H_{10}$	886-66-8	202,3	2563,2	2563,2	0,0	2532,5	30,7
fluoranthène	$C_{16}H_{10}$	206-44-0	202,3	938,9	938,9	0,0	942,4	-3,5
pyrène	$C_{16}H_{10}$	129-00-0	202,3	620,5	666,8	-46,3	849,4	-228,9
bis-(2-méthylphényl)-acétylène	$C_{16}H_{14}$	5294-03-1	206,3	1138,2	1148,3	-10,0	1151,8	-13,6
Di-p-tolylacétylène	$C_{16}H_{14}$	2789-88-0	206,3	1094,6	1132,1	-37,5	1127,6	-33,0
(Z,Z)-1,4-diphénylbutadiène	$C_{16}H_{14}$	5807-76-1	206,3	963,7	898,9	64,8	915,3	48,5
(E,E)-1,4-diphénylbutadiène	$C_{16}H_{14}$	538-81-8	206,3	866,8	877,6	-10,8	874,5	-7,8
2,7-diméthylphénantrène	$C_{16}H_{14}$	1576-69-8	206,3	176,5	221,9	-45,5	239,5	-63,0
4,5-diméthylphénantrène	$C_{16}H_{14}$	3674-69-9	206,3	431,4	221,9	209,5	442,1	-10,7
9,10-diméthylphénantrène	$C_{16}H_{14}$	604-83-1	206,3	230,8	230,1	0,7	251,6	-20,9
1,1-Di-o-tolyléthylène	$C_{16}H_{16}$	2919-19-9	208,3	427,3	427,9	-0,6	522,8	-95,5
cis-1,2-Di-o-tolyléthène	$C_{16}H_{16}$	10311-74-7	208,3	412,4	388,4	24,0	350,5	61,9
trans-1,2-Di-o-tolyléthène	$C_{16}H_{16}$	36888-18-3	208,3	359,6	388,4	-28,8	330,3	29,3
1,1-Di-p-tolyléthylène	$C_{16}H_{16}$	2919-20-2	208,3	412,4	411,8	0,6	498,8	-86,4
(Z)-1,2-bis(4-méthylphényl)éthène	$C_{16}H_{16}$	2510-76-1	208,3	470,0	372,3	97,7	326,5	143,5
(E)-1,2-bis(4-méthylphényl)éthène	$C_{16}H_{16}$	18869-29-9	208,3	278,0	372,3	-94,3	306,3	-28,3
[2.2]métacyclophane	$C_{16}H_{16}$	2319-97-3	208,3	376,9	376,9	0,0	-48,0	424,9
[2.2]paracyclophane	$C_{16}H_{16}$	1633-22-3	208,3	696,6	395,8	300,8	-48,0	**744,6**
[2.2]métaparacyclophane	$C_{16}H_{16}$	5385-36-4	208,3	628,4	628,4	0,0	-48,0	**676,4**
[16]annulène	$C_{16}H_{16}$	3332-38-5	208,3	2628,4	2628,4	0,0	2638,5	-10,1

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Cohen	
					$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}
1,2-Di-o-tolyléthane	$C_{16}H_{18}$	952-80-7	210,3	-190,2	-109,4	-80,8	-167,4	-22,8
1,2-Di-p-tolyléthane	$C_{16}H_{18}$	538-39-6	210,3	-200,2	-125,3	-74,9	-191,1	-9,0
1,4-diphénylbutane	$C_{16}H_{18}$	1083-56-3	210,3	-47,1	-79,8	32,7	-122,7	75,6
tricyclo[8.2.2.2^{4,7}]hexadécane	$C_{16}H_{28}$	283-68-1	220,4	-1107,6	-1107,6	0,0	-1898,4	**790,9**
cyclohexadécane	$C_{16}H_{32}$	295-65-8	224,4	-1797,5	-1797,5	0,0	-1797,9	0,5
cycloheptadécane	$C_{17}H_{34}$	295-97-6	238,5	-1805,0	-1805,0	0,0	-1808,3	3,4
triphénylène	$C_{18}H_{12}$	217-59-4	228,3	664,9	621,8	43,1	649,2	15,8
chrysène	$C_{18}H_{12}$	218-01-9	228,3	636,5	683,0	-46,5	697,4	-60,9
benzo[c]phénantrène	$C_{18}H_{12}$	195-19-7	228,3	809,9	753,3	56,7	685,1	124,8
benzo[a]anthracène	$C_{18}H_{12}$	56-55-3	228,3	748,2	744,2	4,0	745,6	2,6
naphtacène	$C_{18}H_{12}$	92-24-0	228,3	695,6	805,4	-109,8	793,7	-98,1
5,12-dihydro-naphtacène	$C_{18}H_{14}$	959-02-4	230,3	462,0	483,3	-21,3	482,0	-20,0
[18]annulène	$C_{18}H_{18}$	2040-73-5	234,3	697,3	697,3	0,0	1717,2	**-1019,9**
3,4,5,6-tétraméthylphénantrène	$C_{18}H_{18}$	7343-06-8	234,3	99,9	-85,1	185,0	99,0	0,9
2,4,5,7-tétraméthylphénantrène	$C_{18}H_{18}$	7396-38-5	234,3	52,1	-99,4	151,5	77,7	-25,6
[3.3]paracyclophane	$C_{18}H_{20}$	2913-24-8	236,4	111,3	97,0	14,2	-290,3	401,5
1,2,3,4,5,6,7,8,9,10,11,12-dodécahydro-triphénylène	$C_{18}H_{24}$	1610-39-5	240,4	-806,6	124,8	**-931,5**	-807,0	0,4
1,2,4-Tri-tert-butylbenzène	$C_{18}H_{30}$	1459-11-6	246,4	-1021,0	-958,3	-62,6	-535,2	-485,7
1,3,5-Tri-tert-butylbenzène	$C_{18}H_{30}$	1460-02-2	246,4	-1306,2	-1250,5	-55,8	-1300,2	-6,1
octadécane	$C_{18}H_{38}$	593-45-3	254,5	-2229,5	-2165,9	-63,6	-2174,5	-55,0
triphénylméthane	$C_{19}H_{16}$	519-73-3	244,3	700,7	688,3	12,4	703,2	-2,5
2,2',4,4',5,5'-hexaméthyldiphénylméthane	$C_{19}H_{24}$	4957-16-8	252,4	-611,7	-554,2	-57,5	-562,2	-49,5
pérylène	$C_{20}H_{12}$	198-55-0	252,3	724,5	641,9	82,6	661,1	63,4
9,10-dihydro-9,10[1',2']benzénoanthracène	$C_{20}H_{14}$	477-75-8	254,3	853,6	855,6	-1,9	854,0	-0,4
triphényléthylène	$C_{20}H_{16}$	58-72-0	256,3	910,5	884,1	26,4	875,4	35,1
5,8-diméthylbenzo[c]phénantrène	$C_{20}H_{16}$	54986-63-9	256,3	422,1	309,9	112,2	325,4	96,8
1,12-diméthylbenzo[c]phénantrène	$C_{20}H_{16}$	4076-43-1	256,3	602,7	309,9	292,8	406,9	195,8
3,9-diméthylbenz[a]anthracène	$C_{20}H_{16}$	316-51-8	256,3	297,3	393,3	-96,0	379,2	-81,9

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Cohen	
					$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}
1,12-diméthylbenz[a]anthracène	$C_{20}H_{16}$	313-74-6	256,3	542,2	393,3	149,0	542,3	0,0
9,10-diméthyl-1,2-benzanthracène	$C_{20}H_{16}$	57-97-6	256,3	561,0	416,7	144,2	460,7	100,3
5,6-diméthylchrysène	$C_{20}H_{16}$	3697-27-6	256,3	516,9	345,3	171,6	427,6	89,3
1,1,1-triphényléthane	$C_{20}H_{18}$	5271-39-6	258,4	608,5	615,4	-7,0	828,3	-219,9
1,1,2-triphényléthane	$C_{20}H_{18}$	1520-42-9	258,4	504,0	496,4	7,6	491,6	12,4
1-(2-naphtalénylméthyl)naphtalène	$C_{21}H_{16}$	611-48-3	268,4	603,7	623,7	-20,0	587,7	16,0
1',2',3',4'-tétrahydro-1,2-dinaphtylméthane	$C_{21}H_{20}$	56818-06-5	272,4	161,9	437,6	-275,7	17,6	144,3
[1.8]paracyclophane	$C_{21}H_{26}$	6169-94-4	278,4	-294,1	-282,1	-12,1	-562,1	267,9
1,2,4,5-Tétra-tert-butylbenzène	$C_{22}H_{38}$	796-97-4	302,5	-984,7	-1367,7	383,0	-981,0	-3,6
tris(2-méthylphényl)éthylène	$C_{23}H_{22}$	62155-47-9	298,4	419,5	429,0	-9,5	410,2	9,4
tris(4-méthylphényl)éthylène	$C_{23}H_{22}$	6629-83-0	298,4	406,1	412,2	-6,1	385,0	21,1
1,1,2-Tri-o-tolyléthane	$C_{23}H_{24}$		300,4	81,2	98,7	-17,4	83,2	-2,0
1,1,2-Tri-p-tolyléthane	$C_{23}H_{24}$	27497-47-8	300,4	54,6	81,9	-27,4	58,3	-3,7
1,3,5-triphénylbenzène	$C_{24}H_{18}$	612-71-5	306,4	733,0	774,2	-41,1	730,4	2,6
[6.6]paracyclophane	$C_{24}H_{32}$	4384-23-0	320,5	-601,2	-485,5	-115,8	-762,5	161,3
tétraphénylméthane	$C_{25}H_{20}$	630-76-2	320,4	771,2	752,7	18,5	772,7	-1,6
1,3,6-triphénylcycloheptatriène	$C_{25}H_{20}$	17760-68-8	320,4	854,8	1050,3	-195,5	855,7	-0,9
9,10-diphénylanthracène	$C_{26}H_{18}$	1499-10-1	330,4	934,3	848,8	85,5	779,0	155,3
tétraphényléthylène	$C_{26}H_{20}$	632-51-9	332,4	937,0	915,8	21,2	938,5	-1,5
1,1,1,2-tétraphényléthane	$C_{26}H_{22}$	2294-94-2	334,5	666,8	651,6	15,2	815,4	-148,6
1,1,2,2-tétraphényléthane	$C_{26}H_{22}$	632-50-8	334,5	645,8	639,1	6,8	661,4	-15,6
3-phényléicosane	$C_{26}H_{46}$	2400-02-4	358,6	-1530,2	-1498,7	-31,6	-1505,4	-24,8
9,9'-bianthracène	$C_{28}H_{18}$	1055-23-8	354,4	920,3	917,5	2,9	821,0	99,3
9,9'-biphénanthryl	$C_{28}H_{18}$	20532-03-0	354,4	600,4	838,6	-238,3	758,9	-158,6
1,1,4,4-tétraphényl-1,3-butadiène	$C_{28}H_{22}$	1450-63-1	358,5	920,3	951,4	-31,1	992,0	-71,7
1,2,3,4-tétraphényl-1,3-butadiène	$C_{28}H_{22}$	806-71-3	358,5	1001,2	1001,2	0,0	1024,3	-23,2
1,1,4,4-tétraphénylbutane	$C_{28}H_{26}$	1483-64-3	362,5	450,5	440,1	10,4	1011,9	**-561,4**
tétra-p-tolyléthène	$C_{30}H_{28}$	5831-43-6	388,5	441,4	428,0	13,4	427,2	14,2

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Cohen	
					$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}
1,1,2,2-Tétra-p-tolyléthane	$C_{30}H_{30}$	40673-57-2	390,6	188,4	207,1	-18,7	715,4	**-526,9**
cyclotriacontane	$C_{30}H_{60}$	297-35-8	420,8	-2128,6	-2121,3	-7,3	-2088,9	-36,7
13-phénylpentacosane	$C_{31}H_{56}$	6006-90-2	428,8	-1602,2	-1600,5	-1,7	-1600,8	-1,4
pentaphényléthane	$C_{32}H_{26}$	19112-42-6	410,5	928,5	739,1	189,4	893,7	34,8
dotriacontane	$C_{32}H_{66}$	544-85-4	450,9	-2147,6	-2146,5	-1,2	-2137,2	-10,4
hexaphényléthane	$C_{38}H_{30}$	17854-07-8	486,6	1051,7	807,9	243,8	1053,3	-1,6
5,6,11,12-tétraphénylnaphtacène	$C_{42}H_{28}$	517-51-1	532,7	1164,5	1078,4	86,1	884,2	280,3

Comparaison des enthalpies standard de formation en phase solide issues de la littérature avec les enthalpies représentées par la méthode développée et avec les enthalpies prévues par la méthode de Cohen, concernant 256 molécules contenant carbone, hydrogène et oxygène

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Cohen	
					$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}
phénol	C_6H_6O	108-95-2	94,1	-1754,3	-1893,6	139,3	-1786,2	31,9
2-méthylphénol	C_7H_8O	95-48-7	108,1	-1892,0	-1966,8	74,8	-1833,8	-58,3
4-méthylphénol	C_7H_8O	106-44-5	108,1	-1843,0	-1967,4	124,4	-1892,0	49,0
4-éthylphénol	$C_8H_{10}O$	123-07-9	122,2	-1836,9	-1745,0	-91,9	-1897,4	60,6
2,3-diméthylphénol	$C_8H_{10}O$	526-75-0	122,2	-1974,4	-2010,0	35,6	-1901,5	-72,9
2,5-diméthylphénol	$C_8H_{10}O$	95-87-4	122,2	-2018,6	-2023,7	5,1	-1922,0	-96,6
2,6-diméthylphénol	$C_8H_{10}O$	576-26-1	122,2	-1943,3	-2023,2	79,9	-1870,4	-72,9
3,4-diméthylphénol	$C_8H_{10}O$	95-65-8	122,2	-1983,4	-2010,5	27,1	-1953,1	-30,3
3,5-diméthylphénol	$C_8H_{10}O$	108-68-9	122,2	-2000,6	-2024,2	23,6	-1973,6	-27,0
2-isopropylphénol	$C_9H_{12}O$	88-69-7	136,2	-1810,7	-1688,0	-122,7	-1797,5	-13,2
3-isopropylphénol	$C_9H_{12}O$	618-45-1	136,2	-1931,1	-1688,5	-242,7	-1843,7	-87,4
4-isopropylphénol	$C_9H_{12}O$	99-89-8	136,2	-2053,7	-1688,5	-365,3	-1843,7	-210,0
1-naphtol	$C_{10}H_8O$	90-15-3	144,2	-839,3	-854,4	15,1	-834,4	-4,9
2-naphtol	$C_{10}H_8O$	135-19-3	144,2	-861,5	-854,4	-7,1	-834,4	-27,1
1,2,3,4-tétrahydro-1-naphtol	$C_{10}H_{12}O$	529-33-9	148,2	-1628,9	-1197,1	-431,8	-1711,2	82,3
5,6,7,8-tétrahydro-1-naphtol	$C_{10}H_{12}O$	529-35-1	148,2	-1925,1	-1177,2	**-747,9**	-1832,6	-92,4
2-isopropyl-5-méthylphénol	$C_{10}H_{14}O$	89-83-8	150,2	-1866,2	-1760,3	-105,7	-1872,6	6,7
1-adamantanol	$C_{10}H_{16}O$	768-95-6	152,2	-2611,8	-2751,4	139,6	-2623,0	11,2
2-adamantanol	$C_{10}H_{16}O$	700-57-2	152,2	-2548,7	-2532,6	-16,1	-2425,2	-123,5
exo-4-hydroxy-exo-exo-tétracyclo[6.2.1.1^{3,6}.0^{2,7}]dodécane	$C_{12}H_{18}O$	74007-11-7	178,3	-1598,1	-1585,1	-13,1	-1594,2	-3,9
exo-4-hydroxy-exo-endo-tétracyclo[6.2.1.1^{3,6}.0^{2,7}]dodécane	$C_{12}H_{18}O$	107133-43-7	178,3	-1650,9	-1585,1	-65,8	-1603,7	-47,1
exo-4-hydroxy-endo-endo-tétracyclo[6.2.1.1^{3,6}.0^{2,7}]dodécane	$C_{12}H_{18}O$	7273-98-5	178,3	-1482,0	-1585,1	103,0	-1603,7	121,7
(1,1'-biphényl)méthanol	$C_{13}H_{12}O$	41376-19-6	184,2	-568,8	-660,5	91,7	-630,7	61,9
1-tridécanol	$C_{13}H_{28}O$	112-70-9	200,4	-2991,6	-2962,7	-28,9	-2968,2	-23,5
1-diamantanol	$C_{14}H_{20}O$	30545-19-8	204,3	-2098,8	-2034,1	-64,7	-1955,4	-143,4
3-diamantanol	$C_{14}H_{20}O$	30545-24-5	204,3	-2025,4	-1970,3	-55,1	-1911,3	-114,0
4-diamantanol	$C_{14}H_{20}O$	30651-03-7	204,3	-2128,6	-2034,1	-94,6	-2005,3	-123,3
1-tétradécanol	$C_{14}H_{30}O$	112-72-1	214,4	-2936,7	-2907,7	-29,1	-2910,6	-26,1

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Cohen	
					$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}
1-pentadécanol	$C_{15}H_{32}O$	629-76-5	228,4	-2881,6	-2859,4	-22,2	-2860,2	-21,5
1-hexadécanol	$C_{16}H_{34}O$	36653-82-4	242,4	-2831,6	-2816,7	-15,0	-2815,5	-16,1
3',5'-diisopropyl-4,4-diméthyl-3-phényl-1,2-benzocyclobutèn-3-ol	$C_{22}H_{28}O$	33574-16-2	308,5	-709,3	-695,8	-13,5	-	-
acide 3-butynoïque	$C_4H_4O_2$	2345-51-9	84,1	-2876,1	-1947,8	**-928,3**	-	-
acide 3-pentynoïque	$C_5H_6O_2$	36781-65-4	98,1	-2979,6	-2154,0	**-825,7**	-1876,7	**-1103,0**
cis-1,2-cyclopentanediol	$C_5H_{10}O_2$	5057-98-7	102,1	-4749,7	-4884,9	135,2	-4998,5	248,7
trans-1,2-cyclopentanediol	$C_5H_{10}O_2$	5057-99-8	102,1	-4798,7	-4884,9	86,2	-5039,6	240,9
2,2-diméthyl-1,3-propanediol	$C_5H_{12}O_2$	126-30-7	104,1	-5292,5	-5229,7	-62,8	-5226,2	-66,3
hydroquinone	$C_6H_6O_2$	123-31-9	110,1	-3310,3	-3352,8	42,5	-3396,6	86,3
résorcinol	$C_6H_6O_2$	108-46-3	110,1	-3342,1	-3407,4	65,3	-3396,6	54,5
1,6-hexanediol	$C_6H_{14}O_2$	629-11-8	118,2	-4822,5	-4878,4	55,8	-4886,0	63,5
acide benzoïque	$C_7H_6O_2$	65-85-0	122,1	-3154,2	-3226,0	71,8	-3089,6	-64,7
2-hydroxy-2,4,6-cycloheptatrièn-1-one	$C_7H_6O_2$	533-75-5	122,1	-1959,5	-900,2	**-1059,3**	-2016,0	56,5
1-(2-hydroxyphényl)éthanone	$C_8H_8O_2$	118-93-4	136,1	-2626,6	-2580,6	-46,0	-2649,3	22,8
1-(3-hydroxyphényl)éthanone	$C_8H_8O_2$	121-71-1	136,1	-2722,0	-2717,7	-4,3	-2667,7	-54,4
1-(4-hydroxyphényl)éthanone	$C_8H_8O_2$	99-93-4	136,1	-2675,8	-2717,7	41,9	-2667,7	-8,1
acide 2-méthylbenzoïque	$C_8H_8O_2$	118-90-1	136,1	-3059,2	-3146,9	87,7	-3008,5	-50,7
acide 3-méthylbenzoïque	$C_8H_8O_2$	99-04-7	136,1	-3129,7	-3147,4	17,7	-3039,3	-90,3
acide 4-méthylbenzoïque	$C_8H_8O_2$	99-94-5	136,1	-3152,5	-3147,4	-5,1	-3039,3	-113,1
1,4-benzènediméthanol	$C_8H_{10}O_2$	589-29-7	138,2	-2851,0	-2907,8	56,8	-2853,1	2,2
2,5-diméthyl-3-hexyne-2,5-diol	$C_8H_{14}O_2$	142-30-3	142,2	-2712,5	-2070,5	**-642,0**	-2637,2	-75,3
2,5-diméthyl-2,5-hexanediol	$C_8H_{18}O_2$	110-03-2	146,2	-4661,9	-4627,2	-34,7	-4692,7	30,8
acide (Z)-3-phényl-2-propénoïque	$C_9H_8O_2$	102-94-3	148,2	-2106,5	-1972,3	-134,2	-2176,1	69,5
acide (E)-3-phényl-2-propénoïque	$C_9H_8O_2$	140-10-3	148,2	-2273,9	-1972,3	-301,6	-2204,4	-69,5
acide 2,3-diméthylbenzoïque	$C_9H_{10}O_2$	603-79-2	150,2	-2999,2	-3071,8	72,7	-2953,9	-45,3
acide 2,4-diméthylbenzoïque	$C_9H_{10}O_2$	611-01-8	150,2	-3053,1	-3083,0	29,9	-2970,5	-82,6
acide 2,5-diméthylbenzoïque	$C_9H_{10}O_2$	610-72-0	150,2	-3037,1	-3083,0	45,8	-2970,5	-66,6
acide 2,6-diméthylbenzoïque	$C_9H_{10}O_2$	632-46-2	150,2	-2934,6	-2939,3	4,7	-2942,6	8,0
acide 3,4-diméthylbenzoïque	$C_9H_{10}O_2$	619-04-5	150,2	-3121,7	-3072,3	-49,5	-2981,9	-139,8
acide 3,5-diméthylbenzoïque	$C_9H_{10}O_2$	499-06-9	150,2	-3105,7	-3083,4	-22,3	-2998,5	-107,2
acide 2-éthylbenzoïque	$C_9H_{10}O_2$	612-19-1	150,2	-2938,6	-2855,8	-82,7	-2908,6	-30,0

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Cohen	
					$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}
acide 3-éthylbenzoïque	$C_9H_{10}O_2$	619-20-5	150,2	-2968,5	-2856,3	-112,3	-2936,6	-32,0
acide 4-éthylbenzoïque	$C_9H_{10}O_2$	619-64-7	150,2	-3067,8	-2856,3	-211,5	-2936,6	-131,2
2,6-diméthyl-2,6-heptanediol	$C_9H_{20}O_2$	6257-51-8	160,3	-4749,3	-4407,9	-341,5	-4464,8	-284,6
2,7-naphtalènediol	$C_{10}H_8O_2$	582-17-2	160,2	-2036,0	-2036,0	0,0	-2036,6	0,6
2,3-naphtalènediol	$C_{10}H_8O_2$	92-44-4	160,2	-1975,4	-1758,6	-216,9	-1997,3	21,9
acide 2,4-diméthylphénylacétique	$C_{10}H_{12}O_2$	6331-04-0	164,2	-3019,5	-2987,7	-31,7	-2709,5	-310,0
acide 2,3,4-triméthylbenzoïque	$C_{10}H_{12}O_2$	1076-47-7	164,2	-2963,4	-3009,6	46,1	-2908,6	-54,8
acide 2,3,5-triméthylbenzoïque	$C_{10}H_{12}O_2$	2437-66-3	164,2	-2976,2	-3019,8	43,5	-2923,9	-52,4
acide 2,3,6-triméthylbenzoïque	$C_{10}H_{12}O_2$	2529-36-4	164,2	-2897,1	-2888,3	-8,7	-2898,3	1,2
acide 2,4,5-triméthylbenzoïque	$C_{10}H_{12}O_2$	528-90-5	164,2	-3018,9	-3019,8	0,9	-2923,9	-95,0
acide 2,4,6-triméthylbenzoïque	$C_{10}H_{12}O_2$	480-63-7	164,2	-2910,5	-2898,5	-11,9	-2913,5	3,1
acide 3,4,5-triméthylbenzoïque	$C_{10}H_{12}O_2$	1076-88-6	164,2	-3050,5	-3009,6	-41,0	-2908,6	-141,9
2-hydroxy-4-isopropyl-2,4,6-cycloheptatrièn-1-one	$C_{10}H_{12}O_2$	499-44-5	164,2	-2074,3	-649,2	**-1425,1**	-2028,0	-46,3
acide décanoïque	$C_{10}H_{20}O_2$	334-48-5	172,3	-4143,0	-4134,5	-8,6	-4144,2	1,2
1,10-décanediol	$C_{10}H_{22}O_2$	112-47-0	174,3	-3979,2	-3990,8	11,6	-3985,5	6,3
2,7-diméthyl-2,7-octanediol	$C_{10}H_{22}O_2$	19781-07-8	174,3	-4188,7	-4223,8	35,2	-4273,6	84,9
acide 1-naphtalènecarboxylique	$C_{11}H_8O_2$	86-55-5	172,2	-1936,9	-1968,5	31,6	-1913,7	-23,2
acide 2-naphtalènecarboxylique	$C_{11}H_8O_2$	93-09-4	172,2	-2010,1	-1968,5	-41,6	-1913,7	-96,4
acide 2,3,4,5-tétraméthylbenzoïque	$C_{11}H_{14}O_2$	2529-39-7	178,2	-2886,2	-2957,1	70,9	-2870,5	-15,7
acide 2,3,4,6-tétraméthylbenzoïque	$C_{11}H_{14}O_2$	2408-38-0	178,2	-2848,6	-2845,4	-3,2	-2861,0	12,3
acide 2,3,5,6-tétraméthylbenzoïque	$C_{11}H_{14}O_2$	2604-45-7	178,2	-2839,6	-2845,4	5,8	-2861,0	21,3
acide 3,5-diéthylbenzoïque	$C_{11}H_{14}O_2$	3854-90-8	178,2	-2872,2	-2602,9	-269,3	-2831,8	-40,4
acide 2-tert-butylbenzoïque	$C_{11}H_{14}O_2$	1077-58-3	178,2	-2671,9	-2821,6	149,7	-2667,4	-4,5
acide 3-tert-butylbenzoïque	$C_{11}H_{14}O_2$	7498-54-6	178,2	-2829,5	-2821,9	-7,6	-2786,9	-42,6
acide 4-tert-butylbenzoïque	$C_{11}H_{14}O_2$	98-73-7	178,2	-2821,7	-2821,9	0,2	-2786,9	-34,8
acide adamantane-1-carboxylique	$C_{11}H_{16}O_2$	828-51-3	180,2	-3568,0	-3426,1	-141,9	-3295,0	-273,0
acide adamantane-2-carboxylique	$C_{11}H_{16}O_2$	15897-81-1	180,2	-3479,7	-3426,1	-53,7	-3295,0	-184,8
acide undécanoïque	$C_{11}H_{22}O_2$	112-37-8	186,3	-3950,3	-3982,9	32,7	-3289,5	39,2
1-naphtyl acétate	$C_{12}H_{10}O_2$	830-81-9	186,2	-1638,0	-1599,2	-38,8	-1407,6	-230,4
2-naphtyl acétate	$C_{12}H_{10}O_2$	1523-11-1	186,2	-1662,7	-1599,2	-63,5	-1407,6	-255,1
acide 1-naphtalèneacétique	$C_{12}H_{10}O_2$	86-87-3	186,2	-1929,0	-1977,1	48,1	-1754,0	-175,1

