

DONNÉES THERMODYNAMIQUES

(tiré de «Chimie des milieux aquatiques» de Sigg, Behra et Stumm)

ΔG_f° , ΔH_f° ET \bar{S}° POUR LES ESPÈCES CHIMIQUES
FRÉQUEMMENT RENCONTRÉES DANS LES SYSTÈMES AQUATIQUES ^a

VALEURS DONNÉES À 25 °C, 1 ATM, ET CONDITIONS STANDARD ^b

Espèces	Formation à partir des éléments		Entropie \bar{S}° J mol ⁻¹ K ⁻¹	Références ^c
	ΔG_f° (kJ mol ⁻¹)	ΔH_f° (kJ mol ⁻¹)		
<i>Ag (Argent)</i>				
Ag (métal)	0	0	42.6	NBS
Ag ⁺ (aq)	77.12	105.6	73.4	NBS
AgBr	-96.9	-100.6	107	NBS
AgCl	-109.8	-127.1	96	NBS
AgI	-66.2	-61.84	115	NBS
Ag ₂ S(α)	-40.7	-29.4	14	NBS
AgOH(aq)	-92	—	—	NBS
Ag(OH) ₂ ⁻ (aq)	-260.2	—	—	NBS
AgCl(aq)	-72.8	-72.8	154	NBS
AgCl ₂ ⁻ (aq)	-215.5	-245.2	231	NBS
<i>Al (Aluminium)</i>				
Al (métal)	0	0	28.3	R
Al ³⁺ (aq)	-489.4	-531.0	-308	R
AlOH ²⁺ (aq)	-698	—	—	S
Al(OH) ₂ ⁺ (aq)	-911	—	—	S
Al(OH) ₃ (aq)	-1115	—	—	S
Al(OH) ₄ ⁻ (aq)	-1325	—	—	S
Al(OH) ₃ (amorphe)	-1139	—	—	R
Al ₂ O ₃ (Corindon)	-1582	-1676	50.9	R
AlOOH (Boehmite)	-922	-1000	17.8	R
Al(OH) ₃ (Gibbsite)	-1155	-1293	68.4	R
Al ₂ Si ₂ O ₅ (OH) ₄ (Kaolinite)	-3799	-4120	203	R
KAl ₃ Si ₃ O ₁₀ (OH) ₂ (Muscovite)	-1341	—	—	G
Mg ₅ Al ₂ Si ₃ O ₁₀ (OH) ₈ (Chlorite)	-1962	—	—	R

Espèces	Formation à partir des éléments		Entropie \bar{S}° J mol ⁻¹ K ⁻¹	Références ^c
	ΔG_f° (kJ mol ⁻¹)	ΔH_f° (kJ mol ⁻¹)		
CaAl ₂ Si ₂ O ₈ (Anorthite)	-4017.3	-4243.0	199	R
NaAlSi ₃ O ₈ (Albite)	-3711.7	-3935.1	—	R
<i>As (Arsenic)</i>				
As (α métal)	0	0	35.1	NBS
H ₃ AsO ₄ (aq)	-766.0	-898.7	206	NBS
H ₂ AsO ₄ ⁻ (aq)	-748.5	-904.5	117	NBS
HAsO ₄ ²⁻ (aq)	-707.1	-898.7	3.8	NBS
AsO ₄ ³⁻ (aq)	-636.0	-870.3	-145	NBS
H ₂ AsO ₃ (aq)	-587.4	—	—	NBS
<i>Ba (Baryum)</i>				
Ba ²⁺ (aq)	-560.7	-537.6	9.6	R
BaSO ₄ (Barite)	-1362	-1473	132	R
BaCO ₃ (Witherite)	-1132	-1211	112	R
<i>Be (Béryllium)</i>				
Be ²⁺ (aq)	-380	-382	-130	NBS
Be(OH) ₂ (α)	-815.0	-902	51.9	NBS
Be ₃ (OH) ₃ ³⁺	-1802	—	—	NBS
<i>B (Bore)</i>				
H ₃ BO ₃ (aq)	-968.7	-1072	162	NBS
B(OH) ₄ ⁻ (aq)	-1153.3	-1344	102	NBS
<i>Br (Brome)</i>				
Br ₂ (ℓ)	0	0	152	NBS
Br ₂ (aq)	3.93	-259	130.5	NBS
Br ⁻ (aq)	-104.0	-121.5	82.4	NBS
HBrO(aq)	-82.2	-113.0	147	NBS
BrO ⁻ (aq)	-33.5	-94.1	42	NBS
<i>C (Carbone)</i>				
C (Graphite)	0	0	152	NBS
C (Diamant)	3.93	-2.59	130.5	NBS
CO ₂ (g)	-394.37	-393.5	213.6	NBS
H ₂ CO ₃ [*] (aq) ^d	-623.2	-699.6	200.8	NBS
H ₂ CO ₃ (aq) (« vrai »)	~ -607.1	—	—	S
HCO ₃ ⁻ (aq)	-586.8	-692.0	91.2	S
CO ₃ ²⁻ (aq)	-527.9	-677.1	-56.9	NBS
CH ₄ (g)	-50.75	-74.80	186	NBS
CH ₄ (aq)	-34.39	-89.04	83.7	NBS
CH ₃ OH(aq)	-175.4	-245.9	133	NBS
HCOOH(aq)	-372.3	-425.4	163	NBS

