

ÉCOLE NORMALE SUPÉRIEURE DE LYON

Concours d'admission session 2018

Filière universitaire : Second concours

COMPOSITION DE CHIMIE

Durée : 3 heures

L'usage de calculatrices électroniques de poche, à alimentation autonome, non imprimante et sans document d'accompagnement, est autorisé.

★ ★ ★

Ce livret comprend 14 pages numérotées de 1 à 14.

Les parties et sous-parties sont souvent largement indépendantes. Il est conseillé de lire attentivement l'énoncé dans sa globalité et de choisir pertinemment les questions à traiter.

Étude des biodiésels

Le développement des biocarburants répond à une demande de remplacement des énergies fossiles, à la fois dans un souci environnemental et afin de pallier la diminution des ressources. Ces carburants font l'objet de nombreuses études pour en diminuer les coûts de production et en améliorer les propriétés. Ce sujet concerne la production de biodiésels et quelques-unes de leurs propriétés.

La première génération des biocarburants repose sur l'utilisation de végétaux oléagineux comme le tournesol ou le colza à partir desquels sont obtenus des esters méthyliques d'huiles végétales (EMHV) ou biodiésel.

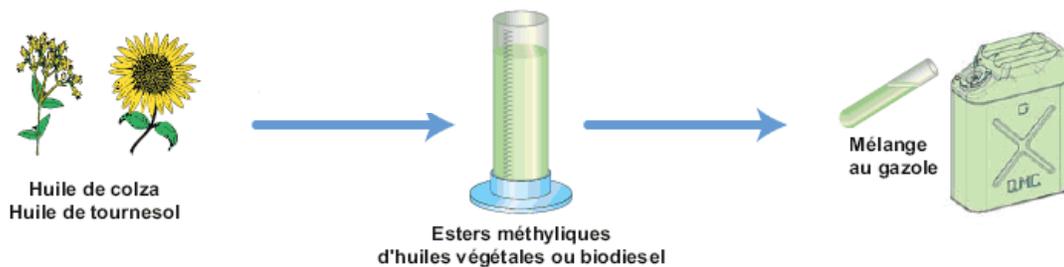


Figure 1 : schéma de production du biodiesel (source IFPEN).

A. Préparation de biocarburant à partir d'huiles végétales

Les huiles végétales sont obtenues par pressurisation des graines des plantes oléagineuses. Elles sont constituées d'un mélange de composés nommés triglycérides ou encore triacylglycérols, dont la structure générique est présentée sur la figure 2.

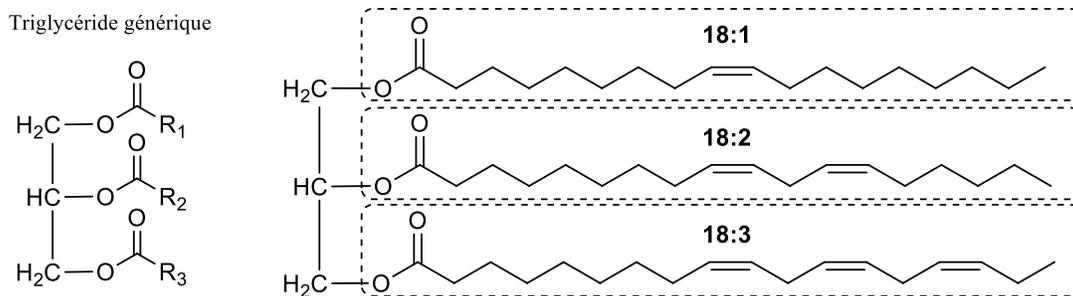


Figure 2 : structures d'un triglycéride générique et d'un triglycéride présentant les chaînes les plus abondantes dans l'huile de colza.

La nature des chaînes carbonées présentes sur un triglycéride dépend de l'huile étudiée. Par exemple, la figure 2 donne la structure des trois chaînes les plus abondamment présentes dans l'huile de colza. Les possibilités de chaînes sont nombreuses et les huiles végétales communes présentent des proportions variables d'un ensemble de ces chaînes. Le tableau 1 donne la composition simplifiée (en pourcentage) de trois huiles végétales communes.

Tableau 1 : compositions en acide gras (en pourcentage) dans quelques huiles végétales communes.