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Cohen	
					$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}
acide 2-naphtalèneacétique	$C_{12}H_{10}O_2$	581-96-4	186,2	-1997,2	-1977,1	-20,1	-1754,0	-243,3
acide pentaméthylbenzoïque	$C_{12}H_{16}O_2$	2243-32-5	192,3	-2788,5	-2800,1	11,6	-2816,1	27,6
3,6-diéthyloct-4-yne-3,6-diol	$C_{12}H_{22}O_2$	2044-37-3	198,3	-2428,1	-2071,5	-356,6	-2447,8	19,7
acide dodécanoïque	$C_{12}H_{24}O_2$	143-07-7	200,3	-3866,9	-3852,6	-14,3	-3856,4	-10,5
2,9-diméthyl-2,9-décanediol	$C_{12}H_{26}O_2$	22092-57-5	202,3	-3902,5	-3932,3	29,9	-3970,7	68,2
acide phényl ester benzoïque	$C_{13}H_{10}O_2$	93-99-2	198,2	-1218,9	-1214,4	-4,5	-1208,3	-10,6
acide 2-phénylbenzoïque	$C_{13}H_{10}O_2$	947-84-2	198,2	-1761,2	-1619,9	-141,3	-1569,5	-191,7
acide tridécanoïque	$C_{13}H_{26}O_2$	638-53-9	214,3	-3763,1	-3739,3	-23,8	-3740,7	-22,4
2,10-diméthyl-2,10-undécanediol	$C_{13}H_{28}O_2$	22092-58-6	216,4	-3863,0	-3814,9	-48,1	-3848,7	-14,3
2-hydroxy-1,2-diphényléthanone	$C_{14}H_{12}O_2$	119-53-9	212,2	-1167,1	-1167,1	0,0	-1242,9	75,9
acide tétradécanoïque	$C_{14}H_{28}O_2$	544-63-8	228,4	-3649,8	-3639,9	-9,9	-3639,3	-10,5
2,11-diméthyl-2,11-dodécanediol	$C_{14}H_{30}O_2$	22092-59-7	230,4	-3673,0	-3711,8	38,9	-3741,5	68,6
2,2'-bis(4-hydroxyphényl)propane	$C_{15}H_{16}O_2$	80-05-7	228,3	-1614,6	-1614,6	0,0	-1612,9	-1,8
acide 3,5-Di-tert-butylbenzoïque	$C_{15}H_{22}O_2$	16225-26-6	234,3	-2665,4	-2611,3	-54,1	-2629,2	-36,3
acide pentadécanoïque	$C_{15}H_{30}O_2$	1002-84-2	242,4	-3554,9	-3552,0	-2,9	-3549,5	-5,4
acide hexadécanoïque	$C_{16}H_{32}O_2$	57-10-3	256,4	-3476,7	-3473,8	-2,9	-3469,6	-7,0
acide 2-naphtyl ester benzoïque	$C_{17}H_{12}O_2$	93-44-7	248,3	-744,3	-747,9	3,6	-772,1	27,8
acide heptadécanoïque	$C_{17}H_{34}O_2$	506-12-7	270,5	-3418,0	-3403,6	-14,4	-3398,0	-20,0
acide octadécanoïque	$C_{18}H_{36}O_2$	57-11-4	284,5	-3331,4	-3340,4	9,0	-3333,5	2,1
acide nonadécanoïque	$C_{19}H_{38}O_2$	646-30-0	298,5	-3296,4	-3283,1	-13,3	-3275,0	-21,4
acide éicosanoïque	$C_{20}H_{40}O_2$	506-30-9	312,5	-3237,8	-3231,0	-6,8	-3221,8	-16,0
acide (E)-13-docosénoïque	$C_{22}H_{42}O_2$	506-33-2	338,6	-2837,5	-2622,3	-215,3	-2773,7	-63,8
acide (S)-2-hydroxypropanoïque	$C_3H_6O_3$	79-33-4	90,1	-7704,4	-7565,0	-139,5	-7613,4	-91,0
acide furancarboxylique	$C_5H_4O_3$	26447-28-9	112,1	-4446,7	-4446,7	0,0	-4516,3	69,6
2-(hydroxyméthyl)-2-méthyl-1,3-propanediol	$C_5H_{12}O_3$	77-85-0	120,1	-6197,4	-6113,4	-84,0	-6065,1	-132,3
2-éthyl-2-(hydroxyméthyl)-1,3-propanediol	$C_6H_{14}O_3$	77-99-6	134,2	-5596,5	-5696,1	99,6	-5649,4	52,9
acide perbenzoïque	$C_7H_6O_3$	93-59-4	138,1	-2657,1	-2210,5	-446,6	-2063,4	**-593,7**
acide salicylique	$C_7H_6O_3$	69-72-7	138,1	-4270,9	-3999,8	-271,1	-4192,0	-78,9
acide 3-(2-furanyl)-2-propénoïque	$C_7H_6O_3$	539-47-9	138,1	-3323,2	-3142,0	-181,2	-3294,9	-28,2
3-hydroxy-4-méthoxy-benzaldéhyde	$C_8H_8O_3$	621-59-0	152,1	-2980,0	-3252,3	272,3	-3033,2	53,2
2,4-dihydroxyacétophénone	$C_8H_8O_3$	89-84-9	152,1	-3769,4	-3603,9	-165,5	-3699,1	-70,3

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Cohen	
					$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}
acide (R,S)-α-hydroxybenzèneacétique	$C_8H_8O_3$	611-72-3	152,1	-3808,2	-3773,1	-35,1	-3750,3	-57,8
acide (S)-α-hydroxybenzèneacétique	$C_8H_8O_3$	17199-29-0	152,1	-3816,0	-3773,1	-43,0	-3750,3	-65,7
acide 2-méthoxybenzoïque	$C_8H_8O_3$	579-75-9	152,1	-3539,3	-3541,2	1,9	-3684,6	145,3
acide 3-méthoxybenzoïque	$C_8H_8O_3$	586-38-9	152,1	-3637,9	-3663,9	26,0	-3712,2	74,3
acide 4-méthoxybenzoïque	$C_8H_8O_3$	100-09-4	152,1	-3691,8	-3663,9	-27,9	-3712,2	20,4
acide 3-hydroxy-2-naphtoïque	$C_{11}H_8O_3$	92-70-6	188,2	-2911,1	-2643,4	-267,7	-2822,8	-88,2
acide dodécanepéroxoïque	$C_{12}H_{24}O_3$	2388-12-7	216,3	-3144,9	-3157,8	12,9	-3144,5	-0,5
phényl-2-hydroxybenzoate	$C_{13}H_{10}O_3$	118-55-8	214,2	-2038,1	-1956,1	-82,1	-2059,6	21,5
diphényl carbonate	$C_{13}H_{10}O_3$	102-09-0	214,2	-1872,9	-1943,4	70,6	-1756,6	-116,2
acide carbonique dicyclohexyl ester	$C_{13}H_{22}O_3$	4427-97-8	226,3	-3668,4	-3601,6	-66,8	-3569,0	-99,4
acide tétradécanepéroxoïque	$C_{14}H_{28}O_3$	19816-73-0	244,4	-3068,7	-3038,8	-29,9	-3023,3	-45,4
acide 2-méthylbenzoïque anhydride	$C_{16}H_{14}O_3$	607-86-3	254,3	-2098,1	-2052,5	-45,6	-	-
acide 4-méthylbenzoïque anhydride	$C_{16}H_{14}O_3$	13222-85-0	254,3	-2048,9	-2053,0	4,1	-	-
acide 1-méthyl-1-phényléthyl ester benzènecarbopéroxoïque	$C_{16}H_{16}O_3$	7074-00-2	256,3	-903,3	-903,3	0,0	-768,3	-135,0
acide hexadécanepéroxoïque	$C_{16}H_{32}O_3$	7311-29-7	272,4	-2943,6	-2944,3	0,8	-2927,1	-16,5
acide 3-phényl-2-propénoïque anhydride	$C_{18}H_{14}O_3$	538-56-7	278,3	-1249,7	-896,4	-353,3	-	-
acide octadécanepéroxoïque	$C_{18}H_{36}O_3$	5796-86-1	300,5	-2853,1	-2867,5	14,4	-2848,8	-4,3
acide oxalique	$C_2H_2O_4$	144-62-7	90,0	-9126,5	-9238,6	112,2	-9052,1	-74,4
dioxybisméthanol	$C_2H_6O_4$	17088-73-2	94,1	-7078,0	-7615,8	**537,9**	-7071,6	-6,4
acide malonique	$C_3H_4O_4$	141-82-2	104,1	-8562,2	-8557,4	-4,9	-8113,5	-448,8
acide 2-butynedioïque	$C_4H_2O_4$	142-45-0	114,1	-5062,4	-4814,4	-248,1	-5129,1	66,6
3,4-dihydroxy-3-cyclobutène-1,2-dione	$C_4H_2O_4$	2892-51-5	114,1	-5244,8	-5244,8	0,0	-5245,7	0,9
acide (Z)-2-butènedioïque	$C_4H_4O_4$	110-16-7	116,1	-6800,9	-6298,4	**-502,6**	-6769,9	-31,0
acide (E)-2-butènedioïque	$C_4H_4O_4$	110-17-8	116,1	-6993,1	-6298,4	**-694,7**	-6806,1	-187,0
acide butanedioïque	$C_4H_6O_4$	110-15-6	118,1	-7964,4	-8022,0	57,6	-7900,9	-63,5
acide éthanedioïque diméthyl ester	$C_4H_6O_4$	553-90-2	118,1	-6404,5	-6319,0	-85,5	-6385,1	-19,5
2(R),3(S)-1,2,3,4-butanetétrol	$C_4H_{10}O_4$	149-32-6	122,1	-7455,0	-7355,6	-99,4	-7207,7	-247,3
acide (E)-2-méthyl-2-butènedioïque	$C_5H_6O_4$	498-24-8	130,1	-6336,7	-5272,6	**-1064,1**	-6307,5	-29,2
acide méthylènebutanedioïque	$C_5H_6O_4$	97-65-4	130,1	-6465,1	-3826,8	**-2638,3**	-6384,4	-80,7
acide méthylbutanedioïque	$C_5H_8O_4$	498-21-5	132,1	-7252,8	-7286,9	34,1	-7192,2	-60,6
acide pentanedioïque	$C_5H_8O_4$	110-94-1	132,1	-7266,4	-7285,4	19,0	-7283,8	17,4

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Cohen	
					$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}
2,2-bis(hydroxyméthyl)-1,3-propanediol	$C_5H_{12}O_4$	115-77-5	136,1	-6761,8	-6789,4	27,6	-6706,8	-55,1
acide 2,2-diméthylbutanedioïque	$C_6H_{10}O_4$	597-43-3	146,1	-6759,2	-6761,7	2,4	-6671,0	-88,3
acide méso-2,3-diméthylbutanedioïque	$C_6H_{10}O_4$	608-39-9	146,1	-6688,7	-6692,8	4,1	-6619,6	-69,1
acide racémique-2,3-diméthylbutanedioïque	$C_6H_{10}O_4$	608-40-2	146,1	-6731,8	-6692,8	-39,1	-6619,6	-112,2
acide (-)-2,3-diméthylbutanedioïque	$C_6H_{10}O_4$	57694-62-9	146,1	-6723,0	-6692,8	-30,2	-6619,6	-103,3
acide 2-éthylbutanedioïque	$C_6H_{10}O_4$	636-48-6	146,1	-6768,8	-6791,1	22,3	-6702,4	-66,4
acide hexanedioïque	$C_6H_{10}O_4$	124-04-9	146,1	-6803,7	-6822,9	19,3	-6785,2	-18,5
5-(1α,2β,3β,4α)-1,2,3,4-cyclohexènetétrol	$C_6H_{10}O_4$	526-87-4	146,1	-5722,5	-5203,4	**-519,1**	-5720,5	-2,1
acide triméthylbutanedioïque	$C_7H_{12}O_4$	2103-16-4	160,2	-6248,4	-6261,5	13,0	-6183,5	-64,9
acide heptanedioïque	$C_7H_{12}O_4$	111-16-0	160,2	-6302,1	-6290,1	-12,1	-6373,9	71,8
acide 1,2-benzènedicarboxylique	$C_8H_6O_4$	88-99-3	166,1	-4707,1	-4624,2	-83,0	-4616,2	-90,9
acide 1,3-benzènedicarboxylique	$C_8H_6O_4$	121-91-5	166,1	-4833,5	-4855,8	22,3	-4769,7	-63,8
acide 1,4-benzènedicarboxylique	$C_8H_6O_4$	100-21-0	166,1	-4912,4	-4819,7	-92,7	-4769,7	-142,7
acide cis-cyclohexane-1,2-dicarboxylique	$C_8H_{12}O_4$	610-09-3	172,2	-5582,0	-5825,6	243,6	-5827,7	245,7
acide trans-cyclohexane-1,2-dicarboxylique	$C_8H_{12}O_4$	2305-32-0	172,2	-5637,8	-5825,6	187,8	-5827,7	189,9
acide tétraméthylbutanedioïque	$C_8H_{14}O_4$	630-51-3	174,2	-5811,9	-5816,1	4,2	-5817,6	5,7
acide 2,2-diéthylbutanedioïque	$C_8H_{14}O_4$	5692-97-7	174,2	-5928,4	-5915,6	-12,8	-5894,0	-34,4
acide méso-2,3-diéthylbutanedioïque	$C_8H_{14}O_4$	35392-80-4	174,2	-5850,9	-5873,0	22,1	-5890,0	39,0
acide racémique-2,3-diéthylbutanedioïque	$C_8H_{14}O_4$	35392-77-9	174,2	-5891,7	-5873,0	-18,7	-5890,0	-1,7
acide octanedioïque	$C_8H_{14}O_4$	505-48-6	174,2	-5958,9	-5954,4	-4,5	-6028,9	70,0
acide 2-acétoxybenzoïque	$C_9H_8O_4$	50-78-2	180,2	-4208,2	-4145,7	-62,5	-4001,0	-207,3
acide nonanedioïque	$C_9H_{16}O_4$	123-99-9	188,2	-5601,4	-5599,8	-1,6	-5735,3	133,9
acide phénylbutanedioïque	$C_{10}H_{10}O_4$	635-51-8	194,2	-4330,9	-4299,4	-31,5	-4226,4	-104,5
2,4-diacétyl-1,3-benzènediol	$C_{10}H_{10}O_4$	2163-12-4	194,2	-3880,3	-3721,2	-159,1	-3838,1	-42,2
4,6-diacétyl-1,3-benzènediol	$C_{10}H_{10}O_4$	2161-85-5	194,2	-3998,8	-3715,3	-283,5	-3870,6	-128,2
acide 1,3-benzènedicarboxylique diméthyl ester	$C_{10}H_{10}O_4$	1459-93-4	194,2	-3764,0	-3638,6	-125,4	-3766,5	2,6
acide 1,4-benzènedicarboxylique diméthyl ester	$C_{10}H_{10}O_4$	120-61-6	194,2	-3772,7	-3607,6	-165,1	-3766,5	-6,2
1,2,3-propanetriol 1-benzoate	$C_{10}H_{12}O_4$	3376-59-8	196,2	-3961,8	-3972,1	10,3	-3919,0	-42,8
1,2,3-propanetriol 2-benzoate	$C_{10}H_{12}O_4$		196,2	-3938,8	-3972,1	33,2	-3919,0	-19,9
acide triéthylbutanedioïque	$C_{10}H_{18}O_4$	2103-18-6	202,2	-5272,3	-5311,8	39,5	-5289,6	17,3
acide décanedioïque	$C_{10}H_{18}O_4$	111-20-6	202,2	-5352,8	-5358,6	5,7	-5482,4	129,5

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Cohen	
					$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}
acide undécanedioïque	$C_{11}H_{20}O_4$	1852-04-6	216,3	-5083,4	-5088,6	5,2	-5262,3	178,9
acide tétraéthylsuccinique	$C_{12}H_{22}O_4$	4111-60-8	230,3	-4761,2	-4916,0	154,8	-4909,2	148,1
acide dodécanedioïque	$C_{12}H_{22}O_4$	693-23-2	230,3	-4906,6	-4907,9	1,3	-5069,0	162,4
acide tridécanedioïque	$C_{13}H_{24}O_4$	505-52-2	244,3	-4699,8	-4694,8	-5,0	-4897,9	198,1
1,2,3-propanetriol 1-décanoate	$C_{13}H_{26}O_4$	2277-23-8	246,3	-4501,9	-4450,1	-51,7	-4473,8	-28,0
1,2,3-propanetriol 2-décanoate	$C_{13}H_{26}O_4$	3376-48-5	246,3	-4447,9	-4450,1	2,3	-4473,8	26,0
acide oxalique diphényl ester	$C_{14}H_{10}O_4$	3155-16-6	242,2	-2228,1	-2205,0	-23,1	-2209,5	-18,6
1,2,3-propanetriol 1-dodécanoate	$C_{15}H_{30}O_4$	142-18-7	274,4	-4230,7	-4212,0	-18,7	-4230,0	-0,7
1,2,3-propanetriol 2-dodécanoate	$C_{15}H_{30}O_4$	1678-45-1	274,4	-4200,5	-4212,0	11,5	-4230,0	29,5
acide méso-2,3-diphénylbutanedioïque	$C_{16}H_{14}O_4$	1225-13-4	270,3	-2713,9	-2731,7	17,9	-2633,6	-80,3
acide racémique-2,3-diphénylbutanedioïque	$C_{16}H_{14}O_4$	7584-72-7	270,3	-2738,3	-2731,7	-6,6	-2633,6	-104,7
(-)α-desmotroposantonin acétate	$C_{17}H_{20}O_4$	14794-71-9	288,3	-3019,4	-3036,6	17,2	-3093,2	73,9
(+)β-desmotroposantonin acétate	$C_{17}H_{20}O_4$	14794-69-5	288,3	-3049,2	-3036,6	-12,7	-3093,2	44,1
1,2,3-propanetriol 1-tétradécanoate	$C_{17}H_{34}O_4$	589-68-4	302,4	-4042,3	-4018,1	-24,2	-4031,4	-10,9
1,2,3-propanetriol 2-tétradécanoate	$C_{17}H_{34}O_4$	3443-83-2	302,4	-4010,3	-4018,1	7,8	-4031,4	21,2
1,2,3-propanetriol 1-hexadécanoyl ester	$C_{19}H_{38}O_4$	542-44-9	330,5	-3877,4	-3857,1	-20,3	-3866,5	-10,9
1,2,3-propanetriol 2-hexadécanoyl ester	$C_{19}H_{38}O_4$	23470-00-0	330,5	-3838,7	-3857,1	18,4	-3866,5	27,8
acide 1,2-benzènedicarboxylique diphényl ester	$C_{20}H_{14}O_4$	84-62-8	318,3	-1536,8	-1575,0	38,2	-1543,4	6,6
acide 1,2-benzènedicarboxylique dicyclohexyl ester	$C_{20}H_{26}O_4$	84-61-7	330,4	-2818,9	-2874,3	55,5	-2792,5	-26,3
1,2,3-propanetriol 1-octadécanoyl ester	$C_{21}H_{42}O_4$	123-94-4	358,6	-3730,0	-3721,3	-8,7	-3727,5	-2,5
1,2,3-propanetriol 2-octadécanoyl ester	$C_{21}H_{42}O_4$	621-61-4	358,6	-3685,1	-3721,3	36,2	-3727,5	42,4
acide (R)-hydroxybutanedioïque	$C_4H_6O_5$	636-61-3	134,1	-8246,1	-8275,1	29,0	-8265,5	19,4
acide (S)-hydroxybutanedioïque	$C_4H_6O_5$	97-67-6	134,1	-8230,5	-8275,1	44,6	-8265,5	35,1
acide 2-oxopentanedioïque	$C_5H_6O_5$	328-50-7	146,1	-7024,0	-7024,1	0,0	-7024,7	0,7
α-D-xylose	$C_5H_{10}O_5$	31178-70-8	150,1	-7045,9	-7036,4	-9,5	-7065,2	19,3
D-ribose	$C_5H_{10}O_5$	50-69-1	150,1	-7001,3	-6973,0	-28,3	-	-
D-arabinose	$C_5H_{10}O_5$	10323-20-3	150,1	-7046,6	-7036,4	-10,2	-7065,2	18,7
xylitol	$C_5H_{12}O_5$	87-99-0	152,1	-7351,5	-7352,5	1,0	-7165,5	-186,0
1,2-anhydro-3,4,5,6-alloinositol	$C_6H_{10}O_5$	23559-36-6	162,1	-5589,0	-5238,8	-350,2	-5590,2	1,2
2-(diacétoxyméthyl)furane	$C_9H_{10}O_5$	613-75-2	198,2	-4451,2	-4445,5	-5,7	-4450,7	-0,5
benzoylcarboxypéroxyde phényl ester	$C_{14}H_{10}O_5$	962-16-3	258,2	-1877,8	-1317,9	**-559,9**	-1961,1	83,3

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Cohen	
					$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}
benzoyl(cyclohexyloxy)carbonylpéroxyde	$C_{14}H_{16}O_5$	20666-86-8	264,3	-2805,8	-2042,2	**-763,6**	-2732,4	-73,4
acide (E)-1-propène-1,2,3-tricarboxylique	$C_6H_6O_6$	4023-65-8	174,1	-7080,1	-4871,6	**-2208,5**	-7159,3	79,3
acide (Z)-1-propène-1,2,3-tricarboxylique	$C_6H_6O_6$	585-84-2	174,1	-7032,4	-4871,6	**-2160,8**	-7159,3	126,9
acide L-ascorbique	$C_6H_8O_6$	50-81-7	176,1	-6612,4	-6558,6	-53,8	-6610,7	-1,7
α-D-glucose	$C_6H_{12}O_6$	26655-34-5	180,2	-7067,8	-7094,3	26,6	-7072,2	4,4
L-sorbose	$C_6H_{12}O_6$	87-79-6	180,2	-7057,8	-6879,9	-177,9	-7010,6	-47,2
β-D-fructose	$C_6H_{12}O_6$	57-48-7	180,2	-7025,0	-6879,9	-145,2	-7010,6	-14,4
D-mannose	$C_6H_{12}O_6$	3458-28-4	180,2	-7010,6	-7034,2	23,6	-	-
α-D-galactose	$C_6H_{12}O_6$	3646-73-9	180,2	-7139,9	-7094,3	-45,6	-7072,2	-67,7
D-mannitol	$C_6H_{14}O_6$	69-65-8	182,2	-7339,8	-7350,5	10,7	-7137,2	-202,6
galactitol	$C_6H_{14}O_6$	608-66-2	182,2	-7392,5	-7350,5	-42,0	-7137,2	-255,3
α-D-méthylglucopyranoside	$C_7H_{14}O_6$	97-30-3	194,2	-6351,2	-6415,8	64,6	-6240,5	-110,7
β-D-méthylglucopyranoside	$C_7H_{14}O_6$	709-50-2	194,2	-6372,9	-6415,8	43,0	-6240,5	-132,4
acide 1,2,3-benzènetricarboxylique	$C_9H_6O_6$	569-51-7	210,1	-5521,5	-5531,0	9,4	-5503,5	-18,1
acide 1,2,4-benzènetricarboxylique	$C_9H_6O_6$	528-44-9	210,1	-5611,0	-5619,8	8,8	-5624,8	13,8
acide 1,3,5-benzènetricarboxylique	$C_9H_6O_6$	554-95-0	210,1	-5663,4	-5803,0	139,6	-5746,2	82,8
4-hydroxy-2H-pyran-3,3,5,5,(4H,6H)-tétraméthanol	$C_9H_{18}O_6$	4744-47-2	222,2	-5704,3	-5728,3	24,0	-5826,7	122,4
acide 1,3,5-benzènetricarboxylique triméthyl ester	$C_{12}H_{12}O_6$	2672-58-4	252,2	-4365,6	-4239,2	-126,4	-4424,7	59,1
acide péroxydicarbonique dicyclohexyl ester	$C_{14}H_{22}O_6$	1561-49-5	286,3	-3850,6	-3108,0	**-742,6**	-3753,1	-97,4
acide 2-hydroxy-1,2,3-propanetricarboxylique	$C_6H_8O_7$	77-92-9	192,1	-8035,5	-8032,8	-2,7	-7743,5	-292,0
acide D-glutarique 1,4-lactone	$C_6H_8O_7$	389-36-6	192,1	-7473,3	-7481,3	7,9	-7452,5	-20,8
acide D-glutarique 3,6-lactone	$C_6H_8O_7$	2782-04-9	192,1	-7482,2	-7481,3	-0,9	-7452,5	-29,7
α-D-glucose hydrate	$C_6H_{14}O_7$	16824-90-1	198,2	-7933,5	-7943,3	9,7	-7901,8	-31,8
dipentaérythritol	$C_{10}H_{22}O_7$	126-58-9	254,3	-6183,4	-6185,0	1,6	-5947,8	-235,6
acide citrique monohydrate	$C_6H_{10}O_8$	5949-29-1	210,1	-8744,2	-8746,7	2,4	-8452,0	-292,2
acide 1,2,3,4-benzènetétracarboxylique	$C_{10}H_6O_8$	476-73-3	254,1	-6093,3	-6100,1	6,8	-6083,4	-9,8
acide 1,2,3,5-benzènetétracarboxylique	$C_{10}H_6O_8$	479-47-0	254,1	-6147,2	-6173,6	26,4	-6183,8	36,6
acide 1,2,4,5-benzènetétracarboxylique	$C_{10}H_6O_8$	89-05-4	254,1	-6180,6	-6095,6	-85,1	-6183,8	3,2
acide 1,2,4,5-benzènetétracarboxylique diméthyl ester	$C_{12}H_{10}O_8$	39900-53-3	282,2	-5228,5	-5275,2	46,7	-5352,9	124,4
acide 1,2,4,5-benzènetétracarboxylique tétraméthyl ester	$C_{14}H_{14}O_8$	635-10-9	310,3	-4617,2	-4603,2	-14,0	-4672,3	55,1
acide 1,2,4,5-benzènetétracarboxylique diéthyl ester	$C_{14}H_{14}O_8$	50853-29-7	310,3	-5124,2	-4943,5	-180,7	-5003,6	-120,6

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Cohen	
					$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}
acide 1,2,4,5-benzènetétracarboxylique dipropyl ester	$C_{16}H_{18}O_8$	56941-72-1	338,3	-4860,0	-4709,5	-150,6	-4761,9	-98,1
acide 1,2,4,5-benzènetétracarboxylique tétraéthyl ester	$C_{18}H_{22}O_8$	6634-01-1	366,4	-4311,6	-4144,3	-167,3	-4184,9	-126,7
acide benzènepentacarboxylique	$C_{11}H_6O_{10}$	1585-40-6	298,2	-6472,0	-6521,4	49,3	-6492,2	20,1
acide benzènepentacarboxylique pentaméthyl ester	$C_{16}H_{16}O_{10}$	3327-06-8	368,3	-4855,1	-4868,8	13,7	-4841,8	-13,3
D-sucrose	$C_{12}H_{22}O_{11}$	57-50-1	342,3	-6503,4	-6663,5	160,0	-6505,5	2,1
β-lactose	$C_{12}H_{22}O_{11}$	5965-66-2	342,3	-6534,4	-6540,3	5,9	-6527,7	-6,7
α-D-glucose 2,3,4,5,6-pentaacétate	$C_{16}H_{22}O_{11}$	3891-59-6	390,3	-5762,7	-5675,1	-87,6	-	-
acide benzènehexacarboxylique	$C_{12}H_6O_{12}$	517-60-2	342,2	-6718,0	-6837,6	119,6	-6721,2	3,2
β-maltose monohydrate	$C_{12}H_{24}O_{12}$	6363-53-7	360,3	-6826,3	-6804,8	-21,5	-7011,2	184,8
α-lactose monohydrate	$C_{12}H_{24}O_{12}$	10639-26-6	360,3	-6894,3	-6909,1	14,8	-7266,5	372,2
acide benzènehexacarboxylique hexaméthyl ester	$C_{18}H_{18}O_{12}$	6237-59-8	426,3	-4951,1	-5062,1	110,9	-4965,2	14,1

Annexe 13

Comparaison des enthalpies standard de formation en phase solide issues de la littérature avec les enthalpies représentées par la méthode développée et avec les enthalpies prévues par la méthode de Domalski *et al.*, concernant 1 017 molécules C-H-N-O

Les résultats sont ici présentés en joules par gramme

A noter que les écarts entre les enthalpies de formation en phase solide mesurées et calculées étant strictement supérieurs à 500 $J.g^{-1}$ en valeur absolue (soit l'erreur limite acceptable) sont mis en évidence. Ils sont inscrits en gras dans les tableaux qui suivent.

