



**République Algérienne Démocratique et Populaire**  
**Ministère de l'Enseignement Supérieur**  
**Et de la Recherche Scientifique**

**Université Echahid Hamma Lakhdar. El Oued**  
**Faculté de la Technologie**

**Mémoire de Fin d'Etude**  
**En vue de l'obtention du diplôme de**  
**MASTER ACADEMIQUE**

**Domaine: Technologies**  
**Filière: Génie des Procédés**  
**Spécialité: Génie chimique**

**Présenté par:**  
**Nom et Prénom: Amrani Hayat**  
**Nom et Prénom: Lebssisse Chaima**

## **Thème**

**Développement de modèles QSPR pour la  
prédiction d'enthalpie de décomposition des  
composés organiques à l'aide des descripteurs  
moléculaires**

**Soutenu le 04/06/2018**

### **Devant le Jury:**

Dr Chrifa Boubekri	Président	Université d'El Oued.
Mr Issam Boudouh	Examineur	Université d'El Oued.
Mr Serouti Abdelghani	Rapporteur	Université d'El Oued

**2017/2018**

*Sommaire*

	<b>Page</b>
Sommaire	I
Remerciements	III
Dédicace	IV
Liste des tableaux	V
Liste des Figures	VI
Symbole	VII
Introduction générale	1
<b>Chapitre I</b>	
<b>Revue bibliographique</b>	<b>3</b>
I-1	les composés organiques 3
I-1-1	Les matériaux énergétiques 3
I-2	Propriétés physiques et thermodynamiques 4
I-2-1	Importance 4
I-2-2	Propriété physique 4
I-2-3	Propriété thermodynamiques 4
I-2-4	Enthalpie de formation standard 5
I-2-4-1	L'enthalpie 5
I-2-4-2	Détermination expérimental 5
I-2-4-3	Calorimétrie 5
I-2-4-4	Caractéristiques de la calorimétrie en bombe statique 6
I-2-4-4-1	Généralités 6
I-2-4-4-2	Bombe calorimétrique 7
I-2-5	Mesures d'enthalpie standard de formation en phase solide 7
I-2-6	Calcul de l'enthalpie standard de formation à partir les mesures 8
I-3	Méthodes de calculs 10
I-3-1	Méthodes de contribution de groupes 10
I-3-2	Méthode de Benson 12
I-3-2-1	Extension de la méthode de Benson à la phase liquide et à la phase solide 14
I-3-2-1-1	Méthode de Domalski et Hearing 14
I-4	Méthodes de descripteurs moléculaires 15
I-4-1	Méthode Vatani, Mehrpooya et Gharagheizi 15
<b>Chapitre II</b>	
<b>Outils et techniques utilisées</b>	<b>17</b>
II-1	Analyse quantitative de relation structure-activité 17
II-1-1	Définition de QSPR 17
II-1-2	Principe de QSPR 17
II-1-3	Les types d'apprentissages d'un modèle QSPR 18
II-2	Descripteurs moléculaires 19
II-2-1	Historique 19
II-2-2	Définition d'un descripteur 20
II-2-3	Importance des descripteurs 20
II-2-4	Bloc des descripteurs 21

II-2-4 -1	Le choix des descripteurs	22
II-2-4-1-1	Descripteurs constitutionnels	22
II-2-4-1-2	Groupe fonctionnel chiffres	23
II-2-4-1-3	Atome centrée des fragments	25
II-3	Techniques des régressions	26
II-3-1	Régression linéaire multiple (MLR)	26
II-4	Logiciel XLSTAT	28
II-4-1	Validation	29
<b>Chapitre III</b>	<b>Méthodologies, Résultats et discussions</b>	<b>30</b>
III-1	Méthodologies	30
III-1-1	Etablissement de la base de données et détermination de descripteurs moléculaires	30
III-1-2	préparation de base des données	31
III-1-3	Les Logiciels utilisés	32
III-1-3 -1	Logiciels « Hyperchem v 8.0 »	32
III-1-3-2	Récupération et stabilisation les molécules de fichier Hin	32
III-1-3-2-1	Stabilisation structure des molécules (minimisation de l'énergie)	32
III-1-3-2-2	Mécanique moléculaire	33
III-1-3-2-3	Récupération des fichiers HyperChem HIN	34
III-1-4	Calcul des descripteurs moléculaires	34
III-1-4-1	Le Logiciel « DRAGON »	35
III-1-4-1-1	DRAGON Structure	35
III-1-5	Méthodes d'analyse de données	39
III-1-5-1	Modélisation par XLSTAT	39
III-2	Résultats et discussions	41
III-2-1	Détail les résultats à base de donne globale	41
III-2-2	Analyse des résultats	46
III-2-2-1	Mise en évidence de problèmes d'estimation en détail	46
III-3	Paramètres des modèles	48
III-3-1	Cas de régression non linéaire	48
III-4	Comparaison avec la méthode de Domalski et Salmon	49
<b>Conclusion générale</b>		<b>50</b>
<b>Bibliographies</b>		<b>51</b>
<b>Annexes</b>		<b>55</b>

# Remerciements

## REMERCIEMENTS

*En premier lieu, nous avons tiens à remercier notre Dieu, qui nous a donné la force pour accomplir ce travail.*

*Nous voudrions remercier notre consultant, Mr SEROUTI ABDELGHANI pour ses explications, remarques judicieuses et conseils qui m'ont été précieux pour la réalisation de ce travail.*

*Nos vifs remerciements vont à nos très chers parents pour leurs efforts fournis et leurs conseils pendant tous nos cursus de formation.*

*En fin, nos exprime nos vifs remerciements à tous ceux qui ont contribué de près ou de loin à la réalisation de ce mémoire.*

# Dédicace

## DÉDICACE

**Nous voulons dédier ce modeste travail :**

- **Nos parents**
- **Toute la famille :Lebssisse et Amrani**
- **Tous les amis**
- **Tous le groupes 2<sup>ème</sup> Master génie chimique 2017/2018**

## *Liste des tableaux*

<b>Tableau</b>		<b>Page</b>
I-1	Energies internes standard de combustion, enthalpies standard de formation en phases solide des molécules: penta méthyl benzène, diphénylamine, 5,6-diméthylbenzimidazole et mélamine [3].	10
I-2	Décomposition en groupes de deux isomères de constitution	12
I-3	Appellations de l'atome de carbone suivant l'hybridation des orbitales atomiques	13
I-4	Résidus moyens et moyennes quadratiques obtenus sur la prévision des enthalpies standard de formation en phase solide de 1 017 molécules C <sub>x</sub> H <sub>y</sub> , C <sub>x</sub> H <sub>y</sub> O <sub>z</sub> , C <sub>x</sub> H <sub>y</sub> N <sub>w</sub> et C <sub>x</sub> H <sub>y</sub> N <sub>w</sub> O <sub>z</sub> .	14
I-5	paramètres statistiques des coefficients de l'équation de méthode Vatani, Mehrpooya et Gharagheizi [6,16].	16
II-1	Liste des blocs descripteur par le logiciel DRAGON [6].	21
II-2	présenté quelques descripteurs moléculaires en bloc des descripteurs constitutionnels [6,32].	22
II-3	présente quelques descripteurs moléculaires en bloc de groupe fonctionnel chiffres, est R: tout groupe reliées entre elles par de carbone; Al: aliphatiques; Ar: aromatique; X: halogène. [6,32].	23
II-4	présenté quelques descripteurs moléculaires en bloc des Atome Centré des fragments	25
III-1	Les descripteurs du descripteur constitutionnelle, groupe fonctionnel énumération et fragments d'atome centré.	37
III-2	Présente les coefficients d'ajustement pour chaque bloc de descripteur	41
III-3	résultat premièrement pour régression non linéaire.	42
III-4	Coefficients d'ajustement pour régression non linéaire du descripteur constitutionnelle.	44
III-5	Coefficients d'ajustement pour régression non linéaire du descripteur Fragments Atome centrée.	44
III-6	Coefficients d'ajustement pour régression non linéaire du descripteur groupe fonctionnel énumération	45
III-7	Présente La somme des coefficients pour les	46
III-8	Les valeurs du poids de l'équation III-1, pour le block des descripteurs constitutionnels.	48
III-9	Comparaison avec la méthode de Salmon et Domalski et al., des résidus moyens et obtenus sur le calcul des enthalpies standard de formation en phase solide.	49

## Liste des figures

Figures		Page
I-1	Une bombe calorimétrique. La réaction est réalisée dans un acier "bombe" rigide (photo de réelles démonté "bombe" montré à droite), et la chaleur dégagée est absorbée par l'eau environnante et d'autres pièces calorimètre. La quantité d'énergie produite par la réaction peut être calculée à partir de l'augmentation de la température.	08
I-2	Exemple de deux molécules, isomères de constitution	11
II-1	principe de la méthode QSPR	18
II-2	Illustration de la structure hiérarchique de fragments et environnements de l'atome circulaires. La région de la molécule sur laquelle le fragment est centré est montrée, avec la structure de l'arbre du fragment et le descripteur produite.	25
II-3	Représentation graphique de la régression multi-linéaire pour deux variables indépendantes $x_1$ et $x_2$ et une variable dépendante $y$ [29,37].	27
III-1	Recherche des données de particule d'après le nombre d'enregistrement CAS.	31
III-2	applique le Field Force à Composé : acide 4-méthoxy benzoïque ; Formule brute ( $C_8H_8O_3$ ) ; CAS 100-09-4	33
III-3	Forme principale du logiciel DRAGON	36
III-4	Forme des options d'enregistrement pour les descripteurs calculés	37
III-5	Fenêtre générale de logicielle XLSTAT	40
III-6	Fenêtre logicielle Xlstat (choisi la régression)	40
III-7	Régression non linéaire	41
III-8	Les graphiques de résultat premièrement pour régression non linéaire	43
III-9	Le graphe évaluation globale des résultats de représentation des enthalpies standard de formation aux descripteur constitutionnelle.	44
III-10	Le graphe évaluation globale des résultats de représentation des enthalpies standard de formation de descripteur Fragments Atome centrée.	45
III-11	Le graphe évaluation globale des résultats de représentation des enthalpies standard de formation de descripteur groupe fonctionnel énumération	45
III-12	Le graphe évaluation globale des résultats de représentation des enthalpies standard de formation de la somme de descripteur constitutionnelle, descripteur Fragments Atome centrée et groupe fonctionnel énumération.	46

**Symbole**

$\Delta H_f^\circ$  : Enthalpie de formation standard

E : l'énergie interne du système

P : la pression du système

V : le volume du système

W : le travail

q : La chaleur

Qp : la chaleur à pression constante

$q_v$  : la chaleur à volume constante

$\Delta C_U^\circ$  : Énergie de combustion dans les conditions de référence

$EE_i$  : Équivalent énergétique du système initial réel

$\Delta\theta_{corr}$  : Accroissement de température

$m_{ech}$  : Masse de l'échantillon

$\Delta U$  : variation d'énergie interne

$\Delta_c H^\circ m$  : Enthalpie standard de combustion

$\Delta_f H^\circ m$  : Enthalpie molaire standard de formation

$\Delta_f H_{s,m}^\circ$  : enthalpie molaire standard de formation en phase solide

R : constante des gaz parfaits

$\Delta_n$  : Différence du nombre de moles de produits et réactifs

$\Delta_f H^\circ g$  : Enthalpie standard de formation en phase gazeuse

$N_k$  : Nombre de groupes de type  $k$  dans la molécule

$d_{fjk}, c_{pk}, s_k$  : contributions de groupes

$s_s^\circ$  : 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

$S_{el}$  : entropie absolue des éléments formant la molécule à  $T$  et 101 325 Pa

$S_e^\circ$  : Entropie absolue d'un élément contenu dans la molécule à  $T$  et 101 325 Pa

$w_i$  : Coefficient de régression  $i= 1, 2, 3, 4, 5$  ;

**Abréviations :**

nSK : Nombre de non-H atomes ;

SCBO : Somme des ordres de liaison classique (H appauvri) ;

nO : Nombre d'atomes d'oxygène ;

nF : Nombre d'atomes de fluor ;

nHM : Nombre d'atomes lourds.

QSPR : Relation structure-propriété quantitative

QSAR : Quantitative structure-activity relationship

RLM : Régression linéaire multiple

$R^2$  : le coefficient de corrélation

RMCE : la racine de la moyenne des carrés des erreurs

MCE : la moyenne des carrés des erreurs



# **Introduction générale**

## **Introduction générale**

Les modèles QSPR (pour Quantitative Structure -Property Relationships) sont des modèles prédictifs permettant de calculer les propriétés de composés chimiques à partir de leurs seules structures moléculaires. Ils reposent sur une relation mathématique entre la propriété et des descripteurs de la structure moléculaire des composés ciblés.

Si ces modèles ont été largement utilisés pour la prédiction d'activités biologiques en toxicologie ou en pharmacologie depuis de nombreuses années, ils trouvent aujourd'hui de plus en plus d'applications pour la prédiction de propriétés physico-chimiques. L'essor de ces approches s'est même récemment accentué avec la mise en place du règlement européen REACH qui recommande l'emploi de tels modèles, une fois validés, pour l'acquisition des données nécessaires à l'enregistrement des substances chimiques.

Depuis plusieurs années, les chercheurs internationaux dans la caractérisation des propriétés physico-chimiques dangereuses, développe des modèles QSPR pour la prédiction des propriétés dangereuses (explosibilité, inflammabilité) de substances chimiques (composés nitrés, peroxydes organiques).

L'objectif de ce travail est de développer de nouveaux modèles QSPR pour la prédiction des propriétés physico-chimiques dangereuses de tels systèmes complexes. S'appuyant sur l'état de l'art des travaux antérieurs existants par ailleurs dans la littérature. Nous consoliderons les données expérimentales disponibles qui lui permettront le développement et la validation des modèles prédictifs. Il mettra en évidence des solutions techniques permettant de traiter ces spécificités de systèmes pour lesquels des adaptations méthodologiques seront nécessaires dans les différentes étapes de développement et de validation des modèles :

- ✓ Consolidation de base de données expérimentales, calculs de structures et descripteurs moléculaires (à l'aide d'outils de chimie quantique notamment) et traitement de données à l'aide d'approches statistiques.

Nous commençons le présent manuscrit, par décrire brièvement la méthodologie du plan de ce mémoire. Ce dernier est constitué de trois chapitres, qui sont abordés successivement dans ce qui suit :

On présente dans le premier chapitre, l'importance des matériaux énergétiques, l'importance des propriétés physiques et thermodynamiques (enthalpie standard de formation), et une revue bibliographique des méthodes prédictives.

## *Introduction générale*

---

Dans le deuxième chapitre, nous expliquons la méthodologie de préparation de la base de données, les étapes de méthodologie de calcul par les logiciels utilisées et consacrer à la description du dispositif des descripteurs moléculaires et les techniques utilise.

La méthode de calcul retenue est finalement décrite en détail dans le troisième chapitre est consacré à la présentation des résultats obtenus, la discussion de ces résultats ainsi leurs comparaisons avec celles obtenues par d'autre méthodes. Enfin, la technique développée est appliquée à de nombreux composés énergétiques.



**Chapitre I :**  
**Revue bibliographique**

Il est important, pour la science et l'industrie, de disposer de données fiables sur les propriétés physiques et thermodynamiques des substances. Mais la mesure de ces propriétés n'est pas facile, pour cela plusieurs chercheurs ont développé des méthodes d'estimation de ces propriétés. Ces méthodes de calcul font appel à des équations analytiques et à des contributions de groupements moléculaires.

Dans ce chapitre on présenter les définitions générales d'enthalpie de formation standard en phase solide et les méthodes de calculs.

### **I-1 les composés organiques :**

Fait intéressant, la plupart de ces composés sont constitués de carbone et de quelques autres éléments comme l'hydrogène, l'oxygène, l'azote, le phosphore, le soufre et les halogènes (fluor, chlore, brome, iode, astate). En effet, les composés organiques possèdent d'importantes propriétés physiques et chimiques dérivées du carbone lui-même et la spécialisation des quelques autres éléments, comme la résistance des structures ou l'effet de la chaleur. Dans les sections suivantes, les propriétés physiques sont associées à la structure des composés organiques tandis que les propriétés chimiques au comportement de celles-ci. Notez que ces revues organisées afin de mettre en évidence le rôle de la stabilisation de l'énergie dans les composés organiques [1].

Plus de 16 millions de composés contenant du carbone sont connus. Les chimistes fabriquent des milliers de nouveaux composés chaque année, dont certains contiennent du carbone. L'étude des composés dont les molécules contiennent du carbone constitue la branche de la chimie connue sous le nom de chimie organique. Ce terme est né de la croyance du dix-huitième siècle selon laquelle les composés organiques ne pouvaient être formés que par des systèmes vivants (c'est-à-dire organiques). Cette idée a été réfutée en 1828 par le chimiste allemand Friedrich Wöhler lorsqu'il synthétisa l'urée ( $\text{H}_2\text{NCONH}_2$ ), une substance organique retrouvée dans l'urine des mammifères, en chauffant du cyanate d'ammonium ( $\text{NH}_4\text{OCN}$ ), une substance inorganique (non-vivante) [2].

#### **I-1-1 Les matériaux énergétiques :**

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 [3,4].

**I-2 Propriétés physiques et thermodynamiques :****I-2-1 Importance :**

La connaissance des propriétés physiques et thermodynamiques des fluides ou solides est indispensable pour le fonctionnement des procédés qui utilisent par exemple les températures et pressions élevées. Pour cette raison, plusieurs littératures faites des recherches pour obtenir des méthodes d'estimation qui facilite les calculs physiques et thermodynamiques des composés organiques purs ou mélange.