	16:0	18:0	18:1	18:2	18:3
Colza	3	1	66	22	8
Soja	12	3	23	55	7
Tournesol	6	3	17	74	0

Les huiles végétales peuvent être utilisées directement dans un moteur diesel, cependant leur forte viscosité en gêne le fonctionnement. Il est en réalité nécessaire de transformer ces huiles pour modifier leurs propriétés avant de pouvoir les utiliser comme carburant.

I. Procédé industriel de production de biodiesel

Le procédé industriel présenté ci-dessous permet de transformer une huile végétale usagée (ayant par exemple servi d'huile de cuisson) en biodiesel. Cet aspect est particulièrement intéressant puisqu'il permet d'optimiser la culture végétale en recyclant de l'huile déjà utilisée. Cependant, lors de leur utilisation ménagère, les huiles s'hydrolysent partiellement et contiennent alors une proportion non négligeable d'acides gras « libres » en solution dans l'huile. La production de biocarburant doit alors se faire en deux phases :

- la première, nommée préparation de l'huile, pour transformer les acides libres (phase A)
- la seconde, nommée synthèse du biodiesel, pour transformer les triglycérides (phase B)

Phase A : préparation de l'huile

- Etape 1. Formation des esters méthyliques des acides libres présents dans l'huile en présence d'excès de méthanol.
- Etape 2. Lavage au glycérol du mélange obtenu en fin de réaction.
- Etape 3. Retrait des restes de méthanol.

Phase B : synthèse du biodiesel

- Etape 4. Réaction du mélange (triglycéride + ester méthylique) avec de l'hydroxyde de sodium et du méthanol (3,5 g de NaOH par litre d'huile à transformer ; six équivalents de MeOH pour un équivalent de triglycéride).
- Etape 5. Retrait de l'excès de méthanol.
- Etape 6. Lavage aqueux du mélange obtenu.
- Etape 7. Neutralisation du mélange par ajout d'acide phosphorique.

Pour étudier ce procédé, un ensemble de données expérimentales concernant les réactifs utilisés est présenté en annexe.

Analyse de la préparation de l'huile (phase A)

1. Écrire l'équation bilan de la réaction d'hydrolyse des triglycérides qui mène à la formation d'acides « libres » dans les huiles usagées. On nommera les fonctions chimiques formées lors de cette réaction.
2. Proposer des conditions expérimentales pour effectuer l'étape 1. Justifier, en particulier, les choix expérimentaux mis en œuvre pour améliorer la cinétique et la thermodynamique de la réaction.
3. Écrire le mécanisme réactionnel associé à cette réaction.
4. Pourquoi se place-t-on en excès de méthanol pour cette réaction ?
5. Quelle est l'utilité du lavage au glycérol de l'étape 2 ? Commenter le choix de ce solvant, dont la structure est donnée en annexe.
6. Proposer une méthode de purification pour retirer l'excès de méthanol lors de l'étape 3. Justifier.
7. Faire un schéma légendé du dispositif expérimental à utiliser pour cette purification.

Analyse de la synthèse du biodiésel (phase B)

8. Écrire le bilan de la transformation mise en jeu dans l'étape 4. Nommer la réaction.
9. Écrire le mécanisme de cette transformation. Quel est le rôle de l'hydroxyde de sodium dans cette réaction ?
10. Combien d'équivalents d'hydroxyde de sodium et de méthanol sont introduits par fonction ester à former ?
11. Que se passerait-il si l'étape 4 était directement réalisée sur l'huile usagée sans avoir initialement préparé celle-ci par les étapes 1 à 3 ?

II. Mise en œuvre expérimentale du procédé industriel au laboratoire

Au laboratoire, il est possible de se dispenser de la première étape de préparation de l'huile, mais il est alors nécessaire de procéder à un titrage des acides « libres » présents dans l'huile étudiée.

Titration des fonctions acides de l'huile usagée

2,0 mL d'huile usagée de colza sont introduits dans un bécher contenant 15,0 mL d'isopropanol et 15,0 mL d'eau, puis le tout est agité jusqu'à l'obtention d'un mélange homogène. Une solution aqueuse de soude ($c_b = 0,01 \text{ mol.L}^{-1}$) est ajoutée goutte à goutte et un suivi pH-métrique est réalisé. La courbe expérimentale de pH obtenue est présentée en annexe, ainsi que les courbes exprimant les répartitions entre l'acide titré et sa base conjuguée. Les courbes de répartition ont été simulées en faisant l'approximation que seul l'acide oléique (18:1, représenté en annexe) était présent dans la solution.