Comparaison des enthalpies standard de formation en phase solide issues de la littérature avec les enthalpies représentées par la méthode développée et avec les enthalpies prévues par la méthode de Domalski *et al.*, concernant 145 molécules contenant carbone et hydrogène

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Domalski *et al.*	
					$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}
2-norbornène	C_7H_{10}	498-66-8	94,2	561,8	1706,2	**-1144,4**	557,4	4,5
norbornane	C_7H_{12}	279-23-2	96,2	-988,9	-991,4	2,5	-1060,6	71,8
cubane	C_8H_8	277-10-1	104,1	5202,2	5190,4	11,7	5617,0	-414,8
bicyclo[2.2.2]oct-2-ène	C_8H_{12}	931-64-6	108,2	-215,4	-215,4	0,0	-215,4	0,0
bicyclo[2.2.2]octane	C_8H_{14}	280-33-1	110,2	-1333,1	-1333,1	0,0	-1333,1	0,0
2,2,3,3-tétraméthylbutane	C_8H_{18}	594-82-1	114,2	-2354,1	-2195,7	-158,4	-2354,4	0,4
7,7-diméthyl-bicyclo[2.2.1]heptane	C_9H_{16}	2034-53-9	124,2	-1193,0	-1208,5	15,5	-1306,5	113,5
bicyclo[3.3.1]nonane	C_9H_{16}	280-65-9	124,2	-1434,5	-1434,5	0,0	-1434,5	0,0
azulène	$C_{10}H_8$	275-51-4	128,2	1656,4	1452,3	204,1	-	-
naphtalène	$C_{10}H_8$	91-20-3	128,2	607,8	575,8	32,0	627,6	-19,8
1,2,4,5-tétraméthylbenzène	$C_{10}H_{14}$	95-93-2	134,2	-893,3	-819,8	-73,5	-777,1	-116,2
3a,4,5,6,7,7a-hexahydro-4,7-méthanoindène	$C_{10}H_{14}$	4488-57-7	134,2	-178,1	35,6	-213,7	-212,6	34,5
octahydro-4,7-méthano-1H-indène	$C_{10}H_{16}$	6004-38-2	136,2	-828,7	-809,3	-19,4	-802,8	-25,9
adamantane	$C_{10}H_{16}$	281-23-2	136,2	-1424,8	-1421,0	-3,8	-1447,5	22,8
protoadamantane	$C_{10}H_{16}$	53130-19-1	136,2	-1106,9	-999,5	-107,5	-1060,7	-46,2
camphène	$C_{10}H_{16}$	79-92-5	136,2	-553,5	-605,2	51,7	-572,3	18,8
bicyclo[3.3.2]décane	$C_{10}H_{18}$	283-50-1	138,2	-1187,7	-1240,7	53,0	-1788,4	**600,7**
2-méthylnaphtalène	$C_{11}H_{10}$	91-57-6	142,2	315,8	276,1	39,7	288,8	26,9
pentaméthylbenzène	$C_{11}H_{16}$	700-12-9	148,2	-901,2	-993,2	92,0	-874,7	-26,5
1-méthyladamantane	$C_{11}H_{18}$	768-91-2	150,3	-1592,6	-1573,0	-19,5	-1529,6	-63,0
2-méthyladamantane	$C_{11}H_{18}$	700-56-1	150,3	-1461,5	-1403,4	-58,1	-1483,1	21,6
bicyclo[3.3.3]undécane	$C_{11}H_{20}$	29415-95-0	152,3	-1001,5	-1001,5	0,0	-1001,8	0,3
biphénylène	$C_{12}H_8$	259-79-0	152,2	2194,6	2194,6	0,0	790,8	**1403,8**
acénaphtylène	$C_{12}H_8$	208-96-8	152,2	1226,7	1226,7	0,0	939,5	287,3
biphényle	$C_{12}H_{10}$	92-52-4	154,2	644,6	593,9	50,7	644,3	0,3
acénaphtène	$C_{12}H_{10}$	83-32-9	154,2	455,9	455,9	0,0	330,6	125,3

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Domalski *et al.*	
					$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}
1,8-diméthylnaphtalène	$C_{12}H_{12}$	569-41-5	156,2	165,8	175,5	-9,7	10,9	154,9
2,3-diméthylnaphtalène	$C_{12}H_{12}$	581-40-8	156,2	-14,7	40,9	-55,7	42,9	-57,6
2,6-diméthylnaphtalène	$C_{12}H_{12}$	581-42-0	156,2	-36,5	-36,5	0,0	10,9	-47,4
2,7-diméthylnaphtalène	$C_{12}H_{12}$	582-16-1	156,2	-34,6	-34,6	0,0	10,9	-45,5
hexacyclo[6.2.1.1^{3,6}.0^{2,7}.0^{4,10}.0^{5,9}]dodécane	$C_{12}H_{14}$	704-02-9	158,2	322,9	369,2	-46,3	536,8	-213,9
hexaméthylbenzène	$C_{12}H_{18}$	87-85-4	162,3	-995,2	-1099,6	104,3	-955,4	-39,8
(E,E,E)-1,5,9-cyclododécatriène	$C_{12}H_{18}$	676-22-2	162,3	163,9	1111,2	**-947,2**	41,8	122,1
2,2,7,7-tétraméthylocta-3,5-diyne	$C_{12}H_{18}$	6130-98-9	162,3	962,0	1461,1	-499,2	1040,0	-78,0
2,2-diméthyladamantane	$C_{12}H_{20}$	19740-34-2	164,3	-1560,1	-1544,0	-16,1	-1567,4	7,3
1,3-diméthyladamantane	$C_{12}H_{20}$	702-79-4	164,3	-1743,3	-1699,1	-44,2	-1572,0	-171,3
cyclododécane	$C_{12}H_{24}$	294-62-2	168,3	-1821,5	-1821,5	0,0	-1821,8	0,3
4-méthyl-1,1'-biphényle	$C_{13}H_{12}$	644-08-6	168,2	329,3	339,1	-9,8	356,6	-27,3
diphénylméthane	$C_{13}H_{12}$	101-81-5	168,2	425,0	340,7	84,3	426,0	-1,0
1,3,5-triméthyladamantane	$C_{13}H_{22}$	707-35-7	178,3	-1863,6	-1805,4	-58,2	-1619,6	-244,0
diphényléthyne	$C_{14}H_{10}$	501-65-5	178,2	1752,8	1697,8	55,0	1750,6	2,2
anthracène	$C_{14}H_{10}$	120-12-7	178,2	724,9	722,8	2,1	682,8	42,1
phénantrène	$C_{14}H_{10}$	85-01-8	178,2	652,0	644,5	7,5	659,3	-7,3
9,10-dihydro-anthracène	$C_{14}H_{12}$	613-31-0	180,2	368,4	312,2	56,2	360,4	8,0
(E)-stilbène	$C_{14}H_{12}$	103-30-0	180,2	759,5	813,5	-54,0	781,7	-22,2
4,4'-diméthylbiphényle	$C_{14}H_{14}$	613-33-2	182,3	77,4	123,5	-46,1	113,1	-35,8
bibenzyle	$C_{14}H_{14}$	103-29-7	182,3	282,6	234,5	48,1	268,3	14,3
1,4,5,8-tétraméthylnaphtalène	$C_{14}H_{16}$	2717-39-7	184,3	-98,8	-102,9	4,1	-418,1	319,3
1,2,3,4,5,6,7,8-octahydro-anthracène	$C_{14}H_{18}$	1079-71-6	186,3	-641,5	141,0	**-782,4**	-737,4	96,0
1,8-cyclotétradécadiyne	$C_{14}H_{20}$	1540-80-3	188,3	784,9	1467,2	**-682,3**	597,6	187,3
diadamantane	$C_{14}H_{20}$	2292-79-7	188,3	-1284,1	-1168,6	-115,4	-842,6	-441,5
1,1,4,6,7-pentaméthylindane	$C_{14}H_{20}$	6682-67-3	188,3	-929,9	-924,0	-5,9	-1005,3	75,5
trans-anti-trans-tétradécahydro-anthracène	$C_{14}H_{24}$	28071-99-0	192,3	-1524,9	-1655,0	130,1	-1482,8	-42,1
1,3,5,7-tétraméthyladamantane	$C_{14}H_{24}$	1687-36-1	192,3	-1901,8	-1896,1	-5,7	-1660,2	-241,7
cyclotétradécane	$C_{14}H_{28}$	295-17-0	196,4	-1904,5	-1904,6	0,0	-1905,9	1,3

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Domalski *et al.*	
					$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}
cis-1,4-Di-tert-butyl-cyclohexane	$C_{14}H_{28}$	4789-34-8	196,4	-1905,1	-1970,9	65,9	-2041,5	136,5
trans-1,4-Di-tert-butyl-cyclohexane	$C_{14}H_{28}$	4789-35-9	196,4	-2046,1	-1970,9	-75,2	-2041,5	-4,6
1,4-diméthyl-7-(1-méthyléthyl)-azulène	$C_{15}H_{18}$	489-84-9	198,3	308,1	1506,4	**-1198,3**	-	-
4-méthyldiadamantane	$C_{15}H_{22}$	30545-28-9	202,3	-1292,4	-1299,0	6,6	-955,0	-337,5
3-méthyldiadamantane	$C_{15}H_{22}$	28375-86-2	202,3	-1287,0	-1299,0	12,1	-955,0	-332,0
1-méthyldiadamantane	$C_{15}H_{22}$	26460-76-4	202,3	-1222,7	-1299,0	76,3	-955,0	-267,8
cyclopentadécane	$C_{15}H_{30}$	295-48-7	210,4	-1787,6	-1787,6	0,0	-1787,4	-0,2
1,1'-(1,3-butadiyne-1,4-diyl)bis-benzène	$C_{16}H_{10}$	886-66-8	202,3	2563,2	2563,2	0,0	2564,0	-0,8
fluoranthène	$C_{16}H_{10}$	206-44-0	202,3	938,9	938,9	0,0	799,1	139,8
pyrène	$C_{16}H_{10}$	129-00-0	202,3	620,5	666,8	-46,3	620,9	-0,4
bis-(2-méthylphényl)-acétylène	$C_{16}H_{14}$	5294-03-1	206,3	1138,2	1148,3	-10,0	1179,3	-41,0
Di-p-tolylacétylène	$C_{16}H_{14}$	2789-88-0	206,3	1094,6	1132,1	-37,5	1130,8	-36,2
(Z,Z)-1,4-diphénylbutadiène	$C_{16}H_{14}$	5807-76-1	206,3	963,7	898,9	64,8	853,0	110,7
(E,E)-1,4-diphénylbutadiène	$C_{16}H_{14}$	538-81-8	206,3	866,8	877,6	-10,8	853,0	13,8
2,7-diméthylphénantrène	$C_{16}H_{14}$	1576-69-8	206,3	176,5	221,9	-45,5	187,9	-11,4
4,5-diméthylphénantrène	$C_{16}H_{14}$	3674-69-9	206,3	431,4	221,9	209,5	187,9	243,6
9,10-diméthylphénantrène	$C_{16}H_{14}$	604-83-1	206,3	230,8	230,1	0,7	212,1	18,6
1,1-Di-o-tolyléthylène	$C_{16}H_{16}$	2919-19-9	208,3	427,3	427,9	-0,6	525,4	-98,1
cis-1,2-Di-o-tolyléthène	$C_{16}H_{16}$	10311-74-7	208,3	412,4	388,4	24,0	346,4	66,0
trans-1,2-Di-o-tolyléthène	$C_{16}H_{16}$	36888-18-3	208,3	359,6	388,4	-28,8	346,4	13,2
1,1-Di-p-tolyléthylène	$C_{16}H_{16}$	2919-20-2	208,3	412,4	411,8	0,6	477,4	-65,0
(Z)-1,2-bis(4-méthylphényl)éthène	$C_{16}H_{16}$	2510-76-1	208,3	470,0	372,3	97,7	298,4	171,6
(E)-1,2-bis(4-méthylphényl)éthène	$C_{16}H_{16}$	18869-29-9	208,3	278,0	372,3	-94,3	298,4	-20,5
[2.2]métacyclophane	$C_{16}H_{16}$	2319-97-3	208,3	376,9	376,9	0,0	376,9	0,0
[2.2]paracyclophane	$C_{16}H_{16}$	1633-22-3	208,3	696,6	395,8	300,8	93,3	**603,3**
[2.2]métaparacyclophane	$C_{16}H_{16}$	5385-36-4	208,3	628,4	628,4	0,0	628,4	0,0
[16]annulène	$C_{16}H_{16}$	3332-38-5	208,3	2628,4	2628,4	0,0	1346,5	**1281,9**
1,2-Di-o-tolyléthane	$C_{16}H_{18}$	952-80-7	210,3	-190,2	-109,4	-80,8	-94,3	-95,9
1,2-Di-p-tolyléthane	$C_{16}H_{18}$	538-39-6	210,3	-200,2	-125,3	-74,9	-141,9	-58,3

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Domalski *et al.*	
					$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}
1,4-diphénylbutane	$C_{16}H_{18}$	1083-56-3	210,3	-47,1	-79,8	32,7	-47,2	0,1
tricyclo[8.2.2.2^{4,7}]hexadécane	$C_{16}H_{28}$	283-68-1	220,4	-1107,6	-1107,6	0,0	-1616,4	**508,8**
cyclohexadécane	$C_{16}H_{32}$	295-65-8	224,4	-1797,5	-1797,5	0,0	-1797,6	0,1
cycloheptadécane	$C_{17}H_{34}$	295-97-6	238,5	-1805,0	-1805,0	0,0	-1805,0	0,0
triphénylène	$C_{18}H_{12}$	217-59-4	228,3	664,9	621,8	43,1	658,6	6,3
chrysène	$C_{18}H_{12}$	218-01-9	228,3	636,5	683,0	-46,5	677,0	-40,6
benzo[c]phénantrène	$C_{18}H_{12}$	195-19-7	228,3	809,9	753,3	56,7	642,2	167,8
benzo[a]anthracène	$C_{18}H_{12}$	56-55-3	228,3	748,2	744,2	4,0	695,4	52,7
naphtacène	$C_{18}H_{12}$	92-24-0	228,3	695,6	805,4	-109,8	713,8	-18,2
5,12-dihydro-naphtacène	$C_{18}H_{14}$	959-02-4	230,3	462,0	483,3	-21,3	461,2	0,8
[18]annulène	$C_{18}H_{18}$	2040-73-5	234,3	697,3	697,3	0,0	1346,5	**-649,2**
3,4,5,6-tétraméthylphénantrène	$C_{18}H_{18}$	7343-06-8	234,3	99,9	-85,1	185,0	-127,9	227,8
2,4,5,7-tétraméthylphénantrène	$C_{18}H_{18}$	7396-38-5	234,3	52,1	-99,4	151,5	-153,5	205,6
[3.3]paracyclophane	$C_{18}H_{20}$	2913-24-8	236,4	111,3	97,0	14,2	110,6	0,6
1,2,3,4,5,6,7,8,9,10,11,12-dodécahydro-triphénylène	$C_{18}H_{24}$	1610-39-5	240,4	-806,6	124,8	**-931,5**	-938,8	132,1
1,2,4-Tri-tert-butylbenzène	$C_{18}H_{30}$	1459-11-6	246,4	-1021,0	-958,3	-62,6	-693,3	-327,7
1,3,5-Tri-tert-butylbenzène	$C_{18}H_{30}$	1460-02-2	246,4	-1306,2	-1250,5	-55,8	-1330,2	24,0
octadécane	$C_{18}H_{38}$	593-45-3	254,5	-2229,5	-2165,9	-63,6	-2216,3	-13,2
triphénylméthane	$C_{19}H_{16}$	519-73-3	244,3	700,7	688,3	12,4	712,7	-12,0
2,2',4,4',5,5'-hexaméthyldiphénylméthane	$C_{19}H_{24}$	4957-16-8	252,4	-611,7	-554,2	-57,5	-501,4	-110,3
pérylène	$C_{20}H_{12}$	198-55-0	252,3	724,5	641,9	82,6	628,0	96,6
9,10-dihydro-9,10[1',2']benzénoanthracène	$C_{20}H_{14}$	477-75-8	254,3	853,6	855,6	-1,9	907,2	-53,6
triphényléthylène	$C_{20}H_{16}$	58-72-0	256,3	910,5	884,1	26,4	882,4	28,1
5,8-diméthylbenzo[c]phénantrène	$C_{20}H_{16}$	54986-63-9	256,3	422,1	309,9	112,2	264,7	157,4
1,12-diméthylbenzo[c]phénantrène	$C_{20}H_{16}$	4076-43-1	256,3	602,7	309,9	292,8	264,7	338,0
3,9-diméthylbenz[a]anthracène	$C_{20}H_{16}$	316-51-8	256,3	297,3	393,3	-96,0	312,2	-14,9
1,12-diméthylbenz[a]anthracène	$C_{20}H_{16}$	313-74-6	256,3	542,2	393,3	149,0	312,2	230,1
9,10-diméthyl-1,2-benzanthracène	$C_{20}H_{16}$	57-97-6	256,3	561,0	416,7	144,2	312,2	248,8

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Domalski *et al.*	
					$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}
5,6-diméthylchrysène	$C_{20}H_{16}$	3697-27-6	256,3	516,9	345,3	171,6	315,3	201,6
1,1,1-triphényléthane	$C_{20}H_{18}$	5271-39-6	258,4	608,5	615,4	-7,0	792,7	-184,3
1,1,2-triphényléthane	$C_{20}H_{18}$	1520-42-9	258,4	504,0	496,4	7,6	518,5	-14,5
1-(2-naphtalénylméthyl)naphtalène	$C_{21}H_{16}$	611-48-3	268,4	603,7	623,7	-20,0	574,5	29,1
1',2',3',4'-tétrahydro-1,2-dinaphtylméthane	$C_{21}H_{20}$	56818-06-5	272,4	161,9	437,6	-275,7	147,0	14,9
[1.8]paracyclophane	$C_{21}H_{26}$	6169-94-4	278,4	-294,1	-282,1	-12,1	-482,2	188,1
1,2,4,5-Tétra-tert-butylbenzène	$C_{22}H_{38}$	796-97-4	302,5	-984,7	-1367,7	383,0	-1468,1	483,4
tris(2-méthylphényl)éthylène	$C_{23}H_{22}$	62155-47-9	298,4	419,5	429,0	-9,5	412,5	7,1
tris(4-méthylphényl)éthylène	$C_{23}H_{22}$	6629-83-0	298,4	406,1	412,2	-6,1	362,2	43,9
1,1,2-Tri-o-tolyléthane	$C_{23}H_{24}$		300,4	81,2	98,7	-17,4	102,7	-21,4
1,1,2-Tri-p-tolyléthane	$C_{23}H_{24}$	27497-47-8	300,4	54,6	81,9	-27,4	52,7	1,9
1,3,5-triphénylbenzène	$C_{24}H_{18}$	612-71-5	306,4	733,0	774,2	-41,1	717,1	15,9
[6.6]paracyclophane	$C_{24}H_{32}$	4384-23-0	320,5	-601,2	-485,5	-115,8	-673,4	72,2
tétraphénylméthane	$C_{25}H_{20}$	630-76-2	320,4	771,2	752,7	18,5	783,6	-12,5
1,3,6-triphénylcycloheptatriène	$C_{25}H_{20}$	17760-68-8	320,4	854,8	1050,3	-195,5	-	-
9,10-diphénylanthracène	$C_{26}H_{18}$	1499-10-1	330,4	934,3	848,8	85,5	919,6	14,7
tétraphényléthylène	$C_{26}H_{20}$	632-51-9	332,4	937,0	915,8	21,2	937,0	0,0
1,1,1,2-tétraphényléthane	$C_{26}H_{22}$	2294-94-2	334,5	666,8	651,6	15,2	838,2	-171,5
1,1,2,2-tétraphényléthane	$C_{26}H_{22}$	632-50-8	334,5	645,8	639,1	6,8	654,8	-9,0
3-phényléicosane	$C_{26}H_{46}$	2400-02-4	358,6	-1530,2	-1498,7	-31,6	-1534,7	4,5
9,9'-bianthracène	$C_{28}H_{18}$	1055-23-8	354,4	920,3	917,5	2,9	920,3	0,0
9,9'-biphénanthryl	$C_{28}H_{18}$	20532-03-0	354,4	600,4	838,6	-238,3	576,7	23,7
1,1,4,4-tétraphényl-1,3-butadiène	$C_{28}H_{22}$	1450-63-1	358,5	920,3	951,4	-31,1	966,8	-46,5
1,2,3,4-tétraphényl-1,3-butadiène	$C_{28}H_{22}$	806-71-3	358,5	1001,2	1001,2	0,0	1001,1	0,1
1,1,4,4-tétraphénylbutane	$C_{28}H_{26}$	1483-64-3	362,5	450,5	440,1	10,4	992,8	**-542,3**
tétra-p-tolyléthène	$C_{30}H_{28}$	5831-43-6	388,5	441,4	428,0	13,4	396,4	45,0
1,1,2,2-Tétra-p-tolyléthane	$C_{30}H_{30}$	40673-57-2	390,6	188,4	207,1	-18,7	668,8	-480,4
cyclotriacontane	$C_{30}H_{60}$	297-35-8	420,8	-2128,6	-2121,3	-7,3	-2096,7	-31,8

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Domalski *et al.*	
					$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}
13-phénylpentacosane	$C_{31}H_{56}$	6006-90-2	428,8	-1602,2	-1600,5	-1,7	-1626,6	24,4
pentaphényléthane	$C_{32}H_{26}$	19112-42-6	410,5	928,5	739,1	189,4	890,0	38,5
dotriacontane	$C_{32}H_{66}$	544-85-4	450,9	-2147,6	-2146,5	-1,2	2164,2	16,6
hexaphényléthane	$C_{38}H_{30}$	17854-07-8	486,6	1051,7	807,9	243,8	1051,7	0,0
5,6,11,12-tétraphénylnaphtacène	$C_{42}H_{28}$	517-51-1	532,7	1164,5	1078,4	86,1	989,9	174,6

Comparaison des enthalpies standard de formation en phase solide issues de la littérature avec les enthalpies représentées par la méthode développée et avec les enthalpies prévues par la méthode de Domalski *et al.*, concernant 256 molécules contenant carbone, hydrogène et oxygène

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Domalski *et al.*	
					$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}
phénol	C_6H_6O	108-95-2	94,1	-1754,3	-1893,6	139,3	-1759,6	5,3
2-méthylphénol	C_7H_8O	95-48-7	108,1	-1892,0	-1966,8	74,8	-1849,2	-42,8
4-méthylphénol	C_7H_8O	106-44-5	108,1	-1843,0	-1967,4	124,4	-1895,5	52,4
4-éthylphénol	$C_8H_{10}O$	123-07-9	122,2	-1836,9	-1745,0	-91,9	-1858,7	21,9
2,3-diméthylphénol	$C_8H_{10}O$	526-75-0	122,2	-1974,4	-2010,0	35,6	-1901,9	-72,5
2,5-diméthylphénol	$C_8H_{10}O$	95-87-4	122,2	-2018,6	-2023,7	5,1	-1942,8	-75,8
2,6-diméthylphénol	$C_8H_{10}O$	576-26-1	122,2	-1943,3	-2023,2	79,9	-1901,9	-41,4
3,4-diméthylphénol	$C_8H_{10}O$	95-65-8	122,2	-1983,4	-2010,5	27,1	-1942,8	-40,6
3,5-diméthylphénol	$C_8H_{10}O$	108-68-9	122,2	-2000,6	-2024,2	23,6	-1951,0	-49,6
2-isopropylphénol	$C_9H_{12}O$	88-69-7	136,2	-1810,7	-1688,0	-122,7	-1871,6	60,9
3-isopropylphénol	$C_9H_{12}O$	618-45-1	136,2	-1931,1	-1688,5	-242,7	-1893,6	-37,5
4-isopropylphénol	$C_9H_{12}O$	99-89-8	136,2	-2053,7	-1688,5	-365,3	-1908,3	-145,5
1-naphtol	$C_{10}H_8O$	90-15-3	144,2	-839,3	-854,4	15,1	-862,5	23,2
2-naphtol	$C_{10}H_8O$	135-19-3	144,2	-861,5	-854,4	-7,1	-862,5	1,0
1,2,3,4-tétrahydro-1-naphtol	$C_{10}H_{12}O$	529-33-9	148,2	-1628,9	-1197,1	-431,8	-	-
5,6,7,8-tétrahydro-1-naphtol	$C_{10}H_{12}O$	529-35-1	148,2	-1925,1	-1177,2	**-747,9**	-1713,1	-212,0
2-isopropyl-5-méthylphénol	$C_{10}H_{14}O$	89-83-8	150,2	-1866,2	-1760,3	-105,7	-1945,6	79,6
1-adamantanol	$C_{10}H_{16}O$	768-95-6	152,2	-2611,8	-2751,4	139,6	-2648,1	36,3
2-adamantanol	$C_{10}H_{16}O$	700-57-2	152,2	-2548,7	-2532,6	-16,1	-2604,8	56,0
exo-4-hydroxy-exo-exo-tétracyclo[6.2.1.1^{3,6}.0^{2,7}]dodécane	$C_{12}H_{18}O$	74007-11-7	178,3	-1598,1	-1585,1	-13,1	-1669,7	71,5
exo-4-hydroxy-exo-endo-tétracyclo[6.2.1.1^{3,6}.0^{2,7}]dodécane	$C_{12}H_{18}O$	107133-43-7	178,3	-1650,9	-1585,1	-65,8	-1669,7	18,8
exo-4-hydroxy-endo-endo-tétracyclo[6.2.1.1^{3,6}.0^{2,7}]dodécane	$C_{12}H_{18}O$	7273-98-5	178,3	-1482,0	-1585,1	103,0	-1669,7	187,6
(1,1'-biphényl)méthanol	$C_{13}H_{12}O$	41376-19-6	184,2	-568,8	-660,5	91,7	-	-
1-tridécanol	$C_{13}H_{28}O$	112-70-9	200,4	-2991,6	-2962,7	-28,9	-3009,1	17,5
1-diamantanol	$C_{14}H_{20}O$	30545-19-8	204,3	-2098,8	-2034,1	-64,7	-1650,0	-448,8
3-diamantanol	$C_{14}H_{20}O$	30545-24-5	204,3	-2025,4	-1970,3	-55,1	-1729,2	-296,2
4-diamantanol	$C_{14}H_{20}O$	30651-03-7	204,3	-2128,6	-2034,1	-94,6	-1650,0	-478,7
1-tétradécanol	$C_{14}H_{30}O$	112-72-1	214,4	-2936,7	-2907,7	-29,1	-2949,4	12,7

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Domalski *et al.*	
					$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}
1-pentadécanol	$C_{15}H_{32}O$	629-76-5	228,4	-2881,6	-2859,4	-22,2	-2897,1	15,5
1-hexadécanol	$C_{16}H_{34}O$	36653-82-4	242,4	-2831,6	-2816,7	-15,0	-2850,8	19,1
3',5'-diisopropyl-4,4-diméthyl-3-phényl-1,2-benzocyclobutèn-3-ol	$C_{22}H_{28}O$	33574-16-2	308,5	-709,3	-695,8	-13,5	-	-
acide 3-butynoïque	$C_4H_4O_2$	2345-51-9	84,1	-2876,1	-1947,8	**-928,3**	-	-
acide 3-pentynoïque	$C_5H_6O_2$	36781-65-4	98,1	-2979,6	-2154,0	**-825,7**	-	-
cis-1,2-cyclopentanediol	$C_5H_{10}O_2$	5057-98-7	102,1	-4749,7	-4884,9	135,2	-5010,3	260,6
trans-1,2-cyclopentanediol	$C_5H_{10}O_2$	5057-99-8	102,1	-4798,7	-4884,9	86,2	-5010,3	211,6
2,2-diméthyl-1,3-propanediol	$C_5H_{12}O_2$	126-30-7	104,1	-5292,5	-5229,7	-62,8	-5329,3	36,8
hydroquinone	$C_6H_6O_2$	123-31-9	110,1	-3310,3	-3352,8	42,5	-3363,7	53,4
résorcinol	$C_6H_6O_2$	108-46-3	110,1	-3342,1	-3407,4	65,3	-3345,5	3,5
1,6-hexanediol	$C_6H_{14}O_2$	629-11-8	118,2	-4822,5	-4878,4	55,8	-4933,1	110,5
acide benzoïque	$C_7H_6O_2$	65-85-0	122,1	-3154,2	-3226,0	71,8	-3163,7	9,4
2-hydroxy-2,4,6-cycloheptatrièn-1-one	$C_7H_6O_2$	533-75-5	122,1	-1959,5	-900,2	**-1059,3**	-	-
1-(2-hydroxyphényl)éthanone	$C_8H_8O_2$	118-93-4	136,1	-2626,6	-2580,6	-46,0	-2566,5	-60,1
1-(3-hydroxyphényl)éthanone	$C_8H_8O_2$	121-71-1	136,1	-2722,0	-2717,7	-4,3	-2588,5	-133,5
1-(4-hydroxyphényl)éthanone	$C_8H_8O_2$	99-93-4	136,1	-2675,8	-2717,7	41,9	-2603,2	-72,6
acide 2-méthylbenzoïque	$C_8H_8O_2$	118-90-1	136,1	-3059,2	-3146,9	87,7	-3090,2	31,0
acide 3-méthylbenzoïque	$C_8H_8O_2$	99-04-7	136,1	-3129,7	-3147,4	17,7	-3112,2	-17,5
acide 4-méthylbenzoïque	$C_8H_8O_2$	99-94-5	136,1	-3152,5	-3147,4	-5,1	-3126,9	-25,6
1,4-benzènediméthanol	$C_8H_{10}O_2$	589-29-7	138,2	-2851,0	-2907,8	56,8	-	-
2,5-diméthyl-3-hexyne-2,5-diol	$C_8H_{14}O_2$	142-30-3	142,2	-2712,5	-2070,5	**-642,0**	-	-
2,5-diméthyl-2,5-hexanediol	$C_8H_{18}O_2$	110-03-2	146,2	-4661,9	-4627,2	-34,7	-4640,5	-21,5
acide (Z)-3-phényl-2-propénoïque	$C_9H_8O_2$	102-94-3	148,2	-2106,5	-1972,3	-134,2	-2242,5	136,0
acide (E)-3-phényl-2-propénoïque	$C_9H_8O_2$	140-10-3	148,2	-2273,9	-1972,3	-301,6	-2281,2	7,3
acide 2,3-diméthylbenzoïque	$C_9H_{10}O_2$	603-79-2	150,2	-2999,2	-3071,8	72,7	-3017,1	17,9
acide 2,4-diméthylbenzoïque	$C_9H_{10}O_2$	611-01-8	150,2	-3053,1	-3083,0	29,9	-3050,4	-2,7
acide 2,5-diméthylbenzoïque	$C_9H_{10}O_2$	610-72-0	150,2	-3037,1	-3083,0	45,8	-3050,4	13,3
acide 2,6-diméthylbenzoïque	$C_9H_{10}O_2$	632-46-2	150,2	-2934,6	-2939,3	4,7	-3017,1	82,5
acide 3,4-diméthylbenzoïque	$C_9H_{10}O_2$	619-04-5	150,2	-3121,7	-3072,3	-49,5	-3050,4	-71,3
acide 3,5-diméthylbenzoïque	$C_9H_{10}O_2$	499-06-9	150,2	-3105,7	-3083,4	-22,3	-3057,0	-48,7
acide 2-éthylbenzoïque	$C_9H_{10}O_2$	612-19-1	150,2	-2938,6	-2855,8	-82,7	-2948,7	10,1