Les propriétés d'une substance sont ses caractéristiques qui sont utilisées pour l'identifier ou le d'écrire. Quand nous disons que l'eau est mouillée, ou cet argent est "brillant", nous décrivons des matières quant à leurs propriétés. Les propriétés peuvent être divisées selon leurs catégories de propriétés physiques et de propriétés chimiques. Il y a deux types de base des propriétés que nous pouvons associer avec la matière, ces propriétés sont appelées des propriétés physiques et thermodynamiques [5].

**I-2-2 Propriété physique :**

Propriétés qui ne changent pas la nature chimique de la matière. La propriété physique d'une substance pure est n'importe quoi qui peut être observée sans changer l'identité de la substance. Les observations consistent habituellement en quelques types de mesures numériques, bien que quelquefois il y ait une plus qualitative (non numérique) description de la propriété. Il y a beaucoup de propriétés physiques et chaque manuel scolaire aura une liste différente d'exemples. Quelques exemples des propriétés physiques : colores, point réfrigérant, et point d'ébullition. Les propriétés chimiques sont propriétés d'un élément ou composent dans les réactions chimiques. Par exemple, le fait que le sodium réagit avec l'eau est une propriété chimique [5].

**I-2-3 Propriété thermodynamiques :**

Les propriétés thermodynamiques ont une signification pratique élevée parce qu'ils décrivent comment les changements physiques dans l'environnement d'un composé tels que la pression et la température affectent le composé et comment le composé change en retour la pression et la température de son environnement. Comme la température et la pression affectent la cinétique et l'étendue des réactions chimiques ainsi que les caractéristiques d'écoulement des produits chimiques, ces propriétés sont importantes pour l'industrie chimique [6].

**I-2-4 Enthalpie de formation standard :**

L'enthalpie standard de formation ( $\Delta H_f^\circ$ ) d'un composé est définie comme la variation d'enthalpie qui accompagne la formation d'une mole d'un composé à partir de ses éléments avec toutes les substances dans leur état standard (pression 1 atm et la température  $T = 298 \text{ K}$  ou  $25^\circ\text{C}$ ). La valeur de l'enthalpie standard de formation de ce processus ne peut pas être obtenue par mesure directe dans un calorimètre, car le processus est beaucoup trop lent dans des conditions normales. Cependant, l'enthalpie standard de formation de ce processus peut être calculée à partir des chaleurs de combustion. Ce n'est qu'un exemple de la façon dont il est utile d'être capable de calculer les enthalpies standard de formation des valeurs pour des réactions chimiques [7].

**I-2-4-1 L'enthalpie :**

L'énergie interne d'un système. Une propriété moins familière d'un système est son enthalpie  $H$ , qui est défini comme suit :

$$H = E + PV \quad I-1$$

$H$  : enthalpie

$E$  : est l'énergie interne du système

$P$  : est la pression du système,

$V$  : est le volume du système.

**I-2-4-2 Détermination expérimental :****I-2-4-3 Calorimétrie :**

Le dix-huitième siècle est donc marqué par la naissance de la calorimétrie chimique. Un certain nombre de perfectionnements ont ensuite permis de développer cette technique. 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 Pelucher, 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 la plus populaire grâce, entre autres, aux travaux de Dickinson [4]. Ce type d'appareil, bien connu aujourd'hui, a permis le développement de la technique calorimétrique et de la calorimétrie de combustion en particulier.

#### **I-2-4-4 Caractéristiques de la calorimétrie en bombe statique :**

##### **I-2-4-4-1 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. [4,9].

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.

#### **I-2-4-4-2 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 [4].

#### **I-2-5 Mesures d'enthalpie standard de formation en phase solide :**

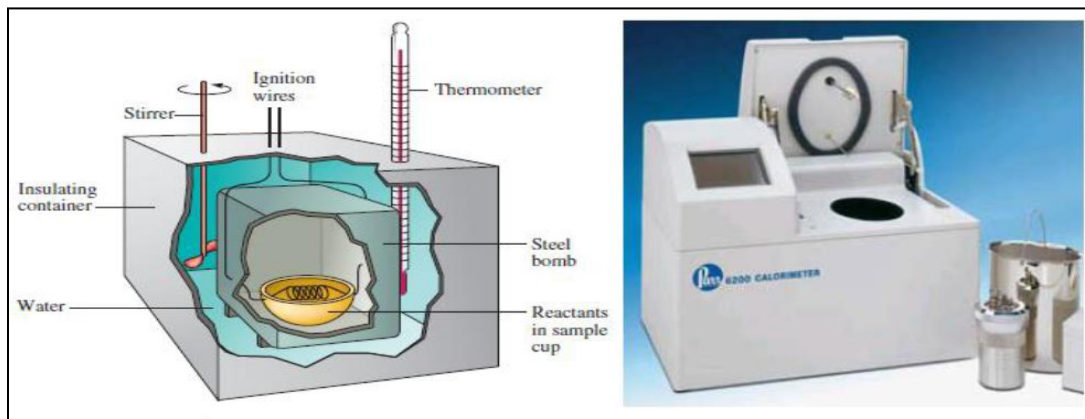
Calorimétrie expérimentée peut également être effectuée à volume constant. Pour étudier les changements d'énergie dans les réactions dans des conditions de volume constant, une "bombe calorimétrique" (Fig. I.1) est utilisée. Les réactifs pesés sont placés dans un récipient en acier rigide (la "bombe") et enflammé. La variation d'énergie est déterminée en mesurant l'augmentation de la température de l'eau et d'autres pièces des calorimètres. Pour un processus à volume constant, la variation en volume  $\Delta V$  est égal à zéro, donc le travail (qui est  $w = -P\Delta V$ ) est aussi égal à zéro. Par conséquent [7,8] :

$$\Delta H = q + w = q_v \quad \text{I-2}$$

$q$  : la chaleur

$w$  : le travail

$q_v$  : la chaleur à volume constante



**Figure I.1 :** Une bombe calorimétrique. La réaction est réalisée dans un acier "bombe" rigide (photo de réelles démonté "bombe" montré à droite), et la chaleur dégagée est absorbée par l'eau environnante et d'autres pièces calorimètre. La quantité d'énergie produite par la réaction peut être calculée à partir de l'augmentation de la température.

#### I-2-6 Calcul de l'enthalpie standard de formation à partir les mesures :

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 :

$$\Delta_c U^0 = - \frac{EE_i \times \Delta\theta_{corr}}{m_{éch}} \quad \text{I-3}$$

OU  $\Delta_c U^0$  : énergie de combustion dans les conditions de référence ;

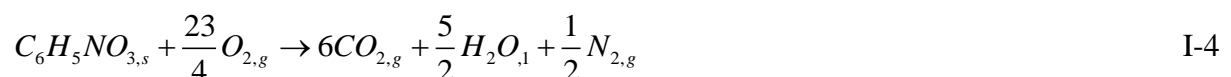
$EE_i$  : équivalent énergétique du système initial réel ;

$\Delta\theta_{corr}$  : accroissement de température ;

$m_{éch}$  : Masse de l'échantillon.

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 ayant été programmé, l'énergie interne standard de combustion du produit analysé est ensuite obtenue suivant l'équation ( $QP = \Delta E + P\Delta V$ ). A partir de cette dernière valeur, il est possible de calculer l'enthalpie standard de formation ( $\Delta_f H^\circ$ ) de la molécule considérée [4].

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



Dans ce cas :

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

Or, on sait qu'au cours d'une transformation, la variation d'enthalpie  $\Delta H$  est :

$$\Delta H = \Delta U + (P.V_{produits} - P.V_{réactifs}) \quad I-6$$

Où  $\Delta U$  : variation d'énergie interne.

S'il n'y a pas de variation de volume du système, alors :

$$\Delta H = \Delta U \quad I-7$$

Si la réaction fait intervenir des gaz parfaits, alors :

$$\Delta(PV) = RT\Delta n \quad I-8$$

$$\text{Où } \Delta n = n_{gaz\text{ produits}} - n_{gaz\text{ réactifs}}$$

De ce fait, on écrit, dans notre cas :

$$\Delta_c H_m^0 = \Delta_c U_m^0 + RT\Delta n \quad I-9$$

On en déduit donc :

$$\Delta_f H_m^0 (C_6H_5NO_{3,s}) = 6.\Delta_f H_m^0 (CO_{2,g}) + \frac{5}{2}.\Delta_f H_m^0 (H_2O_{,l}) - \Delta_c U_m^0 - RT\Delta n \quad I-10$$

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

**Exemple** : de calcul d'enthalpie de formation standard à partir des données expérimentales.

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 ci-dessous.

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. [7].

Dans le tableau ci-dessous rassemblent les valeurs expérimentales nécessaires au calcul des enthalpies standard de formation en phase solide quatre molécules étudiées est :

**Tableau I-1 :** Energies internes standard de combustion, enthalpies standard de formation en phases solide des molécules : penta méthyl benzène, diphénylamine, 5,6-diméthylbenzimidazole et mélamine [4].

No	Pentaméthyl benzène		Diphénylamine		5,6-diméthyl Benzimidazole		Mélamine	
	$\Delta_c U_m^0$ KJ.mol <sup>-1</sup>	$\Delta_c H_{s,m}^0$ KJ.mol <sup>-1</sup>	$\Delta_c U_m^0$ KJ.mol <sup>-1</sup>	$\Delta_c H_{s,m}^0$ KJ.mol <sup>-1</sup>	$\Delta_c U_m^0$ KJ.mol <sup>-1</sup>	$\Delta_c U_{s,m}^0$ KJ.mol <sup>-1</sup>	$\Delta_c U_m^\emptyset$ KJ.mol <sup>-1</sup>	$\Delta_f H_{S,m}^\emptyset$ KJ.mol <sup>-1</sup>
1	-6462.4	-142.9	-6402.9	108.7	-4956.1	-10.9	-1960.2	-81.6
2	-6463.3	-142.1	-6406.2	112	-4957.1	-9.9	-1963.7	-78
3	-6462.8	-142.6	-6403.9	109.7	-4956.8	-10.2	-1961.6	-80.2
4	-6462.6	-142.7	-6405.7	111.5	-4952.8	-14.2	-1959.7	-82
5	-6460.3	-145	-6407.8	113.6	-4954.4	-12.6	-1958	-83.8
6	-6459.4	-145.9	-6410.2	116	-4959.1	-7.9	-1961.8	-79.9
7	-6458.5	-146.8	-6409	114.8	-4963.6	-3.4	-1960.2	-81.5
8	-6461.6	-143.8	-6406.9	112.7	-4958.8	-8.2	-1960.9	-80.8
9	-6459.5	-145.8	-6407.3	113.2	-4962.9	-4.1	1960.8	-80.9
<b>V<sub>m</sub></b> *	-6461,2 ± 1,7	-144,2 ± 1,7	-6406,7 ± 2,3	112,5 ± 2,3	-4958,0 ± 3,3	-9,1 ± 3,3	-1960,8 ± 1,6	-81,0 ± 1,6

\* valeur moyenne

### I-3 Méthodes de calculs :

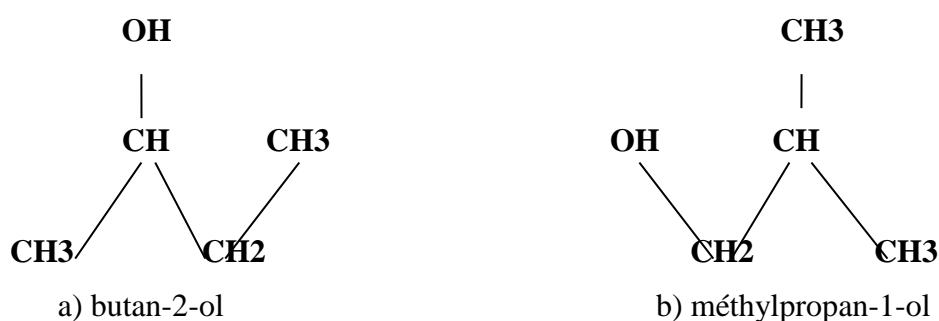
#### I-3-1 Méthodes de contribution de groupes :

Les méthodes de contribution de groupes consistent à évaluer une propriété en décomposant la molécule en un ensemble de groupes fonctionnels, et en sommant les contributions relatives à des fragments de molécules [10,11,12]. Ces contributions sont déterminées à partir d'une base d'exemples de molécules, dont les valeurs de la propriété sont connues. Plusieurs types de groupes fonctionnels peuvent être définis. Ils sont généralement organisés en un système hiérarchique :

- Les groupes d'ordre 0 sont des atomes, et le calcul d'une propriété est effectué en sommant les contributions de chacun des atomes de la molécule considérée ;

- *La décomposition en groupes d'ordre 1* consiste à découper la molécule en groupes d'atomes (tels que  $-CH_2-$ ,  $-CH_3$  ou  $-OH$ ). Leurs contributions à une propriété donnée sont sommées sans que l'environnement de chacun des groupes dans la molécule ne soit pris en considération. Ainsi, le groupe  $-CH_2-$  a une contribution fixe, qu'il soit relié à un carbone ou à un groupe oxygéné. Ces groupes sont assez souvent employés, car ils permettent d'estimer rapidement la valeur d'une propriété, avec une précision parfois suffisante (par exemple pour l'enthalpie de formation). Cependant, les résultats obtenus, pour la température d'ébullition par exemple, ne sont pas toujours satisfaisants. De plus, certains isomères peuvent conduire à la même décomposition : il est alors impossible de les distinguer par cette méthode ;
- *Les groupes d'ordre 2* sont constitués des atomes centraux de la molécule (autres que  $H$ ), accompagnés de leurs plus proches voisins, c'est-à-dire de tous les atomes auxquels ils sont reliés. Contrairement aux groupes d'ordre 1, ceux d'ordre 2 tiennent compte de l'environnement des atomes [13,14].

**Exemple.** Le Tableau (I.2) présente une comparaison des décompositions des molécules de *butan-2-ol* et *2-méthylpropan-1-ol*, représentées sur la Figure I.2. On observe que:



**Figure I-2 :** Exemple de deux molécules, isomères de constitution

Seule la décomposition en groupes d'ordre 2 permet de distinguer ces deux molécules.

**Tableau I-2** : Décomposition en groupes de deux isomères de constitution.

Méthode	Groupe	Nombre de groupe (a)	Nombre de groupe (b)
Groupe 0	C	4	4
	H	10	10
	O	1	1
Groupe 1	CH	1	1
	-CH <sub>2</sub> -	1	1
	-CH <sub>3</sub> -	2	2
	-OH	1	1
Groupe 2	C-(C)(H) <sub>3</sub>	2	2
	C-(C) <sub>2</sub> (H) <sub>2</sub>	1	0
	C-(C)(O)(H) <sub>2</sub>	0	1
	C-(C) <sub>3</sub> (H)	0	1
	C-(C) <sub>2</sub> (O)(H)	1	0

De nombreuses méthodes s'appuient donc sur des groupes des trois ordres pour améliorer la précision des prédictions et différencier les isomères. Elles sont principalement utilisées pour prédire des propriétés thermodynamiques, par exemples des propriétés critiques (température ou pression critique) et de nombreuses grandeurs énergétiques. Elles présentent également l'avantage de permettre l'estimation de propriétés de mélanges, par addition des contributions des composants du mélange [10].

### I-3-2 Méthode de Benson :

La méthode de Benson utilise des contributions de groupes de deuxième ordre (contribution des groupements fonctionnels). 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 [3,4] :

$$\Delta H_f^0 = \sum_k N_k (d_f h_k) \quad (11)$$

$$c_p^0(T) = \sum_k N_k (C_{pk}) \quad (12)$$

$$S^0 = \sum_k N_k (s_k) + S_s^0, \text{ avec} \quad (13)$$

$$S^0_S = \sum_k RLn(N_{oi}) - RLn(N_{ts}) \quad (14)$$

$$\Delta_f G^0_g = \Delta_f H^0_g - 298,15 \times (S^0 - S^0_{el}), \text{ avec} \quad (15)$$

$$S^0_{el} = \sum_e N_e (S^0_e) \quad (16)$$

où  $N_K$  : nombre de groupes de type  $k$  dans la molécule

$d_f h_k, c_{pk}, s_k$  : contributions de groupes

$S^0_S$  : 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

$S^0_{el}$  : entropie absolue des éléments formant la molécule à  $T$  et 101 325 Pa

$S^0_e$  : entropie absolue d'un élément contenu dans la molécule à  $T$  et 101 325 Pa

La relation qui nous intéresse ici est l'équation (11), 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, ...). [4].

### A-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 pseudoéléments du groupe de deuxième ordre précité [4].

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

**Tableau I-3** : Appellations de l'atome de carbone suivant l'hybridation des orbitales atomiques.

Hybridation	Type de liaison	Appellation
$sp$	Liaison simple	C
$sp^2$	Liaison double	Cd
$sp^3$	Liaison triple	Ct

Par ailleurs, CB représente un atome de carbone appartenant à un noyau benzénique et CBF un atome de carbone appartenant à un noyau benzénique, lui-même accolé à un autre noyau

benzénique. CA correspond à un atome de carbone allénique et CI 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 NI (N d'un groupement imino) et NA (N d'un groupement azo). Des pseudo-éléments polyatomiques se distinguent : CO (groupement carbonyle), CN (groupement cyano), NO (groupement nitroso) et NO<sub>2</sub> (groupement nitro). De plus, N<sub>3</sub> correspond à la fonction azidure [4].

### I-3-2-1 Extension de la méthode de Benson à la phase liquide et à la phase solide :

#### I-3-2-1-1 Méthode de Domalski et Hearing :

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, on présente dans le tableau I-4 ci-dessous, 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 [7].