Pour simplifier les calculs, on pourra considérer que le titrage est réalisé en solution aqueuse et que la présence d'isopropanol ne change pas les comportements des espèces considérées. On considérera également que seul l'acide oléique est présent en solution.

12. Dessiner un schéma légendé du dispositif expérimental utilisé pour réaliser le titrage. Détailler en particulier les électrodes à utiliser pour le titrage pH-métrique.
13. Quel est le rôle de l'isopropanol dans ce titrage ?
14. Identifier clairement la nature des courbes 1, 2 et 3 présentées en annexe.
15. Expliquer comment déterminer le pKa du couple acide/base associé à l'acide oléique. Commenter la valeur obtenue.
16. Écrire l'équation de titrage mise en jeu et calculer la valeur de sa constante thermodynamique. Commenter.

17. Déterminer par méthode graphique la valeur du volume équivalent de ce titrage. La construction graphique sera expliquée en reproduisant qualitativement le tracé sur la copie.
18. En déduire la concentration molaire de fonctions acides dans l'huile usagée.
19. Justifier que le pourcentage d'acide oléique ne soit pas égal à 100 % avant le début du dosage.
20. Retrouver par le calcul la proportion en acide oléique et la valeur du pH avant le début du dosage (soit pour $V=0$ mL). Expliquer clairement la méthode utilisée.
21. Quelle quantité de soude sera nécessaire pour réaliser la transformation des triglycérides d'un litre d'huile usagée dans les conditions industrielles (étape 4) ?

Obtention du biocarburant au laboratoire

Un ballon bicol de 250 mL est attaché à l'aide d'une pince, puis 60 mL d'huile usagée de colza titrée y sont introduits. Une ampoule de coulée isobare est adaptée sur le ballon et celle-ci est remplie d'une solution d'hydroxyde de sodium dans le méthanol. Un réfrigérant à eau est lui aussi adapté sur le ballon et l'ensemble est chauffé à 60 °C sous agitation magnétique. Une fois que la température désirée est atteinte, la solution de méthanol est ajoutée par un lent goutte à goutte, puis le milieu réactionnel obtenu est maintenu à cette température pendant 1 heure.

Lorsque l'agitation et le chauffage sont arrêtés, deux phases sont visibles. Elles sont séparées par décantation (cette étape est particulièrement longue car de fortes émulsions sont présentes). La phase organique récoltée est ensuite lavée par une solution saturée de chlorure d'ammonium puis séchée sur sulfate de sodium. Les dernières traces de méthanol sont retirées et une masse de 45,2 g de biodiésel est finalement isolée.

22. Proposer un schéma légendé du montage réalisé.
23. Que contiennent les deux phases observées en fin de réaction ?
24. Comment expliquer les émulsions observées ? Citer une application courante de ce phénomène et expliquer son fonctionnement par un schéma.
25. Calculer le rendement de la réaction de production du biodiésel. (Indication : on pourra faire l'hypothèse simplificatrice que l'huile de colza utilisée pour cette expérience n'est composée que de dérivés de l'acide oléique.)

B. Étude des caractéristiques du biodiésel obtenu

I. Étude de la chaleur combustion

Dans cette partie, on s'intéresse de manière théorique puis de manière expérimentale aux propriétés de combustion du biodiésel obtenu comme décrit précédemment à partir de l'huile de colza.

Étude théorique de la chaleur de combustion du biodiésel

La chaleur de combustion du biodiésel peut être calculée à partir des données thermodynamiques présentées en annexe.

26. Quelle est la réaction de combustion complète de l'oléate de méthyle ? On indique que de la vapeur d'eau est formée.
27. Rappeler les états standards de référence pour les éléments : carbone, oxygène, azote et hydrogène.