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Domalski *et al.*	
					$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}
acide 3-éthylbenzoïque	$C_9H_{10}O_2$	619-20-5	150,2	-2968,5	-2856,3	-112,3	-2968,7	0,1
acide 4-éthylbenzoïque	$C_9H_{10}O_2$	619-64-7	150,2	-3067,8	-2856,3	-211,5	-2982,0	-85,8
2,6-diméthyl-2,6-heptanediol	$C_9H_{20}O_2$	6257-51-8	160,3	-4749,3	-4407,9	-341,5	-4417,8	-331,5
2,7-naphtalènediol	$C_{10}H_8O_2$	582-17-2	160,2	-2036,0	-2036,0	0,0	-2054,8	18,9
2,3-naphtalènediol	$C_{10}H_8O_2$	92-44-4	160,2	-1975,4	-1758,6	-216,9	-1954,9	-20,5
acide 2,4-diméthylphénylacétique	$C_{10}H_{12}O_2$	6331-04-0	164,2	-3019,5	-2987,7	-31,7	-	-
acide 2,3,4-triméthylbenzoïque	$C_{10}H_{12}O_2$	1076-47-7	164,2	-2963,4	-3009,6	46,1	-2956,5	-6,9
acide 2,3,5-triméthylbenzoïque	$C_{10}H_{12}O_2$	2437-66-3	164,2	-2976,2	-3019,8	43,5	-2987,0	10,7
acide 2,3,6-triméthylbenzoïque	$C_{10}H_{12}O_2$	2529-36-4	164,2	-2897,1	-2888,3	-8,7	-2956,5	59,4
acide 2,4,5-triméthylbenzoïque	$C_{10}H_{12}O_2$	528-90-5	164,2	-3018,9	-3019,8	0,9	-2987,0	-31,9
acide 2,4,6-triméthylbenzoïque	$C_{10}H_{12}O_2$	480-63-7	164,2	-2910,5	-2898,5	-11,9	-2974,8	64,3
acide 3,4,5-triméthylbenzoïque	$C_{10}H_{12}O_2$	1076-88-6	164,2	-3050,5	-3009,6	-41,0	-2956,5	-94,0
2-hydroxy-4-isopropyl-2,4,6-cycloheptatrièn-1-one	$C_{10}H_{12}O_2$	499-44-5	164,2	-2074,3	-649,2	**-1425,1**	-	-
acide décanoïque	$C_{10}H_{20}O_2$	334-48-5	172,3	-4143,0	-4134,5	-8,6	-4157,9	14,9
1,10-décanediol	$C_{10}H_{22}O_2$	112-47-0	174,3	-3979,2	-3990,8	11,6	-4020,0	40,7
2,7-diméthyl-2,7-octanediol	$C_{10}H_{22}O_2$	19781-07-8	174,3	-4188,7	-4223,8	35,2	-4231,0	42,4
acide 1-naphtalènecarboxylique	$C_{11}H_8O_2$	86-55-5	172,2	-1936,9	-1968,5	31,6	-2004,2	67,3
acide 2-naphtalènecarboxylique	$C_{11}H_8O_2$	93-09-4	172,2	-2010,1	-1968,5	-41,6	-2004,2	-5,9
acide 2,3,4,5-tétraméthylbenzoïque	$C_{11}H_{14}O_2$	2529-39-7	178,2	-2886,2	-2957,1	70,9	-2894,2	8,0
acide 2,3,4,6-tétraméthylbenzoïque	$C_{11}H_{14}O_2$	2408-38-0	178,2	-2848,6	-2845,4	-3,2	-2894,2	45,6
acide 2,3,5,6-tétraméthylbenzoïque	$C_{11}H_{14}O_2$	2604-45-7	178,2	-2839,6	-2845,4	5,8	-2894,2	54,6
acide 3,5-diéthylbenzoïque	$C_{11}H_{14}O_2$	3854-90-8	178,2	-2872,2	-2602,9	-269,3	-2823,9	-48,3
acide 2-tert-butylbenzoïque	$C_{11}H_{14}O_2$	1077-58-3	178,2	-2671,9	-2821,6	149,7	-2837,3	165,4
acide 3-tert-butylbenzoïque	$C_{11}H_{14}O_2$	7498-54-6	178,2	-2829,5	-2821,9	-7,6	-2854,1	24,6
acide 4-tert-butylbenzoïque	$C_{11}H_{14}O_2$	98-73-7	178,2	-2821,7	-2821,9	0,2	-2865,3	43,7
acide adamantane-1-carboxylique	$C_{11}H_{16}O_2$	828-51-3	180,2	-3568,0	-3426,1	-141,9	-3345,2	-222,8
acide adamantane-2-carboxylique	$C_{11}H_{16}O_2$	15897-81-1	180,2	-3479,7	-3426,1	-53,7	-3345,2	-134,5
acide undécanoïque	$C_{11}H_{22}O_2$	112-37-8	186,3	-3950,3	-3982,9	32,7	-4002,7	52,4
1-naphtyl acétate	$C_{12}H_{10}O_2$	830-81-9	186,2	-1638,0	-1599,2	-38,8	-1586,6	-51,4
2-naphtyl acétate	$C_{12}H_{10}O_2$	1523-11-1	186,2	-1662,7	-1599,2	-63,5	-1586,6	-76,1
acide 1-naphtalèneacétique	$C_{12}H_{10}O_2$	86-87-3	186,2	-1929,0	-1977,1	48,1	-	-

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Domalski *et al.*	
					$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}
acide 2-naphtalèneacétique	$C_{12}H_{10}O_2$	581-96-4	186,2	-1997,2	-1977,1	-20,1	-	-
acide pentaméthylbenzoïque	$C_{12}H_{16}O_2$	2243-32-5	192,3	-2788,5	-2800,1	11,6	-2815,0	26,5
3,6-diéthyloct-4-yne-3,6-diol	$C_{12}H_{22}O_2$	2044-37-3	198,3	-2428,1	-2071,5	-356,6	-	-
acide dodécanoïque	$C_{12}H_{24}O_2$	143-07-7	200,3	-3866,9	-3852,6	-14,3	-3869,3	2,4
2,9-diméthyl-2,9-décanediol	$C_{12}H_{26}O_2$	22092-57-5	202,3	-3902,5	-3932,3	29,9	-3935,1	32,6
acide phényl ester benzoïque	$C_{13}H_{10}O_2$	93-99-2	198,2	-1218,9	-1214,4	-4,5	-1213,6	-5,3
acide 2-phénylbenzoïque	$C_{13}H_{10}O_2$	947-84-2	198,2	-1761,2	-1619,9	-141,3	-1620,3	-140,9
acide tridécanoïque	$C_{13}H_{26}O_2$	638-53-9	214,3	-3763,1	-3739,3	-23,8	-3753,3	-9,8
2,10-diméthyl-2,10-undécanediol	$C_{13}H_{28}O_2$	22092-58-6	216,4	-3863,0	-3814,9	-48,1	-3815,9	-47,1
2-hydroxy-1,2-diphényléthanone	$C_{14}H_{12}O_2$	119-53-9	212,2	-1167,1	-1167,1	0,0	-	-
acide tétradécanoïque	$C_{14}H_{28}O_2$	544-63-8	228,4	-3649,8	-3639,9	-9,9	-3651,5	1,8
2,11-diméthyl-2,11-dodécanediol	$C_{14}H_{30}O_2$	22092-59-7	230,4	-3673,0	-3711,8	38,9	-3711,2	38,3
2,2'-bis(4-hydroxyphényl)propane	$C_{15}H_{16}O_2$	80-05-7	228,3	-1614,6	-1614,6	0,0	-1602,5	-12,1
acide 3,5-Di-tert-butylbenzoïque	$C_{15}H_{22}O_2$	16225-26-6	234,3	-2665,4	-2611,3	-54,1	-2684,3	18,8
acide pentadécanoïque	$C_{15}H_{30}O_2$	1002-84-2	242,4	-3554,9	-3552,0	-2,9	-3561,6	6,6
acide hexadécanoïque	$C_{16}H_{32}O_2$	57-10-3	256,4	-3476,7	-3473,8	-2,9	-3481,4	4,8
acide 2-naphtyl ester benzoïque	$C_{17}H_{12}O_2$	93-44-7	248,3	-744,3	-747,9	3,6	-802,7	58,4
acide heptadécanoïque	$C_{17}H_{34}O_2$	506-12-7	270,5	-3418,0	-3403,6	-14,4	-3409,6	-8,4
acide octadécanoïque	$C_{18}H_{36}O_2$	57-11-4	284,5	-3331,4	-3340,4	9,0	-3344,9	13,5
acide nonadécanoïque	$C_{19}H_{38}O_2$	646-30-0	298,5	-3296,4	-3283,1	-13,3	-3286,2	-10,2
acide éicosanoïque	$C_{20}H_{40}O_2$	506-30-9	312,5	-3237,8	-3231,0	-6,8	-3232,8	-4,9
acide (E)-13-docosénoïque	$C_{22}H_{42}O_2$	506-33-2	338,6	-2837,5	-2622,3	-215,3	-2803,8	-33,7
acide (S)-2-hydroxypropanoïque	$C_3H_6O_3$	79-33-4	90,1	-7704,4	-7565,0	-139,5	-7758,6	54,2
acide furancarboxylique	$C_5H_4O_3$	26447-28-9	112,1	-4446,7	-4446,7	0,0	-	-
2-(hydroxyméthyl)-2-méthyl-1,3-propanediol	$C_5H_{12}O_3$	77-85-0	120,1	-6197,4	-6113,4	-84,0	-6130,8	-66,6
2-éthyl-2-(hydroxyméthyl)-1,3-propanediol	$C_6H_{14}O_3$	77-99-6	134,2	-5596,5	-5696,1	99,6	-5676,7	80,2
acide perbenzoïque	$C_7H_6O_3$	93-59-4	138,1	-2657,1	-2210,5	-446,6	-2099,6	**-557,5**
acide salicylique	$C_7H_6O_3$	69-72-7	138,1	-4270,9	-3999,8	-271,1	-4279,8	8,9
acide 3-(2-furanyl)-2-propénoïque	$C_7H_6O_3$	539-47-9	138,1	-3323,2	-3142,0	-181,2	-	-
3-hydroxy-4-méthoxy-benzaldéhyde	$C_8H_8O_3$	621-59-0	152,1	-2980,0	-3252,3	272,3	-3235,7	255,7
2,4-dihydroxyacétophénone	$C_8H_8O_3$	89-84-9	152,1	-3769,4	-3603,9	-165,5	-3629,4	-140,0

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Domalski *et al.*	
					$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}
acide (R,S)-α-hydroxybenzèneacétique	$C_8H_8O_3$	611-72-3	152,1	-3808,2	-3773,1	-35,1	-	-
acide (S)-α-hydroxybenzèneacétique	$C_8H_8O_3$	17199-29-0	152,1	-3816,0	-3773,1	-43,0	-	-
acide 2-méthoxybenzoïque	$C_8H_8O_3$	579-75-9	152,1	-3539,3	-3541,2	1,9	-3539,3	-0,1
acide 3-méthoxybenzoïque	$C_8H_8O_3$	586-38-9	152,1	-3637,9	-3663,9	26,0	-3657,6	19,7
acide 4-méthoxybenzoïque	$C_8H_8O_3$	100-09-4	152,1	-3691,8	-3663,9	-27,9	-3690,4	-1,4
acide 3-hydroxy-2-naphtoïque	$C_{11}H_8O_3$	92-70-6	188,2	-2911,1	-2643,4	-267,7	-2922,1	11,0
acide dodécanepéroxoïque	$C_{12}H_{24}O_3$	2388-12-7	216,3	-3144,9	-3157,8	12,9	-3137,7	-7,3
phényl-2-hydroxybenzoate	$C_{13}H_{10}O_3$	118-55-8	214,2	-2038,1	-1956,1	-82,1	-2055,5	17,4
diphényl carbonate	$C_{13}H_{10}O_3$	102-09-0	214,2	-1872,9	-1943,4	70,6	-1847,2	-25,7
acide carbonique dicyclohexyl ester	$C_{13}H_{22}O_3$	4427-97-8	226,3	-3668,4	-3601,6	-66,8	-3790,6	122,2
acide tétradécanepéroxoïque	$C_{14}H_{28}O_3$	19816-73-0	244,4	-3068,7	-3038,8	-29,9	-3018,2	-50,5
acide 2-méthylbenzoïque anhydride	$C_{16}H_{14}O_3$	607-86-3	254,3	-2098,1	-2052,5	-45,6	-2014,1	-84,0
acide 4-méthylbenzoïque anhydride	$C_{16}H_{14}O_3$	13222-85-0	254,3	-2048,9	-2053,0	4,1	-2053,4	4,5
acide 1-méthyl-1-phényléthyl ester benzènecarbopéroxoïque	$C_{16}H_{16}O_3$	7074-00-2	256,3	-903,3	-903,3	0,0	-941,2	38,0
acide hexadécanepéroxoïque	$C_{16}H_{32}O_3$	7311-29-7	272,4	-2943,6	-2944,3	0,8	-2923,3	-20,3
acide 3-phényl-2-propénoïque anhydride	$C_{18}H_{14}O_3$	538-56-7	278,3	-1249,7	-896,4	-353,3	-1245,6	-4,1
acide octadécanepéroxoïque	$C_{18}H_{36}O_3$	5796-86-1	300,5	-2853,1	-2867,5	14,4	-2846,1	-7,0
acide oxalique	$C_2H_2O_4$	144-62-7	90,0	-9126,5	-9238,6	112,2	-8951,2	-175,3
dioxybisméthanol	$C_2H_6O_4$	17088-73-2	94,1	-7078,0	-7615,8	**537,9**	-	-
acide malonique	$C_3H_4O_4$	141-82-2	104,1	-8562,2	-8557,4	-4,9	-8558,4	-3,8
acide 2-butynedioïque	$C_4H_2O_4$	142-45-0	114,1	-5062,4	-4814,4	-248,1	-	-
3,4-dihydroxy-3-cyclobutène-1,2-dione	$C_4H_2O_4$	2892-51-5	114,1	-5244,8	-5244,8	0,0	-	-
acide (Z)-2-butènedioïque	$C_4H_4O_4$	110-16-7	116,1	-6800,9	-6298,4	**-502,6**	-6988,2	187,2
acide (E)-2-butènedioïque	$C_4H_4O_4$	110-17-8	116,1	-6993,1	-6298,4	**-694,7**	-7037,5	44,5
acide butanedioïque	$C_4H_6O_4$	110-15-6	118,1	-7964,4	-8022,0	57,6	-7852,6	-111,8
acide éthanedioïque diméthyl ester	$C_4H_6O_4$	553-90-2	118,1	-6404,5	-6319,0	-85,5	-6404,5	0,0
2(R),3(S)-1,2,3,4-butanetétrol	$C_4H_{10}O_4$	149-32-6	122,1	-7455,0	-7355,6	-99,4	-7556,5	101,5
acide (E)-2-méthyl-2-butènedioïque	$C_5H_6O_4$	498-24-8	130,1	-6336,7	-5272,6	**-1064,1**	-	-
acide méthylènebutanedioïque	$C_5H_6O_4$	97-65-4	130,1	-6465,1	-3826,8	**-2638,3**	-	-
acide méthylbutanedioïque	$C_5H_8O_4$	498-21-5	132,1	-7252,8	-7286,9	34,1	-7253,6	0,8
acide pentanedioïque	$C_5H_8O_4$	110-94-1	132,1	-7266,4	-7285,4	19,0	-7241,5	-24,9

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Domalski *et al.*	
					$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}
2,2-bis(hydroxyméthyl)-1,3-propanediol	$C_5H_{12}O_4$	115-77-5	136,1	-6761,8	-6789,4	27,6	-6744,0	-17,9
acide 2,2-diméthylbutanedioïque	$C_6H_{10}O_4$	597-43-3	146,1	-6759,2	-6761,7	2,4	-6689,2	-70,1
acide méso-2,3-diméthylbutanedioïque	$C_6H_{10}O_4$	608-39-9	146,1	-6688,7	-6692,8	4,1	-6769,6	80,9
acide racémique-2,3-diméthylbutanedioïque	$C_6H_{10}O_4$	608-40-2	146,1	-6731,8	-6692,8	-39,1	-6769,6	37,8
acide (-)-2,3-diméthylbutanedioïque	$C_6H_{10}O_4$	57694-62-9	146,1	-6723,0	-6692,8	-30,2	-6769,6	46,7
acide 2-éthylbutanedioïque	$C_6H_{10}O_4$	636-48-6	146,1	-6768,8	-6791,1	22,3	-6742,7	-26,1
acide hexanedioïque	$C_6H_{10}O_4$	124-04-9	146,1	-6803,7	-6822,9	19,3	-6747,7	-56,0
5-(1α,2β,3β,4α)-1,2,3,4-cyclohexènetétrol	$C_6H_{10}O_4$	526-87-4	146,1	-5722,5	-5203,4	**-519,1**	-	-
acide triméthylbutanedioïque	$C_7H_{12}O_4$	2103-16-4	160,2	-6248,4	-6261,5	13,0	-6278,6	30,2
acide heptanedioïque	$C_7H_{12}O_4$	111-16-0	160,2	-6302,1	-6290,1	-12,1	-6340,4	38,3
acide 1,2-benzènedicarboxylique	$C_8H_6O_4$	88-99-3	166,1	-4707,1	-4624,2	-83,0	-4681,5	-25,6
acide 1,3-benzènedicarboxylique	$C_8H_6O_4$	121-91-5	166,1	-4833,5	-4855,8	22,3	-4807,9	-25,6
acide 1,4-benzènedicarboxylique	$C_8H_6O_4$	100-21-0	166,1	-4912,4	-4819,7	-92,7	-4887,0	-25,4
acide cis-cyclohexane-1,2-dicarboxylique	$C_8H_{12}O_4$	610-09-3	172,2	-5582,0	-5825,6	243,6	-5799,2	217,2
acide trans-cyclohexane-1,2-dicarboxylique	$C_8H_{12}O_4$	2305-32-0	172,2	-5637,8	-5825,6	187,8	-5799,2	161,5
acide tétraméthylbutanedioïque	$C_8H_{14}O_4$	630-51-3	174,2	-5811,9	-5816,1	4,2	-5852,0	40,1
acide 2,2-diéthylbutanedioïque	$C_8H_{14}O_4$	5692-97-7	174,2	-5928,4	-5915,6	-12,8	-5899,6	-28,8
acide méso-2,3-diéthylbutanedioïque	$C_8H_{14}O_4$	35392-80-4	174,2	-5850,9	-5873,0	22,1	-5990,2	139,3
acide racémique-2,3-diéthylbutanedioïque	$C_8H_{14}O_4$	35392-77-9	174,2	-5891,7	-5873,0	-18,7	-5990,2	98,5
acide octanedioïque	$C_8H_{14}O_4$	505-48-6	174,2	-5958,9	-5954,4	-4,5	-5998,7	39,8
acide 2-acétoxybenzoïque	$C_9H_8O_4$	50-78-2	180,2	-4208,2	-4145,7	-62,5	-4203,1	-5,1
acide nonanedioïque	$C_9H_{16}O_4$	123-99-9	188,2	-5601,4	-5599,8	-1,6	-5707,9	106,5
acide phénylbutanedioïque	$C_{10}H_{10}O_4$	635-51-8	194,2	-4330,9	-4299,4	-31,5	-4315,7	-15,2
2,4-diacétyl-1,3-benzènediol	$C_{10}H_{10}O_4$	2163-12-4	194,2	-3880,3	-3721,2	-159,1	-3754,3	-126,1
4,6-diacétyl-1,3-benzènediol	$C_{10}H_{10}O_4$	2161-85-5	194,2	-3998,8	-3715,3	-283,5	-3780,0	-218,8
acide 1,3-benzènedicarboxylique diméthyl ester	$C_{10}H_{10}O_4$	1459-93-4	194,2	-3764,0	-3638,6	-125,4	-3915,2	151,2
acide 1,4-benzènedicarboxylique diméthyl ester	$C_{10}H_{10}O_4$	120-61-6	194,2	-3772,7	-3607,6	-165,1	-3925,5	152,7
1,2,3-propanetriol 1-benzoate	$C_{10}H_{12}O_4$	3376-59-8	196,2	-3961,8	-3972,1	10,3	-4124,4	162,6
1,2,3-propanetriol 2-benzoate	$C_{10}H_{12}O_4$		196,2	-3938,8	-3972,1	33,2	-4124,4	185,5
acide triéthylbutanedioïque	$C_{10}H_{18}O_4$	2103-18-6	202,2	-5272,3	-5311,8	39,5	-5368,5	96,2
acide décanedioïque	$C_{10}H_{18}O_4$	111-20-6	202,2	-5352,8	-5358,6	5,7	-5457,5	104,6

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Domalski *et al.*	
					$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}
acide undécanedioïque	$C_{11}H_{20}O_4$	1852-04-6	216,3	-5083,4	-5088,6	5,2	-5239,5	156,1
acide tétraéthylsuccinique	$C_{12}H_{22}O_4$	4111-60-8	230,3	-4761,2	-4916,0	154,8	-4898,2	137,0
acide dodécanedioïque	$C_{12}H_{22}O_4$	693-23-2	230,3	-4906,6	-4907,9	1,3	-5048,1	141,5
acide tridécanedioïque	$C_{13}H_{24}O_4$	505-52-2	244,3	-4699,8	-4694,8	-5,0	-4878,7	178,8
1,2,3-propanetriol 1-décanoate	$C_{13}H_{26}O_4$	2277-23-8	246,3	-4501,9	-4450,1	-51,7	-4624,1	122,2
1,2,3-propanetriol 2-décanoate	$C_{13}H_{26}O_4$	3376-48-5	246,3	-4447,9	-4450,1	2,3	-4587,5	139,7
acide oxalique diphényl ester	$C_{14}H_{10}O_4$	3155-16-6	242,2	-2228,1	-2205,0	-23,1	-2394,0	166,0
1,2,3-propanetriol 1-dodécanoate	$C_{15}H_{30}O_4$	142-18-7	274,4	-4230,7	-4212,0	-18,7	-4365,7	135,0
1,2,3-propanetriol 2-dodécanoate	$C_{15}H_{30}O_4$	1678-45-1	274,4	-4200,5	-4212,0	11,5	-4332,9	132,4
acide méso-2,3-diphénylbutanedioïque	$C_{16}H_{14}O_4$	1225-13-4	270,3	-2713,9	-2731,7	17,9	-2770,4	56,5
acide racémique-2,3-diphénylbutanedioïque	$C_{16}H_{14}O_4$	7584-72-7	270,3	-2738,3	-2731,7	-6,6	-2770,4	32,1
(-)α-desmotroposantonin acétate	$C_{17}H_{20}O_4$	14794-71-9	288,3	-3019,4	-3036,6	17,2	-	-
(+)β-desmotroposantonin acétate	$C_{17}H_{20}O_4$	14794-69-5	288,3	-3049,2	-3036,6	-12,7	-	-
1,2,3-propanetriol 1-tétradécanoate	$C_{17}H_{34}O_4$	589-68-4	302,4	-4042,3	-4018,1	-24,2	-4155,2	112,9
1,2,3-propanetriol 2-tétradécanoate	$C_{17}H_{34}O_4$	3443-83-2	302,4	-4010,3	-4018,1	7,8	-4125,5	115,2
1,2,3-propanetriol 1-hexadécanoyl ester	$C_{19}H_{38}O_4$	542-44-9	330,5	-3877,4	-3857,1	-20,3	-3980,5	103,1
1,2,3-propanetriol 2-hexadécanoyl ester	$C_{19}H_{38}O_4$	23470-00-0	330,5	-3838,7	-3857,1	18,4	-3953,3	114,6
acide 1,2-benzènedicarboxylique diphényl ester	$C_{20}H_{14}O_4$	84-62-8	318,3	-1536,8	-1575,0	38,2	-1618,7	81,9
acide 1,2-benzènedicarboxylique dicyclohexyl ester	$C_{20}H_{26}O_4$	84-61-7	330,4	-2818,9	-2874,3	55,5	-3020,5	201,7
1,2,3-propanetriol 1-octadécanoyl ester	$C_{21}H_{42}O_4$	123-94-4	358,6	-3730,0	-3721,3	-8,7	-3833,1	103,2
1,2,3-propanetriol 2-octadécanoyl ester	$C_{21}H_{42}O_4$	621-61-4	358,6	-3685,1	-3721,3	36,2	-3808,0	123,0
acide (R)-hydroxybutanedioïque	$C_4H_6O_5$	636-61-3	134,1	-8246,1	-8275,1	29,0	-8303,9	57,8
acide (S)-hydroxybutanedioïque	$C_4H_6O_5$	97-67-6	134,1	-8230,5	-8275,1	44,6	-8303,9	73,5
acide 2-oxopentanedioïque	$C_5H_6O_5$	328-50-7	146,1	-7024,0	-7024,1	0,0	-7086,1	62,0
α-D-xylose	$C_5H_{10}O_5$	31178-70-8	150,1	-7045,9	-7036,4	-9,5	-7257,6	211,7
D-ribose	$C_5H_{10}O_5$	50-69-1	150,1	-7001,3	-6973,0	-28,3	-	-
D-arabinose	$C_5H_{10}O_5$	10323-20-3	150,1	-7046,6	-7036,4	-10,2	-7257,6	211,0
xylitol	$C_5H_{12}O_5$	87-99-0	152,1	-7351,5	-7352,5	1,0	-7568,7	217,2
1,2-anhydro-3,4,5,6-alloinositol	$C_6H_{10}O_5$	23559-36-6	162,1	-5589,0	-5238,8	-350,2	-6561,1	**972,1**
2-(diacétoxyméthyl)furane	$C_9H_{10}O_5$	613-75-2	198,2	-4451,2	-4445,5	-5,7	-	-
benzoylcarboxypéroxyde phényl ester	$C_{14}H_{10}O_5$	962-16-3	258,2	-1877,8	-1317,9	**-559,9**	-2031,4	153,6

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Domalski *et al.*	
					$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}
benzoyl(cyclohexyloxy)carbonylpéroxyde	$C_{14}H_{16}O_5$	20666-86-8	264,3	-2805,8	-2042,2	**-763,6**	-2859,3	53,5
acide (E)-1-propène-1,2,3-tricarboxylique	$C_6H_6O_6$	4023-65-8	174,1	-7080,1	-4871,6	**-2208,5**	-	-
acide (Z)-1-propène-1,2,3-tricarboxylique	$C_6H_6O_6$	585-84-2	174,1	-7032,4	-4871,6	**-2160,8**	-	-
acide L-ascorbique	$C_6H_8O_6$	50-81-7	176,1	-6612,4	-6558,6	-53,8	-	-
α-D-glucose	$C_6H_{12}O_6$	26655-34-5	180,2	-7067,8	-7094,3	26,6	-7237,2	169,4
L-sorbose	$C_6H_{12}O_6$	87-79-6	180,2	-7057,8	-6879,9	-177,9	-	-
β-D-fructose	$C_6H_{12}O_6$	57-48-7	180,2	-7025,0	-6879,9	-145,2	-	-
D-mannose	$C_6H_{12}O_6$	3458-28-4	180,2	-7010,6	-7034,2	23,6	-	-
α-D-galactose	$C_6H_{12}O_6$	3646-73-9	180,2	-7139,9	-7094,3	-45,6	-7267,7	127,8
D-mannitol	$C_6H_{14}O_6$	69-65-8	182,2	-7339,8	-7350,5	10,7	-7576,8	237,0
galactitol	$C_6H_{14}O_6$	608-66-2	182,2	-7392,5	-7350,5	-42,0	-7576,8	184,3
α-D-méthylglucopyranoside	$C_7H_{14}O_6$	97-30-3	194,2	-6351,2	-6415,8	64,6	-6568,1	216,8
β-D-méthylglucopyranoside	$C_7H_{14}O_6$	709-50-2	194,2	-6372,9	-6415,8	43,0	-6568,1	195,2
acide 1,2,3-benzènetricarboxylique	$C_9H_6O_6$	569-51-7	210,1	-5521,5	-5531,0	9,4	-5501,0	-20,5
acide 1,2,4-benzènetricarboxylique	$C_9H_6O_6$	528-44-9	210,1	-5611,0	-5619,8	8,8	-5663,5	52,5
acide 1,3,5-benzènetricarboxylique	$C_9H_6O_6$	554-95-0	210,1	-5663,4	-5803,0	139,6	-5700,9	37,6
4-hydroxy-2H-pyran-3,3,5,5,(4H,6H)-tétraméthanol	$C_9H_{18}O_6$	4744-47-2	222,2	-5704,3	-5728,3	24,0	-5933,5	229,2
acide 1,3,5-benzènetricarboxylique triméthyl ester	$C_{12}H_{12}O_6$	2672-58-4	252,2	-4365,6	-4239,2	-126,4	-4587,2	221,6
acide péroxydicarbonique dicyclohexyl ester	$C_{14}H_{22}O_6$	1561-49-5	286,3	-3850,6	-3108,0	**-742,6**	-3988,0	137,5
acide 2-hydroxy-1,2,3-propanetricarboxylique	$C_6H_8O_7$	77-92-9	192,1	-8035,5	-8032,8	-2,7	-	-
acide D-glutarique 1,4-lactone	$C_6H_8O_7$	389-36-6	192,1	-7473,3	-7481,3	7,9	-7687,1	213,8
acide D-glutarique 3,6-lactone	$C_6H_8O_7$	2782-04-9	192,1	-7482,2	-7481,3	-0,9	-7687,1	204,9
α-D-glucose hydrate	$C_6H_{14}O_7$	16824-90-1	198,2	-7933,5	-7943,3	9,7	-	-
dipentaérythritol	$C_{10}H_{22}O_7$	126-58-9	254,3	-6183,4	-6185,0	1,6	-6119,4	-64,0
acide citrique monohydrate	$C_6H_{10}O_8$	5949-29-1	210,1	-8744,2	-8746,7	2,4	-	-
acide 1,2,3,4-benzènetétracarboxylique	$C_{10}H_6O_8$	476-73-3	254,1	-6093,3	-6100,1	6,8	-6036,8	-56,5
acide 1,2,3,5-benzènetétracarboxylique	$C_{10}H_6O_8$	479-47-0	254,1	-6147,2	-6173,6	26,4	-6119,4	-27,8
acide 1,2,4,5-benzènetétracarboxylique	$C_{10}H_6O_8$	89-05-4	254,1	-6180,6	-6095,6	-85,1	-6171,1	-9,5
acide 1,2,4,5-benzènetétracarboxylique diméthyl ester	$C_{12}H_{10}O_8$	39900-53-3	282,2	-5228,5	-5275,2	46,7	-5667,3	438,8
acide 1,2,4,5-benzènetétracarboxylique tétraméthyl ester	$C_{14}H_{14}O_8$	635-10-9	310,3	-4617,2	-4603,2	-14,0	-4994,9	377,8
acide 1,2,4,5-benzènetétracarboxylique diéthyl ester	$C_{14}H_{14}O_8$	50853-29-7	310,3	-5124,2	-4943,5	-180,7	-5367,6	243,4