**Tableau I-4 :** Résidus moyens et moyennes quadratiques obtenus sur la prévision des enthalpies standard de formation en phase solide de 1 017 molécules C<sub>x</sub>H<sub>y</sub>, C<sub>x</sub>H<sub>y</sub>O<sub>z</sub>, C<sub>x</sub>H<sub>y</sub>N<sub>w</sub> et C<sub>x</sub>H<sub>y</sub>N<sub>w</sub>O<sub>z</sub>.

Formule générale	Nombre de molécules	Résidu moyen	Moyenne quadratique
C <sub>x</sub> H <sub>y</sub>	142	26,1	51
C <sub>x</sub> H <sub>y</sub> O <sub>z</sub>	217	21,1	36,2
C <sub>x</sub> N <sub>w</sub> et C <sub>x</sub> H <sub>y</sub> N <sub>w</sub>	42	34,3	63,5
C <sub>x</sub> N <sub>w</sub> O <sub>z</sub> et C <sub>x</sub> H <sub>y</sub> N <sub>w</sub> O <sub>z</sub>	253	34,6	65,3
Total	654	28,3	53,9

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-méthyl butane 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 gauches.

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<sup>-1</sup>. 16% d'entre eux étaient compris entre 4 et 8 kJ.mol<sup>-1</sup>, et les 17% restants étaient supérieurs à 8 kJ.mol<sup>-1</sup>. 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.

#### I-4 Méthodes de descripteurs moléculaires :

##### I-4-1 Méthode Vatani, Mehrpooya et Gharagheizi :

Vatani, Mehrpooya et Gharagheizi [7,17] ont développé une méthode pour estimer l'enthalpie de formation standard. Les modèles développés sont applicables pour les composés organiques. Le principe de la technique utilisée est basé sur les descripteurs moléculaires. Dans cette méthode, étudié un nouveau modèle de QSPR pour la prédiction de  $\Delta_f H^0$  de 1115 composés organiques est présentée. Ces composés appartiennent à toutes les familles de matériaux, à la suite le modèle obtenu peut être appliqué pour la prédiction de  $\Delta_f H^0$  pour un composé. Les équations caractéristiques des modèles développés peuvent s'écrire sous la forme suivante :

$$\Delta_f H^0 = w_0 - w_1 * nSK + w_2 * SCBO + w_3 * SCBO + w_4 * nF + w_5 * nHM \quad \text{I-17}$$

Où les descripteurs moléculaires de l'équation (I-17) et sont définis comme :

$w_i$  : Coefficient de régression  $i= 1, 2, 3, 4, 5$  ;

$nSK$  : Nombre de non-H atomes ;

$SCBO$  : Somme des ordres de liaison classique (H appauvri) ;

$nO$  : Nombre d'atomes d'oxygène ;

$nF$  : Nombre d'atomes de fluor ;

$nHM$  : Nombre d'atomes lourds.

Les paramètres statistiques des coefficients de l'équation (I-17) sont présentés dans le Tableau I-5

**Tableau I-5** : paramètres statistiques des coefficients de l'équation de méthode Vatani, Mehrpooya et Gharagheizi [7,17].

No.	Variables	Coefficient de régression ( $w_i$ )	Erreurs coefficient de régression	Standard coefficient de régression
1	Constante	50.16088267	4.075696	0
2	$nSK$	-80.52012489	1.175295	3.60196
3	$SCBO$	53.64545627	0.9837223	3.593514
4	$nO$	-169.2188895	1.424115	1.061814
5	$nF$	-174.7547718	1.178939	1.047946
6	$nHM$	-266.5765885	6.857063	1.006101



**Chapitre II :**  
**Outils et techniques utilisées**

Toutes les méthodes en rédigé dans premier chapitre est utilisé les contributions des groupes, mais nous on utilise descripteurs moléculaires, pour la prévision d'un modèle mathématique pour calcule l'enthalpie standard de formation en phase solide de molécules organiques. Pour concept la prévision a ce modèle on utilise deux méthodes prédictives : régression multilinéaire (RML) et régressions non linéaires (RNL). Toutes ces les méthodes en bases aux descripteurs moléculaires comme variables.

## II-1 Analyse quantitative de relation structure-activité

### II-1-1- Définition de QSPR

Le **QSPR** (**Quantitative Structure-Property Relationships**) est le procédé par lequel des liens quantitatifs sont établis entre la structure moléculaire d'un ensemble de composés avec une propriété physico-chimique. Les grandes phases de développement d'un modèle QSPR peuvent être décrites comme suit :

- Choisir des descripteurs adaptés au problème structure-propriété,
- Exploiter les valeurs des descripteurs comme variables, afin de définir une relation qui les corrèle à la propriété en question, à l'aide de machines d'apprentissage. C'est la fouille de données.
- Établir des critères de performance et de validation qui aideront au choix des meilleurs modèles pour le problème posé et estimer des incertitudes de prédiction [18,19].

### II-1-2- Principe de QSPR

Le principe des méthodes QSPR est, comme leur nom l'indique, de mettre en place une relation mathématique reliant de manière quantitative des propriétés moléculaires aussi bien électroniques que géométriques, appelées descripteurs, avec une observable macroscopique (activité biologique, toxicité, propriété physico-chimique, etc.), pour une série de composés chimiques similaires à l'aide de méthodes d'analyses de données. Aussi la forme générale de modèle est :

$$\text{Propriété} = f(\text{Descripteurs}) \quad (\text{II.1})$$

L'objectif d'une telle méthode est donc d'analyser les données structurales afin de détecter les facteurs déterminants pour la propriété mesurée. Pour ce faire, différents types d'outils peuvent être employés : régressions multilinéaires (MLR), régressions aux moindres carrés partiels (PLS), arbres de décision, réseaux de neurones, algorithmes génétiques.

Une fois cette relation mise en place et validée sur un jeu validation, elle peut alors être employée pour la prédiction de la propriété de nouvelles molécules, pour lesquelles la valeur expérimentale n'est pas disponible, voire pour des molécules encore non synthétisées. De tels modèles peuvent également, dans certains cas, être utilisés pour mieux appréhender les phénomènes moléculaires mis en jeu dans la propriété d'intérêt [18,19].

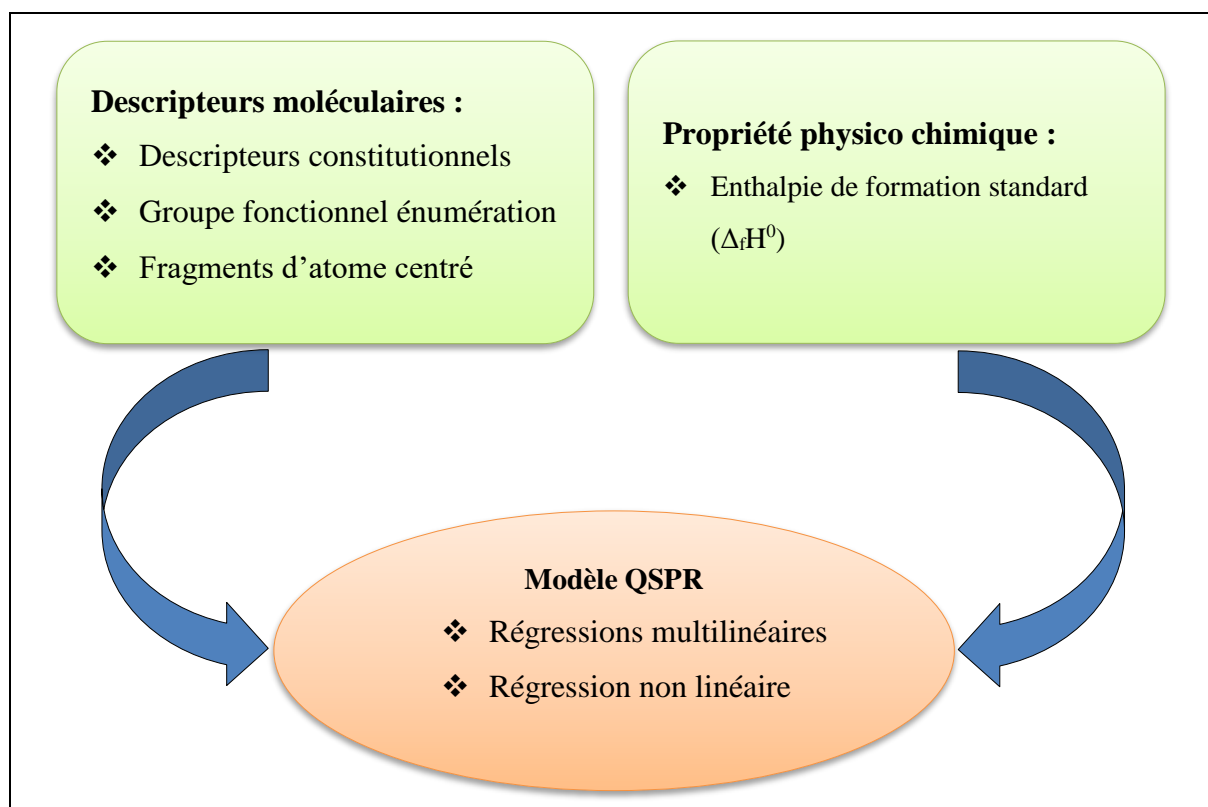


Figure II-1 : principe de la méthode QSPR.

### II-1-3- Les types d'apprentissages d'un modèle QSPR :

Les techniques d'apprentissage ont été développées en informatique ces 15 dernières années. Il y a deux types d'apprentissages :

- Non-supervisé : les activités et propriétés ne sont pas utilisés (seul les descripteurs). Ce type est utilisé pour grouper des composés chimiques.
- Supervisé : établit une relation entre données entrées / input data (composés chimiques). Et données produites output data (propriétés) [18,20].

## II-2- Descripteurs moléculaires :

### II-2-1- Historique :

L'histoire de descripteurs moléculaires est étroitement liée à l'histoire de ce qui peut être considéré comme l'un des concepts les plus importants scientifiques de la dernière partie du XIXe siècle et le siècle entier XXe siècle, qui est, le concept de la structure moléculaire.

Les années entre 1860 et 1880 ont été caractérisées par un vif débat sur le concept de la structure moléculaire, qui ressort des études sur les substances montrant isomérisation optique et les études de Kekulé (1861-1867) sur la structure du benzène. Le concept de la molécule considérée comme un corps en trois dimensions a été proposée par Boutlerov (1861-1865), Wislicenus (1869-1873), Van't Hoff (1874-1875), et Le Bel (1874). La publication en français de l'édition révisée de la chimie dans l'espace par Van't Hoff en 1875 est considérée comme un jalon important dans la conception en trois dimensions des structures chimiques.

Crum-Brown et Fraser (1868-1869) a proposé l'existence d'une corrélation entre l'activité biologique des alcaloïdes différents et leur constitution moléculaire. Plus précisément, l'action physiologique d'une substance dans un certain système biologique (F) a été définie comme une fonction (f) de son constitution chimique (C) :

$$\Phi = f(C) \quad \text{II-2}$$

Ainsi, une altération de la constitution chimique,  $\Delta C$ , se traduirait par un effet sur l'activité biologique,  $\Delta \Phi$ . Cette équation peut être considérée comme la première formulation générale d'un quantitatives structure-activité.

L'utilisation de la mécanique quantique-chimiques dans les descripteurs QSAR / QSPR modélisation remonte au début des années 1970, bien qu'ils étaient réellement conçus plusieurs années avant d'encoder des informations sur les propriétés des molécules pertinentes dans le cadre de la mécanique quantique-chimie. Pendant 1930-1960, les études pionnières qui ont marqué le début de la chimie quantique sont celles de Pauling et Coulson sur la liaison chimique, de Sanderson sur électro-négativité et de Fukui et de Mulliken sur la distribution électronique.

A la fin de 1960, beaucoup de structure-propriété ont été proposées sur la base non seulement sur les effets substituant, mais aussi sur les indices décrivant l'ensemble de la structure moléculaire. Ces indices théoriques ont été obtenus à partir d'une représentation topologique de la molécule, principalement l'application des concepts théorie des graphes, puis généralement dénommé 2D-descripteurs. Comme un prolongement naturel de la représentation topologique d'une molécule, les aspects géométriques de structures moléculaires ont été pris en

compte depuis le milieu des années 1980, conduisant au développement de la 3D-QSAR, qui exploite les informations sur la géométrie moléculaire. Descripteurs géométriques ont été obtenues à partir des coordonnées spatiales 3D d'une molécule et, parmi eux, il y avait des indices d'ombre, chargé partiel descripteurs surface, les descripteurs de W, les indices de gravité, les descripteurs de l'EVA, 3D-Morse descripteurs, des descripteurs EEVA, et les descripteurs GETAWAY.

Enfin, la communauté scientifique a été montrant un intérêt croissant ces dernières années pour le criblage virtuel et la conception de bibliothèques de composés chimiques, pour lequel plusieurs similarité / diversité des approches, des méthodes basées sur les cellules et les fonctions de notation ont été proposées principalement basé sur des descripteurs moléculaires sous-structure, comme les empreintes digitales [7,24].

### II-2-2 Définition d'un descripteur :

Le descripteur moléculaire est le résultat final d'une procédure logique et mathématique qui transforme l'information chimique chiffrée dans une représentation symbolique d'une molécule dans un nombre utile ou le résultat de quelque expérience standard.

Les descripteurs moléculaires sont les traits communs les plus considérables de structure moléculaire qui peut être utilisée pour développer la « Relation Structure – property ». Dans notre cas, la propriété est pression de vapeur ou coefficient Kow d'une molécule odorante. Beaucoup des descripteurs moléculaires ont été proposés dériver de théories différentes et approches avec le but de prédire biologique et propriétés physico-chimiques des molécules [17,22].

### II-2-3 Importance des descripteurs :

Les descripteurs moléculaires jouent un rôle fondamental en chimie, sciences pharmaceutiques, la protection de l'environnement, recherche de la santé et contrôle de qualité, être obtenu quand les molécules sont transformées dans une représentation moléculaire qui autorise quelque traitement mathématique. Les descripteurs moléculaires sont très importants pour :

- Indiquons la description de la configuration de la molécule à étudier.
- Décrivons tous les paramètres descriptifs de la molécule.

Les descripteurs moléculaires sont utilisés pour, une connaissance de statistiques, chimio métriques, et les principes des approches QSAR/QSPR sont nécessaires en plus de la connaissance spécifique du problème [17,25]

**II-2-4 Bloc des descripteurs :**

Les descripteurs moléculaires calculés par **DRAGON** sont divisés en 20 blocs logiques. Il existe quatre types de descripteurs moléculaires 0D, 1D, 2D, 3D.

- Descripteurs moléculaires 0D, 1D : il y a 5 bloc, contient de nombre d'atomes, des groupements fonctionnels, des propriétés des molécules, et les charges.
- Descripteurs moléculaires 2D : il y a 9 bloc, possède des descripteurs simples et autres dérivées des algorithmes appliqués à une représentation topologique.
- Descripteurs moléculaires 3D : il y a 6 bloc, contiens des descripteurs moléculaires dérivés d'une représentation géométrique appelé aussi descripteurs géométriques [17,23].

Actuellement, il est possible de calculer 1664 descripteurs moléculaires ont inscrit dans tableau II-1 qui peuvent être classés en 20 groups (blocs) logiques.

**Tableau II-1 :** Liste des blocs descripteur par le logiciel DRAGON [7].

No.	Descripteurs moléculaire	NDM*	No.	Descripteurs moléculaire	NDM*
1	Descripteurs constitutionnelle	48	11	Autocorrélations 2D	96
2	Profils moléculaires Randic	41	12	Descripteurs ESCAPADE	197
3	Descripteurs topologiques	119	13	Indices contiguïté Affilez	107
4	Descripteurs géométriques	74	14	Groupe fonctionnel chiffres	121
5	Marche et comptes de chemin	47	15	Charge valeurs propres	64
6	Descripteurs RDF	150	16	Fragments d'atome centré	120
7	Connectivité indices	33	17	Indices de charge topologique	21
8	Descripteurs 3D-MORSE	160	18	Descripteurs de charge	14
9	Information indices	47	19	Indices valeurs propres à base	44
10	Descripteurs WHIM	99	20	Les propriétés moléculaires	28

\* Nombre des descripteurs moléculaire

**II-2-4 -1 Le choix des descripteurs :**

Pour avoir les bons choix de descripteurs moléculaires on doit respecter les points suivants :

- 1- Les descripteurs doivent avoir une relation directe, et une description suffisante à la structure moléculaire des composés chimiques à étudier.
- 2- Les descripteurs doivent avoir des liens avec les propriétés chimiques et physiques et l'activité des composés chimiques.
- 3- La simplicité des descripteurs.
- 4- La représentation descriptive de la totalité de la structure moléculaires des composées.
- 5- La diversité (variétés) de ces descripteurs.
- 6- La sélection exacte et la distinction entre les descripteurs décisifs (principaux), et d'écarts (secondaires).
- 7- La simplicité et l'efficacité de ces descripteurs, puisque la complexité des provoque une perturbation sur les résultats d'estimation [30,31].
- 8- Il n'est pas nécessaire d'avoir des relations parfaites, entre les variables (descripteurs) prédictives, Parce qu'elles causent des difficultés sur la régression linéaire (confusion parfaite d'effets et perturbation dans l'interprétation des résultats) [30,32].

**II-2-4-1-1 Descripteurs constitutionnels :**

La manière la plus simple de représenter un système moléculaire est de considérer sa composition chimique, sans prise en compte de quelconques considérations géométriques ou électroniques.