28. Écrire les équations chimiques qui sont associées aux enthalpies de formation de l'eau liquide $\Delta_f H^\circ_{H_2O(g)}$ et du dioxyde de carbone gazeux $\Delta_f H^\circ_{CO_2(g)}$.
29. Exprimer l'enthalpie de formation de l'oléate de méthyle à l'état liquide $\Delta_f H^\circ_{18:1(l)}$ en fonction des énergies de liaison fournies en annexe, de l'enthalpie de sublimation du graphite $L_{sub,C(gr)}$ et de l'enthalpie de vaporisation de l'oléate de méthyle $L_{vap,18:1}$.
30. Écrire un cycle thermodynamique permettant de relier l'enthalpie de combustion de l'oléate de méthyle liquide $\Delta_{comb} H^\circ_{18:1(l)}$ à $\Delta_f H^\circ_{18:1(l)}$, $\Delta_f H^\circ_{CO_2(g)}$ et $\Delta_f H^\circ_{H_2O(g)}$.
31. En déduire l'expression de $\Delta_{comb} H^\circ_{18:1(l)}$ en fonction des différentes énergies de liaison, de $L_{vap,18:1}$, de $L_{sub,C(gr)}$, de $\Delta_f H^\circ_{CO_2(g)}$ et de $\Delta_f H^\circ_{H_2O(g)}$.
32. Calculer la valeur numérique de $\Delta_{comb} H^\circ_{18:1(l)}$. Commenter.
33. En procédant de manière similaire, donner les expressions littérales et les valeurs numériques des enthalpies de combustion des autres esters présents dans le biodiésel : $\Delta_{comb} H^\circ_{18:2(l)}$, $\Delta_{comb} H^\circ_{18:3(l)}$, $\Delta_{comb} H^\circ_{16:0(l)}$ et $\Delta_{comb} H^\circ_{18:0(l)}$.
34. En déduire la valeur théorique de l'enthalpie de combustion complète du biodiésel étudié $\Delta_{comb} H^\circ_{biodiésel(l)}$.

Étude expérimentale de la chaleur de combustion du biodiésel

Pour mesurer la chaleur libérée lors de la combustion d'un biodiésel de manière expérimentale, il est nécessaire d'utiliser un calorimètre doté d'une bombe calorimétrique comme celui qui est présenté sur la figure 3.

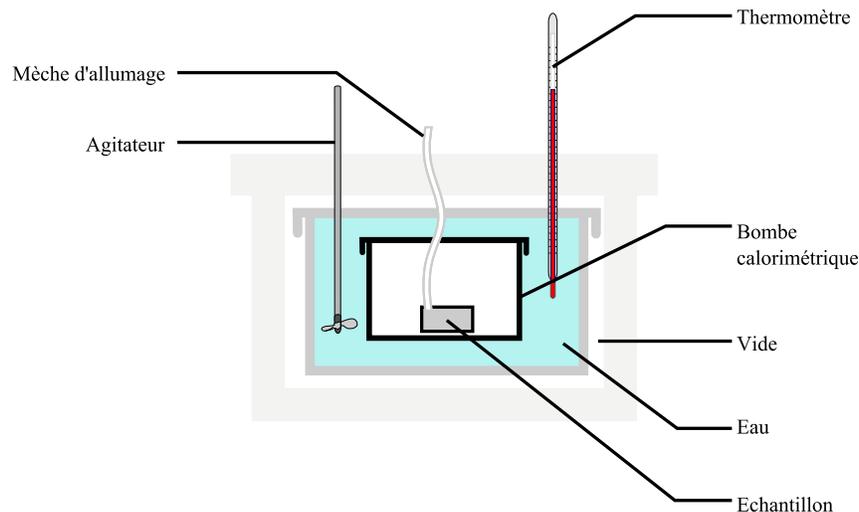


Figure 3 : vue en coupe d'un calorimètre équipé d'une bombe calorimétrique.

La notice d'utilisation de ce type d'appareil décrit la marche à suivre pour réaliser une mesure de chaleur de combustion. Le document suivant reproduit une partie de cette notice.

Mesure d'une chaleur de combustion d'un échantillon inconnu

Introduire une masse connue de l'échantillon à étudier dans la bombe calorimétrique et démarrer la combustion en enflammant la mèche. Mesurer l'élévation de température jusqu'à la combustion complète de l'échantillon. Relever l'élévation de température ΔT en fin d'expérience. Sortir l'échantillon liquide de du calorimètre et le chauffer légèrement pour chasser les gaz. Ajouter un volume $V_0 = 10,00$ mL d'une solution de soude de concentration $C_b = 0,1000$ mol.L⁻¹ et agiter vigoureusement. Titrer le mélange obtenu par une solution d'acide chlorhydrique de concentration $C_a = 0,1000$ mol.L⁻¹ et noter le volume V_E d'acide versé pour atteindre l'équivalence.