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Domalski *et al.*	
					$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}
acide 1,2,4,5-benzènetétracarboxylique dipropyl ester	$C_{16}H_{18}O_8$	56941-72-1	338,3	-4860,0	-4709,5	-150,6	-5096,3	236,3
acide 1,2,4,5-benzènetétracarboxylique tétraéthyl ester	$C_{18}H_{22}O_8$	6634-01-1	366,4	-4311,6	-4144,3	-167,3	-4590,3	278,7
acide benzènepentacarboxylique	$C_{11}H_6O_{10}$	1585-40-6	298,2	-6472,0	-6521,4	49,3	-6370,3	-101,8
acide benzènepentacarboxylique pentaméthyl ester	$C_{16}H_{16}O_{10}$	3327-06-8	368,3	-4855,1	-4868,8	13,7	-5257,8	402,7
D-sucrose	$C_{12}H_{22}O_{11}$	57-50-1	342,3	-6503,4	-6663,5	160,0	-6802,4	299,0
β-lactose	$C_{12}H_{22}O_{11}$	5965-66-2	342,3	-6534,4	-6540,3	5,9	-6805,0	270,6
α-D-glucose 2,3,4,5,6-pentaacétate	$C_{16}H_{22}O_{11}$	3891-59-6	390,3	-5762,7	-5675,1	-87,6	-5991,5	228,8
acide benzènehexacarboxylique	$C_{12}H_6O_{12}$	517-60-2	342,2	-6718,0	-6837,6	119,6	-6518,2	-199,8
β-maltose monohydrate	$C_{12}H_{24}O_{12}$	6363-53-7	360,3	-6826,3	-6804,8	-21,5	-	-
α-lactose monohydrate	$C_{12}H_{24}O_{12}$	10639-26-6	360,3	-6894,3	-6909,1	14,8	-	-
acide benzènehexacarboxylique hexaméthyl ester	$C_{18}H_{18}O_{12}$	6237-59-8	426,3	-4951,1	-5062,1	110,9	-5449,2	498,1

Comparaison des enthalpies standard de formation en phase solide issues de la littérature avec les enthalpies représentées par la méthode développée et avec les enthalpies prévues par la méthode de Domalski *et al.*, concernant 134 molécules contenant carbone, hydrogène et azote

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Domalski *et al.*	
					$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}
méthanetétracarbonitrile	C_5N_4	24331-09-7	116,1	5268,8	5268,8	0,0	-	-
éthènetétracarbonitrile	C_6N_4	670-54-2	128,1	4870,0	3929,7	**940,3**	-	-
quinuclidine	$C_7H_{13}N$	100-76-5	111,2	-494,7	-494,7	0,0	-856,3	361,7
indole	C_8H_7N	120-72-9	117,1	740,1	740,1	0,0	-	-
endo-bicyclo[2.2.1]heptane-2-carbonitrile	$C_8H_{11}N$	3211-87-8	121,2	167,5	167,5	0,0	243,3	-75,8
3-azabicyclo[3.2.2]nonane	$C_8H_{15}N$	283-24-9	125,2	-810,6	-1369,2	**558,6**	-1196,4	385,8
3-éthyl-2,4,5-triméthyl-1H-pyrrole	$C_9H_{15}N$	520-69-4	137,2	-650,0	-650,0	0,0	-1041,0	391,0
1-naphtylamine	$C_{10}H_9N$	134-32-7	143,2	472,8	445,1	27,7	433,4	39,4
2-naphtylamine	$C_{10}H_9N$	91-59-8	143,2	416,9	445,1	-28,2	433,4	-16,5
1-phényl-1H-pyrrole	$C_{10}H_9N$	635-90-5	143,2	1077,6	1077,6	0,0	-	-
2-phényl-1H-pyrrole	$C_{10}H_9N$	3042-22-6	143,2	972,2	972,2	0,0	-	-
2,3-diméthyl-1H-indole	$C_{10}H_{11}N$	91-55-4	145,2	28,9	-382,1	411,1	-	-
9H-carbazole	$C_{12}H_9N$	86-74-8	167,2	608,2	124,6	483,6	904,3	-296,0
2-aminobiphényle	$C_{12}H_{11}N$	90-41-5	169,2	554,3	482,1	72,2	508,1	46,2
4-aminobiphényle	$C_{12}H_{11}N$	92-67-1	169,2	478,7	481,7	-3,1	478,5	0,1
diphénylamine	$C_{12}H_{11}N$	122-39-4	169,2	769,4	471,6	297,8	769,4	0,0
acridine	$C_{13}H_9N$	260-94-6	179,2	1001,1	984,1	17,0	-	-
biphényl-2-carbonitrile	$C_{13}H_9N$	24973-49-7	179,2	1298,4	1224,8	73,6	1222,2	76,3
6,7-benzoquinoline	$C_{13}H_9N$	260-36-6	179,2	830,8	874,6	-43,7	-	-
benzo[f]quinoline	$C_{13}H_9N$	85-02-9	179,2	840,3	796,6	43,7	-	-
benzo[h]quinoline	$C_{13}H_9N$	230-27-3	179,2	893,9	893,9	0,0	-	-
p-benzylidèneaniline	$C_{13}H_{11}N$	538-51-2	181,2	1020,8	286,0	**734,8**	-	-
9-méthyl-9H-carbazole	$C_{13}H_{11}N$	1484-12-4	181,2	582,1	582,2	0,0	818,6	-236,5
4-méthyldiphénylamine	$C_{13}H_{13}N$	620-84-8	183,2	266,8	247,0	19,9	495,7	-228,8
4,4'-diméthyldiphénylamine	$C_{14}H_{15}N$	620-93-9	197,3	-58,8	54,4	-113,2	260,9	-319,7
N-phényl-2-naphtylamine	$C_{16}H_{13}N$	135-88-6	219,3	729,2	614,9	114,3	781,9	-52,7
5-méthyl-5H-indéno[2,1-b]quinoline	$C_{17}H_{13}N$	6626-64-8	231,3	888,1	888,1	0,0	-	-

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Domalski *et al.*	
					$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}
N-benzyldiphénylamine	$C_{19}H_{17}N$	606-87-1	259,3	712,2	573,2	139,0	372,7	339,5
tribenzylamine	$C_{21}H_{21}N$	620-40-6	287,4	489,6	113,1	376,4	-457,0	**946,6**
cyanamide	CH_2N_2	420-04-2	42,0	1398,7	1398,7	0,0	-	-
malononitrile	$C_3H_2N_2$	109-77-3	66,1	2844,3	2844,3	0,0	-	-
1H-pyrazole	$C_3H_4N_2$	288-13-1	68,1	1548,2	648,6	**899,6**	-	-
1H-imidazole	$C_3H_4N_2$	288-32-4	68,1	731,5	1907,9	**-1176,4**	-	-
(E)-butènedinitrile	$C_4H_2N_2$	764-42-1	78,1	3435,3	3435,3	0,0	-	-
pyrazine	$C_4H_4N_2$	290-37-9	80,1	1745,6	1745,6	0,0	1749,6	-4,0
succinonitrile	$C_4H_4N_2$	110-61-2	80,1	1744,3	2166,1	-421,8	1744,3	0,0
pipérazine	$C_4H_{10}N_2$	110-85-0	86,1	-485,3	-1761,1	**1275,8**	-469,0	-16,3
2,3-diazabicyclo[2.2.1]hept-2-ène	$C_5H_8N_2$	2721-32-6	96,1	1581,2	1581,2	0,0	-	-
3-pyridinecarbonitrile	$C_6H_4N_2$	100-54-9	104,1	1976,8	1973,5	3,3	1962,6	14,2
2-butyne-1,4-dicarbonitrile	$C_6H_4N_2$		104,1	3523,2	3523,2	0,0	-	-
1,4-benzènediamine	$C_6H_8N_2$	106-50-3	108,1	28,7	43,1	-14,4	22,4	6,3
1,2-benzènediamine	$C_6H_8N_2$	95-54-5	108,1	361,6	160,1	201,5	-5,4	366,9
1,3-benzènediamine	$C_6H_8N_2$	108-45-2	108,1	-72,1	-12,5	-59,6	-70,1	-2,0
triéthylènediamine	$C_6H_{12}N_2$	280-57-9	112,2	251,4	251,4	0,0	-17,8	269,2
tétraméthyldiazétine	$C_6H_{12}N_2$	54166-22-2	112,2	784,5	784,5	0,0	277,1	**507,4**
3,3,5,5-tétraméthyl-1-pyrazoline	$C_7H_{14}N_2$	2721-31-5	126,2	-177,5	-177,5	0,0	-176,7	-0,8
phtalonitrile	$C_8H_4N_2$	91-15-6	128,1	2190,0	2133,4	56,6	2134,7	55,3
1,3-benzènedicarbonitrile	$C_8H_4N_2$	626-17-5	128,1	2126,7	2142,4	-15,6	2111,3	15,5
1,4-benzènedicarbonitrile	$C_8H_4N_2$	623-26-7	128,1	2095,5	2189,3	-93,8	2095,7	-0,2
tétraméthylbutanedinitrile	$C_8H_{12}N_2$	3333-52-6	136,2	109,4	109,4	0,0	-425,3	**534,7**
1,4-diméthyl-2,3-diaza-bicyclo[2.2.2]oct-2-ène	$C_8H_{14}N_2$	49570-30-1	138,2	147,6	147,6	0,0	82,5	65,1
Di-2-pyrrolylméthane	$C_9H_{10}N_2$	21211-65-4	146,2	863,3	970,2	-106,9	477,1	386,2
phénazine	$C_{12}H_8N_2$	92-82-0	180,2	1353,5	1242,4	111,1	-	-
benzo[c]cinnoline	$C_{12}H_8N_2$	230-17-1	180,2	1637,6	1637,6	0,0	-	-
(E)-azobenzène	$C_{12}H_{10}N_2$	17082-12-1	182,2	1693,5	1836,0	-142,5	1693,6	0,0
(Z)-azobenzène	$C_{12}H_{10}N_2$	1080-16-6	182,2	1963,0	1836,0	127,0	1963,0	0,0
1,2-diphénylhydrazine	$C_{12}H_{12}N_2$	122-66-7	184,2	1201,2	994,8	206,4	1186,5	14,7
4,4'-diaminobiphényle	$C_{12}H_{12}N_2$	92-87-5	184,2	383,7	387,9	-4,1	339,8	44,0

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Domalski *et al.*	
					$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}
2,2',5,5'-tétraméthyl-1,1'-bipyrrole	$C_{12}H_{16}N_2$	10507-71-8	188,3	702,7	-294,0	**996,7**	-	-
9-aminoacridine	$C_{13}H_{10}N_2$	90-45-9	194,2	819,6	819,1	0,5	-	-
2-aminoacridine	$C_{13}H_{10}N_2$	581-28-2	194,2	856,7	856,2	0,5	-	-
N,N'-dibenzylidène-hydrazine	$C_{14}H_{12}N_2$	588-68-1	208,3	1629,2	128,6	**1500,6**	-	-
dibenzylidène-1,2-éthylènediamine	$C_{16}H_{16}N_2$	104-71-2	236,3	1148,5	-495,8	**1644,2**	-	-
tétraphénylhydrazine	$C_{24}H_{20}N_2$	632-52-0	336,4	1361,1	1361,1	0,0	1320,6	40,4
guanidine	CH_5N_3	113-00-8	59,1	-948,0	-3137,2	**2189,2**	-	-
éthylènetricarbonitrile	C_5HN_3	997-76-2	103,1	4261,7	4261,7	0,0	-	-
1,1,1-éthanetricarbonitrile	$C_5H_3N_3$	10359-20-3	105,1	3316,9	3316,8	0,1	-	-
2,6-pyridinediamine	$C_5H_7N_3$	141-86-6	109,1	-59,6	-226,1	166,5	393,0	-452,6
1H-benzotriazole	$C_6H_5N_3$	95-14-7	119,1	1985,3	1850,0	135,3	-	-
1,1,1-tricyano-3-butyne	$C_7H_3N_3$	10359-26-9	129,1	4691,0	4691,0	0,0	-	-
pyridinium dicyanométhylide	$C_8H_5N_3$	27032-01-5	143,1	2779,7	2779,7	0,0	-	-
1H-naphto[2,3-d]triazole	$C_{10}H_7N_3$	269-12-5	169,2	1620,7	1627,9	-7,2	-	-
1H-naphto[1,2-d]triazole	$C_{10}H_7N_3$	233-59-0	169,2	1539,8	1627,9	-88,1	-	-
1,3-diphényltriazène	$C_{12}H_{11}N_3$	136-35-6	197,2	1681,2	1681,3	0,0	-	-
3,6-diaminoacridine	$C_{13}H_{11}N_3$	92-62-6	209,2	607,9	746,7	-138,8	-	-
1H-tétrazole	CH_2N_4	288-94-8	70,1	3369,1	3404,2	-35,1	-	-
dicyandiamide	$C_2H_4N_4$	461-58-5	84,1	253,3	-1284,7	**1538,0**	-	-
1H-1,2,4-triazole-3-amine	$C_2H_4N_4$	61-82-5	84,1	913,4	756,8	156,7	-	-
1,5-diméthyltétrazole	$C_3H_6N_4$	5144-11-6	98,1	1897,8	1830,9	66,9	-	-
hexaméthylènetétramine	$C_6H_{12}N_4$	100-97-0	140,2	885,3	607,1	278,1	1769,1	**-883,8**
1,1,2,2-cyclopropane-tétracarbonitrile	$C_7H_2N_4$	2424-32-0	142,1	4163,5	4163,5	0,0	-	-
1-phényl-1H-tétrazole	$C_7H_6N_4$	5378-52-9	146,1	2359,0	2387,1	-28,1	-	-
5-phényl-1H-tétrazole	$C_7H_6N_4$	18039-42-4	146,1	2039,0	2030,2	8,8	-	-
1-phényl-5-méthyl-1H-tétrazole	$C_8H_8N_4$	14213-16-2	160,2	1807,4	1807,4	0,0	-	-
1-méthyl-5-phényl-1H-tétrazole	$C_8H_8N_4$	20743-50-4	160,2	1825,5	1832,3	-6,8	-	-
2-phényl-5-méthyl-2H-tétrazole	$C_8H_8N_4$	22706-20-3	160,2	1715,6	1715,6	0,0	-	-
2,2'-azo-bis-isobutyronitrile	$C_8H_{12}N_4$	78-67-1	164,2	1498,1	1498,1	0,0	-	-
1,2-bis(2-cyano-2-propyl)-hydrazine	$C_8H_{14}N_4$	6869-07-4	166,2	719,5	719,5	0,0	-	-
1,4,8,11-tétraazacyclotétradécane	$C_{10}H_{24}N_4$	295-37-4	200,3	-578,6	-1975,1	**1396,5**	-697,0	118,4

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Domalski *et al.*	
					$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}
bicyclo[2.2.1]hept-5-ène-2,2,3,3-tétracarbonitrile	$C_{11}H_6N_4$	6343-21-1	194,2	3207,1	3207,1	0,0	-	-
3-méthyl-4-cyclohexène-1,1,2,2-tétracarbonitrile	$C_{11}H_8N_4$	13358-02-6	196,2	2623,2	2623,2	0,0	-	-
tétracyano-p-quinodiméthane	$C_{12}H_4N_4$	1518-16-7	204,2	3262,2	3134,1	128,1	-	-
bicyclo[2.2.2]oct-5-ène-2,2,3,3-tétracarbonitrile	$C_{12}H_8N_4$	1017-93-2	208,2	2766,8	2785,3	-18,5	-	-
4,5-diméthyl-4-cyclohexène-1,1,2,2-tétracarbonitrile	$C_{12}H_{10}N_4$	69155-29-9	210,2	2247,0	2247,0	0,0	-	-
1,3-diphényl-1-tétrazène	$C_{12}H_{12}N_4$	35364-31-9	212,3	1941,6	1747,7	193,9	-	-
1,5-diphényl-1H-tétrazole	$C_{13}H_{10}N_4$	7477-73-8	222,2	1830,8	1831,8	-0,9	-	-
2,5-diphényl-2H-tétrazole	$C_{13}H_{10}N_4$	18039-45-7	222,2	1778,7	1639,1	139,6	-	-
1,5-diphénylformazane	$C_{13}H_{12}N_4$	1885-34-3	224,3	2041,8	2041,8	0,0	-	-
1,3,5-triphénylformazane	$C_{19}H_{16}N_4$	531-52-2	300,4	1808,2	1808,2	0,0	-	-
9,10-dihydro-9,10-éthanoanthracène-11,11,12,12-tétracarbonitrile	$C_{20}H_{10}N_4$	1625-84-9	306,3	2326,0	2313,5	12,5	-	-
21H,23H-porphine	$C_{20}H_{14}N_4$	101-60-0	310,4	-3566,6	-3566,6	0,0	-	-
2,7,12,17-tétraéthyl-3,8,13,18-tétraméthyl-21H,23H-porphine	$C_{32}H_{38}N_4$	448-71-5	478,7	-52,6	-24,7	-28,0	-	-
2,8,12,18-tétraéthyl-3,7,13,18-tétraméthyl-21H,23H-porphine	$C_{32}H_{38}N_4$	448-70-4	478,7	3,3	-24,7	28,0	-	-
2,3,7,8,12,13,17,18-octaéthyl-21H,23H-porphine	$C_{36}H_{46}N_4$	2683-82-1	534,8	-342,6	-342,6	0,0	-	-
5-amino-1H-tétrazole	CH_3N_5	4418-61-5	85,1	2459,2	2459,2	0,0	-	-
5-cyano-1H-tétrazole	C_2HN_5	74418-40-9	95,1	4228,8	4228,8	0,0	-	-
1-méthyl-5-aminotétrazole	$C_2H_5N_5$	5422-44-6	99,1	1838,6	1948,4	-109,8	-	-
5-amino-2-méthyl-2H-tétrazole	$C_2H_5N_5$	6154-04-7	99,1	2086,9	2076,6	10,3	-	-
5-méthylamino-1H-tétrazole	$C_2H_5N_5$	53010-03-0	99,1	2043,5	1993,9	49,7	-	-
1-méthyl-5-méthylaminotétrazole	$C_3H_7N_5$	17267-51-5	113,1	1769,8	1718,2	51,6	-	-
5-(diméthylamino)-tétrazole	$C_3H_7N_5$	5422-45-7	113,1	1614,2	1668,2	-54,0	-	-
5-amino-1-(2-propényl)-1H-tétrazole	$C_4H_7N_5$	74999-22-7	125,1	2121,0	2203,4	-82,5	-	-
5-amino-2-(2-propényl)-2H-tétrazole	$C_4H_7N_5$	74999-26-1	125,1	2260,8	2269,0	-8,2	-	-
adénine	$C_5H_5N_5$	73-24-5	135,1	717,1	982,8	-265,7	-	-
5-amino-1-phényl-1H-tétrazole	$C_7H_7N_5$	5467-78-7	161,2	1929,7	1903,0	26,7	-	-
1-amino-5-phényl-1H-tétrazole	$C_7H_7N_5$	23579-46-6	161,2	1893,1	1971,3	-78,2	-	-
1-(2-propényl)-5-(2-propénylamino)tétrazole	$C_7H_{11}N_5$	66907-70-8	165,2	2119,9	2122,6	-2,7	-	-
5-(di(2-propényl)amino)-1H-tétrazole	$C_7H_{11}N_5$	6280-33-7	165,2	2125,4	2088,4	37,0	-	-
benzal-3-hydrazino-5-méthyl-1,2,4-triazole	$C_{10}H_{11}N_5$	87123-46-4	201,2	1282,1	295,6	**986,5**	-	-
mélamine	$C_3H_6N_6$	108-78-1	126,1	-690,4	-645,2	-45,2	836,1	**-1526,5**

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Domalski *et al.*	
					$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}
N'-(5-tétrazolyl)-benzalhydrazone	$C_8H_8N_6$	10444-59-4	188,2	2434,3	1316,7	**1117,6**	-	-
benzal-5-hydrazinotétrazole	$C_8H_8N_6$	108480-28-0	188,2	2343,4	2343,4	0,0	-	-
3-hexyne-1,1,1,6,6,6-hexacarbonitrile	$C_{12}H_4N_6$	10350-89-7	232,2	4313,1	4315,9	-2,8	-	-
3-hexène-1,1,1,6,6,6-hexacarbonitrile	$C_{12}H_6N_6$		234,2	3575,3	3575,3	0,0	-	-
3,5-octadiyne-1,1,1,8,8,8-hexacarbonitrile	$C_{14}H_4N_6$	10350-90-0	256,2	4756,0	4753,5	2,5	-	-
1-(1H-tétrazol-5-yl)-guanidine	$C_2H_5N_7$	66591-60-4	127,1	1066,5	49,1	**1017,4**	-	-
5,5'-bitétrazole	$C_2H_2N_8$	2783-98-4	138,1	3851,0	4066,2	-215,2	-	-
1,2-bis-(5-tétrazolyl)-éthane	$C_4H_6N_8$	26670-16-6	166,1	2674,8	2650,8	24,0	-	-
5,5'-hydrazotétrazole	$C_2H_4N_{10}$	74999-19-2	168,1	3364,3	3779,1	-414,9	-	-
cis-1,1'-diméthyl-5,5'-azotétrazole	$C_4H_6N_{10}$	41463-68-7	194,2	3728,1	3886,5	-158,5	-	-
trans-1,1'-diméthyl-5,5'-azotétrazole	$C_4H_6N_{10}$	74999-23-8	194,2	4080,2	3886,5	193,7	-	-
2,2'-diméthyl-5,5'-azotétrazole	$C_4H_6N_{10}$	41463-69-8	194,2	3886,5	3886,5	0,0	-	-
2,5,8-triamino-1,3,4,6,7,9,9b-heptaazaphénalène	$C_6H_6N_{10}$	1502-47-2	218,2	72,0	72,0	0,0	-	-
2,2'-diéthyl-5,5'-azotétrazole	$C_6H_{10}N_{10}$	74999-25-0	222,2	2949,0	2949,0	0,0	-	-

Comparaison des enthalpies standard de formation en phase solide issues de la littérature avec les enthalpies représentées par la méthode développée et avec les enthalpies prévues par la méthode de Domalski *et al.*, concernant 482 molécules contenant carbone, hydrogène, oxygène et azote

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Domalski *et al.*	
				$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}
3,4-dicyano-1,2,4-oxadiazole	C_4N_4O	55644-07-0	3798,6	4156,9	-358,3	-	-
3,4-dicyanofuroxane	$C_4N_4O_2$	17557-81-2	3419,3	3419,3	0,0	-	-
trinitroacétonitrile	$C_2N_4O_6$	630-72-8	989,0	989,0	0,0	-	-
3-cyano-5-(cyanofurazanyl)-1,2,4-oxadiazole N-oxyde	$C_6N_6O_3$	56092-91-2	2769,2	2076,8	**692,4**	-	-
benzotrifuroxane	$C_6N_6O_6$	3470-17-5	2489,5	2489,5	0,0	-	-
hexanitroéthane	$C_2N_6O_{12}$	918-37-6	265,0	-13,8	278,8	-	-
acétamide	C_2H_5NO	60-35-5	-5343,1	-5286,0	-57,1	-5190,5	-152,5
propanamide	C_3H_7NO	79-05-0	-4626,9	-4581,9	-45,1	-4576,2	-50,8
butanamide	C_4H_9NO	541-35-5	-4182,7	-4185,7	3,0	-4177,0	-5,7
1H-pyrrole-2-carboxaldéhyde	C_5H_5NO	1003-29-8	-1118,8	-1428,8	310,0	-	-
2-pyridinol	C_5H_5NO	72762-00-6	-1748,7	-1782,0	33,3	-1210,6	**-538,1**
3-pyridinol	C_5H_5NO	109-00-2	-1388,0	-1375,0	-13,0	-1210,6	-177,4
4-pyridinol	C_5H_5NO	626-64-2	-1565,7	-1545,4	-20,3	-1210,6	-355,1
2-pipéridone	C_5H_9NO	675-20-7	-3092,9	-3111,5	18,7	-3279,7	186,8
pentanamide	$C_5H_{11}NO$	626-97-1	-3752,0	-3899,4	147,5	-3888,5	136,5
2-méthyl-3-hydroxypyridine	C_6H_7NO	1121-25-1	-1590,8	-1561,7	-29,1	-1370,0	-220,9
2-méthyl-4-hydroxypyridine	C_6H_7NO	18615-86-6	-1692,5	-1710,2	17,7	-1397,5	-295,1
2-méthyl-5-hydroxypyridine	C_6H_7NO	1121-78-4	-1521,2	-1561,7	40,5	-1415,8	-105,4
2-méthyl-6-hydroxypyridine	C_6H_7NO	3279-76-3	-1945,5	-1916,4	-29,1	-1397,5	**-548,0**
2-hexynamide	C_6H_9NO	62155-28-6	-1060,8	-1060,8	0,0	-	-
ε-caprolactame	$C_6H_{11}NO$	105-60-2	-2911,0	-2967,5	56,6	-3133,1	222,1
hexanamide	$C_6H_{13}NO$	628-02-4	-3672,7	-3682,9	10,2	-3670,3	-2,4
benzamide	C_7H_7NO	55-21-0	-1668,7	-1693,9	25,2	-1669,2	0,5
2-amino-2,4,6-cycloheptatrièn-1-one	C_7H_7NO	33504-43-7	-260,9	-1144,1	**883,3**	-	-
hexahydro-5-méthyl-2H-azépin-2-one	$C_7H_{13}NO$	2210-07-3	-2862,0	-2776,2	-85,8	-2989,2	127,2
hexahydro-7-méthyl-2H-azépin-2-one	$C_7H_{13}NO$	1985-48-4	-2848,6	-2884,1	35,5	-3015,4	166,8
hexahydro-2(1H)-azocinone	$C_7H_{13}NO$	673-66-5	-2740,1	-2740,1	0,0	-3018,8	278,7
α-oxobenzèneacétonitrile	C_8H_5NO	613-90-1	296,6	296,7	0,0	-	-
N-phénylacétamide	C_8H_9NO	103-84-4	-1550,7	-1572,4	21,6	-1497,8	-53,0
1-(4-aminophényl)éthanone	C_8H_9NO	99-92-3	-1347,3	-1354,6	7,4	-1243,1	-104,2

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Domalski *et al.*	
				$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}
1-(3-aminophényl)éthanone	C_8H_9NO	99-03-6	-1282,2	-1354,6	72,5	-1228,3	-53,9
octanamide	$C_8H_{17}NO$	629-01-6	-3303,9	-3377,0	73,2	-3362,1	58,2
5-phénylisoxazole	C_9H_7NO	1006-67-3	554,6	487,7	66,9	-	-
8-quinolinol	C_9H_7NO	148-24-3	-571,8	-656,3	84,6	-	-
β-oxobenzènepropanenitrile	C_9H_7NO	614-16-4	-153,6	-153,6	0,0	-	-
4-(diméthylamino)-benzaldéhyde	$C_9H_{11}NO$	100-10-7	-917,1	-944,8	27,7	-758,4	-158,7
4-éthyl-3,5-diméthyl-1H-pyrrole-2-carboxaldéhyde	$C_9H_{13}NO$	6250-80-2	-1685,1	-1508,6	-176,5	-	-
2,2,6,6-tétraméthyl-4-pipéridinone	$C_9H_{17}NO$	826-36-8	-2152,8	-2152,8	0,0	-2318,2	165,4
N-butylpentanamide	$C_9H_{19}NO$	2763-67-9	-2957,6	-2817,7	-139,9	-3036,0	78,3
3-méthyl-5-phénylisoxazole	$C_{10}H_9NO$	1008-75-9	115,0	-788,3	**903,3**	-	-
3-phényl-5-méthylisoxazole	$C_{10}H_9NO$	1008-74-8	86,1	86,1	0,0	-	-
β-cyanopropiophénone	$C_{10}H_9NO$	5343-98-6	-448,5	-448,5	0,0	-382,9	-65,7
2-méthyl-1',2'-naphtoxazole	$C_{12}H_9NO$	85-15-4	-478,2	-221,5	-256,6	-	-
2-méthylnapht[2,3-d]oxazole	$C_{12}H_9NO$	20686-66-2	-286,0	-221,5	-64,5	-	-
N,N-diphénylacétamide	$C_{14}H_{13}NO$	519-87-9	-203,1	-208,3	5,3	-453,0	249,9
N-acétyl-N-cyclohexyl-phénylamine	$C_{14}H_{19}NO$	5769-11-9	-1380,5	-1479,8	99,2	-1324,8	-55,7
3,5-diphénylisoxazole	$C_{15}H_{11}NO$	2039-49-8	654,5	-228,5	**883,0**	-	-
glycine	$C_2H_5NO_2$	56-40-6	-7028,4	-7079,0	50,5	-7035,1	6,7
N-méthylglycine	$C_3H_7NO_2$	107-97-1	-5761,4	-5804,0	42,6	-5844,9	83,5
L-alanine	$C_3H_7NO_2$	56-41-7	-6293,0	-6181,5	-111,4	-6261,8	-31,2
DL-alanine	$C_3H_7NO_2$	302-72-7	-6326,0	-6181,5	-144,4	-6261,8	-64,2
D-alanine	$C_3H_7NO_2$	338-69-2	-6299,0	-6181,5	-117,5	-6261,8	-37,3
succinimide	$C_4H_5NO_2$	123-56-8	-4644,8	-4644,1	-0,6	-4633,3	-11,5
acide 4-aminobutanoïque	$C_4H_9NO_2$	56-12-2	-5604,2	-5647,7	43,5	-5706,6	102,4
n-propylcarbamate	$C_4H_9NO_2$	627-12-3	-5358,8	-5163,3	-195,5	-	-
2-méthyl-2-nitropropane	$C_4H_9NO_2$	594-70-7	-2228,5	-1964,4	-264,1	-2228,7	0,2
DL-proline	$C_5H_9NO_2$	609-36-9	-4553,1	-4345,4	-207,7	-4755,7	202,6
L-proline	$C_5H_9NO_2$	147-85-3	-4408,2	-4345,4	-62,8	-4755,7	347,4
acide 5-aminopentanoïque	$C_5H_{11}NO_2$	660-88-8	-5156,8	-5225,4	68,6	-5274,3	117,6
L-valine	$C_5H_{11}NO_2$	72-18-4	-5247,4	-5085,9	-161,5	-5232,3	-15,1
acide 3-pyridinecarboxylique	$C_6H_5NO_2$	59-67-6	-2801,6	-2708,6	-93,0	-2728,3	-73,3
L-leucine	$C_6H_{13}NO_2$	61-90-5	-4859,2	-4778,9	-80,3	-4897,0	37,7
DL-leucine	$C_6H_{13}NO_2$	328-39-2	-4883,6	-4778,9	-104,7	-4897,0	13,3
D-leucine	$C_6H_{13}NO_2$	328-38-1	-4858,5	-4778,9	-79,5	-4897,0	38,5