**TableauII-2** : présenté quelques descripteurs moléculaires en bloc des descripteurs constitutionnels [7,33].

Symbole	Nom	Symbole	Nom
<i>nAT</i>	Nombre d'atomes	<i>nTB</i>	Nombre de triple liaison
<i>nSK</i>	Nombre de non-H atomes	<i>nAB</i>	Nombre de liaison aromatique
<i>nBT</i>	Nombre de liaison	<i>nH</i>	Nombre d'atomes Hydrogène
<i>nBO</i>	Nombre de non-H liaison	<i>nC</i>	Nombre d'atomes Carbone
<i>nBM</i>	Nombre de multiple liaison	<i>nN</i>	Nombre d'atomes Nitrogène
<i>ARR</i>	Aromatique ratio	<i>nO</i>	Nombre d'atomes Oxygène
<i>nCIC</i>	Nombre de rings	<i>nF</i>	Nombre d'atomes Fluorine
<i>nCIR</i>	Nombre de circuits	<i>nCL</i>	Nombre d'atomes Chlorite

<i>RBN</i>	Nombre de liaison tournant	<i>nBR</i>	Nombre d'atomes brome
<i>RBF</i>	Fraction liaison tournante	<i>nI</i>	Nombre d'atomes d'iode
<i>nDB</i>	Nombre de double liaison	<i>nB</i>	Nombre d'atomes bore

Ces descripteurs sont très couramment utilisés du fait de leur extrême simplicité non seulement d'un point de vue conceptuel mais surtout calculatoire. Ils sont notamment à la base des analyses par groupes de contribution, comme la méthode de Benson [26,34], dans laquelle l'effet des substituants est introduit sous la forme d'une valeur tabulée.

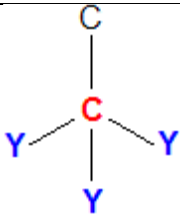
Si ce type de descripteurs est employé pour obtenir les modèles QSAR/QSPR les plus simples, ces derniers peuvent poser problème pour une bonne interprétation des mécanismes d'interaction mis en jeu pour la propriété étudiée. Par exemple, ils ne permettent pas de distinguer les isomères. Or, pour la grande majorité des propriétés, la position d'un substituant modifie la valeur expérimentale d'une propriété. Les paramètres constitutionnels sont, dans de tels cas, défaillants. Il faut alors recourir à d'autres classes de descripteurs [26,35].

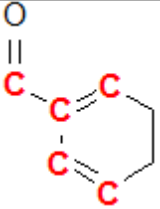
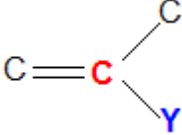
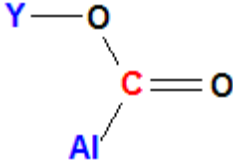
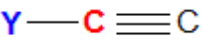
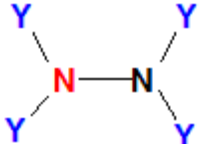
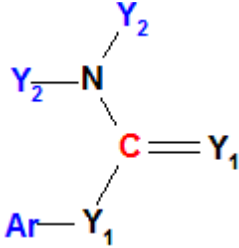
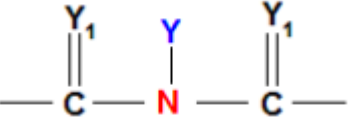
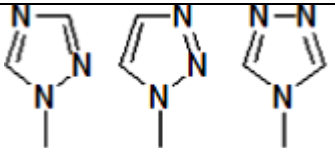
#### II-2-4-1-2 Groupe fonctionnel énumération:

Le groupe fonctionnel chiffres, peuvent être défini à l'état donné comme les groupes chimiques fonctionnels, qui sont des groupes d'atomes ayant une réactivité caractéristique et spécifique, tels que : NOH, NCOOH, NNH<sub>2</sub>, NC=O, NOCH<sub>3</sub>, NSH, NH<sub>2</sub>C=, NBENZ, ...etc. entrées dont représentent le nombre de oxydryl, carboxylic, aminic, carbonilic, methoxy, thyo, methylen, et phenyl ces groupes fonctionnels, respectivement [24].

Groupe fonctionnel chiffres par rapport à ceux des groupes constatés que statistiquement significative dans la modélisation de la liaison au récepteur est : CO<sub>2</sub>, PO<sub>4</sub>, N<sup>+</sup>, N, OH, C=O, l'éther et des groupes Thio-éther, halogènes, sp<sup>3</sup> et sp<sup>2</sup> atomes de carbone, et nombre de liaison rotatif. Et rappelons quelques-unes des descripteurs moléculaires dans le tableauII-3 suivant :

**Tableau II-3** : présente quelques descripteurs moléculaires en bloc de groupe fonctionnel chiffres, est R : tout groupes reliés entre elles par de carbone ; Al : aliphatiques ; Ar : aromatique ; X : halogène. [7,33].

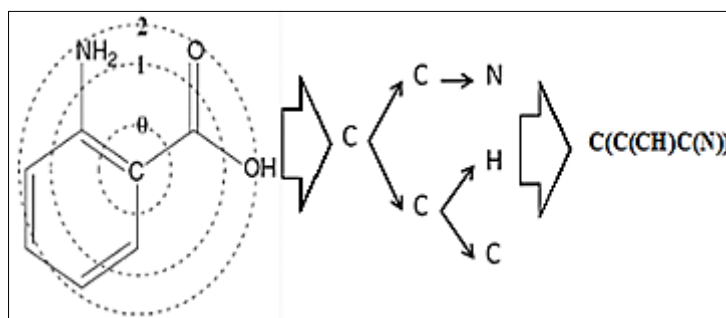
Symbole	Structure	Définition
nCp		Nombre de terminaux primaires C (SP <sup>3</sup> ) Y = aucun atome de terminal ou un groupe hétéro-aromatique (i.e. H, X, OH, NH <sub>2</sub> , etc.)

nCconj		Nombre de non-aromatiques C conjugué (SP2)
nR=C <sub>s</sub>		Nombre de secondaire aliphatique C (sp2) Y = H ou tout hétéroatome.
nRCOOR		Nombre d'esters (aliphatiques) Y = Ar ou Al (non H) Al = H ou un groupe aliphatique lié à C
nR#CH/X		Nombre de terminaux C (sp) Y = aucun atome de terminal ou un groupe hétéro-aromatique (i.e. H, X, OH, NH2, etc.)
nN-N		Nombre de N hydrazines Y = C ou H
nArOCON		Nombre de (Thio-) carbamates (aromatiques) ; Y1 = O ou S ; Y2 = H ou un groupe aliphatique ou aromatique, liés par un atome ; Ar = groupe aromatique liés par un atome.
nN(CO)2		Nombre d'imides (Thio-) Y = H ou C    Y1 = O ou S
nTriazoles		Nombre de triazoles

### II-2-4-1-3 Atome centrée des fragments :

Atome centré des fragments se compose d'un seul atome central entouré par un ou plusieurs coquilles d'atomes séparés de la centrale de la même distance topologique. Ce type de fragments de structure a été introduit dans le début des années 1950 par Tatevskii, puis par Benson pour prédire certaines propriétés physico-chimiques des composés organiques dans le cadre de régimes d'additifs [7,36].

L'atome s'est concentré fragments hiérarchiques de molécules, illustrés au-dessous dans Figure II.2, forment une classe supplémentaire de descripteur sous-structurel [6,36].



**Figure II.2:** Illustration de la structure hiérarchique de fragments et environnements de l'atome central. La région de la molécule sur laquelle le fragment est centré est montrée, avec la structure de l'arbre du fragment et le descripteur produit.

On rappelle quelques-unes des descripteurs moléculaires dans le tableau II-4 suivant :

**Tableau II-4 :** présenté quelques descripteurs moléculaires en bloc des Atome Centrée des fragments [7,33].

Symbole	Nom	Symbole	Nom
C-001	$CH_3R / CH_4$	C-022	#CR / R=C=R
C-002	$CH_2R_2$	C-023	#CX
C-004	$CR_4$	H-051	H attached to Alfa-C
C-005	$CH_3X$	H-052	H attached to C0(sp3) with 1X attached to next C
C-006	$CH_2RX$	H-053	H attached to C0(sp3) with 2X attached to next C
C-007	$CH_2X_2$	O-056	Alcool
C-008	$CHR_2X$	O-057	Phénol / émol / carboxyle OH
C-009	$CHRX_2$	O-058	O=
C-010	$CHX_2$	O-059	Al-O-Al

C-011	$CR_3X$	O-061	O--
C-012	$CR_2X_2$	N-074	R#N / R=N-
C-013	$CRX_3$	N-075	R--N--R / R--N—X
C-021	#CH	N-078	Ar-N=X / X-N=X

### II-3-Techniques des régressions :

Depuis 1964, l'année de l'approche qui présente un QSPR est née grâce à la contribution du groupe, et dans les dernières années il utilise les descripteurs moléculaires. La plupart des modèles ont été construits QSPR en utilisant une technique de régression multivariée.

L'analyse de régression établit une corrélation entre une variable dépendante représentant la propriété chimique et plusieurs variables indépendantes, qui sont, les descripteurs (prédicateurs). Cette corrélation est le plus souvent exprimée sous la forme d'une régression linéaire ou non linéaire [30].

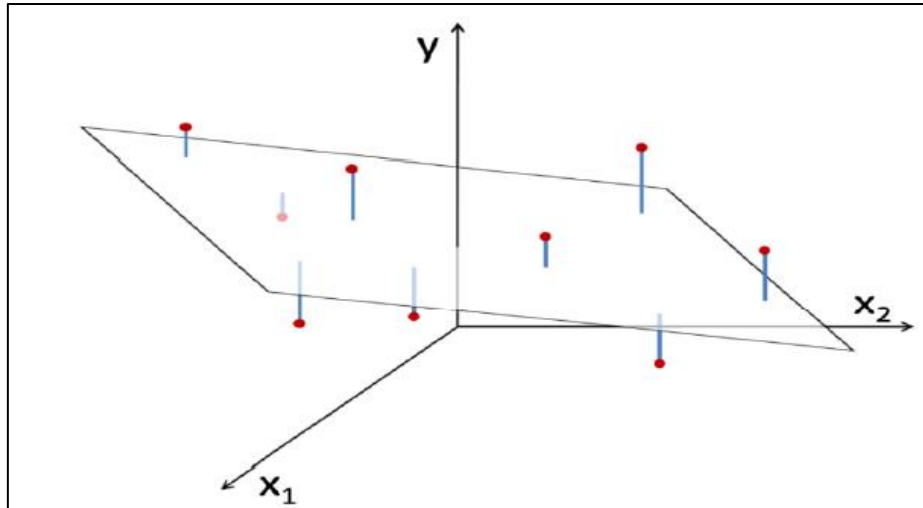
#### II-3-1 - Régression linéaire multiple (MLR) :

La régression multilinéaire (MLR) est la méthode la plus simple et la plus communément employée pour le développement de modèles prédictifs [30,38]. Elle repose sur l'hypothèse qu'il existe une relation linéaire entre une variable dépendante  $y$  (ici, la propriété physico-chimique) et une série de  $n$  variables indépendantes  $x_i$  (ici, les descripteurs moléculaires). L'objectif est d'obtenir une équation de la forme suivante :

$$y = a_0 + a_1X_1 + a_2X_2 + \dots + a_nX_n \quad (\text{II.3})$$

Où  $a_i$  sont les coefficients de la régression.

La Figure II.3 donne une représentation graphique de la méthode pour deux variables dépendantes. Il s'agit en fait de définir le plan au plus proche de tous les points de l'espace (au sens des moindres carrés). Pour  $n$  variables, il s'agira d'un hyperplan d'ordre  $n$ .



**Figure II.3:** Représentation graphique de la régression multilinéaire pour deux variables indépendantes  $x_1$  et  $x_2$  et une variable dépendante  $y$  [30,38].

La détermination de l'équation (II.1) se fait alors à partir d'une base de données de  $p$  échantillons pour laquelle à la fois les variables dépendantes et la variable indépendante sont connues. Il s'agit donc de considérer un système de  $p$  équations.

$$\begin{aligned}
 Y_1 &= a_0 + a_1 X_{1,1} + a_2 X_{2,2} + \dots + a_n X_{n,1} + \varepsilon_1 \\
 Y_2 &= a_0 + a_1 X_{1,2} + a_2 X_{2,2} + \dots + a_n X_{n,2} + \varepsilon_2 \\
 Y_p &= a_0 + a_1 X_{1,p} + a_2 X_{2,p} + \dots + a_n X_{n,p} + \varepsilon_p
 \end{aligned}
 \tag{II-4}$$

Où les résidus  $\varepsilon_i$  représentent l'erreur du modèle, constituée par l'incertitude sur la variable dépendante  $y_i$  d'une part, sur les variables indépendantes  $x_i$  d'autre part, mais aussi par les informations contenues dans les variables indépendantes mais non exprimées via les variables dépendantes.

Ce système d'équations peut être écrit sous la forme matricielle suivante :

$$\begin{pmatrix} Y_1 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ Y_p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & X_{1,1} & \dots & X_{n,1} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 1 & X_{1,p} & \dots & X_{n,p} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ a_p \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \varepsilon_1 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \varepsilon_p \end{pmatrix}
 \tag{II-5}$$

Soit de manière condensée :

$$Y = XA + \varepsilon
 \tag{II-6}$$

La méthode consiste alors à choisir les coefficients du vecteur A en faisant en sorte de minimiser la somme des carrés des écarts entre les valeurs prédites et les valeurs réelles sur l'intégralité de la base de données et ceci sous couvert de certaines hypothèses de départ.

En premier lieu, les variables indépendantes  $X_i$ , comme leur nom l'indique, sont supposées indépendantes entre elles et leur incertitude est négligeable. Ensuite, les différents échantillons  $y_i$  sont supposés indépendants entre eux et suivent une distribution normale. L'erreur  $\varepsilon$  est elle-même supposée suivre une distribution normale, centrée en 0.

Enfin, par nature, la dépendance de y vis-à-vis des xi est supposée linéaire.

La valeur prédite de la variable dépendante est alors :

$$\hat{Y} = \hat{a}_0 + \hat{a}_1 x_{1,i} + \dots + \hat{a}_n x_{n,i} \tag{II-7}$$

Les résidus peuvent donc être définis comme la différence entre les valeurs prédites et observées de y.

$$\varepsilon_i = y_i - \hat{y}_i \tag{II-8}$$

Il s'agit alors de trouver les coefficients  $\hat{a}_i$  afin de minimiser la somme des carrés de ces résidus pour l'intégralité de la base de données.

$$\begin{aligned} \min \left[ \sum (\varepsilon_i)^2 \right] &= \min \left[ \sum (y_i - \hat{y}_i)^2 \right] = \min \left[ \sum (y_i - a_0 - a_1 x_{1,i} - \dots - a_n x_n)^2 \right] \\ &= \min (Y - X A)^T (Y - X A) \end{aligned} \tag{II-9}$$

Les coefficients peuvent être obtenus à partir de l'équation matricielle suivante :

$$\hat{A} = (X^T X)^{-1} X^T Y \tag{II-10}$$

Bien entendu, la régression multilinéaire souffre de certains désavantages.

Le principal découle de sa linéarité. Elle est donc défailante pour la mise en évidence de dépendances non-linéaires. Cela dit, elle n'en reste pas moins une méthode simple et efficace dans la plupart des cas. De plus, pour peu que les variables indépendantes soient choisies de manière raisonnée, les équations obtenues peuvent être interprétées d'un point de vue phénoménologique.

**II-4-Logiciel XLSTAT :**

XLSTAT est un logiciel très fiable et très stable. XLSTAT nous permet de réorganiser nos données et de les structurer afin de faciliter leur analyse.

Avec XLSTAT l'analyse en composantes principales (ACP) et l'analyse des correspondances (AFC) deviennent faciles, de même que la régression linéaire (simple ou multiple), La régression logistique ou non-linéaire ou que l'ANOVA (analyse de variance). L'ensemble des résultats étant publié sur des feuilles Excel, il nous sera très facile de les réutiliser dans d'autres analyses.

XLSTAT nous donne accès à un grand nombre de tests. Les résultats des tests comprennent une interprétation explicite.

XLSTAT offre une large variété de tests statistiques pour que nous permette de tester des hypothèses.

XLSTAT nous permet d'évaluer la qualité de nos données, et détermine les erreurs de calcul (écarts + résidus), ce que nous aide d'améliorer notre travail.

Les résultats des essais incluent une première conclusion de niveau pour soulager notre interprétation.

XLSTAT inclut quelques outils qui facilitent la visualisation des données.

XLSTAT-3D Plot laisse créer des visualisations saisissantes de nos données [30,39].

#### II-4-1-Validation

Coefficients et tests statistiques standard.

Afin de déterminer la qualité d'un modèle, différents indicateurs statistiques sont employés. Le plus répandu d'entre eux est le coefficient de corrélation  $R^2$  qui évalue la part de la variance expliquée par le modèle [26].

$$R^2 = 1 - \frac{\sum (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum (y_i - \bar{y})^2} \tag{II-11}$$

Où  $\bar{y}$  est la valeur moyenne des valeurs prédites.

Plus la valeur de  $R^2$  sera proche de 1 (cas idéal)

**RMCE** : la racine de la moyenne des carrés des erreurs

$$RMCE = \sqrt{MCE} = \sqrt{\frac{1}{w-p} \sum_{i=1}^n w_i (y_i - \hat{y}_i)^2} \tag{II-12}$$



**Chapitre III :**  
**Méthodologies, Résultats et**  
**discussions**

Dans les chapitres précédents, on a parlé des méthodes prédictives et leur importance pour le calcul des propriétés physique et thermodynamiques, on a détaillé la méthodologie de développement de la nouvelle méthode, et on a expliqué les étapes de régression.

Dans ce chapitre on va présenter quelques résultats de régression des données expérimentales aux modèles proposés, obtenus par le logiciel XLSTAT, ainsi que la comparaison entre les qualités de prédiction des modèles des propriétés entre eux, et la qualité de prédiction entre les modèles des propriétés de la récente méthode et les modèles des autres méthodes .pour cela , on a utilisé deux formes de présentation des résultats, sont les résultats sous forme des tableaux et sous forme des figures.