La chaleur de combustion de l'échantillon peut être calculée en tenant compte de la capacité calorifique du calorimètre C_{cal} (qui doit être déterminée par une étape de calibration de l'appareil), la chaleur de combustion de la mèche Q_m (qui est également déterminée par calibration), la chaleur d'oxydation du diazote de l'air Q_{N_2} , et l'élévation de température du système au cours de l'expérience ΔT .

Cette démarche a été appliquée avec un calorimètre adapté et les données suivantes ont été obtenues :

- Masse de l'échantillon : $m = 0,955$ g
- Élévation de température $\Delta T = 3,4804$ K
- Capacité calorifique du calorimètre déterminée par calibration $C_{cal} = 10845$ J.K⁻¹
- Chaleur de combustion de la mèche $Q_m = 60$ J
- Volume équivalent relevé pour le titrage $V_E = 5,10$ mL

Dans les conditions de l'expérience, une quantité n_{N_2} de diazote de l'air est oxydée par le dioxygène en présence de vapeur d'eau pour donner l'acide nitrique (HNO₃) à l'état liquide.

35. Ecrire les deux demi-équations d'oxydation et de réduction.
36. En déduire l'équation d'oxydo-réduction globale.
37. En quoi cette oxydation constitue-t-elle l'une des sources de pollution liée à la combustion du biodiésel ?

La chaleur associée à la transformation de n_{N_2} moles de diazote est notée Q_{N_2} par la suite.

38. Exprimer Q_{N_2} en fonction de $\Delta_f H^\circ_{H_2O(g)}$, de $\Delta_f H^\circ_{HNO_3(l)}$ et de n_{N_2} .
39. Expliquer comment le titrage réalisé en fin d'expérience permet de remonter à n_{N_2} . Exprimer n_{N_2} en fonction de V_E , V_0 , C_a et C_b .
40. Expliquer en quoi le chauffage permet de chasser les gaz. Quel gaz serait problématique pour le titrage ? Justifier.
41. Exprimer l'enthalpie de combustion de l'échantillon ΔH en fonction de ΔT , C_{cal} , Q_m et Q_{N_2} .
42. En déduire l'expression de $\Delta_{comb, massique} H^\circ_{biodiésel(l)}$, l'enthalpie de combustion massique du biodiésel, en fonction de V_E , V_0 , C_a , C_b , $\Delta_f H^\circ_{H_2O(g)}$, $\Delta_f H^\circ_{HNO_3(l)}$, ΔT , C_{cal} , Q_m et m . Calculer la valeur numérique.
43. Calculer l'enthalpie de combustion molaire du biodiésel et la comparer à la valeur trouvée de manière théorique. Commenter.

Utilisation du biodiésel dans un moteur

Lorsqu'il est utilisé comme carburant, l'énergie libérée par la combustion du biodiésel est utilisée pour faire fonctionner un moteur et ainsi faire avancer le véhicule. Si l'on considère un véhicule citadin de type Toyota Yaris, l'énergie nécessaire pour réaliser un trajet de 100 km à 90 km.h⁻¹ est de 80.10⁶ J. Pour ce type de véhicule, le rendement de transmission énergétique entre le moteur et les roues est de 40 %.

44. Calculer l'énergie libérée par la combustion d'un litre de biodiésel.
45. En déduire le volume de biodiésel nécessaire pour faire un trajet de 100 km à une vitesse de 90 km.h⁻¹.

À partir de 2020, une nouvelle réglementation entrera en vigueur dans l'Union européenne pour limiter les émissions de CO₂ à moins de 95 g.km⁻¹.

46. Calculer l'émission de CO₂ d'un véhicule type Toyota Yaris fonctionnant avec du biodiésel. Commenter.

II. Étude du comportement à basse température

Lorsque la température extérieure diminue, les propriétés physiques du biodiésel évoluent comme peut en attester la photo ci-dessous qui montre l'aspect de différents biodiésels pour une température de 35 °F soit 1,7 °C.