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Domalski *et al.*	
				$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}
L-isoleucine	$C_6H_{13}NO_2$	73-32-5	-4884,0	-4768,9	-115,2	-4879,1	-4,9
DL-isoleucine	$C_6H_{13}NO_2$	443-79-8	-4841,9	-4773,9	-68,0	-4879,1	37,2
acide 2-aminohexanoïque	$C_6H_{13}NO_2$	616-06-8	-4872,2	-4874,0	1,8	-4907,8	35,6
acide 4-aminohexanoïque	$C_6H_{13}NO_2$	5415-99-6	-4926,3	-4898,1	-28,3	-4913,4	-12,9
acide 5-aminohexanoïque	$C_6H_{13}NO_2$	628-47-7	-4904,2	-4898,1	-6,2	-4913,4	9,2
acide 6-aminohexanoïque	$C_6H_{13}NO_2$	60-32-2	-4858,9	-4893,5	34,6	-4934,6	75,7
2-hydroxybenzaldoxime	$C_7H_7NO_2$	94-67-7	-1339,5	-1459,8	120,3	-	-
acide 2-aminobenzoïque	$C_7H_7NO_2$	118-92-3	-2923,4	-2810,1	-113,3	-2929,4	6,1
acide 3-aminobenzoïque	$C_7H_7NO_2$	99-05-8	-3001,4	-2946,2	-55,2	-3002,4	1,0
acide 4-aminobenzoïque	$C_7H_7NO_2$	150-13-0	-3010,2	-2946,2	-64,0	-3031,5	21,4
1-méthyl-4-nitrobenzène	$C_7H_7NO_2$	99-99-0	-350,7	-339,4	-11,4	-286,0	-64,8
éthylméthyl maléimide	$C_7H_9NO_2$	29720-92-1	-3375,4	-574,8	**-2800,6**	-	-
acide 7-aminoheptanoïque	$C_7H_{15}NO_2$	929-17-9	-4596,4	-4625,7	29,3	-4660,4	64,0
1-nitro-2-phényléthène	$C_8H_7NO_2$	102-96-5	204,5	204,5	0,0	-	-
méthyl phénylcarbamate	$C_8H_9NO_2$	2603-10-3	-1235,1	-2516,8	**1281,7**	-	-
acide 2-méthyl-1H-pyrrole-3-carboxylique éthyl ester	$C_8H_{11}NO_2$	936-12-9	-2683,1	-2610,5	-72,7	-	-
acide 2,4-diméthyl-1H-pyrrole-3-carboxylique méthyl ester	$C_8H_{11}NO_2$	52459-90-2	-2756,9	-2852,3	95,4	-	-
acide 2,4-diméthyl-1H-pyrrole-5-carboxylique méthyl ester	$C_8H_{11}NO_2$	74999-36-3	-2756,9	-2771,8	14,9	-	-
2-nitro-1-phénylpropène	$C_9H_9NO_2$	705-60-2	-94,4	-94,4	0,0	-	-
L-phénylalanine	$C_9H_{11}NO_2$	63-91-2	-2826,5	-2973,2	146,7	-2792,3	-34,2
DL-phénylalanine	$C_9H_{11}NO_2$	150-30-1	-2788,3	-2973,2	184,9	-2792,3	3,9
acide 4-aminobenzoïque éthyl ester	$C_9H_{11}NO_2$	94-09-7	-2529,8	-2279,2	-250,7	-2499,7	-30,2
acide 2,5-diméthyl-1H-pyrrole-3-carboxylique éthyl ester	$C_9H_{13}NO_2$	2199-52-2	-2863,0	-3340,2	477,3	-	-
acide 3,5-diméthyl-1H-pyrrole-2-carboxylique éthyl ester	$C_9H_{13}NO_2$	2199-44-2	-2837,8	-2992,2	154,3	-	-
acide 4,5-diméthyl-1H-pyrrole-3-carboxylique éthyl ester	$C_9H_{13}NO_2$	2199-53-3	-2812,7	-2747,8	-64,9	-	-
acide 2,4-diméthyl-1H-pyrrole-3-carboxylique éthyl ester	$C_9H_{13}NO_2$	2199-51-1	-2770,3	-2747,8	-22,5	-	-
acide 4,5-diméthyl-1H-pyrrole-2-carboxylique éthyl ester	$C_9H_{13}NO_2$	2199-45-3	-2687,7	-2674,1	-13,6	-	-
2,2,6,6-tétraméthyl-4-oxo-1-pipéridinyloxy	$C_9H_{16}NO_2$	2896-70-0	-1753,5	-1753,5	0,0	-	-
1-hydroxy-2,2,6,6-tétraméthyl-4-pipéridinone	$C_9H_{17}NO_2$	3637-11-4	-2208,1	-2208,1	0,0	-	-
2,2,6,6-tétraméthyl-4-hydroxypipéridine-1-oxyde	$C_9H_{18}NO_2$	2226-96-2	-2279,3	-2279,3	0,0	-	-
1-hydroxy-2,2,6,6-tétraméthyl-4-pipéridinol	$C_9H_{19}NO_2$	3637-10-3	-2571,4	-2571,4	0,0	-	-
acide 9-aminononanoïque	$C_9H_{19}NO_2$	1120-12-3	-4200,8	-4220,2	19,4	-4245,3	44,5
1-nitronaphtalène	$C_{10}H_7NO_2$	86-57-7	246,0	248,5	-2,5	239,1	6,9
4-nitroso-1-naphtol	$C_{10}H_7NO_2$	605-60-7	-622,5	-495,5	-127,0	-622,9	0,4

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Domalski *et al.*	
				$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}
2-nitroso-1-naphtol	$C_{10}H_7NO_2$	132-53-6	-356,9	-387,7	30,9	-594,1	237,2
1-nitroso-2-naphtol	$C_{10}H_7NO_2$	131-91-9	-291,6	-387,7	96,1	-594,1	302,4
N,N-diacétylaniline	$C_{10}H_{11}NO_2$	1563-87-7	-2046,3	-2046,3	0,0	-	-
acide phénylcarbamique isopropyl ester	$C_{10}H_{13}NO_2$	122-42-9	-2466,9	-2419,0	-47,9	-	-
acide 2,4,5-triméthyl-1H-pyrrole-3-carboxylique éthyl ester	$C_{10}H_{15}NO_2$	2199-54-4	-2702,6	-2780,3	77,6	-	-
acide phénylcarbamique butyl ester	$C_{11}H_{15}NO_2$	1538-74-5	-2046,7	-2393,3	346,7	-	-
acide 3,5-diméthyl-4-vinyl-1H-pyrrole-2-carboxylique éthyl ester	$C_{11}H_{15}NO_2$	25894-11-5	-2445,1	-2434,2	-11,0	-	-
acide 3,5-diméthyl-4-éthyl-1H-pyrrole-2-carboxylique éthyl ester	$C_{11}H_{17}NO_2$	2199-47-5	-2734,8	-2748,3	13,4	-	-
3-nitrobiphényle	$C_{12}H_9NO_2$	2113-58-8	326,8	305,3	21,6	312,9	13,9
4-nitrobiphényle	$C_{12}H_9NO_2$	92-93-3	203,3	305,3	-101,9	302,9	-99,6
acide 3,5-diméthyl-4-propyl-1H-pyrrole-2-carboxylique éthyl ester	$C_{12}H_{19}NO_2$	4758-64-9	-2718,8	-2706,3	-12,5	-	-
cis-4-nitrostilbène	$C_{14}H_{11}NO_2$	6624-53-9	586,0	514,4	71,7	477,7	108,3
trans-4-nitrostilbène	$C_{14}H_{11}NO_2$	1694-20-8	456,0	514,4	-58,4	452,3	3,7
éthyl-N,N-diphénylcarbamate	$C_{15}H_{15}NO_2$	603-52-1	-1164,2	-971,8	-192,4	-	-
N,N-diphénylacétoacétamide	$C_{16}H_{15}NO_2$	2540-31-0	-899,7	-745,7	-154,1	-1076,8	177,0
acide 3-N-phénylamino-2-naphtoïque	$C_{17}H_{13}NO_2$	6973-58-6	-1001,2	-984,6	-16,6	-987,8	-13,4
1-nitro-2-propanone	$C_3H_5NO_3$	10230-68-9	-2859,0	-2859,0	0,0	-	-
L-serine	$C_3H_7NO_3$	56-45-1	-6971,9	-7059,5	87,6	-7055,3	83,4
2-nitrofurane	$C_4H_3NO_3$	609-39-2	-920,7	-1005,7	85,1	-	-
3-méthyl-2,5-oxazolidine-dione	$C_4H_5NO_3$	5840-76-6	-5216,9	-5210,1	-6,8	-	-
2-méthyl-2-nitro-1-propanol	$C_4H_9NO_3$	76-39-1	-3442,8	-3294,3	-148,5	-3453,6	10,8
L-thréonine	$C_4H_9NO_3$	72-19-5	-6517,0	-6468,0	-49,0	-6603,6	86,6
DL-thréonine	$C_4H_9NO_3$	80-68-2	-6370,1	-6473,6	103,5	-6603,6	233,6
2-amino-2-(hydroxyméthyl)-1,3-propanediol	$C_4H_{11}NO_3$	77-86-1	-5925,6	-5925,6	0,0	-5805,8	-119,9
1-hydroxy-L-proline	$C_5H_9NO_3$	18610-59-8	-5041,6	-5279,1	237,5	-5695,5	**653,9**
acide 4-hydroxy-5-méthyl-1H-pyrrole-3-carboxylique éthyl ester	$C_8H_{11}NO_3$	74999-30-7	-3616,9	-3629,4	12,5	-	-
N-benzoylglycine	$C_9H_9NO_3$	495-69-2	-3397,8	-3359,5	-38,3	-3399,8	2,0
L-tyrosine	$C_9H_{11}NO_3$	60-18-4	-3781,1	-3797,8	16,6	-3675,9	-105,3
acide 2,4-diméthyl-5-hydroxy-1H-pyrrole-3-carboxylique éthyl ester	$C_9H_{13}NO_3$	74999-31-8	-3736,3	-4209,9	473,6	-	-
4-benzyl-2,5-oxazolidinedione	$C_{10}H_9NO_3$	1892-35-9	-2889,4	-2889,4	0,0	-	-
2-méthyl-2-nitro-1-phényl-1-propanol	$C_{10}H_{13}NO_3$	33687-74-0	-1623,8	-1746,3	122,5	-	-
2-méthyl-2-nitro-3-phényl-1-propanol	$C_{10}H_{13}NO_3$	62030-36-8	-1780,1	-1701,5	-78,6	-1720,4	-59,7
acide 4-formyl-3,5-diméthyl-1H-pyrrole-2-carboxylique éthyl ester	$C_{10}H_{13}NO_3$	2199-64-6	-3282,5	-3292,7	10,1	-	-
acide 5-formyl-2,4-diméthyl-1H-pyrrole-3-carboxylique éthyl ester	$C_{10}H_{13}NO_3$	2199-59-9	-3308,1	-3292,7	-15,5	-	-

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Domalski *et al.*	
				$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}
acide 4-acétyl-3,5-diméthyl-1H-pyrrole-2-carboxylique éthyl ester	$C_{11}H_{15}NO_3$	2386-26-7	-3128,0	-3138,4	10,4	-	-
acide 3,5-diméthyl-4-(1-oxopropyl)-1H-pyrrole-2-carboxylique éthyl ester	$C_{12}H_{17}NO_3$	40484-82-0	-3043,0	-3042,8	-0,2	-	-
acide 2,4-diméthyl-5-(1-oxopropyl)-1H-pyrrole-3-carboxylique éthyl ester	$C_{12}H_{17}NO_3$	78956-69-1	-3052,4	-3042,8	-9,6	-	-
acide aspartique	$C_4H_7NO_4$	56-84-8	-7312,4	-7354,3	41,9	-7306,0	-6,4
2-méthyl-2-nitro-1,3-propanediol	$C_4H_9NO_4$	77-49-6	-4251,1	-4309,3	58,2	-4388,4	137,4
5-nitro-2-furancarboxaldéhyde	$C_5H_3NO_4$	698-63-5	-1608,3	-1610,9	2,6	-	-
acide L-glutamique	$C_5H_9NO_4$	56-86-0	-6819,3	-6855,4	36,1	-6809,4	-9,9
acide D-glutamique	$C_5H_9NO_4$	6893-26-1	-6813,7	-6855,4	41,8	-6809,4	-4,3
2-éthyl-2-nitro-1,3-propanediol	$C_5H_{11}NO_4$	597-09-1	-4065,8	-4103,5	37,7	-4143,8	77,9
2-nitro-2-propyl-1,3-propanediol	$C_6H_{13}NO_4$	5638-92-6	-3831,5	-3933,1	101,6	-3967,8	136,2
2-isopropyl-2-nitro-1,3-propanediol	$C_6H_{13}NO_4$	62155-31-1	-3818,1	-3856,7	38,6	-3959,1	141,0
acide 2-nitrobenzoïque	$C_7H_5NO_4$	552-16-9	-2384,5	-2422,9	38,4	-2395,8	11,3
acide 3-nitrobenzoïque	$C_7H_5NO_4$	121-92-6	-2477,3	-2541,6	64,3	-2461,6	-15,7
acide 4-nitrobenzoïque	$C_7H_5NO_4$	62-23-7	-2554,5	-2541,6	-12,9	-2545,4	-9,1
3-(5-nitro-2-furyl)-2-propénal	$C_7H_5NO_4$	1874-22-2	-973,9	-961,3	-12,7	-	-
acide 3,5-diméthyl-1H-pyrrole-2,4-dicarboxylique 4-méthyl ester	$C_9H_{11}NO_4$	50296-60-1	-4269,0	-4605,7	336,7	-	-
acide 3,5-diméthyl-1H-pyrrole-2,4-dicarboxylique diméthyl ester	$C_{10}H_{13}NO_4$	5448-17-9	-4006,8	-4062,8	56,0	-	-
acide 5-carbométhoxy-2,4-diméthyl-1H-pyrrole-3-acrylique	$C_{11}H_{13}NO_4$		-3621,5	-3630,9	9,5	-	-
acide phénylalanine-N-carboxylique diméthyl ester	$C_{12}H_{15}NO_4$	70288-75-4	-3230,3	-3315,3	85,0	-	-
acide 3,5-diméthyl-2-carboxy-1H-pyrrole-4-propanoïque diméthyl ester	$C_{12}H_{17}NO_4$	16132-20-0	-3551,3	-3530,4	-20,8	-	-
acide 3,5-diméthyl-1H-pyrrole-2,4-dicarboxylique diéthyl ester	$C_{12}H_{17}NO_4$	2436-79-5	-3831,3	-3774,8	-56,4	-	-
acide 2,4-diméthyl-5-carboxy-1H-pyrrole-3-propanoïque 5-éthyl ester	$C_{12}H_{17}NO_4$	37789-64-3	-3911,5	-3833,9	-77,6	-	-
2-(hydroxyméthyl)-2-nitro-1,3-propanediol	$C_4H_9NO_5$	126-11-4	-4867,1	-5118,1	251,0	-5125,3	258,3
acide 5-nitrofuran-2-carboxylique	$C_5H_3NO_5$	645-12-5	-3292,2	-3280,0	-12,2	-	-
acide 5-nitro-2-furancarboxylique méthyl ester	$C_6H_5NO_5$	1874-23-3	-2753,2	-2718,5	-34,8	-	-
acide 5-(hydroxyméthyl)-3-méthyl-1H-pyrrole-2,4-dicarboxylique diéthyl ester	$C_{12}H_{17}NO_5$	5422-89-9	-4143,5	-4143,5	0,0	-	-
acide 2,4-diméthyl-5-carboxy-α-oxo-1H-pyrrole-3-oxoacétique diéthyl ester	$C_{13}H_{17}NO_5$	21898-53-3	-3798,3	-3789,6	-8,7	-	-
acide 3-méthyl-5-(1-hydroxyéthyl)-1H-pyrrole-2,4-dicarboxylique diéthyl ester	$C_{13}H_{19}NO_5$	74999-34-1	-4217,7	-4325,4	107,7	-	-
acide 3-méthyl-5-(1-hydroxypropyl)-1H-pyrrole-2,4-dicarboxylique diéthyl ester	$C_{14}H_{21}NO_5$		-3828,2	-4211,6	383,4	-	-
acide 5-carbéthoxy-2,4-diméthyl-1H-pyrrole-3-méthylmalonique diéthyl ester	$C_{17}H_{25}NO_6$		-4132,5	-4132,5	0,0	-	-
acide 5-nitro-2-acétoxy-2,5-dihydro-2-furancarboxylique méthyl ester	$C_8H_9NO_7$	22401-53-2	-3977,3	-3977,3	0,0	-	-
2-(diacétoxyméthyl)-5-nitrofurane	$C_9H_9NO_7$	92-55-7	-3692,1	-3692,1	0,0	-	-
2-(3,3-diacétoxypropényl)-5-nitrofurane	$C_{11}H_{11}NO_7$	1874-14-2	-3240,3	-3240,3	0,0	-	-
2-acétoxy-2-bis(acétoxy)méthyl-2,5-dihydro-5-nitrofurane	$C_{11}H_{13}NO_9$		-4531,7	-4531,7	0,0	-	-

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Domalski *et al.*	
				$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}
urée	CH_4N_2O	57-13-6	-5546,7	-5987,3	440,6	-5554,9	8,2
1,3-diazétidin-2-one	$C_2H_4N_2O$	5265-50-9	-4538,9	-2755,8	**-1783,1**	-3451,0	**-1087,9**
3-amino-5-méthylisoxazole	$C_4H_6N_2O$	1072-67-9	-629,9	-922,7	292,7	-	-
triméthylurée	$C_4H_{10}N_2O$	632-14-4	-3235,9	-2410,9	**-825,0**	-2918,9	-317,0
1-acétyl-1H-imidazole	$C_5H_6N_2O$	2466-76-4	-1086,1	-1086,2	0,0	-	-
1H-pyrrole-2-carboxaldéhyde oxime	$C_5H_6N_2O$	32597-34-5	109,9	338,0	-228,1	-	-
5-amino-3,4-diméthylisoxazole	$C_5H_8N_2O$	19947-75-2	-737,5	-737,5	0,0	-	-
1,2,3-benzoxadiazole	$C_6H_4N_2O$	273-59-6	1963,2	1963,2	0,0	-	-
2-(diéthylamino)acétamide	$C_6H_{14}N_2O$	7409-48-5	-2699,9	-2362,0	-338,0	-2698,3	-1,7
phénylfurazane	$C_8H_6N_2O$	10349-06-1	1627,8	1702,5	-74,7	-	-
3-méthyl-4-phénylfurazane	$C_9H_8N_2O$	10349-09-4	1172,5	1273,9	-101,4	-	-
benzyl-1,2,4-oxadiazole	$C_9H_8N_2O$	37216-04-9	232,2	232,3	0,0	-	-
3-méthyl-5-phényl-1,2,4-oxadiazole	$C_9H_8N_2O$	1199-00-4	644,9	644,9	0,0	-	-
5-méthyl-3-phényl-1,2,4-oxadiazole	$C_9H_8N_2O$	1198-98-7	608,1	608,1	0,0	-	-
2,2'-carbonylbis-(1H-pyrrole)	$C_9H_8N_2O$	15770-21-5	-157,3	-229,5	72,2	-	-
N,N'-diméthyl-N-phénylurée	$C_9H_{12}N_2O$	938-91-0	-1326,4	-1391,4	65,0	-1169,2	-157,2
N'-éthyl-N-méthyl-N-phénylurée	$C_{10}H_{14}N_2O$	52073-04-8	-1709,6	-1560,4	-149,1	-1267,9	-441,7
4-nitroso-diphénylamine	$C_{12}H_{10}N_2O$	156-10-5	1075,1	591,1	484,0	739,9	335,1
N-nitroso-diphénylamine	$C_{12}H_{10}N_2O$	86-30-6	1146,2	1146,2	0,0	-	-
N,N-diphénylurée	$C_{13}H_{12}N_2O$	603-54-3	-578,1	-430,4	-147,7	-578,1	0,0
tétrahydrocarbazole urée	$C_{13}H_{14}N_2O$	67242-61-9	-5025,6	-5025,6	0,0	-	-
diphénylfurazane	$C_{14}H_{10}N_2O$	19768-02-6	1479,9	1403,5	76,4	-	-
3,5-diphényl-1,2,4-oxadiazole	$C_{14}H_{10}N_2O$	888-71-1	931,9	931,9	0,0	-	-
2,5-diphényl-1,3,4-oxadiazole	$C_{14}H_{10}N_2O$	725-12-2	743,8	743,8	0,0	-	-
N,N-diphényl-N'-méthylurée	$C_{14}H_{14}N_2O$	13114-72-2	-472,0	-465,0	-7,0	-503,8	31,8
acide acétique 1,2-diphénylhydrazide	$C_{14}H_{14}N_2O$	22293-38-5	-49,5	-53,0	3,5	-	-
4-acétamidobiphényle	$C_{14}H_{14}N_2O$	3366-61-8	-709,8	-661,9	-47,9	-709,9	0,2
N,N'-diméthyl-N,N'-diphénylurée	$C_{15}H_{16}N_2O$	611-92-7	-304,2	-289,8	-14,4	-282,1	-22,1
N,N-diphényl-N'-éthylurée	$C_{15}H_{16}N_2O$	18168-01-9	-635,0	-644,5	9,5	-615,9	-19,2
N,N'-diheptylurée	$C_{15}H_{32}N_2O$	1798-20-5	-2445,9	-2478,1	32,2	-2645,1	199,2
N,N-diphényl-N'-allylurée	$C_{16}H_{16}N_2O$	101279-92-9	-153,4	-107,3	-46,1	-	-
N-éthyl-N'-méthyl-N,N'-diphénylurée	$C_{16}H_{18}N_2O$	4474-03-7	-497,8	-469,0	-28,8	-400,2	-97,6
N,N'-diéthyl-N,N'-diphénylurée	$C_{17}H_{20}N_2O$	85-98-3	-559,7	-629,5	69,8	-506,0	-53,8
2,2',4,4'-tétraméthyl-3,3'-diéthyldipyrryl cétone	$C_{17}H_{24}N_2O$	13228-22-3	-931,8	-889,3	-42,5	-	-

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Domalski *et al.*	
				$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}
N,N'-dioctylurée	$C_{17}H_{36}N_2O$	1943-08-4	-2514,1	-2442,9	-71,1	-2591,0	77,0
N-pipéridyl-N,N'-diphénylformamide	$C_{18}H_{20}N_2O$	75534-73-5	-385,9	-516,1	130,2	-566,0	180,1
N,N'-didécylurée	$C_{21}H_{44}N_2O$	1943-09-5	-2576,1	-2389,9	-186,2	-2509,6	-66,5
N'-(2-naphtyl)-N,N-diphénylurée	$C_{23}H_{18}N_2O$	112322-16-4	189,1	187,3	1,8	67,1	122,0
N'-(1-naphtyl)-N,N-diphénylurée	$C_{23}H_{18}N_2O$	60302-02-5	231,1	187,3	43,8	67,1	164,0
oxamide	$C_2H_4N_2O_2$	471-46-5	-5667,9	-5657,3	-10,7	-	-
glyoxime	$C_2H_4N_2O_2$	557-30-2	-1007,2	-963,3	-43,9	-	-
N-nitrodiméthylamine	$C_2H_6N_2O_2$	4164-28-7	-832,8	-112,9	**-719,9**	-593,7	-239,1
propanediamide	$C_3H_6N_2O_2$	108-13-4	-5316,7	-5411,0	94,3	-5277,6	-39,1
méthylglyoxime	$C_3H_6N_2O_2$	1804-15-5	-1241,0	-1269,5	28,5	-	-
uracile	$C_4H_4N_2O_2$	66-22-8	-3831,0	-3831,0	0,0	-2386,0	**-1445,0**
5-méthyl-2,4-imidazolidinedione	$C_4H_6N_2O_2$	616-03-5	-4264,6	-4264,6	0,0	-4373,5	108,9
2,5-pipérazinedione	$C_4H_6N_2O_2$	106-57-0	-3913,1	-3891,7	-21,4	-4125,2	212,1
butanediamide	$C_4H_8N_2O_2$	110-14-5	-5005,2	-5121,3	116,1	-4956,1	-49,1
2,3-butanedione dioxime	$C_4H_8N_2O_2$	95-45-4	-1532,1	-1501,8	-30,3	-	-
5-méthyluracile	$C_5H_6N_2O_2$	65-71-4	-3669,7	-3520,8	-148,9	-2393,2	**-1276,6**
5,5-diméthyl-2,4-imidazolidinedione	$C_5H_8N_2O_2$	77-71-4	-4162,2	-4174,1	11,9	-	-
DL-ornithine	$C_5H_{12}N_2O_2$	616-07-9	-4937,9	-4980,8	42,9	-4900,2	-37,7
2-nitroaniline	$C_6H_6N_2O_2$	88-74-4	-189,0	-190,0	1,1	-160,9	-28,0
3-nitroaniline	$C_6H_6N_2O_2$	99-09-2	-247,5	-159,8	-87,7	-204,4	-43,1
4-nitroaniline	$C_6H_6N_2O_2$	100-01-6	-304,1	-159,8	-144,3	-132,0	-172,1
DL-5-éthyl-5-méthyl-2,4-imidazolidinedione	$C_6H_{10}N_2O_2$	16820-12-5	-3982,3	-3971,5	-10,7	-	-
DL-lysine	$C_6H_{14}N_2O_2$	70-54-2	-4642,7	-4706,4	63,8	-4631,2	-11,4
2-méthyl-5-nitroaniline	$C_7H_8N_2O_2$	99-55-8	-600,1	-371,6	-228,5	-411,4	-188,6
4-méthyl-3-nitroaniline	$C_7H_8N_2O_2$	119-32-4	-471,2	-321,3	-150,0	-418,0	-53,2
3-isopropyl-2,5-pipérazinedione	$C_7H_{12}N_2O_2$	14771-77-8	-3220,0	-3268,2	48,3	-3557,0	337,0
3-phényl-1,2,4-oxadiazol-5(4H)-one	$C_8H_6N_2O_2$	1456-22-0	-674,7	-1048,2	373,5	-	-
5-phényl-1,2,4-oxadiazol-3(2H)-one	$C_8H_6N_2O_2$	21084-84-4	-27,1	216,4	-243,5	-	-
α-phénylglyoxime	$C_8H_8N_2O_2$	4589-97-3	258,3	-132,3	390,6	-	-
β-phénylglyoxime	$C_8H_8N_2O_2$	4589-97-3	-124,3	-132,3	8,1	-	-
1,4-benzènedicarboxamide	$C_8H_8N_2O_2$	3010-82-0	-2638,3	-2577,6	-60,6	-2702,1	63,8
1,3-benzènedicarboxamide	$C_8H_8N_2O_2$	1740-57-4	-2661,4	-2614,3	-47,1	-2689,9	28,5
3-isopropyl-6-méthyl-2,5-pipérazinedione	$C_8H_{14}N_2O_2$	15136-26-2	-3021,6	-3112,5	90,9	-3438,8	417,3
α-(4-méthylphényl)-glyoxime	$C_9H_{10}N_2O_2$		-234,8	-315,7	80,9	-	-