### **III-1 Méthodologies**

#### **III-1-1 Etablissement de la base de données et détermination de descripteurs moléculaires**

Le modèle QSPR, par sa construction, est très dépendant des données expérimentales de référence. Le choix de la base de données est donc un point critique de son développement. Dans la plupart des cas, les données expérimentales sont issues de la littérature.

Pour être de qualité, une base de données doit être composée de données expérimentales aussi fiables que possible, puisque les barres d'erreurs sur celles-ci se propageront dans le modèle final, étant donné que les paramètres de ce dernier sont ajustés par rapport à ces données. Il est donc important de choisir des données présentant des incertitudes faibles afin de limiter les barres d'erreur expérimentales. En effet, un modèle ne pourra être plus robuste statistiquement que les données théoriques à partir desquelles il a été développé.

De plus, les données doivent être obtenues suivant un protocole expérimental unique. En effet, les conditions expérimentales ont, en général, une forte influence sur les valeurs obtenues. La définition de la propriété en termes de conditions expérimentales est d'ailleurs un point important de la démarche.

Tant que faire se peut, la base de données doit également être caractéristique de l'éventail des valeurs que la propriété peut rencontrer, puisque c'est en partie sur ce critère que sera déterminé le domaine d'applicabilité du modèle final. D'une manière générale, plus ce dernier sera grand, plus des modèles prédictifs sur une large gamme de valeurs pourront être attendus [7,26]

### III-1-2 préparation de base des données :

Premièrement la base de données brute est sous forme de CAS : Dans cette partie, toutes les valeurs des propriétés expérimentales ont été obtenues de la Banque de données du labo de génie de procédés. Le nombre des composés est atteint 858 constituants, présent de nombreux familles chimiques à savoir (acides, esters, composés oxygénés polyfonctionnels, alcools).

Deuxièmement on recherche des valeurs d'enthalpie standard de formation à partir des CAS et les structures moléculaires on registre sous forme 2DMol Figure III-1. Les enthalpies standard de formation en phases 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 [4].

Ce recueil, très complet et faisant référence, comprend exclusivement des valeurs issues de données thermochimiques expérimentales de substances prises dans leur état standard, à  $T=298,15\text{K}$ . Pour ce qui est des solides, l'état standard correspond à l'état de la substance pure sous  $P=101\,325\text{ Pa}$ .

NIST (National Institute of Standards and Technology) Chemistry WebBook (Figure III-1) [40].

L'ensemble de ces valeurs est présenté dans le tableau A-1 (Annexe). Celui-ci contient des données a 856 molécules.

Les valeurs expérimentales d'enthalpies de formation en phase solide dans le tableau A-1, sont des valeurs moyennes.

The image displays two screenshots of the NIST Chemistry WebBook interface. The left screenshot shows the main page 'WebBook de Chimie NIST, SRD 69' with search options. The right screenshot shows the search results page for a specific CAS number, displaying a list of data types to be retrieved.

**WebBook de Chimie NIST, SRD 69**

Rechercher des données de particule d'après le nombre d'enregistrement CAS

1. Entrez un numéro enregistrement (par exemple, 74-82-8):

2. Sélectionner l'unité désirée pour les données thermodynamiques:  
 SI  basé-calorie

3. Sélectionner le type(s) désiré des données:

Données Thermodynamiques	Autres Données
<input checked="" type="checkbox"/> Phase Gazeuse	<input type="checkbox"/> Spectre IR
<input checked="" type="checkbox"/> Phase condensée	<input type="checkbox"/> Spectre THz IR
<input checked="" type="checkbox"/> Changement de phase	<input type="checkbox"/> Spectre de Masse
<input checked="" type="checkbox"/> Réaction	<input type="checkbox"/> Spectre UV/Vis
<input checked="" type="checkbox"/> Énergies ioniques	<input type="checkbox"/> Chromatographie en phase gazeuse
<input checked="" type="checkbox"/> Groupes ioniques	<input type="checkbox"/> Niveaux d'énergie vibrationnelle & électronique
	<input type="checkbox"/> Constantes des molécules diatomiques
	<input type="checkbox"/> Loi d'Henry

4. Cliquez ici pour lancer la recherche:

**NIST** National Institute of Standards and Technology  
WebBook de Chimie NIST, SRD 69

Recherche ▼ Données NIST ▼ À propos ▼

### Naphthalene, 1,2,3,4-tetrahydro-2-(1-naphthalenylmethyl)-

- Formule:  $C_{21}H_{26}$
- Poids moléculaire: 272.3835
- Identifiant Chimique Internationale IUPAC:
  - InChI=1S/C21H26/c1-2-8-19-14-16(12-13-17(19)6-1)15-20-18-5-9-18-7-3-4-11-21(18)20/h1-11,16H,12-15H2
  - Télécharger l'identifiant dans un fichier.
- IUPAC InChIKey: PKYDLTUAIBQLBN-UHFFFAOYSA-N
- Numéro d'enregistrement CAS: 56818-06-5
- Structure Chimique:

Cette structure est également disponible sous forme de fichier Mol 2d ou sous forme de computed fichier SD 3d.

- D'autres noms: 1,2,3,4-Tetrahydro-1,2-dinaphthylmethane
- Information on this page:
  - Condensed phase thermochemistry data
  - References

### Condensed phase thermochemistry data

Go To: Top, References, Notes

Data compilation copyright by the U.S. Secretary of Commerce on behalf of the U.S.A. All rights reserved.

Data compiled by: H.V. Akeely, J.F. Liebman, and S.E. Stein

Quantity	Value	Units	Method	Reference	Comment
$\Delta H_f^\circ$ solid	44.1 ± 1.8	kJ/mol	Ccb	Doussin, Scott, et al., 1976	crystal phase

Quantity	Value	Units	Method	Reference	Comment
$\Delta H_f^\circ$ solid	-11186.2 ± 1.5	kJ/mol	Ccb	Doussin, Scott, et al., 1976	crystal phase; Corresponding $\Delta H_f^\circ$ gas = 44.18 kJ/mol (simple calculation by NIST; no Washburn corrections)

### References

Go To: Top, Condensed phase thermochemistry data, Notes

Data compilation copyright by the U.S. Secretary of Commerce on behalf of the U.S.A. All rights reserved.

Doussin, Scott, et al., 1976  
Doussin, D.P.; Scott, D.W.; Good, W.D.; Osborn, A.G., *Thermodynamic properties of organic compounds and thermodynamic properties of fluids*, Gov. Rep. Announce. Index U.S., 1976, 76, 97. [all data]

Figure III-1 : Recherche des données de particule d'après le nombre d'enregistrement CAS.

### III-1-3 Les Logiciels utilisés :

#### III-1-3 -1 Logiciels « Hyperchem v 8.0 » :

HyperChem rassemble dans une même interface un ensemble d'outils dédiés à la modélisation moléculaire, qui est connu pour sa qualité, flexibilité, et facilité d'usage.

#### ➤ Fonctionnalités :

HyperChem est le logiciel qui vous permet de faire réellement de la modélisation : il possède plus de méthodes de calculs (mécanique moléculaire, semi-empirique et ab-initio) pour que vous puissiez calculer plus de propriétés.

Hyperchem est utilisé dans cette étude pour construire et optimiser les molécules, chaque molécule est enregistrée comme un fichier nommé "Hin" après l'optimisation. Nous avons utilisé la méthode semi empirique MM+ pour l'optimisation. On a 856 molécules donc on obtient 856 fichiers Hin, en suite en va calculer les descripteurs moléculaires à partir de ce fichier par logiciel DRAGON pour chaque molécule [30].

### III-1-3-2- Récupération et stabilisation les molécules de fichier Hin


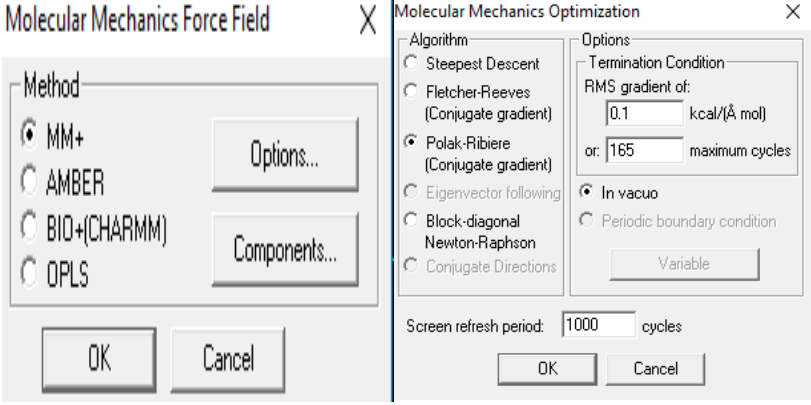
#### III-1-3-2-1 Stabilisation structure des molécules (minimisation de l'énergie)

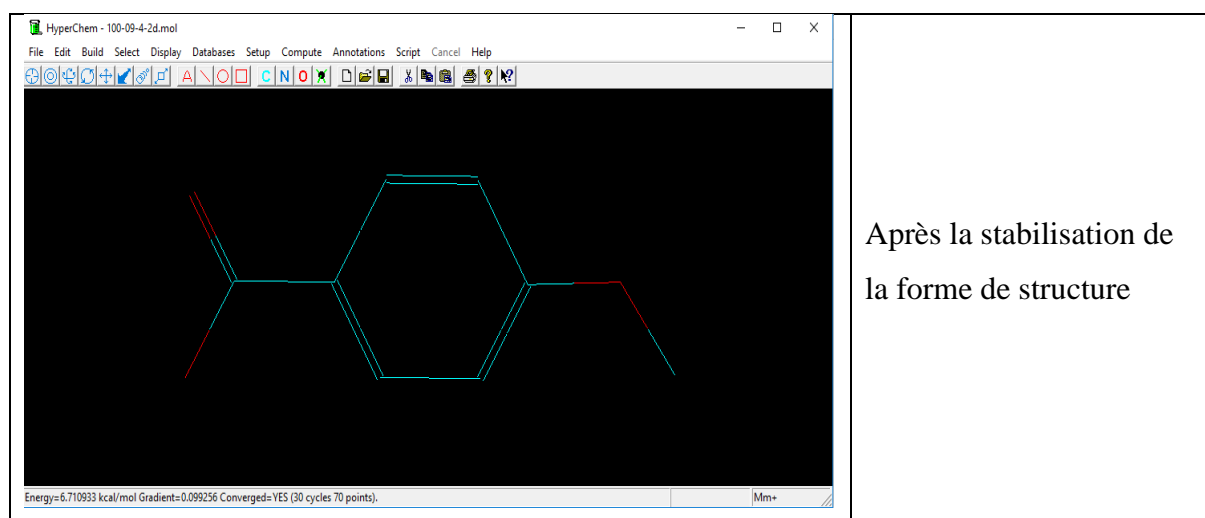
Pour stabilise forme de structure de chaque molécule ou minimisation de l'énergie on utilise le HyperChem, pouvez effectuer une minimisation de l'énergie (ou de la géométrie d'optimisation) d'une molécule en utilisant une variété de méthodes de calcul. Les deux mécanismes moléculaires et les méthodes semi-empiriques sont disponibles. Minimisation de l'énergie modifie la géométrie ou la forme d'une molécule d'abaisser l'énergie potentielle de la molécule et pour donner une conformation plus stable.

### III-1-3-2-2 Mécanique moléculaire :

Champs de force mécanique moléculaire utiliser les équations de la mécanique classique pour décrire les surfaces d'énergie potentielle et des propriétés physiques des molécules. Une molécule est décrite comme une collection d'atomes qui interagissent les uns avec les autres par de simples fonctions analytiques. Cette description est appelée un champ de force. Une composante d'un champ de force est l'énergie résultant de la compression et l'étirement d'un caoutchouc [25].

HyperChem comprend quatre haut-mécanique moléculaire des champs de force : de nouvelles implémentations de techniques élaborées et publiées par des groupes de recherche respectés Mais nous dans ce travail on concentre à méthode MM+ de caractéristiques Field Force présente dans figure suivante :

	<p>Avant la stabilisation de la forme de structure</p>
	<p>Choisi une méthode de Field Force et active l'optimisation</p>



**Figure III-2** : applique le Field Force à Composé : acide 4-méthoxy benzoïque ; Formule brute  $C_8H_8O_3$  ; CAS : 100-09-4.

### III-1-3-2-3 Récupération des fichiers HyperChem HIN :

Une fois que vous avez construit une structure en HyperChem, vous pouvez l'enregistrer pour une utilisation ultérieure. C'est une bonne idée puisque cela vous fait gagner du temps si vous voulez revoir votre structure à une date ultérieure. Pourquoi construire deux fois ?! Vous pouvez le faire en allant dans Fichier et Enregistrer. Vous devez lui donner un nom comme Hin. Le fichier peut être rappelé pour la visualisation et la manipulation à une date ultérieure. Enregistrez-le dans le dossier public dans le répertoire approprié. Dans le calcul de descripteurs moléculaires, les structures chimiques des composés optimisés sont nécessaires. Les structures chimiques de tous les 856 composés dans notre jeu de données, ont été établies dans le logiciel HyperChem, et pré-optimisés en utilisant le champ avant MM + mécanique.

### III-1-4 Calcule des descripteurs moléculaires :

Afin d'exploiter au maximum les informations contenues dans les structures moléculaires, celles-ci sont traduites en une série de grandeurs (en général scalaires) qui quantifient leurs caractéristiques physico-chimiques et structurelles. Dans la prochaine étape pour tous les 858 composés, descripteurs moléculaires ont été calculés par le logiciel Dragon. Dragon peut calculer 1664 descripteurs moléculaires pour chaque structure dans notre jeu des données.

### **III-1-4-1 Le Logiciel « DRAGON » :**

Le logiciel DRAGON a été conçu pour fournir à l'utilisateur une variété de descripteurs moléculaires dérivés de différentes représentations moléculaires, permettant à l'utilisateur de choisir les descripteurs moléculaires qui conviennent le mieux à sa recherche spécifique. La première version de DRAGON a été développée en 1994 par Milano Chemometrics et QSAR Research Group sous le nom de "WHIM / 3D QSAR", étant spécifique pour le calcul des descripteurs WHIM [40,41]. Successivement, beaucoup d'autres descripteurs ont été mis en place pour aboutir à un nouveau logiciel qui, en 1997, a fourni environ 600 descripteurs et a été publié sous le nom de DRAGON. Depuis 1997, DRAGON a été régulièrement mis à jour par des inclusions de nouveaux descripteurs moléculaires afin de faire avancer la recherche dans QSAR et de nouveaux algorithmes pour optimiser les performances de précision et de temps ainsi que sa capacité à lire différents formats de fichiers moléculaires.

En fait, DRAGON [41.43] permet le calcul de 1664 descripteurs moléculaires et il est conçu pour fonctionner à la fois pour les systèmes Windows et Linux. Il existe deux versions pour Windows, DRAGON Professional, qui ne peut fonctionner qu'en mode autonome et DRAGON plus, qui peut fonctionner à la fois en mode autonome et en arrière-plan. Pour Linux, il n'existe qu'une seule version, appelée DRAGON X, qui ne fonctionne en mode arrière-plan que par une ligne de commande. DRAGON n'a pas été conçu comme un logiciel QSAR ; il ne fournit que des descripteurs moléculaires et n'effectue pas d'analyse QSAR ni d'optimisation de la géométrie. Cependant, par DRAGON c'est possible de fusionner des descripteurs moléculaires calculés et des propriétés définies par l'utilisateur pour un ensemble de molécules, fournissant un fichier de sortie complet qui peut être facilement chargé par n'importe quelle application d'analyse de corrélation. De plus, un menu a été inclus dans DRAGON qui permet le calcul de la corrélation de paires entre les descripteurs moléculaires et les propriétés expérimentales et l'analyse graphique de la distribution des molécules dans le descripteur et l'espace de réponse.

#### **III-1-4-1-1 DRAGON Structure :**

DRAGON a été conçu comme un logiciel convivial qui effectue des calculs de descripteurs selon une séquence logique simple (Figure 3) :

1. Chargement des fichiers moléculaires ;
2. Sélection des descripteurs ;
3. Calcul des descripteurs ;
4. Sauvegarde des descripteurs calculés.



Figure III- 3 : Forme principale du logiciel DRAGON.