Figure 4 : pots de biodiésels issus de différentes huiles végétales portés à 1,7 °C.
De gauche à droite : biodiésels de colza, de carthame, de maïs, d'olive, de soja et d'arachide.

Le point de trouble d'un carburant est la température à laquelle commence la solidification, c'est-à-dire la température à laquelle apparaissent les premiers cristaux dans le liquide. Cette propriété est cruciale car le carburant ne doit pas se figer dans le réservoir lorsqu'il est soumis à des températures trop basses, notamment en hiver. Il est donc important de connaître l'évolution de cette propriété selon le biodiésel utilisé.

Mesure expérimentale du point de trouble

Une méthode peu précise mais simple pour mesurer les points de troubles est de suivre l'évolution de l'absorbance ou de la transmittance d'un échantillon en fonction de la température. Pour cela, les échantillons sont préparés et placés dans une cuve en quartz de longueur $l = 1$ cm. L'absorbance ou la transmittance de l'échantillon est alors enregistrée pour des longueurs d'onde de lumière incidente allant de 300 à 900 nm. La partie suivante traite du biodiésel issu de l'huile d'arachide et de la mesure de son point de trouble.

Les spectres UV-visible d'un échantillon de biodiésel ont été enregistrés en faisant varier la température par pas de 1 °C entre 0 et 25 °C. La superposition des spectres obtenus est présentée sur la figure 5.

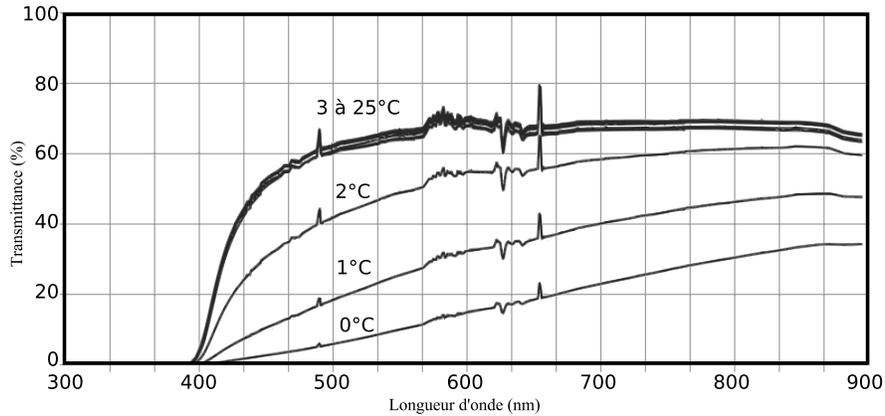


Figure 5 : spectres UV-visible d'un échantillon de biodiésel d'huile d'arachide entre 300 et 900 nm pour des températures variant entre 0 et 25 °C.

47. Décrire l'appareil qui permet d'enregistrer des spectres UV-visible, ainsi que le principe de son fonctionnement.
48. Donner l'expression de la transmittance T et de l'absorbance A en fonction de l'intensité du rayonnement incident I_0 et de l'intensité I du rayon lumineux en sortie de l'échantillon.
49. Commenter l'évolution des spectres UV-visible en fonction de la température d'étude.
50. Comment peut-on expliquer que pour les basses températures, la transmittance de l'échantillon dépende fortement de la longueur d'onde de la lumière incidente ?

Pour définir le point de trouble, les transmittances ont été relevées à une longueur d'onde de 540 nm et pour des températures comprises entre 0 et 25 °C. La figure 6 montre la courbe obtenue. Le point de trouble est défini au point d'inflexion de la courbe de transmittance.

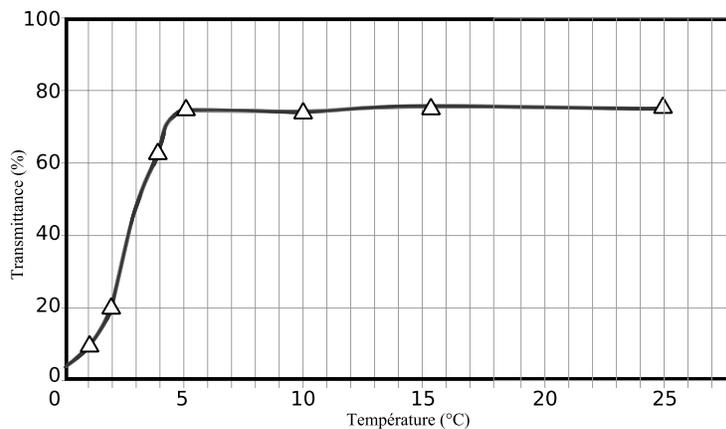


Figure 6 : transmittance de l'échantillon de biodiésel d'arachide à 540 nm en fonction de la température.