Espèces	Formation à partir des éléments		Entropie $\bar{S}^\circ \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$	Références ^c
	$\Delta G_f^\circ \text{ (kJ mol}^{-1}\text{)}$	$\Delta H_f^\circ \text{ (kJ mol}^{-1}\text{)}$		
HCOO ⁻ (aq)	-351.0	-425.6	92	NBS
HCN(aq)	119.7	107.1	124.6	NBS
CN ⁻ (aq)	172.4	150.6	94.1	NBS
CH ₂ O	-129.7	—	—	S
CH ₃ COOH(aq)	-396.6	-485.8	179	NBS
CH ₃ COO ⁻ (aq)	-369.4	-486.0	86.6	NBS
C ₂ H ₅ OH(aq)	-181.8	-288.3	149	NBS
NH ₂ CH ₂ COOH(aq)	-370.8	-514.0	158	NBS
NH ₂ CH ₂ COO ⁻ (aq)	-315.0	-469.8	119	NBS
<i>Ca (Calcium)</i>				
Ca ²⁺ (aq)	-553.54	-542.83	-53	R
CaOH ⁺ (aq)	-718.4	—	—	NBS
Ca(OH) ₂ (aq)	-868.1	-1003	-74.5	NBS
Ca(OH) ₂ (Portlandite)	-898.4	-986.0	83	R
CaCO ₃ (Calcite)	-1128.8	-1207.4	91.7	R
CaCO ₃ (Aragonite)	-1127.8	-1207.4	88.0	R
CaMg(CO ₃) ₂ (Dolomite)	-2161.7	-2324.5	155.2	R
CaSiO ₃ (Wollastonite)	-1549.9	-1635.2	82.0	R
CaSO ₄ (Anhydrite)	-1321.7	-1434.1	106.7	R
CaSO ₄ • 2 H ₂ O (Gypse)	-1797.2	-2022.6	194.1	R
Ca ₅ (PO ₄) ₃ OH (Hydroxyapatite)	-6338.4	-6721.6	390.4	R
<i>Cd (Cadmium)</i>				
Cd (γ métal)	0	0	51.8	S
Cd ²⁺ (aq)	-77.58	-75.90	-73.2	R
Cd(OH) ₄ ²⁻ (aq)	-758.5	—	—	R
CdOH ⁺ (aq)	-284.5	—	—	R
Cd(OH) ₃ ⁻ (aq)	-600.8	—	—	R
Cd(OH) ₂ (aq)	-392.2	—	—	R
CdO (s)	-228.4	-258.1	54.8	S
Cd(OH) ₂ (précipité)	-473.6	-560.6	96.2	R
CdCl ⁺ (aq)	-224.4	-240.6	43.5	R
CdCl ₂ (aq)	-340.1	-410.2	39.8	R
CdCl ₃ ⁻ (aq)	-487.0	-561.0	203	R
CdCO ₃ (s)	-669.4	-750.6	92.5	R
<i>Cl (Chlore)</i>				
Cl ⁻ (aq)	-131.3	-167.2	56.5	NBS
Cl ₂ (g)	0	0	223.0	NBS
Cl ₂ (aq)	6.90	-23.4	121	NBS
HClO(aq)	-79.9	-120.9	142	NBS