Avec les descripteurs moléculaires, DRAGON permet également de calculer les composantes principales (PC) des descripteurs inclus dans le bloc sélectionné afin de compresser en un petit nombre de variables l'information du bloc descripteur. De plus, des descripteurs non informatifs et redondants peuvent être exclus du fichier de sortie par trois options différentes disponibles dans la fenêtre "Enregistrer les descripteurs" (Figure 4) :

- Variables constantes : si cochées, descripteurs avec écart-type inférieur à 0.0001 ou toutes les valeurs manquantes ne sera pas sauvé ;
- Variables quasi constantes : si cochées, permet l'exclusion des descripteurs avec une seule valeur différente des autres ;
- Corrélation paire : si cochée, permet l'exclusion de l'un des deux descripteurs avec un coefficient de corrélation égal ou supérieur à la valeur seuil sélectionnée. Les valeurs de seuil autorisées vont de 0,9 à 1. Pour chaque paire de descripteurs corrélés, celle qui présente la corrélation de pair la plus élevée avec les autres descripteurs sera automatiquement exclue

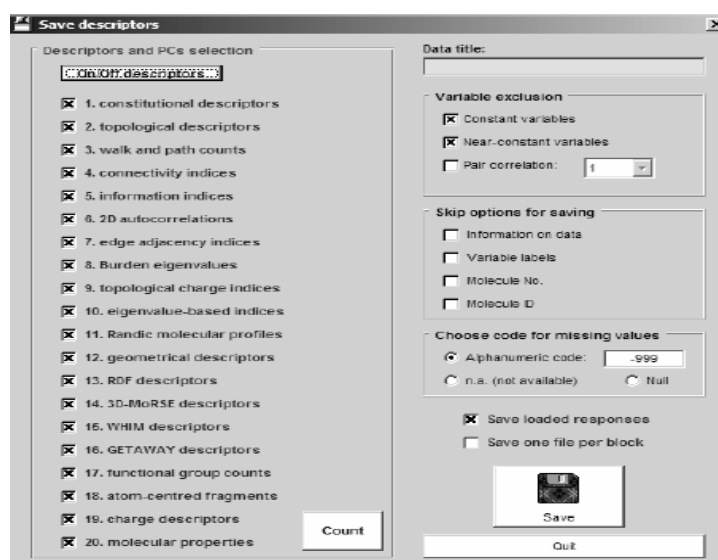


Figure III-4 : Forme des options d'enregistrement pour les descripteurs calculés

Une fois les descripteurs calculés, DRAGON permet d'effectuer une simple corrélation et une analyse graphique. De plus, jusqu'à 100 variables définies par l'utilisateur peuvent être chargées en tant que fichier texte et ajoutées aux descripteurs moléculaires calculés. Cette option permet un lien simple avec d'autres paquets. DRAGON donne également la possibilité de charger des descripteurs préalablement calculés pour effectuer une analyse des descripteurs et / ou ajouter des variables définies par l'utilisateur et / ou sauvegarder les descripteurs en utilisant différentes options (Figure 4) [41].

Les calculs du logiciel de DRAGON les descripteurs moléculaires est donne 20 blocs (chapitre II Tableau II-1) et nous on présente les descripteurs des trois blocs (les descripteurs en utilisent dans cette étude), descripteurs constitutionnelle, groupe fonctionnel énumération et fragments d'atome centré dans le tableau III-1 suivant :

Tableau III-1 : Les descripteurs du descripteur constitutionnelle, groupe fonctionnel énumération et fragments d'atome centré.

No.	Descripteurs constitutionnelle	Fragments atome centrée	Groupe fonctionnel énumération	No.	Fragments atome centrée	Groupe fonctionnel énumération
1	MW	C-001	nCp	40	H-046	nArNHR
2	AMW	C-002	nCs	41	H-047	nRNR2
3	Ss	C-003	nCt	42	H-049	nArNR2
4	Mv	C-004	nCq	43	H-050	nN-N
5	Me	C-005	nCrs	44	H-051	nN=N

6	Ms	C-006	nCrq	45	H-052	nRCN
7	nBT	C-007	nCar	46	H-053	nArCN
8	nBM	C-008	nCbH	47	H-054	nN+
9	ARR	C-009	nCb-	48	H-055	nRNHO
10	nCIC	C-011	nCconj	49	H-056	nRNNO <sub>x</sub>
11	nCIR	C-012	nR=Cp	50	O-057	nArNO
12	RBN	C-013	nR=Cs	51	O-058	nRNO <sub>2</sub>
13	<b>RBF</b>	<b>C-015</b>	<b>nR=Ct</b>	<b>52</b>	<b>O-059</b>	<b>nArNO<sub>2</sub></b>
14	nDB	C-016	nR#C-	53	O-060	nN(CO) <sub>2</sub>
15	nTB	C-017	nRCOOH	54	O-061	nC=N-N<
16	nH	C-018	nArCOOH	55	O-063	nROH
17	nN	C-019	nRCOOR	56	N-066	nArOH
18	nO	C-022	nArCOOR	57	N-067	nOHp
19	nR03	C-024	nRCONH <sub>2</sub>	58	N-068	nOHs
20	nR04	C-025	nArCONH <sub>2</sub>	59	N-069	nOHt
21	nR05	C-026	nRCONHR	60	N-070	nROR
22	nR06	C-027	nArCONHR	61	N-071	nArOR
23	nR07	C-028	nRCONR <sub>2</sub>	62	N-072	nO(C=O) <sub>2</sub>
24	nR08	C-039	nROCON	63	N-073	nOxiranes
25	nR09	C-030	nArOCON	64	N-074	nPyrrolidines
26	nR10	C-031	nRCHO	65	N-075	nOxolanes
27	nR11	C-032	nArCHO	66	N-076	nPyrroles
28	nR12	C-033	nRCO	67	N-077	nImidazoles
29	nBnz	C-034	nArCO	68	N-078	nFuranes
30	--	C-035	nCONN	69	--	nOxazoles
31	--	C-036	nC=O(O) <sub>2</sub>	70	--	nIsoxazoles
32	--	C-037	nN=C-N<	71	--	nTriazoles
33	--	C-038	nC(=N)N <sub>2</sub>	72	--	nPyridines
34	--	C-039	nArC=N	73	--	nPyrimidines
35	--	C-040	nRCNO	74	--	nPyrazines
36	--	C-041	nArCNO	75	--	n135-Triazines
37	--	C-042	nRNH <sub>2</sub>	76	--	nHDon
38	--	C-043	nArNH <sub>2</sub>	77	--	nHAcc
39	--	C-044	nRNHR	78	--	nHBonds

### **III-1-5 Méthodes d'analyse de données :**

La mise en place de modèles QSPR n'est pas une chose aisée. La première difficulté réside dans la différence d'échelles existant entre les données à corrélérer, la structure étant à une échelle moléculaire alors que les propriétés à prédire sont à une échelle macroscopique. De plus, il tient compte des problèmes d'incertitudes à la fois au niveau des structures moléculaires (liées niveau de calcul) et des données expérimentales (protocoles de mesures).

Un des problèmes importants réside également dans le traitement de données en grande quantité. Un grand nombre de descripteurs et de molécules peuvent être à analyser, mais aucune règle stricte n'existe quant au choix des paramètres structuraux les plus importants parmi le jeu complet de ceux disponibles [26].

En fait, de nombreux outils existent et il s'agit de trouver le moyen le plus adapté pour obtenir un modèle fiable à partir des données disponibles. Selon les cas, plusieurs approches sont envisageables, il faut alors choisir celle permettant de caractériser au mieux le système.

Les différentes méthodes présentées dans la suite sont celles employées au cours de l'étude, pour développer des modèles (plus ou moins de paramétrés, linéaires ou non linéaires, interprétables ou non), choisir les paramètres les plus pertinents, valider ces modèles (en interne ou en externe) et déterminer leurs domaines d'applicabilité [26].

#### **III-1-5-1 Modélisation par XLSTAT :**

##### **➤ Les étapes de régression :**

La régression est effectuée pour la détermination des interactions des groupes, avec le calcul des pourcentages moyens des erreurs, pour appliquer cette régression on a utilisé le logiciel XLSTAT. L'utilisation de ce logiciel n'est pas compliquée, ne prend pas longtemps pour donner les résultats, et aussi n'a pas plusieurs étapes d'application, comme nous l'avons vu dans cette partie. Cette régression passe par plusieurs étapes.

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L
1	No.	MolID	MW	nBT	nBM	nCIC	nCIR	RBN	nDB	nTB	nH	nT
2	1	100-01-6-2	138.14	16	8	1	1	1	1	2	0	6
3	2	100-09-4-2	152.16	19	7	1	1	2	1	0	0	8
4	3	100-10-7-2	149.21	22	7	1	1	2	1	0	0	11
5	4	100-21-0-2	166.14	18	8	1	1	2	2	0	0	6
6	5	100-25-4-2	168.12	16	10	1	1	2	4	0	0	4
7	6	1002-84-2	242.45	46	1	0	0	13	1	0	0	30
8	7	1003-29-8	95.11	12	6	1	1	1	1	0	0	5
9	8	100-54-9-2	104.12	12	7	1	1	0	0	1	0	4
10	9	1006-67-3	145.17	19	11	2	2	1	0	0	0	7
11	10	100-76-5-2	111.21	22	0	2	3	0	0	0	0	13
12	11	1008-74-8	159.2	22	11	2	2	1	0	0	0	9
13	12	1008-75-9	159.2	22	11	2	2	1	0	0	0	9

Figure (III-5) : Fenêtre générale de logicielle XLSTAT.

On ouvre une feuille d'Excel et lance le logiciel XLSTAT par le clic sur l'icône de ce dernier. De la barre menu, choisir XLSTAT. Une liste va apparaître, cette dernière contient les différentes tâches du logiciel XLSTAT

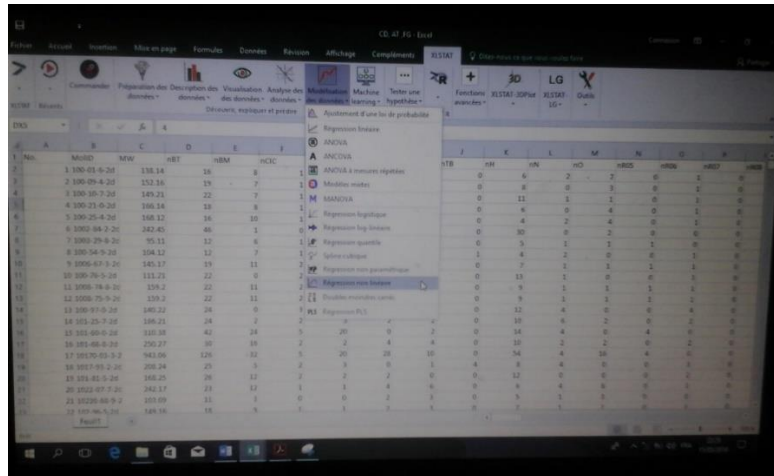
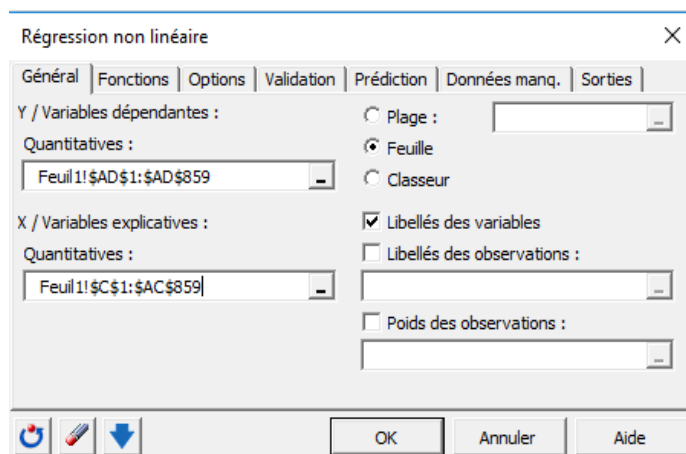


Figure (III-6) : Fenêtre logicielle XLSTAT (choisi la régression)

De la liste précédente, on choisit « Modélisation des Données », puis « Régression Linéaires » si on veut faire une régression linéaire, ou « Régression Non Linéaire » si on veut faire une régression non linéaire.

Dans ce travail, on a utilisé la régression non linéaire pour calculer la variable d'enthalpie de formation. Cette régression peut être faite sur le logiciel par le choix de l'onglet « Régression non Linéaires ». Une fois cette dernière est sélectionnée, une boîte de dialogue va apparaître.



Figure(III-7) : Régression non linéaire.

De la boîte précédente, on sélectionne « Variable(s) dépendante(s) » pour sélectionner les valeurs expérimentales de la propriété à modéliser (les  $Y_i$ ), puis on choisit « Variable(s) quantitative(s) » pour sélectionner les variables indépendantes (les  $X_i$ ). Après cette étape, on passe aux autres onglets de cette boîte pour sélectionner les autres paramètres, puis on clique sur le bouton OK. Une fois que vous avez cliqué sur le bouton "OK", les calculs commencent puis les résultats sont affichés.

### III-2 Résultats et discussions :

#### III-2-1 Détail les résultats à base de donnée globale :

Dans ce cas, on utilise un seul bloc de descripteur et l'ensemble des formules brut pour la régression non linéaire :

➤ **Choix les meilleurs blocs pour la régression :**

En première étape dans ce travail on calcule par régression non linéaire multiple à chaque bloc de descripteur moléculaire sont seul et présente les résultats dans le tableau ci-dessous :

**Tableau III-2 :** Présente les coefficients d'ajustement pour chaque bloc de descripteur.

Descripteurs moléculaire	No	R <sup>2</sup>	RMCE
Descripteurs constitutionnels	<b>29</b>	<b>0,94</b>	<b>128,985</b>
Profils moléculaires Randic	4	0,066	492,14
Descripteurs topologiques	39	0,655	305,26
Descripteurs géométriques	21	0,478	371,45
Marche et comptes de chemin	12	0,422	388,1
Descripteurs RDF	42	0,617	322,28
Connectivité indices	13	0,438	383,68
Descripteurs 3D-MORSE	<b>85</b>	<b>0,818</b>	<b>224,95</b>

Information indices	23	0,482	369,84
Descripteurs WHIM	26	0,328	422,34
Autocorrélations 2D	21	0,36	413,95
Descripteurs ESCAPADE	<b>100</b>	<b>0,9</b>	<b>165,85</b>
Indices contiguïté Affilez	30	0,485	370,96
Groupe fonctionnel énumération	<b>78</b>	<b>0,961</b>	<b>119.286</b>
Charge valeurs propres	13	0,393	398,93
Fragments d'atome centré	<b>41</b>	<b>0,993</b>	<b>47.125</b>
Indices de charge topologique	15	0,17	466,98
Indices valeurs propres à base	7	0,633	308,9
Les propriétés moléculaires	26	0,483	370,62

➤ **Détail des résultats :**

À travers le calcul des descripteurs moléculaire nous avons retrouvé 19 types de descripteur mais nous choisir qu'ils donnent le meilleur résultat.

Le descripteur 3D-MORSE et le descripteur ESCAPADE, il donne bons résultats à partir le mais RMCE donne un résultat moyennement, donc nous avons concentré avec les descripteurs constitutionnels, Descripteur Fragment Atome centré et Groupe fonctionnelle énumération.

**Tableau III-3 :** résultat premièrement pour régression non linéaire.

<b>Blocs des descripteurs</b>	<b>R<sup>2</sup></b>	<b>RMCE</b>
Descripteur constitutionnelle	0.94	128.985
Fragments Atome centrée	0.993	47.125
Groupe fonctionnel énumération	0.961	119.286

➤ Les graphiques

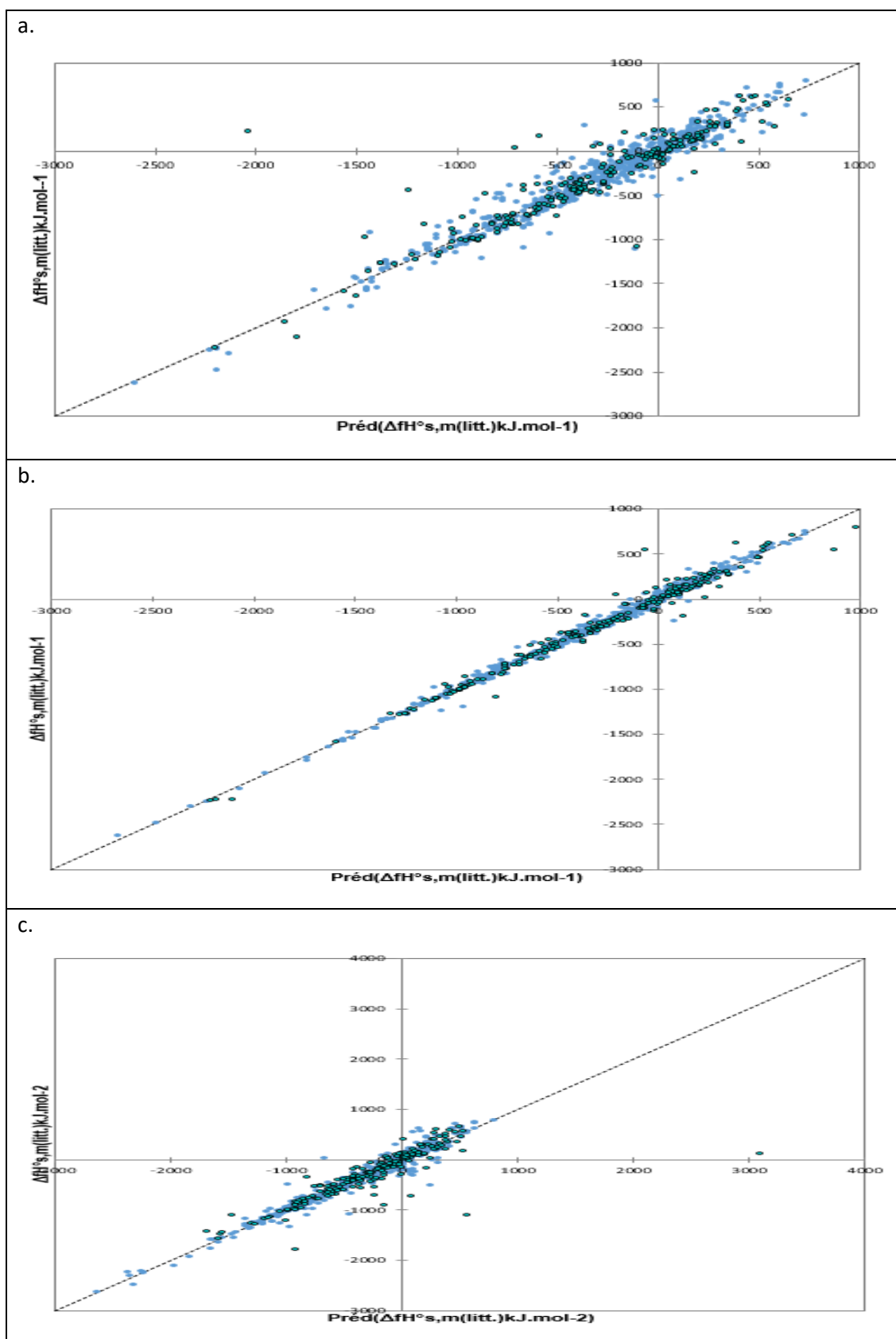


Figure 8 : Les graphiques de résultat premièrement pour régression non linéaire

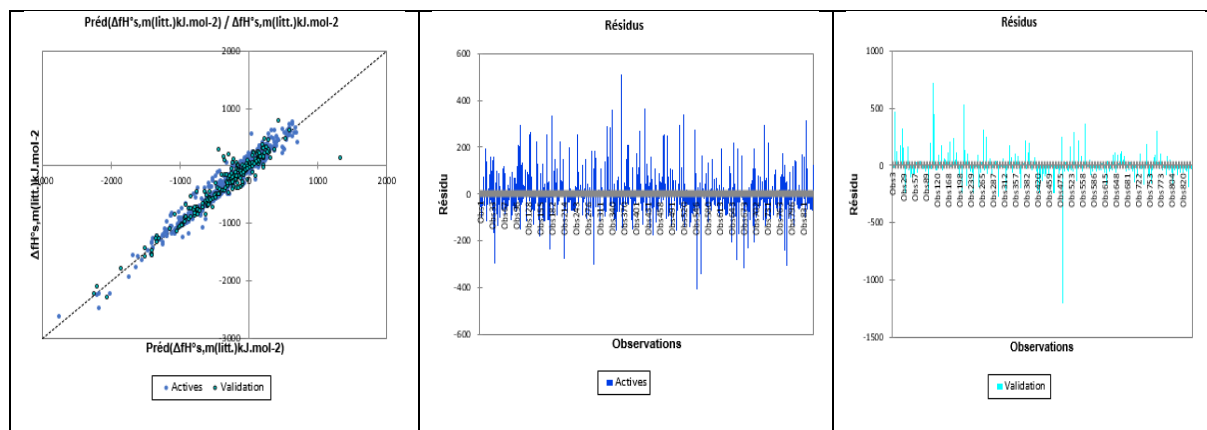
Pour améliorer les résultats nous devons vérifier la base de données et les étapes préparations avant la régression.