51. Commenter le choix de la longueur d'onde pour le tracé de l'évolution de la transmittance en fonction de la température.
52. Donner la valeur du point de trouble pour le biodiésel obtenu à partir de l'huile d'arachide. Commenter.

Influence de la composition en esters méthyliques d'acide gras sur le point de trouble

Afin de comprendre les disparités de points de trouble entre les biodiésels issus de plantes différentes, plusieurs équipes de recherche ont étudié l'influence de la composition des mélanges d'esters méthyliques. Des mélanges binaires de plusieurs compositions en esters méthyliques d'acides gras (EMAG) ont été préparés et leurs points de trouble ont été mesurés.

La figure 7 présente le diagramme obtenu en traçant les points de trouble pour différentes compositions du mélange binaire des EMAG 16:0 et 18:0. Les points correspondent aux mesures expérimentales tandis que la courbe correspond à la modélisation théorique de ce diagramme.

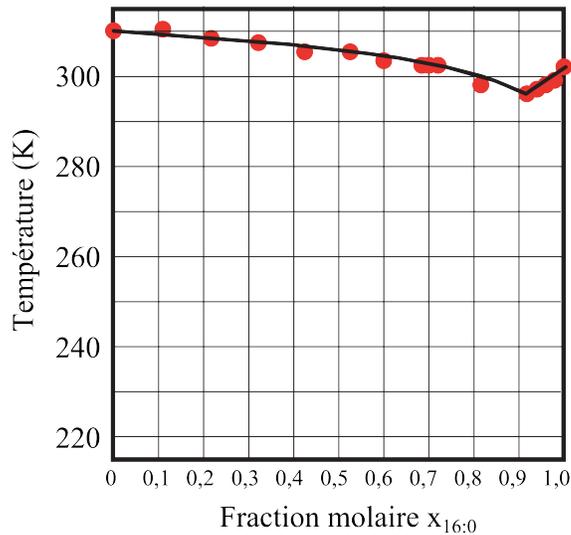


Figure 7 : diagramme binaire isobare des esters méthyliques d'acide gras (EMAG) 16:0 et 18:0.

On considérera par la suite que le diagramme binaire obtenu correspond à un mélange idéal.

53. Décrire le type de diagramme binaire obtenu ici, commenter en particulier l'existence de points caractéristiques.
54. La courbe tracée correspond-elle au *liquidus* ou au *solidus* ? Justifier.
55. Compléter le diagramme binaire en le reproduisant sur la copie. Placer les phases en présence sur chaque zone du diagramme.
56. Décrire la courbe d'analyse thermique de refroidissement obtenue pour un mélange initial contenant 20 % de l'ester 16:0 à 320 K.
57. Décrire à présent la courbe d'analyse thermique de refroidissement obtenue pour un mélange initial contenant 92 % de l'ester 16:0 à 320 K.
58. Quelle composition du mélange des deux esters permet d'abaisser le point de trouble au plus bas ? Commenter la valeur de la température obtenue.

Diminution du point de trouble par ajout d'adjuvant

En pratique, pour améliorer les points de trouble des biodiésels, il est nécessaire de les mélanger à du diésel classique et d'ajouter des adjuvants. Ainsi, pour le biodiésel issu de l'huile de colza, il est possible d'abaisser le point de trouble de $-3,3\text{ }^{\circ}\text{C}$ pour le biodiesel pur, à $-10\text{ }^{\circ}\text{C}$ pour un mélange contenant 20 % de biodiésel, 75 % de diésel et 5 % d'adjuvant. L'adjuvant peut être fabriqué directement à partir du biodiésel par une série de trois réactions. La figure 8 décrit la synthèse de l'adjuvant C à partir de l'oléate de méthyle.