Espèces	Formation à partir des éléments		Entropie \bar{S}° J mol ⁻¹ K ⁻¹	Références ^c
	ΔG_f° (kJ mol ⁻¹)	ΔH_f° (kJ mol ⁻¹)		
ClO ⁻ (aq)	-36.8	-107.1	42	NBS
ClO ₂ (aq)	117.6	74.9	173	NBS
ClO ₂ ⁻ (aq)	17.1	-66.5	101	NBS
ClO ₃ ⁻ (aq)	-3.35	-99.2	162	NBS
ClO ₄ ⁻ (aq)	-8.62	-129.3	182	NBS
<i>Co (Cobalt)</i>				
Co (métal)	0	0	30.04	R
Co ²⁺ (aq)	-54.4	-58.2	-113	R
Co ³⁺	134	92	-305	R
HCoO ₂ ⁻ (aq)	-407.5	—	—	NBS
Co(OH) ₂ (aq)	-369	-518	134	NBS
Co(OH) ₂ (bleu)	-450	—	—	NBS
CoO	-214.2	-237.9	53.0	R
Co ₃ O ₄ (Cobalt spinelle)	-725.5	-891.2	102.5	R
<i>Cr (Chrome)</i>				
Cr (métal)	0	0	23.8	NBS
Cr ²⁺ (aq)	—	-143.5	—	NBS
Cr ³⁺ (aq)	-215.5	-256.0	308	NBS
Cr ₂ O ₃ (Eskolaite)	-1053	-1135	81	R
HCrO ₄ ⁻ (aq)	-764.8	-878.2	184	R
CrO ₄ ²⁻ (aq)	-727.9	-881.1	50	R
Cr ₂ O ₇ ²⁻ (aq)	-1301	-1490	262	R
<i>Cu (Cuivre)</i>				
Cu (métal)	0	0	33.1	NBS
Cu ⁺ (aq)	50.0	71.7	40.6	NBS
Cu ²⁺ (aq)	65.5	64.8	-99.6	NBS
Cu(OH) ₂ (aq)	-249.1	-395.2	-121	NBS
HCuO ₂ ⁻ (aq)	-258	—	—	S
CuS (Covellite)	-53.6	-53.1	66.5	NBS
Cu ₂ S (α)	-86.2	-79.5	121	NBS
CuO (Ténorite)	-129.7	-157.3	43	NBS
CuCO ₃ • Cu(OH) ₂ (Malachite)	-893.7	-1051.4	186	NBS
2 CuCO ₃ • Cu(OH) ₂ (Azurite)	—	-1632	—	NBS
<i>e⁻ (Electron)</i>				
e ⁻	0	0	0	
<i>F (Fluor)</i>				
F ₂ (g)	0	0	202	NBS
F ⁻ (aq)	-278.8	-332.6	-13.8	NBS