**a. Descripteur constitutionnelle :**

**Tableau III-4 :** Coefficients d'ajustement pour régression non linéaire du descripteur constitutionnelle.

R <sup>2</sup>	0.96
RMCE	107.027

**a.1. Les graphiques :**



**Figure 9 :** Le graphe évaluation globale des résultats de représentation des enthalpies standard de formation au descripteur constitutionnelle.

**b. Descripteur Fragments Atome centrée :**

**Tableau III-5 :** Coefficients d'ajustement pour régression non linéaire du descripteur Fragments Atome centrée.

R <sup>2</sup>	0.993
RMCE	46.754

b.1. Les graphiques :

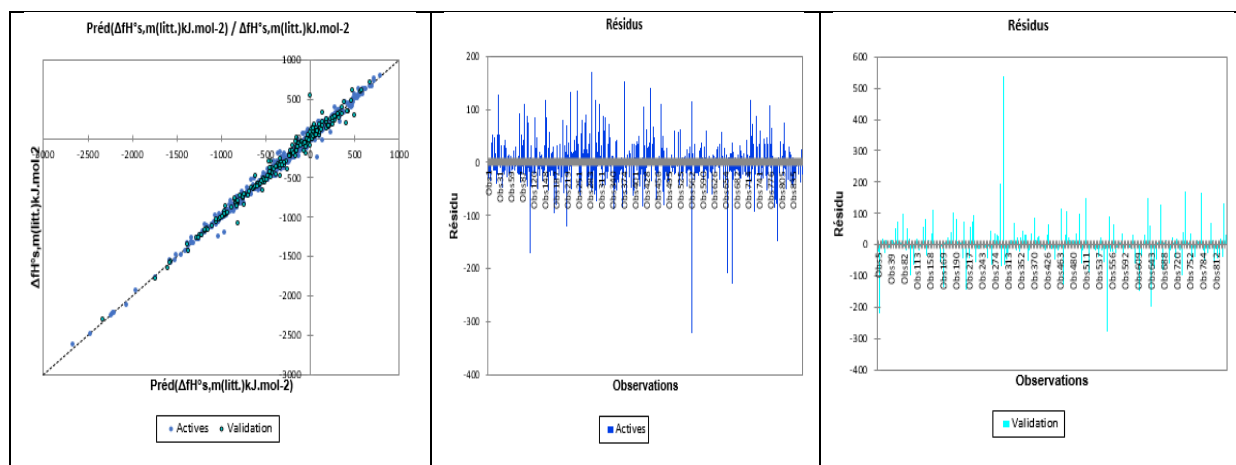


Figure 10 : Le graphe évaluation globale des résultats de représentation des enthalpies standard de formation de descripteur Fragments Atome centrée.

c. Groupe fonctionnel énumération

Tableau III-6 : Coefficients d'ajustement pour régression non linéaire du descripteur groupe fonctionnel énumération

<b>R<sup>2</sup></b>	0.977
<b>RMCE</b>	90.199

c.1. Les graphiques :

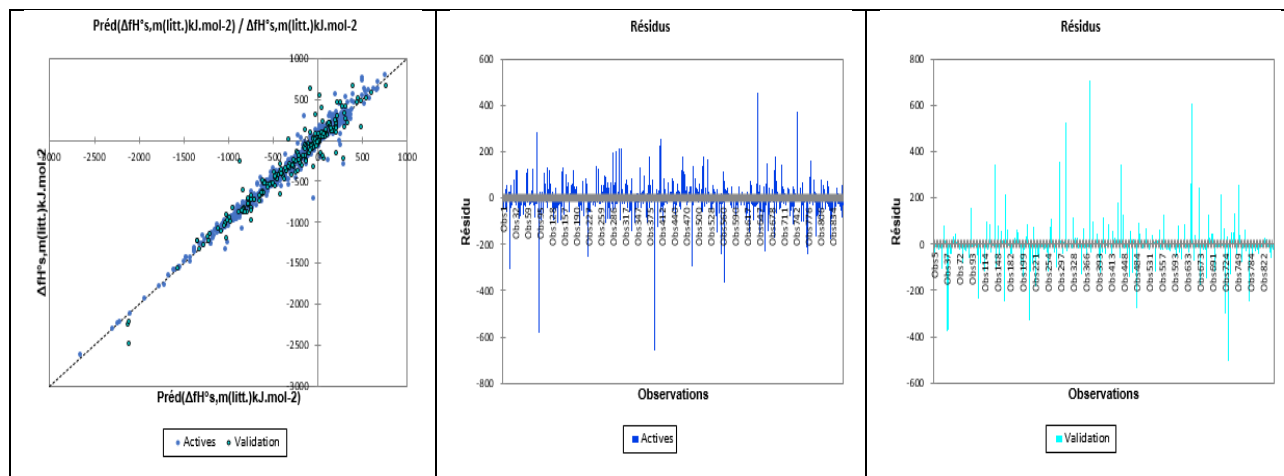


Figure 11 : Le graphe évaluation globale des résultats de représentation des enthalpies standard de formation de descripteur groupe fonctionnel énumération

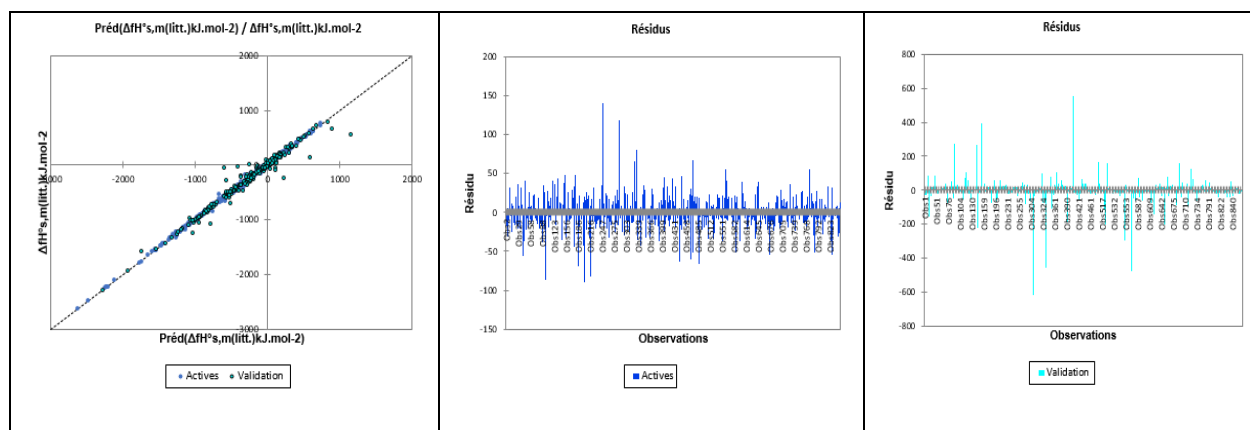
**d. La somme des trois Descripteurs :**

**Tableau III-7 :** Présente La somme des coefficients pour les trois blocs :

	La somme des trois descripteurs	Descripteurs constitutionnels	Fragments d'atome centré	Groupe fonctionnel énumération
<b>R<sup>2</sup></b>	0.998	0.94	0.993	0.961
<b>RMCE</b>	29.322	128.985	47.125	119.286

À travers la somme des trois descripteurs nous avons remarqué bons résultats et moyennement nombre de descripteurs à contre pour calculer chaque descripteur en seuls les résultats elle était moyenne.

**d.1. Les graphiques :**



**Figure 12 :** Le graphe évaluation globale des résultats de représentation des enthalpies standard de formation de la somme de descripteur constitutionnelle, descripteur Fragments Atome centrée et groupe fonctionnel énumération.

**III-2-2 Analyse des résultats :**

**III-2-2-1 Mise en évidence de problèmes d'estimation en détail :**

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.

- Les différentes représentations de molécules étudiées ont montré qu'il était difficile d'évaluer l'enthalpie standard de formation en phase solide. Les composés suivants peuvent illustrer ce constat :

- a. Descripteur constitutionnelle, la différence représentée dans les composés suivants :  
[2,2] -Meta para cyclophane ( $C_{16}H_{16}$ ) [5385-36-4] résidu =  $-1201,39 \text{ KJ.mol}^{-1}$ .
- b. Atom-centred fragments, la différence représentée dans les composés suivants : Penta  
cyclo $[4.2.0.0^{2.5}.0^{3.8}.0^{4.7}]$  octane ( $C_8H_8$ ) [277-10-1] résidu =  $539,29 \text{ KJ.mol}^{-1}$ .
- c. Groupe fonctionnel énumération, la différence représentée dans les composés suivants:  
Benzotrifuroxane  $C_6O_6N_6$  [3470-17-5] résidu =  $708,54 \text{ KJ.mol}^{-1}$ .

➤ **Mise en évidence de problèmes générale :**

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. Nous avons donc analysé à nouveau ce type de molécule pour vérifier sa validité, En effet, il est parfois très compliqué de faire « le bon choix » de valeur d'enthalpie standard de formation permettant la détermination de descripteur moléculaires. 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 [4]. 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 descripteurs moléculaires n'ont pu être estimés 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 descripteur. En réalité, le faible nombre d'occurrences d'un groupe n'est pas directement responsable d'une incertitude élevée (car des mesures expérimentales tout à fait fiables engendrent la détermination de descripteur moléculaires exactes). Cela empêche simplement de certifier la validité de la valeur de descripteur trouvée. Dans le cadre de la méthode établie, il faut considérer que les descripteurs moléculaires qui ont été déterminées grâce à un nombre de molécules inférieur à 3 sont les moins fiables [4].

### III-3 Paramètres des modèles :

#### III-3-1 Cas de régression non linéaire :

- Descripteur Fragments Atome centrée : présent les valeurs du poids pour l'équation III-1 dans le tableau A-2 à (L'annexe).
- Groupe fonctionnel énumération : présent les valeurs du poids pour l'équation III-1 dans le tableau A-3 à (L'annexe).
- La somme pour les trois blocs : présent les valeurs du poids pour l'équation III-1 dans le tableau A-4 à (L'annexe).
- Descripteurs constitutionnels : présent les valeurs du poids pour l'équation III-1 dans le tableau suivant :

**Tableau III-8 :** Les valeurs du poids de l'équation III-1, pour le block des descripteurs constitutionnels.

<b>Variables</b>	<b>w<sub>i</sub></b>	<b>w<sub>j</sub></b>
A	-661.651	---
nBT	-309.956	-0.008
nBM	152.615	-0.518
nCIC	821.972	11.989
nCIR	-50.019	0.437
RBN	4.548	0.231
nDB	185.714	-0.514
nTB	613.798	-2.142
nH	450.580	-0.039
nN	163.606	1.935
nO	100.243	1.972
nR03	-105.493	0.000
nR04	173.611	-136.970
nR05	-126.940	32.471
nR06	-97.273	23.317
nR07	288.782	-163.455
nR08	-61.359	-10.611
nR09	-129.053	-24.299
nR10	-204.784	20.189
nR11	282.925	161.604

nR12	-15.397	12.867
nBnz	143.696	-25.657

La forme générale de l'équation de régression multilinéaire on écrit comme suite :

$$\Delta H_{f,s}^{\circ} = A + \sum_{i=0}^n w_i x_i + \sum_{i=0}^n w_j x^2 \quad \text{III-1}$$

Où

$\Delta H_{f,s}^{\circ}$  : L'enthalpie standard de formation en phase solide ;

A : constante ;

w : les poids (coefficients) des descripteurs moléculaires,  $i=0, 1, 2, \dots, n$  ;

x : les descripteurs moléculaires,  $i=0, 1, 2, \dots, n$ .

### III-4 Comparaison avec la méthode de Domalski et Salmon :

Domalski et Salmon 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. Nous avons employé ces descriptions afin de calculer l'enthalpie standard de formation à l'état solide des molécules présentées dans les tableaux A-5 (L'annexe). L'évaluation de ces enthalpies permet ainsi de comparer les résultats de représentation obtenus grâce à la méthode de descripteur moléculaire décrite dans cette étude avec les résultats de prévision calculés grâce à la méthode de Domalski et Salmon (Tableau III-9).

**Tableau III-9** : Comparaison avec la méthode de Salmon et Domalski et al., des résidus moyens et obtenus sur le calcul des enthalpies standard de formation en phase solide.

Méthode	Salmon	Domalski et al.	Notre travail
Unité	Résidu moyen	Résidu moyen	Résidu moyen
$KJ.mol^{-1}$	23,13	27,16	13,17

Les prévisions d'enthalpies sont, dans l'ensemble, meilleures que les représentations obtenues en utilisant les valeurs de descripteur moléculaire déterminées au cours de cette étude. En effet, les résidus moyens calculés sont moins élevés dans le cas de la méthode de Salmon et Domalski et al.



## **Conclusion générale**

## Conclusion générale

Dans la présente le modèle (QSPR) a été le résultat d'une étude sur l'enthalpie standard de formation de 856 composés. Ces composés ont été sélectionnés parmi toutes les familles de composés à la suite il n'y a pas de limite spécifique en application de ce modèle. En outre la simplicité de l'utilisation de celui-ci est l'un des avantages de ce modèle.

Dans ce travail nous avons abordé le problème de prédiction de l'enthalpie standard de formation ( $\Delta H_f^\circ$ ), pour cela nous avons fait la corrélation de différents types de paramètres (descripteurs) pour calcul l'enthalpie de formation standard par la méthode QSPR. Ont conclus les blocs les plus précises dont ce modelé est les groupes fonctionnels, les fragments de l'atome centré et descripteur constitutionnel.

Ce modèle donne des résultats de corrélation remarquables avec les descripteurs des blocs fragments de l'atome centré groupes fonctionnels et descripteurs constitutionnels ( $R^2 = 0,998$ ). Le résidu moyenne calculé sur la représentation d'enthalpies de formation en phase solide d'un ensemble de 856 molécules est de 22,87 KJ.mol<sup>-1</sup>.

Enfin, il serait intéressant de continuer à développer la méthode établie au cours de cette étude en déterminant des valeurs de descripteur moléculaire 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 descripteur moléculaire. 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 descripteur moléculaire 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 descripteur moléculaire déterminées au cours de la présente étude. Ceci serait appliqué d'autres méthodes, par exemple méthode de signature de descripteur moléculaire, graphe machine, etc.



# **Bibliographiques**

## Bibliographiques

- [1] **Ponce E, Hiram E, Ponce-C, Pedro, Molina, Arturo** ;(*Artificial Organic Networks, Studies in Computational Intelligence*) (2014)
- [2] **Theodore L. Brown, H. Eugene LEMay, Jr, Bruce E. Bursten, Catherine J. Murphy, Patrick M. Woodward** ;(*Chemistry the central science*) (2012)
- [3] **Tauzia J.M.** *A Propos des Matériaux Energétiques*, Groupe SNPE.
- [4] **Anna S** ; Thèse de doctorat (Développement d'une méthode prédictive de calcul des enthalpies de formation en phase solide de molécules organiques - Application aux matériaux énergétiques) l'Ecole des Mines de Paris (21 décembre 2006)
- [5] **Mazouzi A et Noui Ch** ; Thème de master académique (Méthode de prédiction des propriétés physiques et thermodynamiques des composés organiques purs basées sur le concept des interactions binaires des groupes organiques fonctionnels) Université KASDI Marbah Ourgla (2012-2013).
- [6] **Benjamin T. Goodman**; (Thermodynamic Property Prediction for Solid Organic Compounds Based on Molecular Structure) Brigham Young University – Provo (2003).
- [7] **Abdelghani S** ; Thème de master académique (Développement d'une méthode prédictive de calcul la variation des enthalpies de formation en phase solide de molécules organiques. Application à la conception des matériaux énergétiques) Université KASDI Marbah Ourgla (2011-2012).
- [8] **Zumdahl Steven S. Zumdahl and Susan A. Zumdahl**; Chemistry, Eighth Edition University of Illinois. 2010, ET **Steven S. Zumdahl**; Chemical Principles, University of Illinois, 2005,
- [9] Parr® Introduction to Bomb Calorimetry No. 202M.
- [10] **Mohamed E** ; Thèse de doctorat (L'étude des indices topologiques, leurs applications en QSAR/QSPR et leurs corrélations aux représentations moléculaires « Plerograph » et « Kenograph ») Université Mohammed v-Agdal (2013).
- [11] **A.Leo and al**; Calculation of hydrophobic constant (logp) from  $\pi$  and f constants. Journal of Medicinal Chemistry, 18:865, 1975.