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Domalski *et al.*	
				$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}
β-(4-méthylphényl)-glyoxime	$C_9H_{10}N_2O_2$		140,9	-315,7	456,6	-	-
N-(4-éthoxyphényl)urée	$C_9H_{12}N_2O_2$	150-69-6	-2601,5	-2474,4	-127,1	-2428,3	-173,2
N-(3-éthoxyphényl)urée	$C_9H_{12}N_2O_2$	13142-86-4	-2383,4	-2474,4	91,0	-2400,6	17,2
2,6-diméthylbenzo-[1,2-d,5,4-d]bisoxazole	$C_{10}H_8N_2O_2$	55850-41-4	-1129,2	-1115,9	-13,3	-	-
2,7-diméthylbenzo-[1,2-d,3,4-d]bisoxazole	$C_{10}H_8N_2O_2$	53816-93-6	-1102,7	-1115,9	13,3	-	-
3-méthyl-4-benzoylfurazane	$C_{10}H_8N_2O_2$	10349-11-8	634,5	526,3	108,2	-	-
L-tryptophane	$C_{11}H_{12}N_2O_2$	73-22-3	-2033,5	-2033,5	0,0	-	-
3-benzyl-2,5-pipérazinedione	$C_{11}H_{12}N_2O_2$	5037-75-2	-1691,3	-1633,2	-58,1	-2090,6	399,3
acide 2,4-diméthyl-3-méthylcarbonitrile-1H-pyrrole-carboxylique éthyl ester	$C_{11}H_{14}N_2O_2$		-1877,9	-1877,9	0,0	-	-
3-isopropyl-6-(2-méthyl-propyl)-2,5-pipérazinedione	$C_{11}H_{20}N_2O_2$	5625-50-3	-2948,8	-2857,3	-91,5	-3155,1	206,3
2-nitrodiphénylamine	$C_{12}H_{10}N_2O_2$	119-75-5	368,7	321,4	47,3	448,9	-80,2
3-benzyl-6-méthyl-2,5-pipérazinedione	$C_{12}H_{14}N_2O_2$	14474-78-3	-1704,5	-1616,8	-87,6	-2092,7	388,2
(Z,Z)-diphényléthanedione dioxime	$C_{14}H_{12}N_2O_2$	572-45-2	174,0	172,3	1,7	-	-
(E,E)-diphényléthanedione dioxime	$C_{14}H_{12}N_2O_2$	522-34-9	74,9	172,3	-97,4	-	-
(E,Z)-diphényléthanedione dioxime	$C_{14}H_{12}N_2O_2$	572-43-0	221,0	172,3	48,7	-	-
acide benzoïque 2-benzoylhydrazide	$C_{14}H_{12}N_2O_2$	787-84-8	-839,4	-766,5	-72,9	-	-
3-benzyl-6-isopropyl-2,5-pipérazinedione	$C_{14}H_{18}N_2O_2$	14474-71-6	-1594,4	-1623,7	29,3	-2077,9	483,5
1,1'-méthylènebis(4-isocyanatobenzène)	$C_{15}H_{10}N_2O_2$	101-68-8	-211,0	-211,0	0,0	-	-
N,N-diphényl-N'-2-hydroxyéthylurée	$C_{15}H_{16}N_2O_2$	6123-87-1	-1245,4	-1350,1	104,7	-1302,8	57,4
1,2-diacétyl-1,2-diphénylhydrazine	$C_{16}H_{16}N_2O_2$	793-25-9	-702,2	-1051,2	349,0	-	-
biphényl-4,4'-diacétamide	$C_{16}H_{16}N_2O_2$	613-35-4	-1761,0	-1382,7	-378,3	-1430,7	-330,3
4-diphénylamino-carbonylmorpholine	$C_{17}H_{18}N_2O_2$	75125-45-0	-770,7	-864,7	94,0	-904,8	134,1
2-anilinométhyl-3-méthyl-4-éthyl-5-carbéthoxypyrrole	$C_{17}H_{22}N_2O_2$		-1330,1	-1295,4	-34,7	-	-
3,6-dibenzyl-2,5-pipérazinedione	$C_{18}H_{18}N_2O_2$	2308-61-4	-977,1	-998,6	21,5	-1301,9	324,8
bis(hydroxyméthyl)urée	$C_3H_8N_2O_3$	25155-29-7	-5969,7	-5972,9	3,3	-	-
L-asparagine	$C_4H_8N_2O_3$	70-47-3	-5975,0	-6129,7	154,7	-5987,5	12,5
N-glycylglycine	$C_4H_8N_2O_3$	556-50-3	-5659,3	-5745,6	86,3	-5662,7	3,4
L-glutamine	$C_5H_{10}N_2O_3$	56-85-9	-5654,7	-5745,0	90,3	-5614,0	-40,6
N-DL-alanylglycine	$C_5H_{10}N_2O_3$	1188-01-8	-5322,1	-5326,5	4,3	-5323,0	0,9
N-glycyl-DL-valine	$C_7H_{14}N_2O_3$	2325-17-9	-4793,4	-4731,1	-62,3	-4781,9	-11,5
N-DL-leucylglycine	$C_8H_{16}N_2O_3$	615-82-7	-4568,0	-4536,7	-31,3	-4581,8	13,8
3-benzoyl-5-hydroxy-1,2,4-oxadiazole	$C_9H_6N_2O_3$		-1419,4	-1773,5	354,2	-	-
3-((4-hydroxyphényl)méthyl)-2,5-pipérazinedione	$C_{11}H_{12}N_2O_3$	5845-66-9	-2326,3	-2409,0	82,7	-2868,6	**542,3**
N-glycylphénylalanine	$C_{11}H_{14}N_2O_3$	6491-52-7	-3079,5	-3234,5	155,0	-3065,6	-14,0

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Domalski *et al.*	
				$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}
N-alanylphénylalanine	$C_{12}H_{16}N_2O_3$	3061-90-3	-3005,9	-3124,3	118,4	-3009,7	3,7
N-valylphénylalanine	$C_{14}H_{20}N_2O_3$	75946-40-6	-2897,2	-2965,7	68,5	-2898,5	1,3
3,4-dibenzoyl-1,2,5-oxadiazole	$C_{16}H_{10}N_2O_3$	10349-12-9	374,5	366,3	8,2	-	-
3,4-bis(4-méthylbenzoyl)-1,2,5-oxadiazole	$C_{18}H_{14}N_2O_3$		66,6	107,2	-40,7	-	-
1,2-dinitroéthane	$C_2H_4N_2O_4$	7570-26-5	-1488,0	-1544,4	56,3	-1482,5	-5,5
3-nitroisoxazolidine-2-oxyde	$C_3H_4N_2O_4$	4122-45-6	-386,1	-516,7	130,5	-	-
2,2-dinitropropane	$C_3H_6N_2O_4$	595-49-3	-1429,1	-1028,2	-400,9	-1435,5	6,3
N-nitrosuccinimide	$C_4H_4N_2O_4$	5336-95-8	-2259,8	-2259,8	0,0	-	-
tartramide	$C_4H_8N_2O_4$	634-63-9	-8057,8	-6402,6	**-1655,2**	-6399,0	**-1658,8**
1,4-dinitrobutane	$C_4H_8N_2O_4$	4286-49-1	-1682,5	-1653,7	-28,8	-1733,9	51,5
L-asparagine monohydrate	$C_4H_{10}N_2O_4$	5794-13-8	-7237,6	-7366,0	128,5	-	-
5-nitro-2-furamide	$C_5H_4N_2O_4$	701-51-9	-2128,2	-1523,5	**-604,7**	-	-
2,2-diméthyl-1,3-dinitropropane	$C_5H_{10}N_2O_4$	762-98-1	-1696,6	-1681,2	-15,4	-1774,4	77,8
1,3-dinitrobenzène	$C_6H_4N_2O_4$	99-65-0	-163,0	-254,5	91,5	-151,0	-12,0
1,2-dinitrobenzène	$C_6H_4N_2O_4$	528-29-0	-10,7	-59,5	48,8	10,2	-20,9
1,4-dinitrobenzène	$C_6H_4N_2O_4$	100-25-4	-230,2	-218,7	-11,5	-231,3	1,1
3,6-bis(hydroxyméthyl)-2,5-pipérazinedione	$C_6H_{10}N_2O_4$	5625-41-2	-5027,7	-4967,3	-60,4	-5153,0	125,3
2,3-diméthyl-2,3-dinitrobutane	$C_6H_{12}N_2O_4$	3964-18-9	-1768,2	-1850,6	82,4	-1867,6	99,5
1-méthyl-2,4-dinitrobenzène	$C_7H_6N_2O_4$	121-14-2	-364,6	-382,1	17,5	-333,6	-31,0
1-méthyl-2,6-dinitrobenzène	$C_7H_6N_2O_4$	606-20-2	-280,6	-339,7	59,1	-311,6	31,0
(dinitrométhyl)benzène	$C_7H_6N_2O_4$	25321-14-6	-227,3	-227,3	0,0	-	-
méthyl(4-nitrophényl)carbamate	$C_8H_8N_2O_4$	1943-87-9	-2181,4	-2096,3	-85,1	-	-
2,4-dinitro-1,3-diméthylbenzène	$C_8H_8N_2O_4$	603-02-1	-436,4	-452,1	15,7	-459,4	23,0
4,6-dinitro-1,3-diméthylbenzène	$C_8H_8N_2O_4$	616-72-8	-520,0	-491,5	-28,5	-479,8	-40,2
(1,1'-bipyrrolidine)-2,2',5,5'-tétrone	$C_8H_8N_2O_4$	3741-24-0	-3616,4	-3616,4	0,0	-3616,2	-0,2
N,N'-dicarbéthoxy-éthylènediamine	$C_8H_{16}N_2O_4$	539-71-9	-4803,1	-4448,9	-354,1	-	-
1,5-dinitronaphtalène	$C_{10}H_6N_2O_4$	605-71-0	136,1	56,2	80,0	10,9	125,2
1,8-dinitronaphtalène	$C_{10}H_6N_2O_4$	602-38-0	182,0	278,7	-96,8	10,9	171,1
N-hippuroylglycine	$C_{11}H_{12}N_2O_4$	1145-32-0	-3525,0	-3512,1	-13,0	-3510,2	-14,8
acide 1-amino-2,5-diméthyl-1H-pyrrole-3,4-dicarboxylique diéthyl ester	$C_{12}H_{18}N_2O_4$	4815-44-5	-2988,8	-3290,3	301,5	-	-
(Z)-1,2-bis(4-nitrophényl)éthylène	$C_{14}H_{10}N_2O_4$	619-93-2	274,2	314,8	-40,6	253,7	20,5
(E)-1,2-bis(4-nitrophényl)éthylène	$C_{14}H_{10}N_2O_4$	736-31-2	203,2	314,8	-111,7	232,5	-29,4
2,2',4,4'-tétraméthyl-3,3'-dicarbéthoxy-dipyrrylméthène	$C_{19}H_{24}N_2O_4$	2407-87-6	-2392,5	-2716,6	324,1	-	-
4,4'-méthylènebis(acide 2,5-diméthyl-1H-pyrrole-3-carboxylique)diéthyl ester	$C_{19}H_{26}N_2O_4$		-2522,7	-2517,1	-5,6	-	-

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Domalski *et al.*	
				$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}
5,5'-méthylènebis(acide 2,4-diméthyl-1H-pyrrole-3-carboxylique)diéthyl ester	$C_{19}H_{26}N_2O_4$	5442-92-2	-2463,5	-2517,1	53,6	-	-
4,4'-méthylènebis(acide 3,5-diméthyl-1H-pyrrole-2-carboxylique)diéthyl ester	$C_{19}H_{26}N_2O_4$	6285-54-7	-2506,8	-2458,8	-48,0	-	-
4,4'-éthylènebis(acide 2,5-diméthyl-1H-pyrrole-3-carboxylique)diéthyl ester	$C_{20}H_{28}N_2O_4$		-2473,9	-2825,1	351,2	-	-
N,N'-bis(2-méthoxyphényl)téréphtalamide	$C_{22}H_{20}N_2O_4$	36360-34-6	-1349,3	-1363,9	14,6	-1529,1	179,8
N,N'-bis(3-méthoxyphényl)téréphtalamide	$C_{22}H_{20}N_2O_4$	6957-81-9	-1459,1	-1463,1	4,0	-1545,0	86,0
N,N'-bis(4-méthoxyphényl)téréphtalamide	$C_{22}H_{20}N_2O_4$	7144-15-2	-1456,9	-1463,1	6,1	-1555,7	98,7
alloxane monohydrate	$C_4H_4N_2O_5$	2244-11-3	-6251,1	-6245,2	-5,9	-	-
2,4-dinitrophénol	$C_6H_4N_2O_5$	51-28-5	-1263,9	-1194,6	-69,4	-1179,5	-84,4
2,6-dinitrophénol	$C_6H_4N_2O_5$	573-56-8	-1140,1	-1194,6	54,5	-1108,9	-31,2
N-serylserine	$C_6H_{12}N_2O_5$	6620-95-7	-6128,4	-6134,1	5,7	-6113,7	-14,7
2,4-dinitro-1-méthoxybenzène	$C_7H_6N_2O_5$	119-27-7	-941,8	-882,5	-59,3	-986,8	45,0
2,6-dinitro-1-méthoxybenzène	$C_7H_6N_2O_5$	3535-67-9	-955,4	-724,0	-231,4	-961,6	6,2
2,4-dinitro-1-éthoxybenzène	$C_8H_8N_2O_5$	610-54-8	-1067,1	-930,4	-136,7	-1077,1	10,0
2,4-dinitro-1-naphtol	$C_{10}H_6N_2O_5$	605-69-6	-774,7	-704,2	-70,5	-751,2	-23,5
4-hydroxy-5,4'-bis(acide 2-méthyl-1H-pyrrole-3-carboxylique)diéthyl ester	$C_{16}H_{20}N_2O_5$		-3146,0	-3571,7	425,7	-	-
2,4-dinitro-1,3-benzènediol	$C_6H_4N_2O_6$	519-44-8	-2076,9	-1984,4	-92,5	-1968,7	-108,2
4,6-dinitro-1,3-benzènediol	$C_6H_4N_2O_6$	616-74-0	-2196,8	-1984,4	-212,4	-2033,6	-163,2
acide 3,5-dinitrobenzoïque	$C_7H_4N_2O_6$	99-34-3	-2039,4	-2147,5	108,0	-1993,8	-45,7
2,4-dinitrophénoxyéthanol	$C_8H_8N_2O_6$	2831-60-9	-1747,5	-1703,1	-44,4	-1816,5	69,0
1,2-bis(3-carboxypropanoyl)hydrazine	$C_8H_{12}N_2O_6$	5343-02-2	-5725,5	-5603,9	-121,5	-	-
N,N'-1,2-éthanediylbis-(N-(carboxyméthyl)glycine)	$C_{10}H_{16}N_2O_8$	60-00-4	-6020,7	-5793,4	-227,3	-6306,4	285,7
cytosine	$C_4H_5N_3O$	71-30-7	-1991,9	-1991,9	0,0	-	-
créatinine	$C_4H_7N_3O$	60-27-5	-2108,4	-2111,8	3,4	-	-
4-phénylfurazane amine	$C_8H_7N_3O$	10349-14-1	1370,7	1370,7	0,0	-	-
créatine	$C_4H_9N_3O_2$	57-00-1	-4096,6	-3975,7	-120,9	-	-
L-histidine	$C_6H_9N_3O_2$	71-00-1	-2847,7	-2847,7	0,0	-	-
4-phényl-3-furazancarboxamide	$C_9H_7N_3O_2$	18600-75-4	418,7	411,9	6,8	-	-
4-(4-méthylphényl)-3-furazancarboxamide	$C_{10}H_9N_3O_2$		207,2	213,5	-6,3	-	-
1,3,5-triazine-2,4,6(1H,3H,5H)-triol	$C_3H_3N_3O_3$	108-80-5	-5450,7	-5433,1	-17,6	-3283,0	**-2167,7**
3-méthyl-4-nitrofuroxane	$C_3H_3N_3O_4$	49558-02-3	694,1	694,1	0,0	-	-
2,3-dinitroaniline	$C_6H_5N_3O_4$	602-03-9	-63,9	-132,4	68,5	-167,4	103,5
2,4-dinitroaniline	$C_6H_5N_3O_4$	97-02-9	-370,2	-311,4	-58,9	-260,8	-109,4
2,5-dinitroaniline	$C_6H_5N_3O_4$	619-18-1	-241,9	-311,4	69,5	-389,1	147,2

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Domalski *et al.*	
				$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}
2,6-dinitroaniline	$C_6H_5N_3O_4$	606-22-4	-276,3	-334,2	57,9	-282,7	6,3
3,4-dinitroaniline	$C_6H_5N_3O_4$	610-41-3	-178,0	-109,5	-68,5	-145,6	-32,4
3,5-dinitroaniline	$C_6H_5N_3O_4$	618-87-1	-212,4	-288,5	76,1	-348,2	135,8
N-méthyl-2,6-dinitroaniline	$C_7H_7N_3O_4$	5910-19-0	-71,0	-170,0	99,0	-181,8	110,8
N-méthyl-2,4-dinitroaniline	$C_7H_7N_3O_4$	2044-88-4	-342,4	-170,0	-172,4	-138,7	-203,7
N,N-diméthyl-2,4-dinitroaniline	$C_8H_9N_3O_4$	1670-17-3	-145,4	-145,4	0,0	-67,0	-78,4
N-phényl-2,4-dinitroaniline	$C_{12}H_9N_3O_4$	961-68-2	86,8	146,9	-60,1	272,5	-185,7
N-(N-glycyl-DL-phénylalanyl)alanine	$C_{14}H_{19}N_3O_4$	18828-33-6	-3159,7	-3283,5	123,7	-3280,2	120,5
N-méthyl-N-(2-nitroxyéthyl)nitramine	$C_3H_7N_3O_5$	17096-47-8	-907,5	-906,5	-1,0	-1197,7	290,2
trinitrométhane	CHN_3O_6	517-25-9	-318,5	-318,5	0,0	-317,8	-0,7
1,1,1-trinitroéthane	$C_2H_3N_3O_6$	595-86-8	-681,0	-252,2	-428,8	-	-
2-méthyl-2,3,3-trinitrobutane	$C_5H_9N_3O_6$	5324-72-1	-1600,4	-1280,8	-319,6	-1310,9	-289,4
1,3,5-trinitrobenzène	$C_6H_3N_3O_6$	99-35-4	-223,8	-345,1	121,3	-175,6	-48,3
2-méthyl-2,3,3-trinitropentane	$C_6H_{11}N_3O_6$	62154-78-3	-1312,6	-1310,2	-2,4	-1379,9	67,3
2,4,6-trinitrotoluène	$C_7H_5N_3O_6$	118-96-7	-354,6	-407,9	53,3	-302,8	-51,8
2-éthyl-1,3,5-trinitrobenzène	$C_8H_7N_3O_6$	13985-60-9	-375,6	-386,0	10,3	-368,6	-7,1
2,4-diméthyl-1,3,5-trinitrobenzène	$C_8H_7N_3O_6$	632-92-8	-425,9	-463,3	37,5	-407,0	-18,9
1,1,1-trinitro-2-phényléthane	$C_8H_7N_3O_6$	38677-56-4	-76,7	77,3	-154,0	-	-
1,3,8-trinitronaphtalène	$C_{10}H_5N_3O_6$	2364-46-7	92,3	114,1	-21,8	-88,0	180,3
1,4,5-trinitronaphtalène	$C_{10}H_5N_3O_6$	2243-95-0	138,3	114,1	24,2	-139,3	277,6
2,2,2-trinitroéthanol	$C_2H_3N_3O_7$	918-54-7	-1441,5	-1278,4	-163,1	-	-
2,4,6-trinitrophénol	$C_6H_3N_3O_7$	88-89-1	-1084,8	-1094,3	9,5	-943,6	-141,2
3-méthyl-2,4,6-trinitrophénol	$C_7H_5N_3O_7$	602-99-3	-1052,5	-1109,7	57,2	-1010,0	-42,5
2-méthoxy-1,3,5-trinitrobenzène	$C_7H_5N_3O_7$	606-35-9	-647,4	-716,6	69,2	-833,1	185,7
2-éthoxy-1,3,5-trinitrobenzène	$C_8H_7N_3O_7$	4732-14-3	-795,6	-765,1	-30,5	-916,0	120,4
2-méthyl-2-nitro-1,3-propanediol dinitrate	$C_4H_7N_3O_8$	4055-94-1	-1661,8	-1686,3	24,5	-1961,9	300,0
2-(2,4-dinitrophénoxy)-éthanol nitrate	$C_8H_7N_3O_8$	62030-34-6	-1071,9	-1051,6	-20,4	-1240,2	168,3
2-éthyl-2-(hydroxyméthyl)-1,3-propanediol trinitrate	$C_6H_{11}N_3O_9$	2921-92-8	-1782,9	-1714,9	-68,0	-1986,4	203,5
N,N-bis(2-(bis(carboxyméthyl)amino)éthyl)glycine	$C_{14}H_{23}N_3O_{10}$	67-43-6	-5657,1	-5324,8	-332,3	-5928,1	271,0
5-hydroxytétrazole	CH_2N_4O	16421-52-6	73,2	44,8	28,4	-	-
5-méthoxy-1H-tétrazole	$C_2H_4N_4O$	5376-15-8	690,5	690,5	0,0	-	-
1-acétyl-1H-tétrazole	$C_3H_4N_4O$	21565-41-3	727,1	727,1	0,0	-	-
1,4-diméthyl-5-tétrazolone	$C_3H_6N_4O$	13576-20-0	-241,9	-241,9	0,0	-	-
1,7-dihydro-6H-purin-6-one	$C_5H_4N_4O$	68-94-0	-814,0	-814,0	0,0	-	-

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Domalski *et al.*	
				$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}
1-phényl-5-hydroxytétrazole	$C_7H_4N_4O$	51449-77-5	698,2	713,4	-15,3	-	-
nitroguanidine	$CH_4N_4O_2$	556-88-7	-832,2	-1096,4	264,2	-	-
azodicarbonamide	$C_2H_4N_4O_2$	123-77-3	-2519,8	-2519,8	0,0	-	-
tétrahydro-1,2,4,5-tétrazine-3,6-dione	$C_2H_4N_4O_2$	624-40-8	-2250,2	-2250,2	0,0	-	-
acide oxalique dihydrazide	$C_2H_6N_4O_2$	996-98-5	-2499,7	-2357,4	-142,3	-	-
1,2-hydrazinedicarboxamide	$C_2H_6N_4O_2$	110-21-4	-4222,9	-4173,7	-49,2	-	-
6-amino-1,3,5-triazine-2,4(1H,3H)-dione	$C_3H_4N_4O_2$	645-93-2	-3847,3	-3645,1	-202,3	-	-
propanedioyl dihydrazide	$C_3H_8N_4O_2$	3815-86-9	-2517,4	-2517,4	0,0	-	-
glycolurile	$C_4H_6N_4O_2$	496-46-8	-3467,6	-3467,6	0,0	-	-
1,4-dinitrosopipérazine	$C_4H_8N_4O_2$	140-79-4	645,9	625,9	20,1	-180,4	**826,3**
butanedioyl dihydrazide	$C_4H_{10}N_4O_2$	4146-43-4	-2508,4	-2564,9	56,5	-	-
3,7-dihydro-1H-purine-2,6-dione	$C_5H_4N_4O_2$	69-89-6	-2495,5	-2495,6	0,0	-	-
D-arginine	$C_6H_{14}N_4O_2$	157-06-2	-3579,2	-3670,2	91,0	-	-
2-phényl-5-carboxytétrazole	$C_8H_6N_4O_2$	54798-92-4	-217,2	-217,2	0,0	-	-
1,2-bis(diphénylcarbamoyl)hydrazine	$C_{26}H_{22}N_4O_2$	75011-84-6	128,8	103,1	25,7	-	-
éthylène-bis-diphénylurée	$C_{28}H_{26}N_4O_2$	6123-88-2	-433,9	-520,7	86,8	-449,5	15,5
acide 8,13-diéthyl-3,7,12,17-tétraméthyl-21H,23H-porphine-2-propanoïque méthyl ester	$C_{32}H_{36}N_4O_2$	5174-83-4	-762,6	-847,6	85,0	-	-
acide 8,13-diéthyl-3,7,12,17,20-pentaméthyl-21H,23H-porphine-2-propanoïque méthyl ester	$C_{33}H_{38}N_4O_2$	33719-66-3	-730,7	-794,4	63,8	-	-
désoxophylloérythrine monométhyl ester	$C_{34}H_{38}N_4O_2$	33902-83-9	-339,8	-694,2	354,4	-	-
2,5-dioxo-4-imidazolidinylurée	$C_4H_6N_4O_3$	97-59-6	-4538,5	-4538,5	0,0	-	-
acide urique	$C_5H_4N_4O_3$	69-93-2	-3680,9	-3680,9	0,0	-	-
pyrophaeophorbide-a-monométhyl ester	$C_{34}H_{36}N_4O_3$	6453-67-4	-683,3	-585,1	-98,2	-	-
phylloérythrine monométhyl ester	$C_{34}H_{36}N_4O_3$	33719-95-8	-671,1	-633,3	-37,8	-	-
N,N'-dinitro-1,2-éthanediamine	$C_2H_6N_4O_4$	505-71-5	-691,6	-691,6	0,0	-672,9	-18,7
1,4-dinitropipérazine	$C_4H_8N_4O_4$	4164-37-8	-313,3	-296,9	-16,4	-318,0	4,6
2,4-dinitrophénylhydrazine	$C_6H_6N_4O_4$	119-26-6	252,4	235,7	16,7	346,8	-94,4
5-nitrofurazone	$C_6H_6N_4O_4$	59-87-0	-1128,5	-1128,5	0,0	-	-
4,4'-dinitrohydrazobenzène	$C_{12}H_{10}N_4O_4$	22719-28-4	400,0	443,9	-43,9	512,5	-112,5
protoporphyrine	$C_{34}H_{34}N_4O_4$	553-12-8	-927,2	-1600,8	**673,6**	-	-
rhodoporphyrine (XV) diméthyl ester	$C_{34}H_{38}N_4O_4$	22361-85-9	-938,6	-1633,7	**695,1**	-	-
mésoporphyrine (IX) diméthyl ester	$C_{36}H_{42}N_4O_4$	1263-63-4	-1416,4	-1407,0	-9,4	-	-
N,N'-diméthyl-N,N'-dinitroéthanediamide	$C_4H_6N_4O_6$	14760-99-7	-1482,2	-1468,2	-14,0	-	-
2,4,6-trinitro-N-méthylaniline	$C_7H_6N_4O_6$	1022-07-7	-205,7	-265,5	59,8	-142,0	-63,7
2,4,N-trinitro-N-méthylaniline	$C_7H_6N_4O_6$	19092-03-6	66,9	104,2	-37,3	357,6	-290,7

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Domalski *et al.*	
				$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}
2,6,N-trinitro-N-méthylaniline	$C_7H_6N_4O_6$	102153-82-2	163,1	104,2	58,9	322,5	-159,4
chlorin-p6-triméthyl ester	$C_{36}H_{40}N_4O_6$	62786-89-4	-1989,4	-1964,6	-24,8	-	-
chloroporphyrin-e6-triméthyl ester	$C_{37}H_{42}N_4O_6$	28211-96-3	-1540,0	-1603,5	63,4	-	-
chlorin-e6-triméthyl ester	$C_{37}H_{42}N_4O_6$	71217-51-1	-1481,6	-1424,6	-57,1	-	-
1-nitroacétaldéhyde o-(1,1-dinitroéthyl)oxime	$C_4H_6N_4O_7$	10565-52-3	-745,1	-745,1	0,0	-	-
2,2,3,3-tétranitrobutane	$C_4H_6N_4O_8$	20919-97-5	-765,2	-825,8	60,6	-833,9	68,7
1,1,1,4-tétranitrobutane	$C_4H_6N_4O_8$	20919-96-4	-796,7	-650,8	-145,9	-	-
N-nitrobis(2-hydroxyéthyl)amine dinitrate	$C_4H_8N_4O_8$	4185-47-1	-1071,9	-1204,2	132,3	-1424,2	352,3
dinitrobutylèneglycol diuréthane	$C_6H_{10}N_4O_8$		-3137,1	-2963,8	-173,3	-	-
1,4,5,8-tétranitronaphtalène	$C_{10}H_4N_4O_8$	4793-98-0	154,1	155,2	-1,0	-245,6	399,7
coproporphyrin-(I) tétraméthyl ester	$C_{40}H_{46}N_4O_8$	25767-20-8	-2082,5	-2242,9	160,4	-	-
2,4,6-trinitrophénoxyéthyl nitrate	$C_8H_6N_4O_{10}$	62030-33-5	-920,3	-900,8	-19,5	-1086,9	166,6
pentaérythritol tétranitrate	$C_5H_8N_4O_{12}$	78-11-5	-1703,7	-1650,2	-53,5	-1947,0	243,3
5-cyclohexène-(1α,2β,3β,4α)-1,2,3,4-tétrol tétranitrate	$C_6H_6N_4O_{12}$	29585-45-3	-1188,5	-1088,9	-99,6	-	-
α-époxyconduritol-E tétranitrate	$C_6H_6N_4O_{13}$	23627-80-7	-1298,0	-1298,0	0,0	-2149,7	**851,7**
α-D-méthyl glucopyranoside-2,3,4,6-tétranitrate	$C_7H_{10}N_4O_{14}$	13225-10-0	-2207,0	-2246,4	39,4	-2527,6	320,6
isouroporphyrine (II) octaméthyl ester	$C_{48}H_{54}N_4O_{16}$	10170-03-3	-2782,7	-2841,6	58,9	-	-
N-(1H-tétrazol-5-yl)-acétamide	$C_3H_5N_5O$	6158-77-6	-39,8	-136,1	96,3	-	-
4,6-diamino-1,3,5-triazin-2(1H)-one	$C_3H_5N_5O$	645-92-1	-2357,9	-1638,9	**-719,0**	-	-
guanine	$C_5H_5N_5O$	73-40-5	-1216,9	-1044,6	-172,3	-	-
aminonitroguanidine	$CH_5N_5O_2$	27256-18-4	210,1	34,1	176,0	-	-
N-nitro-1H-1,2,4-triazol-3-amine	$C_2H_3N_5O_2$	34815-01-5	870,0	1044,7	-174,7	-	-
5-méthyl-N-nitro-1H-1,2,4-triazol-3-amine	$C_3H_5N_5O_2$	42216-41-1	372,5	553,5	-181,1	-	-
5-tétrazolyluréthane	$C_4H_7N_5O_2$	5326-16-9	-1400,1	-1322,2	-77,9	-	-
3-amino-1,2,4-triazole nitrate	$C_2H_5N_5O_3$	13040-74-9	-1163,2	-1158,3	-4,9	-	-
1-formamido-2-nitroguanidine	$C_2H_5N_5O_3$		-998,7	-998,7	0,0	-	-
1-nitro-3-guanidinourée	$C_2H_5N_5O_3$	28787-21-5	-2129,9	-2130,0	0,0	-	-
1-acétamido-2-nitroguanidine	$C_3H_7N_5O_3$	42216-29-5	-1201,6	-1244,9	43,4	-	-
5-méthyl-1H-1,2,4-triazol-3-amine nitrate	$C_3H_7N_5O_3$	13040-75-0	-1417,6	-1402,8	-14,8	-	-
acétamidoguanidine nitrate	$C_3H_9N_5O_4$	75011-77-7	-2757,7	-1468,4	**-1289,3**	-	-
2,4,6-trinitrophénylhydrazine	$C_6H_5N_5O_6$	653-49-6	150,9	65,5	85,4	253,7	-102,7
1,3-diamino-2,4,6-trinitrobenzène	$C_6H_5N_5O_6$	1630-08-6	-402,7	-454,0	51,4	-412,0	9,3
bis(2,2-dinitropropyl)amine	$C_6H_{11}N_5O_8$	1924-47-6	-943,9	-1002,9	59,0	-1077,5	133,7
N-méthyl-N,2,4,6-tétranitroaniline	$C_7H_5N_5O_8$	479-45-8	91,6	-19,3	110,9	277,1	-185,5