Espèces	Formation à partir des éléments		Entropie \bar{S}° J mol ⁻¹ K ⁻¹	Références ^c
	ΔG_f° (kJ mol ⁻¹)	ΔH_f° (kJ mol ⁻¹)		
HF(aq)	-296.8	320.0	88.7	NBS
HF ₂ ⁻ (aq)	-578.1	-650	92.5	NBS
<i>Fe (Fer)</i>				
Fe (métal)	0	0	27.3	NBS
Fe ²⁺ (aq)	-78.87	-89.10	-138	NBS
FeOH ⁺ (aq)	-277.3	—	—	NBS
Fe ³⁺ (aq)	-4.60	-48.5	-316	NBS
FeOH ²⁺ (aq)	-229.4	-324.7	-29.2	NBS
Fe(OH) ₂ ⁺ (aq)	-438	—	—	NBS
Fe(OH) ₄ ⁻ (aq)	-659	—	—	NBS
Fe ₂ (OH) ₂ ⁴⁺ (aq)	-467.3	—	—	NBS
FeS ₂ (Pyrite)	-160.2	-171.5	52.9	R
FeS ₂ (Marcassite)	-158.4	-169.4	53.9	R
FeO(s)	-251.1	-272.0	59.8	R
Fe(OH) ₂ (précipité)	-486.6	-569	87.9	NBS
α -Fe ₂ O ₃ (Hématite) ^e	-742.7	-824.6	87.4	R
Fe ₃ O ₄ (Magnétite)	-1012.6	-1115.7	146	R
α -FeOOH (Goethite) ^e	-488.6	-559.3	60.5	R
FeOOH (amorphe) ^e	-462	—	—	S
Fe(OH) ₃ (amorphe) ^e	-699 (-712)	—	—	S
FeS (Troïlite)	-101.3	-101	60.3	R
FeCO ₃ (Sidérite)	-666.7	-737.0	105	R
Fe ₂ SiO ₄ (Fayalite)	-1379.4	-1479.3	148	R
<i>H (Hydrogène)</i>				
H ₂ (g)	0	0	130.6	NBS
H ₂ (aq)	17.57	-4.18	57.7	NBS
H ⁺ (aq)	0	0	0	NBS
H ₂ O(l)	-237.18	-285.83	69.91	NBS
H ₂ O ₂ (aq)	-134.1	-191.1	144	NBS
HO ₂ ⁻ (aq)	-67.4	-160.3	23.8	NBS
H ₂ O(g)	-228.57	-241.8	188.72	S
<i>Hg (Mercure)</i>				
Hg(l) (métal)	0	0	76.0	NBS
Hg ₂ ²⁺ (aq)	153.6	172.4	84.5	NBS
Hg ²⁺ (aq)	164.4	171.0	-32.2	NBS
Hg ₂ Cl ₂ (Calomel)	-210.8	265.2	192.4	NBS
HgO (rouge)	-58.5	-90.8	70.3	NBS
HgS (Cinabre)	-43.3	-46.7	96.2	NBS
HgI ₂ (rouge)	-101.7	-105.4	180	NBS

Espèces	Formation à partir des éléments		Entropie \bar{S}° J mol ⁻¹ K ⁻¹	Références ^c
	ΔG_f° (kJ mol ⁻¹)	ΔH_f° (kJ mol ⁻¹)		
HgCl ⁺ (aq)	-5.44	-18.8	75.3	NBS
HgCl ₂ (aq)	-173.2	-216.3	155	NBS
HgCl ₃ ⁻ (aq)	-309.2	-388.7	209	NBS
HgCl ₄ ²⁻ (aq)	-446.8	-554.0	293	NBS
HgOH ⁺ (aq)	-52.3	-84.5	71	NBS
Hg(OH) ₂ (aq)	-274.9	-355.2	142	NBS
HgO ₂ ⁻ (aq)	-190.3	—	—	NBS
<i>I (Iode)</i>				
I ₂ (Cristal)	0	0	116	NBS
I ₂ (aq)	16.4	22.6	137	NBS
I ⁻ (aq)	-51.59	-55.19	111	NBS
I ₃ ⁻ (aq)	-51.5	-51.5	239	NBS
HIO(aq)	-99.2	-138	95.4	NBS
IO ⁻ (aq)	-38.5	-107.5	-5.4	NBS
HIO ₃ (aq)	-132.6	-211.3	167	NBS
IO ₃ ⁻	-128.0	-221.3	118	NBS
<i>Mg (Magnésium)</i>				
Mg (métal)	0	0	32.7	R
Mg ²⁺ (aq)	-454.8	-466.8	-138	R
MgOH ⁺ (aq)	-626.8	—	—	S
Mg(OH) ₂ (aq)	-769.4	-926.8	-149	NBS
Mg(OH) ₂ (Brucite)	-833.5	-924.5	63.2	R
<i>Mn (Manganèse)</i>				
Mn (métal)	0	0	32.0	R
Mn ²⁺ (aq)	-228.0	-220.7	-73.6	R
Mn(OH) ₂ (précipité)	-616	—	—	S
Mn ₃ O ₄ (Hausmannite)	-1281	—	—	S
MnOOH (α Manganite)	-557.7	—	—	S
MnO ₂ (Manganate) (IV)				
(MnO _{1.7} – MnO ₂)	-453.1	—	—	S
MnO ₂ (Pyrolusite)	-465.1	-520.0	53	R
MnCO ₃ (Rhodochrosite)	-816.0	-889.3	100	R
MnS (Alabandine)	-218.1	-213.8	87	R
MnSiO ₃ (Rhodonite)	-1243	-1319	131	R
<i>N (Azote)</i>				
N ₂ (g)	0	0	191.5	NBS
N ₂ O(g)	104.2	82.0	220	NBS
NH ₃ (g)	-16.48	-46.1	192	NBS