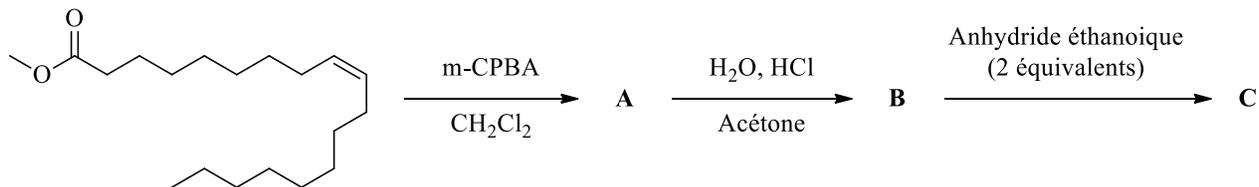


Figure 8 : formation de l'adjuvant C à partir de l'oléate de méthyle (EMAG 18:1).

59. Quelle est la configuration de la double liaison carbone-carbone de l'oléate de méthyle ?
60. Expliciter les fonctions chimiques qui sont présentes dans le m-CPBA, la structure chimique est donnée en annexe.
61. Donner la structure du composé A et détailler le mécanisme de son obtention.
62. Combien de stéréoisomères du composé A sont obtenus au cours de cette réaction ? Justifier.
63. Donner la structure du composé B et détailler le mécanisme de son obtention.
64. Détailler les stéréoisomères du composé B obtenus par cette réaction. Justifier.
65. Proposer une voie de synthèse pour obtenir deux autres stéréoisomères du composé B en une seule étape à partir de l'oléate de méthyle.
66. Donner la structure du composé C et détailler le mécanisme de son obtention.

★ ★

★

Annexes

Données :

Masses molaires ($\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$) : $M(\text{O}) = 16,0$; $M(\text{H}) = 1,0$; $M(\text{C}) = 12,0$, $M(\text{N}) = 14,0$.

$\text{pKa} : \text{H}_2\text{CO}_3/\text{HCO}_3^- = 10,3$; $\text{H}_3\text{O}^+/\text{H}_2\text{O} = 0$; $\text{H}_2\text{O}/\text{HO}^- = 14$; $\text{HNO}_3/\text{NO}_3^- = 0$.

	$T_{\text{ebullition}} (\text{°C})$	Masse molaire ($\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$)	Masse volumique ($\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$)
Huile de colza	>200	≈ 884	0,92
Biodiésel de colza	>200	≈ 296	0,88
Eau	100	18	1,0
MeOH	64,7	32	0,79
Glycérol	290	92	1,26

Tableau de miscibilités :

Miscibilité	Glycérol	Huile végétale	Biodiésel	Eau	MeOH	APTS	H_2SO_4	NaOH
Glycérol	oui	non	non	oui	oui	oui	oui	oui
Huile végétale	non	oui	oui	non	oui			
Biodiésel	non	oui	oui	non	oui			
Eau	oui	non	non	oui	oui	oui	oui	oui
MeOH	oui	oui	oui	oui	oui	oui	oui	oui
APTS	oui			oui	oui			
H_2SO_4	oui			oui	oui			
NaOH	oui			oui	oui			

Données thermodynamiques :

Enthalpies de formation à 298 K ($\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$):

$\text{CO}_{2(\text{g})}$	$\text{H}_2\text{O}_{(\text{g})}$	$\text{H}_2\text{O}_{(\text{l})}$	$\text{HNO}_{3(\text{l})}$
-393,5	-241,8	-285,8	-173,2

Energies de liaison moyennes définies pour un composé $\text{A-B}_{(\text{g})}$ à partir des composés $\text{A}_{(\text{g})}$ et $\text{B}_{(\text{g})}$ à 298 K ($\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$):

$D_{\text{H-H}}$	$D_{\text{C-H}}$	$D_{\text{C-C}}$	$D_{\text{C=C}}$	$D_{\text{C=O}}$	$D_{\text{O=O}}$	$D_{\text{C-O}}$	$D_{\text{O-H}}$
437	410	347	602	801	497	360	464

Enthalpies de changement d'état à 298 K ($\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$):

$L_{\text{sub,C}(\text{gr})}$	$L_{\text{vap,H}_2\text{O}}$	$L_{\text{vap,16:0}}$	$L_{\text{vap,18:0}}$	$L_{\text{vap,18:1}}$	$L_{\text{vap,18:2}}$	$L_{\text{vap,18:3}}$
715	40,7	96,4	106,1	106,2	107,8	110,5