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Domalski *et al.*	
				$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}
2,4,5,7-tétranitrocarbazole	$C_{12}H_5N_5O_8$	28453-24-9	54,1	9,3	44,9	-65,6	119,7
2,2',4,4',6-pentanitrobenzophénone	$C_{13}H_5N_5O_{11}$	32255-35-9	-280,9	-280,9	0,0	-394,3	113,3
2,2,4,4-tétrakis(hydroxyméthyl nitrate)pyranol nitrate	$C_9H_{13}N_5O_{16}$		-1772,9	-1806,3	33,4	-2082,5	309,6
3-(5-tétrazolylazo)-butan-2-one	$C_5H_8N_6O$	74999-21-6	995,5	995,5	0,0	-	-
nitroguanylazide	$CH_2N_6O_2$	62154-79-4	2294,2	2347,9	-53,7	-	-
3,7-dinitroso-1,3,5,7-tétraazabicyclo[3.3.1]nonane	$C_5H_{10}N_6O_2$	101-25-7	1125,9	1126,0	0,0	1228,4	-102,5
3-(5-tétrazolylazo)-pentan-2,4-dione	$C_6H_8N_6O_2$	74999-20-5	73,4	73,4	0,0	-	-
5-aminotétrazole nitrate	$CH_4N_6O_3$		-186,4	-254,6	68,2	-	-
guanyl azide nitrate	$CH_4N_6O_3$		107,4	60,2	47,2	-	-
diaminoguanidine nitrate	$CH_8N_6O_3$	37160-07-9	-1295,1	-1203,1	-91,9	-	-
hexahydro-1,3,5-trinitroso-1,3,5-triazine	$C_3H_6N_6O_3$	13980-04-6	1642,0	1627,0	15,0	1621,3	20,7
hexahydro-1,3,5-trinitro-1,3,5-triazine	$C_3H_6N_6O_6$	121-82-4	301,4	313,1	-11,7	324,2	-22,8
1,3,5-triamino-2,4,6-trinitrobenzène	$C_6H_6N_6O_6$	3058-38-6	-540,4	-499,0	-41,4	-567,7	27,3
hexaméthylènetétramine dinitrate	$C_6H_{14}N_6O_6$		-1438,3	-1438,3	0,0	-	-
N-nitroso-(2,2-dinitropropyl)amine	$C_6H_{10}N_6O_9$	28464-26-8	-620,3	-519,2	-101,1	-953,6	333,3
N-nitro-bis(2,2-dinitropropyl)amine	$C_6H_{10}N_6O_{10}$	28464-24-6	-710,3	-712,2	1,8	-952,8	242,4
N,N'-dinitro-N,N'-bis(2-hydroxyéthyl)oxamide dinitrate	$C_6H_8N_6O_{12}$	62209-60-3	-1577,7	-1633,0	55,3	-	-
2,2',4,4',6,6'-hexanitrobiphényle	$C_{12}H_4N_6O_{12}$	4433-16-3	161,5	64,4	97,1	-79,7	241,2
(E)-2,2',4,4',6,6'-hexanitrostilbène	$C_{14}H_6N_6O_{12}$	20062-22-0	173,8	173,8	0,0	17,2	156,6
bis(2,2,2-trinitroéthoxy)méthane	$C_5H_6N_6O_{14}$	6263-74-7	-1078,0	-1053,6	-24,3	-	-
éthylènedinitramine diuréthanglycol dinitrate	$C_8H_{12}N_6O_{14}$		-2364,9	-2435,4	70,5	-	-
1,1,1,9,9,9-hexanitro-3,5,7-trioxanonane	$C_6H_8N_6O_{15}$		-1476,9	-1488,2	11,3	-	-
dipentaérythritol hexanitrate	$C_{10}H_{16}N_6O_{19}$	13184-80-0	-1868,5	-1855,3	-13,3	-2102,1	233,6
3-picrylamino-1,2,4-triazole	$C_8H_5N_7O_6$	18212-12-9	513,3	381,3	132,0	-	-
bis(2,2,2-trinitroéthyl)amine	$C_4H_5N_7O_{12}$	34880-53-0	-97,3	-260,8	163,5	-	-
1,1,1,3,5,5,5-heptanitropentane	$C_5H_5N_7O_{14}$	20919-99-7	-397,0	-397,0	0,0	-	-
5,7-dinitro-1-picrylbenzotriazole	$C_{12}H_4N_8O_{10}$	50892-90-5	713,5	713,5	0,0	-	-
2,2',4,4',6,6'-hexanitroazobenzène	$C_{12}H_4N_8O_{12}$	19159-68-3	534,8	646,7	-111,9	387,9	146,9
3,3'-diamino-2,2',4,4',6,6'-hexanitrobiphényle	$C_{12}H_6N_8O_{12}$	17215-44-0	-32,8	-21,0	-11,8	-181,8	149,0
N-nitrosobis(2,2,2-trinitroéthyl)amine	$C_4H_4N_8O_{13}$	34882-73-0	132,2	84,5	47,7	-	-
N-nitrobis(2,2,2-trinitroéthyl)amine	$C_4H_4N_8O_{14}$	19836-28-3	-71,9	-102,5	30,7	-	-
N,3,3,3-tétranitro-N-(2,2,2-trinitroéthyl)-propylamine	$C_5H_6N_8O_{14}$	71742-94-4	-218,5	-173,0	-45,5	-	-
1,1,1,4,9,9,9-heptanitro-4-aza-6-oxanonane	$C_7H_{10}N_8O_{15}$		-680,6	-626,1	-54,6	-	-
1,1,1,5,9,9,9-heptanitro-3,7-dioxa-5-azanonane	$C_6H_8N_8O_{16}$	80308-88-9	-865,1	-892,2	27,2	-	-

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Domalski *et al.*	
				$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}
2,2',4,4',4",6,6',6"-octanitroterphényle	$C_{18}H_6N_8O_{16}$	33491-88-2	160,4	160,4	0,0	-	-
saccharose octanitrate	$C_{12}H_{14}N_8O_{27}$	30236-29-4	-1942,4	-1942,4	0,0	-	-
5-nitraminotétrazole guanidinate	$C_2H_7N_9O_2$		587,9	587,9	0,0	-	-
2,4,6-trinitro-1,3,5-tris(méthylnitramino)benzène	$C_9H_9N_9O_{12}$	62030-37-9	271,4	299,8	-28,4	734,2	-462,8
2,2',2",4,4',4",6,6',6"-nonanitroterphényle	$C_{18}H_5N_9O_{18}$	51460-84-5	208,1	201,8	6,3	-44,4	252,5
1,3,5-tripicrylbenzène	$C_{24}H_9N_9O_{18}$	58505-78-5	-343,1	-55,9	-287,3	36,5	-379,6
1-(5-tétrazolyl)-4-guanyltétrazène hydrate	$C_2H_8N_{10}O$	109-27-3	1005,0	1005,0	0,0	-	-
1,1,1,5,7,9,13,13,13-nonanitro-3,11-dioxa-5,7,9-triazatridécane	$C_8H_{12}N_{12}O_{20}$	80308-90-3	-570,6	-570,6	0,0	-	-
2,2',2",2"',4,4',4",4"',6,6',6",6"'-dodécanitroquatraphényle	$C_{24}H_6N_{12}O_{24}$	23242-92-4	251,8	270,6	-18,9	-26,8	278,5
azo-bis(2,2',4,4',6,6'-hexanitrodiphényl)	$C_{24}H_6N_{14}O_{24}$	23987-32-8	549,0	565,2	-16,2	213,4	335,6
2,2',2",2"',4,4',4",4"',6,6',6",6"'-dodécanitro-3,3'-bis(phénylazo)biphényle	$C_{24}H_6N_{16}O_{24}$	58505-80-9	877,3	841,4	35,9	438,7	438,7

Annexe 14

Comparaison des enthalpies standard de formation en phase solide issues de la littérature avec les enthalpies prévues par la méthode développée et par la méthode de Politzer *et al.*, concernant 5 molécules énergétiques

Les résultats sont ici présentés en joules par gramme

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Politzer *et al.*	
					$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}
acétamide	C_2H_5NO	60-35-5	59,1	-5343,1	-5286,0	-57,1	-4979,7	-363,4
3-nitro-1,2,4-triazole-5-one	$C_2H_2N_4O_3$	932-64-9	130,1	-997,2	-	-	-810,7	-186,5
4-nitroaniline	$C_6H_6N_2O_2$	100-01-6	138,1	-304,1	-159,7	-144,3	-336,2	32,2
1,3,5-trinitrobenzène	$C_6H_3N_3O_6$	99-35-4	213,1	-223,8	-345,1	121,3	-147,2	-76,6
1,3,3-trinitroazétidine	$C_3H_4N_4O_6$	97645-24-4	192,1	139,6	-	-	180,8	-41,2

Annexe 15

Comparaison des enthalpies standard de formation en phase solide issues de la littérature avec les enthalpies prévues par la méthode développée et par la méthode de Rice *et al.*, concernant 44 molécules énergétiques

Les résultats sont ici présentés en joules par gramme

A noter que les écarts entre les enthalpies de formation en phase solide mesurées et calculées étant strictement supérieurs à 500 $J.g^{-1}$ en valeur absolue (soit l'erreur limite acceptable) sont mis en évidence. Ils sont inscrits en gras dans les tableaux qui suivent.

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Rice *et al.*	
					$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}
trinitrométhane	CHN_3O_6	517-25-9	151,0	-318,5	-318,5	0,0	-315,8	-2,7
hexanitroéthane	$C_2N_6O_{12}$	918-37-6	300,1	265,0	-13,8	278,8	338,8	-73,9
nitroguanidine	$CH_4N_4O_2$	556-88-7	104,1	-832,2	-1096,4	264,2	-297,5	**-534,8**
diméthylnitramine	$C_2H_6N_2O_2$	4164-28-7	90,1	-832,8	-112,9	**-719,9**	-808,2	-24,6
hexahydro-1,3,5-trinitroso-1,3,5-triazine	$C_3H_6N_6O_3$	13980-04-6	174,1	1642,0	1627,0	15,0	1698,9	-56,9
hexahydro-1,3,5-trinitro-1,3,5-triazine	$C_3H_6N_6O_6$	121-82-4	222,1	301,4	313,1	-11,7	391,8	-90,5
1,4-dinitrosopipérazine	$C_4H_8N_4O_2$	140-79-4	144,1	645,9	625,9	20,1	818,6	-172,7
1,4-dinitropipérazine	$C_4H_8N_4O_4$	4164-37-8	176,1	-313,4	-296,9	-16,4	-175,8	-137,6
octahydro-1,3,5,7-tétranitro-1,3,5,7-tétraazacyclooctane	$C_4H_8N_8O_8$	2691-41-0	296,2	283,7	403,0	-119,3	361,7	-78,0
2-méthyl-2-nitropropane	$C_4H_9NO_2$	594-70-7	103,1	-2228,5	-1964,4	-264,1	-2182,9	-45,6
pentaérythritol tétranitrate	$C_5H_8N_4O_{12}$	78-11-5	316,1	-1703,7	-1650,2	-53,5	-1790,7	87,0
1,3,5-trinitrobenzène	$C_6H_3N_3O_6$	99-35-4	213,1	-223,8	-345,1	121,3	-322,0	98,2
2,4,6-trinitrophénol	$C_6H_3N_3O_7$	88-89-1	229,1	-1084,8	-1094,3	9,5	-989,8	-95,0
2,4,6-trinitrorésorcinol	$C_6H_3N_3O_8$	82-71-3	245,1	-1907,4	-1745,6	-161,8	-1611,4	-296,0
1-nitro-2-nitrosobenzène	$C_6H_4N_2O_3$	612-29-3	152,1	672,6	166,7	**505,8**	1367,1	**-694,5**
1-nitro-3-nitrosobenzène	$C_6H_4N_2O_3$	17122-21-3	152,1	689,8	166,7	**523,1**	599,6	90,2
1,2-dinitrobenzène	$C_6H_4N_2O_4$	528-29-0	168,1	-10,7	-59,5	48,8	-74,7	64,0
1,3-dinitrobenzène	$C_6H_4N_2O_4$	99-65-0	168,1	-163,0	-254,5	91,5	-298,7	135,7
1,4-dinitrobenzène	$C_6H_4N_2O_4$	100-25-4	168,1	-230,2	-218,7	-11,5	-271,3	41,1
2,4-dinitrophénol	$C_6H_4N_2O_5$	51-28-5	184,1	-1263,9	-1194,6	-69,4	-1243,1	-20,9
2,6-dinitrophénol	$C_6H_4N_2O_5$	573-56-8	184,1	-1140,1	-1194,6	54,5	-1086,3	-53,8
2,4,6-trinitroaniline	$C_6H_4N_4O_6$	489-98-5	228,1	-495,2	-403,2	-92,1	-390,7	-104,6
2-nitrophénol	$C_6H_5NO_3$	88-75-5	139,1	-1470,8	-1359,8	-111,0	-1365,5	-105,3
3-nitrophénol	$C_6H_5NO_3$	554-84-7	139,1	-1512,9	-1502,3	-10,6	-1389,6	-123,4
4-nitrophénol	$C_6H_5NO_3$	100-02-7	139,1	-1488,8	-1502,3	13,5	-1497,8	9,0
3-nitroaniline	$C_6H_6N_2O_2$	99-09-2	138,1	-247,5	-159,8	-87,7	-190,8	-56,6
2-nitroaniline	$C_6H_6N_2O_2$	88-74-4	138,1	-189,0	-190,0	1,1	-233,3	44,3
2,4,6-trinitro-1,3,5-benzènetriamine	$C_6H_6N_6O_6$	3058-38-6	258,1	-540,4	-499,0	-41,4	-337,1	-203,3
N-nitro-bis(2,2-dinitropropyl)amine	$C_6H_{10}N_6O_{10}$	28464-24-6	326,2	-710,4	-712,2	1,8	-871,0	160,6
2,4,6-trinitrotoluène	$C_7H_5N_3O_6$	118-96-7	227,1	-354,6	-407,9	53,3	-385,0	30,4

Composé	Formule brute	CAS	M	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Rice *et al.*	
					$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			g.mol^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}
2-méthoxy-1,3,5-trinitrobenzène	$C_7H_5N_3O_7$	606-35-9	243,1	-647,4	-716,6	69,2	-757,2	109,8
N-méthyl-N,2,4,6-tétranitroaniline	$C_7H_5N_5O_8$	479-45-8	287,1	91,6	-19,3	110,9	-24,8	116,4
1-méthyl-2,4-dinitrobenzène	$C_7H_6N_2O_4$	121-14-2	182,1	-364,6	-382,1	17,5	-466,4	101,8
2-méthyl-1,3-dinitrobenzène	$C_7H_6N_2O_4$	606-20-2	182,1	-280,6	-339,7	59,1	-351,5	70,9
(dinitrométhyl)benzène	$C_7H_6N_2O_4$	25321-14-6	182,1	-227,3	-227,3	0,0	-250,4	23,1
2-méthyl-4,6-dinitrophénol	$C_7H_6N_2O_5$	534-52-1	198,1	-1408,5	-1284,0	-124,5	-1364,2	-44,3
1-méthyl-4-nitrobenzène	$C_7H_7NO_2$	99-99-0	137,1	-350,8	-339,4	-11,4	-485,1	134,4
2,4,6-trinitrométaxylène	$C_8H_7N_3O_6$	632-92-8	241,2	-425,9	-463,3	37,5	-466,7	40,8
1,3,5-triméthyl-2,4,6-trinitrobenzène	$C_9H_9N_3O_6$	602-96-0	255,2	-500,1	-512,7	12,6	-531,2	31,2
1-nitronaphtalène	$C_{10}H_7NO_2$	86-57-7	173,2	246,0	248,5	-2,5	198,1	47,9
trans-2,2',4,4',6,6'-hexanitrostilbène	$C_{14}H_6N_6O_{12}$	20062-22-0	450,2	173,8	173,8	0,0	-88,3	262,1
ε-hexanitrohexaazaisowurtzitane	$C_6H_6N_{12}O_{12}$	135285-90-4	438,2	849,0	-	-	947,2	-98,3
β-hexanitrohexaazaisowurtzitane	$C_6H_6N_{12}O_{12}$	135285-90-4	438,2	983,5	-	-	927,2	56,3
diéthylèneglycol dinitrate	$C_4H_8N_2O_7$	693-21-0	196,1	-2176,1	-2224,7	48,5	-2408,6	232,5

Annexe 16

Comparaison des enthalpies standard de formation en phase solide issues de la littérature avec les enthalpies prévues par la méthode développée et par la méthode de Mathieu *et al.*, concernant 33 molécules énergétiques

Les résultats sont ici présentés en joules par gramme

A noter que les écarts entre les enthalpies de formation en phase solide mesurées et calculées étant strictement supérieurs à 500 $J.g^{-1}$ en valeur absolue (soit l'erreur limite acceptable) sont mis en évidence. Ils sont inscrits en gras dans les tableaux qui suivent.

Composé	Formule brute	CAS	$\Delta_f H°_{s,m}$ (litt.)	Salmon		Mathieu *et al.* (PIMM)		Mathieu *et al.* (PM3)		Mathieu *et al.* (P2)	
				$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu	$\Delta_f H°_{s,m}$ (calc.)	Résidu
			J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}	J.g^{-1}
diphényléthyne	$C_{14}H_{10}$	501-65-5	1752,8	1697,8	55,0	1580,0	172,8	1520,0	232,8	1580,0	172,8
2,2'-azo-bis-isobutyronitrile	$C_8H_{12}N_4$	78-67-1	1498,1	1498,1	0,0	970,0	**528,1**	1150,0	348,1	1250,0	248,1
2,5-diméthyl-4'-méthoxyazobenzène	$C_{15}H_{16}N_2O$	88578-22-7	840,0	1017,5	-177,5	940,0	-100,0	1390,0	**-550,0**	1160,0	-320,0
2-naphtyl phénylamine	$C_6H_{13}N$	135-88-6	1612,3	1359,6	252,8	480,0	**1132,3**	510,0	**1102,3**	520,0	**1092,3**
diphénylamine	$C_{12}H_{11}N$	122-39-4	769,4	471,6	297,8	400,0	369,4	460,0	309,4	460,0	309,4
hexahydro-1,3,5-trinitro-1,3,5-triazine	$C_3H_6N_6O_6$	121-82-4	301,4	313,1	-11,7	40,0	261,4	330,0	-28,6	290,0	11,4
octahydro-1,3,5,7-tétranitro-1,3,5,7-tétraazacyclooctane	$C_4H_8N_8O_8$	2691-41-0	283,7	403,0	-119,3	-440,0	**723,7**	-20,0	303,7	20,0	263,7
1,3,3-trinitroazétidine	$C_3H_4N_4O_6$	97645-24-4	139,6	-	-	50,0	89,6	250,0	-110,4	-50,0	189,6
flexzone 6H	$C_{18}H_{22}N_2$	101-87-1	-84,4	-297,9	213,5	-470,0	385,7	-240,0	155,7	-370,0	285,7
1,3,5-trinitrobenzène	$C_6H_3N_3O_6$	99-35-4	-223,8	-345,1	121,3	-90,0	-133,8	0,0	-223,8	-240,0	16,2
2,4,6-trinitrotoluène	$C_7H_5N_3O_6$	118-96-7	-354,6	-407,9	53,3	-140,0	-214,6	-130,0	-224,6	-280,0	-74,6
1,3,5-triamino-2,4,6-trinitrobenzène	$C_6H_6N_6O_6$	3058-38-6	-540,4	-499,0	-41,4	340,0	**-880,4**	360,0	**-900,4**	-190,0	-350,4
N,N'-diméthyl-N,N'-diphénylurée	$C_{15}H_{16}N_2O$	611-92-7	-304,2	-289,8	-14,4	-550,0	245,8	-540,0	235,8	-540,0	235,8
1,3-diéthyl-1,3-diphénylurée	$C_{17}H_{20}N_2O$	85-98-3	-559,8	-629,5	69,8	-530,0	-29,8	-530,0	-29,8	-530,0	-29,8
1-méthyl-3,3-diphénylurée	$C_{14}H_{14}N_2O$	13114-72-2	-472,0	-465,0	-7,0	-840,0	368,0	-850,0	378,0	-700,0	228,0
N,N-diphénylurée	$C_{13}H_{12}N_2O$	603-54-3	-578,1	-430,4	-147,7	-940,0	361,9	-960,0	381,9	-820,0	241,9
mélamine	$C_3H_6N_6$	108-78-1	-690,4	-645,2	-45,2	-1010,0	319,6	-1340,0	**649,6**	-770,0	79,6
N,N-diphényl-N'-éthylurée	$C_{15}H_{16}N_2O$	18168-01-9	-635,0	-644,5	9,5	-1070,0	435,0	-1040,0	405,0	-890,0	255,0
éthylènedinitramine	$C_2H_6N_4O_4$	505-71-5	-691,6	-691,6	0,0	-1560,0	**868,4**	-1470,0	**778,4**	-570,0	-121,6
diphényluréthane	$C_{15}H_{16}NO_2$	603-52-1	-1159,3	-967,7	-191,6	-1450,0	290,7	-1490,0	330,7	-1310,0	150,7
dinitroglycoluril	$C_4H_4N_6O_6$	55510-04-8	-1480,6	-1778,1	297,5	-1700,0	219,4	-1370,0	-110,6	-1520,0	39,4
diphényl phtalate	$C_{20}H_{14}O_4$	84-62-8	-1536,8	-1575,0	38,2	-1660,0	123,2	-1900,0	363,2	-1710,0	173,2
2,6-Di-tert-butyl-4-méthylphénol	$C_{15}H_{24}O$	128-37-0	-1814,9	-1954,0	139,1	-1850,0	35,1	-1720,0	-94,9	-1800,0	-14,9
camphre	$C_{10}H_{16}O$	76-22-2	-2097,0	-	-	-2460,0	363,0	-2390,0	293,0	-2440,0	343,0
éthyl-N,N-phényléthylcarbamate	$C_{11}H_{15}NO_2$	1013-75-8	-2176,0	-2108,1	-67,9	-2570,0	394,0	-2570,0	394,0	-2330,0	154,0
dicyclohexyl phtalate	$C_{20}H_{26}O_4$	84-61-7	-2818,9	-2874,3	55,5	-3140,0	321,2	-3170,0	351,2	-3010,0	191,2
résorcinol	$C_6H_6O_2$	108-46-3	-3342,1	-3407,4	65,3	-3540,0	197,9	-3680,0	337,9	-3660,0	317,9
acide pyrrole-2,4-dicarboxylique	$C_6H_5NO_4$		-3830,0	-5507,6	**1677,6**	-4300,0	470,0	-4370,0	**540,0**	-3990,0	160,0
acide sébacique diméthyl ester	$C_{12}H_{22}O_4$	106-79-6	-4498,3	-4390,5	-107,8	-4730,0	231,7	-4860,0	361,7	-4630,0	131,7
N,N'-dicarbéthoxy-éthylènediamine	$C_8H_{16}N_2O_4$	539-71-9	-4803,1	-4448,9	-354,1	-5220,0	416,9	-5370,0	**566,9**	-4770,0	-33,1
1,2,5-hexanetriol	$C_6H_{14}O_3$		-5294,9	-5723,4	428,4	-5240,0	-54,9	-5220,0	-74,9	-5240,0	-54,9
2-éthyl-2-(hydroxyméthyl)-1,3-propanediol	$C_6H_{14}O_3$	77-99-6	-5596,5	-5696,1	99,6	-5530,0	-66,5	-5790,0	193,5	-5950,0	353,5
triméthyl citrate	$C_9H_{14}O_7$	1587-20-8	-6091,9	-5948,1	-143,8	-5920,0	-171,9	-6520,0	428,1	-6170,0	78,1

DEVELOPPEMENT D'UNE METHODE PREDICTIVE DE CALCUL DES ENTHALPIES DE FORMATION EN PHASE SOLIDE DE MOLECULES ORGANIQUES - APPLICATION AUX MATERIAUX ENERGETIQUES.

Résumé

La recherche de nouveaux matériaux énergétiques performants nécessite la connaissance de plusieurs données thermochimiques, notamment l'enthalpie de formation, avant tout projet de synthèse. La grande majorité des molécules énergétiques se trouvant en phase solide, le but de cette thèse est de développer une méthode de contribution de groupes permettant d'évaluer les enthalpies standard de formation de composés solides contenant des atomes de carbone, d'hydrogène, d'oxygène et surtout d'azote. L'objectif fixé est d'obtenir des erreurs d'estimation inférieures à 500 $J.g^{-1}$.

Deux démarches ont été mises en parallèle : l'une directe et l'autre indirecte. La conclusion de la comparaison de ces deux méthodes est que l'approche directe est la plus satisfaisante. Les différentes recherches effectuées ont permis de montrer que les enthalpies de formation en phase solide de 75% des composés étudiés (soit 1 017 au total) sont représentées avec un résidu moyen de 5,7 $kJ.mol^{-1}$. La moyenne quadratique calculée est de 298,4 $J.g^{-1}$ (soit 1,7 fois inférieure à l'erreur maximale souhaitée). Les résultats observés grâce à la méthode établie sur de très nombreux composés, et notamment sur des molécules énergétiques, ont été comparés avec les résultats obtenus par d'autres techniques (méthodes de contribution de groupes et méthodes semi-empiriques).

Un important travail expérimental a été mis en œuvre. Des mesures d'enthalpies standard de formation en phase solide de vingt-cinq composés organiques ont ainsi été réalisées par calorimétrie de combustion en bombe statique.

Mots clés : calorimétrie de combustion ; enthalpie standard de formation en phase gazeuse ; enthalpie standard de formation en phase solide ; enthalpie standard de sublimation ; matériaux énergétiques ; méthode de contribution de groupes ; thermochimie.

DEVELOPMENT OF A COMPUTATIONAL METHOD PREDICTING ENTHALPIES OF FORMATION IN THE SOLID PHASE OF ORGANIC MOLECULES - APPLICATION TO ENERGETIC MATERIALS.

Abstract

Design of new performing energetic materials requires several thermochemical data, especially enthalpy of formation, in view of a probable synthesis. The great majority of energetic molecules being solids, the purpose of this thesis is to develop a group contribution method predicting standard enthalpies of formation of solid compounds containing atoms of carbon, hydrogen, oxygen, and above all nitrogen. The ultimate goal is to estimate these properties with an error no larger than 500 $J.g^{-1}$.

Two approaches were investigated : one direct and the other one indirect. The first method proved to be the most successful. Research done showed that the enthalpies of formation in the solid phase of 75% of the studied compounds (*i.e.* a whole set of 1 017 molecules) are represented with a mean residual of 5.7 $kJ.mol^{-1}$. The rms deviation calculated is 298.4 $J.g^{-1}$ (which is 1.7 times less than the maximum error required). Results observed owing to the method developed on a fairly large number of compounds, and notably on energetic molecules, were compared with results obtained due to other techniques (group contribution methods and semi-empirical methods).

A great deal of experiment was done. Standard enthalpies of formation in the solid phase were measured by static bomb combustion calorimetry for twenty-five organic compounds.

Key words: combustion calorimetry ; energetic materials ; group contribution method ; standard enthalpy of formation in the gas phase ; standard enthalpy of formation in the solid phase ; standard enthalpy of sublimation ; thermochemistry.

Laboratoire d'accueil :	Unité de Chimie et Procédés Ecole Nationale Supérieure de Techniques Avancées 32 Bd Victor, 75 739 Paris Cedex 15
Thèse présentée par :	SALMON Anna **le :** 21/12/2006
Discipline :	"Génie des Procédés" - Ecole des Mines de Paris