Espèces	Formation à partir des éléments		Entropie \bar{S}° J mol ⁻¹ K ⁻¹	Références ^c
	ΔG_f° (kJ mol ⁻¹)	ΔH_f° (kJ mol ⁻¹)		
NH ₃ (aq)	-26.57	-80.29	111	NBS
NH ₄ ⁺ (aq)	-79.37	-132.5	113.4	NBS
HNO ₂ (aq)	-55.6	-119.2	153	NBS
NO ₂ ⁻ (aq)	-37.2	-104.6	140	NBS
HNO ₃ (aq)	-111.3	-207.3	146	NBS
NO ₃ ⁻ (aq)	-111.3	-207.3	146.4	NBS
<i>Ni (Nickel)</i>				
Ni ²⁺ (aq)	-45.6	-54.0	-129	R
NiO (Bunsénite)	-211.6	-239.7	38	R
NiS (Millerite)	-86.2	-84.9	66	R
<i>O (Oxygène)</i>				
O ₂ (g)	0	0	205	NBS
O ₂ (aq)	16.32	-11.71	111	NBS
O ₃ (g)	163.2	142.7	239	NBS
OH ⁻ (aq)	-157.3	-230.0	-10.75	NBS
<i>P (Phosphore)</i>				
P (α, blanc)	0	0	41.1	
PO ₄ ³⁻ (aq)	-1018.8	-1277.4	-222	NBS
HPO ₄ ²⁻ (aq)	-1089.3	-1292.1	-33.4	NBS
H ₂ PO ₄ ⁻ (aq)	-1130.4	-1296.3	90.4	NBS
H ₃ PO ₄ (aq)	-1142.6	-1288.3	158	NBS
<i>Pb (Plomb)</i>				
Pb (métal)	0	0	64.8	NBS
Pb ²⁺ (aq)	-24.39	-1.67	10.5	NBS
PbOH ⁺ (aq)	-226.3	—	—	NBS
Pb(OH) ₃ ⁻ (aq)	-575.7	—	—	NBS
Pb(OH) ₂ (précipité)	-452.2	—	—	NBS
PbO (jaune)	-187.9	-217.3	68.7	NBS
PbO ₂	-217.4	-277.4	68.6	NBS
Pb ₃ O ₄	-601.2	-718.4	211	NBS
PbS	-98.7	-100.4	91.2	NBS
PbSO ₄	-813.2	-920.0	149	NBS
PbCO ₃ (Cérusite)	-625.5	-699.1	131	NBS
<i>S (Soufre)</i>				
S (rhomboédrique)	0	0	31.8	NBS
SO ₂ (g)	-300.2	-296.8	248	NBS
SO ₃ (g)	-371.1	-395.7	257	NBS
H ₂ S(g)	-33.56	-20.63	205.7	NBS

Espèces	Formation à partir des éléments		Entropie \bar{S}° J mol ⁻¹ K ⁻¹	Références ^c
	ΔG_f° (kJ mol ⁻¹)	ΔH_f° (kJ mol ⁻¹)		
H ₂ S(aq)	-27.87	-39.75	121.3	NBS
S ²⁻ (aq)	85.8	33.0	-14.6	NBS
HS ⁻ (aq)	12.05	-17.6	62.8	NBS
SO ₃ ²⁻ (aq)	-486.6	-635.5	-29	NBS
HSO ₃ ⁻ (aq)	-527.8	-626.2	140	NBS
SO ₂ • H ₂ O(aq)	-537.9	-608.8	232	NBS
H ₂ SO ₃ (aq) (« vrai »)	~ -534.5	—	—	S
SO ₄ ²⁻ (aq)	-744.6	-909.2	20.1	NBS
HSO ₄ ⁻ (aq)	-756.0	-887.3	132	NBS
<i>Se (Sélénium)</i>				
Se (noir)	0	0	42.4	NBS
SeO ₃ ²⁻ (aq)	-369.9	-509.2	12.6	NBS
HSeO ₃ ⁻ (aq)	-411.5	-514.5	135	NBS
H ₂ SeO ₃ (aq)	-426.2	-507.5	208	NBS
SeO ₄ ²⁻ (aq)	-441.4	-599.1	54.0	NBS
HSeO ₄ ⁻ (aq)	-452.3	-581.6	149	NBS
<i>Si (Silicium)</i>				
Si (métal)	0	0	18.8	NBS
SiO ₂ (α, Quartz)	-856.67	-910.94	41.8	NBS
SiO ₂ (α, Cristobalite)	-855.88	-909.48	42.7	NBS
SiO ₂ (α, Tridymite)	-855.29	-909.06	43.5	NBS
SiO ₂ (amorphe)	-850.73	-903.49	46.9	NBS
H ₄ SiO ₄ (aq)	-1316.7	-1468.6	180	NBS
<i>Sr (Strontium)</i>				
Sr ²⁺ (aq)	-559.4	-545.8	-33	R
SrOH ⁺ (aq)	-721	—	—	NBS
SrCO ₃ (Strontianite)	-1137.6	-1218.7	97	R
SrSO ₄ (Célestine)	-1341.0	-1453.2	118	R
<i>Zn (Zinc)</i>				
Zn (métal)	0	0	29.3	NBS
Zn ²⁺ (aq)	-147.0	-153.9	112	NBS
ZnOH ⁺ (aq)	-330.1	—	—	NBS
Zn(OH) ₂ (aq)	-522.3	—	—	NBS
Zn(OH) ₃ ⁻ (aq)	-694.3	—	—	NBS
Zn(OH) ₄ ²⁻ (aq)	-858.7	—	—	NBS
Zn(OH) ₂ (s,β)	-553.2	-641.9	81.2	R
ZnCl ⁺ (aq)	-275.3	—	—	NBS
ZnCl ₂ (aq)	-403.8	—	—	NBS

Espèces	Formation à partir des éléments		Entropie \bar{S}° J mol ⁻¹ K ⁻¹	Références ^c
	ΔG_f° (kJ mol ⁻¹)	ΔH_f° (kJ mol ⁻¹)		
ZnCl ₃ ⁻ (aq)	-540.6	—	—	NBS
ZnCl ₄ ²⁻ (aq)	-666.1	—	—	S
ZnCO ₃ (Smithsonite)	-731.6	-812.8	82.4	NBS

a. La qualité des données est variable.

b. Les données thermodynamiques sont données d'après Robie, Hemingway, et Fisher et sont basées sur un état de référence des éléments dans leur état standard à 1 bar = 10⁵ Pa = 0.987 atm. Cet état de référence modifié a une influence négligeable sur les données indiquées pour les phases condensées. (Pour la phase gazeuse il ne sera indiqué que les données du National Bureau of Standard – NBS – valables pour l'état de référence = 1 atm.)

c. NBS : D.D. Wagman et al., Selected Values of Chemical Thermodynamic Properties, U.S. National Bureau of Standards, Technical Notes 270-3 (1968), 270-4 (1969), 270-5 (1971). R : R.A. Robie, B.S. Hemingway, and J.R. Fisher, *Thermodynamic Properties of Minerals and Related Substances at 298.15 K and 1 Bar (10⁵ Pascals) Pressure and at Higher Temperatures*, Geological Survey Bulletin No. 1452, Washington D.C., 1978. S : autres sources.

d. $[H_2CO_3^*] = [CO_2(aq)] + [H_2CO_3]$ « vrai ».

e. La stabilité thermodynamique des (hydr)oxydes de fer(III) dépend de leur origine et leur préparation, de leur âge et de leur surface molaire. Les valeurs pour $K_{so} = \{Fe^{3+}\}\{OH^-\}^3$ varient entre 10^{-37.3} et 10^{-43.7}. Les valeurs correspondantes pour G_f° de FeOOH_(s) varient entre -452 kJ mol⁻¹ et -489 kJ mol⁻¹ ; les valeurs pour G_f° de Fe(OH)_{3(s)} varient entre -692 kJ mol⁻¹ et -729 kJ mol⁻¹.