- [12] **G.Klopman and al**; Computer automated logp calculations based on an extended group approach. *Journal of Chemical Information and Computer Sciences*, 34(4) :752–781, 1994
- [13] **A goul ON – Sigwal T-Abram** ; Une nouvelle méthode d'apprentissage de données structurées : applications à l'aide à la découverte de médicaments [thèse en ligne]. PhD thesis, Paris : Université Pierre et Marie Curie (Paris 6), 2008.
- [14] **J.W. Jalowka and T.E. Daubert** ; Group contribution method to predict critical temperature and pressure of hydrocarbons. *Industrial and Engineering Chemistry Process Design and Development*, 25(1):139–142, 1986.
- [15] **Domalski E.S. et Hearing E.D** ; Estimation of the Thermodynamic Properties of Hydrocarbons at 298.15 K, *J. Phys. Chem. Ref. Data* 1988ons at 298.15 K, *J. Phys. Chem. Ref. Data* 1988
- [16] **Domalski E.S. et Hearing E.D**; Estimation of the Thermodynamic Properties of C-H-NO-S-Halogen Compounds at 298.15 K, *J. Phys. Chem. Ref. Data* 1993
- [17] **Vatani A, Mehrpooya M\* et Gharagheizi F**; Prediction of Standard Enthalpy of Formation by a QSPR Model; *International Journal of Molecular Sciences* ([www.mdpi.org/ijms/](http://www.mdpi.org/ijms/)); 2007; PP: 407-432.
- [18] **Regadi D** ; Thème de master académique (Développement de modèle QSPR pour la prédiction des propriétés physique des quelques composés odorants) Université KASDI Marbah Ourgla (2012-2013).
- [19] **Hansch C**; (1969), a quantitative approach to biochemical structure activity relationships. *Accounts of chemical research*,
- [20] **R. Leardi**; (2001), *Chemometr.*
- [21] **Talete srl**; Dragon Profesional Software, Via V.Pisani, 13-20124 Milano (ITALY), 2005.
- [22] **Dragon\_ Aide blocs des descripteurs.**
- [23] **Saadi Kh** ; Mémoire de Magister (Contribution à l'étude de la Relation structure chimique-odeur Utilisation de la technique Random Forest (Application à la famille des pyrazines)) Université Kasdi Marbah Ourgla (2009).
- [24] **R Todeschini, V Consonni** ; *Molecular Descriptors for Chemoinformatics, Volumes I & II* ; 2009
- [25] **AI ACCESS**, 91940, Les Ulis, Franonce.

- [26] **Guillaume F** ; Thèses de doctorat (Développement de modèles QSPR pour la prédiction des propriétés d'explosibilité des composés nitroaromatiques) Université Pierre et Marie Curie (2010).
- [27] **A Guendouzi** ; Thèses de doctorat (Élaboration des modèles QSPR prédictifs des propriétés physico-chimiques à l'aide des descripteurs moléculaires) Université Abou Bekr Belkaid de Tlemcen (2015).
- [28] M Tenenhaus,, La régression PLS, Théorie et Pratique, Paris, Éditions Technip, (1998), 254
- [29] **F Blayo** ; Michel Verleysen, "Les réseaux de neurones artificiels", (1996), 1re édition
- [30] **Melle Hamad B et Khahla S** ; Thème de master académique (Contribution à la Prédiction de Coefficient de partage octanol /eau par la technique QSPR (Quantitative Structure Property Relationship)) Université El-Oued (2013/2014).
- [31] **Souyei B** ; contribution à la prédiction de coefficient de partage Octanol/eau Par la technique QSPR. 2007, 64 -68.
- [32] **Chessell D, Thioulouse J, Dray S**; Co-inertia Analysis and the Linking of Ecological Tables. Ecology. 2003, 84, 3078-3089.
- [33] [<http://michem.disat.unimib.it/chm/Help/edragon/>].
- [34] S.W. Benson, J.H. Buss, *J. Chem. Phys.*, **1958**, 29, 546-572.
- [35] *Stratégie pour la future politique dans le domaine des substances chimiques, Livre Blanc, COM (2001)88 final*, Commission européenne, 2001.
- [36] **A Varnek et A Tropsha**; Chemoinformatics Approaches to Virtual Screening. Royal Society of Chemistry ([www.rsc.org](http://www.rsc.org)) 2008. PP: 6-7, 26-28.
- [37] **Samuel Edward A**; Thèse de doctorat (Molecular Similarity and Xenobiotic Metabolism) Université de Cambridge, 2010. PP : 9-11.
- [38] **Lejeune M** ; Statistiques. La théorie et ses applications. Springer-Verlag, Paris, 2004.
- [39] **Afnor** ; Qualité de l'air-Mesurage de l'odeur d'un effluent gazeux. Méthodes supraliminaires, NF X 43-103.
- [40] <http://webbook.nist.gov/chemistry>

[41] **A. Mauri, V. Consonni, M. Pavan, and R. Todeschini**; (DRAGON software: An easy approach to molecular descriptor calculations) 2006.

[42] **R. Todeschini, M. Lasagni, and E. Marengo** (1994). New Molecular Descriptors for 2D- and 3Dstructures. Theory. J. Chemometrics, 8, 263-273.

[43] **Talete srl**; Dragon (ver. 5.4), Milano, Italy. Web site: [www.talete.mi.it/products/software.htm](http://www.talete.mi.it/products/software.htm)



# **Annexes**

**Tableau A-1** : Banque d'enthalpie standard de formation en phase solide concernant les 856 molécules.

Composé	Formule	$\Delta fH^{\circ}_{s,m}$ (litt.) $KJ.mol^{-1}$	$\Delta fH^{\circ}_{s,m}$ (Préd.) $KJ.mol^{-1}$	Résidus
4-nitroaniline	C6H6N2O2	-42.1	-35.7148677	-6.38513234
acide 4-méthoxybenzoïque	C8H8O3	-566.1	-557.724858	-8.375142
4-(diméthylamino)-benzaldéhyde	C9H11NO	-139.5	-217.329841	77.8298412
acide 1,4-benzènedicarboxylique	C8H6O4	-824	-824	2.0692E-08
1,4-dinitrobenzène	C6H4N2O4	-38.9	-32.4887129	-6.4112871
acide pentadécanoïque	C15H30O2	-870.6	-876.326501	5.72650051
1H-pyrrole-2-carboxaldéhyde	C5H5NO	-106.8	-101.496621	-5.30337947
3-pyridinecarbonitrile	C6H4N2	200.2	198.820858	1.37914218
5-phénylisoxazole	C9H7NO	80.1	80.1000003	-2.9961E-07
Quinuclidine	C7H13N	-55.19	-49.073996	-6.11600403
3-phényl-5-méthylisoxazole	C10H9NO	12.1	42.7961237	-30.6961237
3-méthyl-5-phénylisoxazole	C10H9NO	16.4	26.8652482	-10.4652482
Hexaméthylènetétramine	C6H12N4	118.1	118.1	6.2158E-11
3,7-dinitroso-1,3,5,7-tétraazabicyclo[3.3.1]nonane	C5H10N6O2	207.1	210.87112	-3.77111968
1,1'-méthylènebis(4-isocyanatobenzène)	C15H10N2O2	-55	-87.0443703	32.0443703
isouroporphyrine (II) octaméthyl ester	C48H54N4O16	-2624	-2623.45205	-0.54794686
bicyclo[2.2.2]oct-5-ène-2,2,3,3-tétracarbonitrile	C12H8N4	565.6	579.020495	-13.420495
Diphénylméthane	C13H12	71.5	85.1399354	-13.6399354
2,4,6-trinitro-N-méthylaniline	C7H6N4O6	-50.5	-70.4271646	19.9271646
1-nitro-2-propanone	C3H5NO3	-294.7	-277.839106	-16.8608943
1-nitro-2-phényléthène	C8H7NO2	29.7	26.820537	2.87946304
cis-1,2-Di-o-tolyléthène	C16H16	81.5	50.2907206	31.2092794
D-arabinose	C5H10O5	-1066.3	-1097.81546	31.5154568
Bibenzyle	C14H14	52.9	6.20859593	46.6914041
(E)-stilbène	C14H12	132.5	109.330987	23.1690126

## Annexes

Phénylfurazane	C8H6N2O	237.9	250.542398	-12.6423977
3-méthyl-4-phénylfurazane	C9H8N2O	186.2	170.27618	15.9238201
3,4-dibenzoyl-1,2,5-oxadiazole	C16H10N2O3	102.7	110.192829	-7.49282884
4-phénylfurazane amine	C8H7N3O	217.1	211.707604	5.39239621
1,1,1-éthanetricarbonitrile	C5H3N3	344.76	343.046389	1.7136111
N-phénylacétamide	C8H9NO	-209.9	-210.627393	0.72739261
N'-(5-tétrazolyl)-benzalhydrazone	C8H8N6	457.9	424.444568	33.455432
dibenzylidène-1,2-éthylènediamine	C16H16N2	268.5	273.866667	-5.36666668
2,2',5,5'-tétraméthyl-1,1'-bipyrrole	C12H16N2	132	110.192829	21.8071712
9,9'-bianthracène	C28H18	318	318	1.5882E-10
ε-caprolactame	C6H11NO	-330.5	-296.795436	-33.7045641
1-nitroacétaldéhyde o-(1,1-dinitroéthyl) oxime	C4H6N4O7	-166	-187.922883	21.9228834
α-lactose monohydrate	C12H24O12	-2484.1	-2481.12131	-2.97868868
1,4-benzènediamine	C6H8N2	-1.8	-7.49734187	5.69734187
2,5-pipérazinedione	C4H6N2O2	-449.4	-452.187243	2.78724276
3-amino-5-méthylisoxazole	C4H6N2O	-66.4	-60.0412447	-6.35875529
N-méthylglycine	C3H7NO2	-521.7	-524.266531	2.5665309
1,2,3,4,5,6,7,8-octahydro-anthracène	C14H18	-119.6	-131.357405	11.7574049
(Z)-azobenzène	C12H10N2	351.1	342.466535	8.63346506
Propanediamide	C3H6N2O2	-548.8	-591.314094	42.514094
1,4-diphénylbutane	C16H18	-14	-34.7806869	20.7806869
1,3-benzènediamine	C6H8N2	-11.7	-34.0879607	22.3879607
Mélamine	C3H6N6	-87.6	-70	-17.6
1,3,5-triazine-2,4,6(1H,3H,5H)-triol	C3H3N3O3	-715.2	-727.754066	12.5540659
3-pyridinol	C5H5NO	-165.5	-165.5	-1.2151E-09
Malononitrile	C3H2N2	186.7	161.437069	25.262931
Butanediamide	C4H8N2O2	-600.4	-592.995366	-7.40463401
acide butanedioïque	C4H6O4	-946.4	-982.056571	35.656571
acide (Z)-2-butènedioïque	C4H4O4	-801.9	-822.276036	20.3760364
acide (E)-2-butènedioïque	C4H4O4	-821.7	-857.75681	36.05681
1,2-hydrazinedicarboxamide	C2H6N4O2	-502.9	-518.618228	15.7182277

## Annexes

Succinonitrile	C4H4N2	139	109.330987	29.6690126
Pipérazine	C4H10N2	-42	-15.2878037	-26.7121963
acide pentanedioïque	C5H8O4	-960.7	-954.618736	-6.0812636
acide heptanedioïque	C7H12O4	-1011.9	-993.626842	-18.2731584
acide décanedioïque	C10H18O4	-1086.6	-793.515587	-293.084413
acide 9-aminononanoïque	C9H19NO2	-732.7	-738.776355	6.07635487
2-méthyl-3-hydroxypyridine	C6H7NO	-175.1	-195.792944	20.6929441
2-méthyl-5-hydroxypyridine	C6H7NO	-166.3	-101.457832	-64.842168
acide undécanoïque	C11H22O2	-741.5	-749.930529	8.43052937
Guanidine	CH5N3	-61.8	-72.0264124	10.2264124
N-hippuroylglycine	C11H12N2O4	-835	-852.787945	17.7879448
2,2-bis(hydroxyméthyl)-1,3-propanediol	C5H12O4	-931.4	-945.939186	14.539186
phényl-2-hydroxybenzoate	C13H10O3	-436.9	-433.1	-3.8
N-DL-alanyl-glycine	C5H10N2O3	-789.4	-795.114834	5.71483448
acide 2-aminobenzoïque	C7H7NO2	-401.8	-382.31814	-19.48186
2,4,6-trinitrotoluène	C7H5N3O6	-81.9	-78.7915035	-3.10849651
2,4-dinitrophénylhydrazine	C6H6N4O4	51.1	51.2309213	-0.13092128
2,4-dinitro-1-méthoxybenzène	C7H6N2O5	-186.7	-304.388264	117.688264
4-méthyl-3-nitroaniline	C7H8N2O2	-73.1	-78.418523	5.31852303
2-hydroxy-1,2-diphényléthanone	C14H12O2	-248.53	-219.716708	-28.813292
2-nitrodiphénylamine	C12H10N2O2	78.99	94.0331572	-15.0431572
5-méthyl-3-phényl-1,2,4-oxadiazole	C9H8N2O	96.9	112.729733	-15.8297334
3-méthyl-5-phényl-1,2,4-oxadiazole	C9H8N2O	101.7	95.2357028	6.46429725
Anthracène	C14H10	126.2	126.2	2.0084E-10
acide 1,4-benzènedicarboxylique diméthyl ester	C10H10O4	-735.5	-761.503636	26.0036359
Indole	C8H7N	85.9	85.9431537	-0.04315374
1-méthyl-2,4-dinitrobenzène	C7H6N2O4	-67.5	-34.7806869	-32.7193131
hexahydro-1,3,5-trinitro-1,3,5-triazine	C3H6N6O6	66.94	78.783383	-11.843383
acide 1,3-benzènedicarboxylique	C8H6O4	-811.7	-812.195103	0.49510293
acide 3-nitrobenzoïque	C7H5NO4	-415.3	-436.169916	20.8699162

## Annexes

Diphénylamine	C12H11N	127.2	171.388951	-44.1889514
acide phénylcarbamique isopropyl ester	C10H13NO2	-444.1	-443.717076	-0.38292415
acide méso-2,3-diphénylbutanedioïque	C16H14O4	-735.9	-743.676461	7.77646138
1,2-diphénylhydrazine	C12H12N2	220.9	223.523555	-2.62355469
Succinimide	C4H5NO2	-460.6	-472.115382	11.5153821
Azodicarbonamide	C2H4N4O2	-292.5	-564.202053	271.702053
1,2,3-propanetriol 1-octadécanoyl ester	C21H42O4	-1346.7	-1354.83499	8.13498691
acide nonanedioïque	C9H16O4	-1057.7	-1072.19048	14.4904838
acide hexanedioïque	C6H10O4	-1000.8	-996.835984	-3.96401615
2-(hydroxyméthyl)-2-nitro-1,3-propanediol	C4H9NO5	-740.1	-767.928142	27.828142
mésoporphyrine (IX) diméthyl ester	C36H42N4O4	-846.3	-811.890053	-34.4099466
Dipentaérythritol	C10H22O7	-1579.6	-1738.71076	159.110756
Pyrène	C16H10	119.6	73.7275072	45.8724928
N,N-diphényl-N'-méthylurée	C14H14N2O	-107.8	-70.4271646	-37.3728354
dipentaérythritol hexanitrate	C10H16N6O19	-980.9	-980.9	-2.1259E-11
1-nitroso-2-naphtol	C10H7NO2	-50.6	-50.8937498	0.29374982
acide 4-méthylbenzoïque anhydride	C16H14O3	-527.6	-535.858398	8.25839807
$\alpha$ -D-méthyl glucopyranoside-2,3,4,6-tétranitrate	C7H10N4O14	-830.2	-821.769471	-8.43052937
2,2',4,4'-tétraméthyl-3,3'-diéthyl-dipyrryl cétone	C17H24N2O	-254.8	-274.364989	19.564989
2-nitroso-1-naphtol	C10H7NO2	-61.8	-146.620591	84.8205909
3-méthyl-4-cyclohexène-1,1,2,2-tétracarbonitrile	C11H8N4	511.8	515.077581	-3.27758123
1-naphtylamine	C10H9N	67.7	53.6336535	14.0663465
1,4-diméthyl-5-tétrazolone	C3H6N4O	-27.9	-5.55676122	-22.3432388
N-phényl-2-naphtylamine	C16H13N	159.2	171.310697	-12.1106973
1,3-diphényltriazène	C12H11N3	329.9	347.013569	-17.1135686
hexahydro-1,3,5-trinitroso-1,3,5-triazine	C3H6N6O3	282.9	291.700432	-8.80043225
2-éthyl-1,3,5-trinitrobenzène	C8H7N3O6	-91.3	-65.0017542	-26.2982458
1,4-dinitrosopipérazine	C4H8N4O2	89	56.0152799	32.9847201
acide malonique	C3H4O4	-895.7	-902.397395	6.69739547
2,6-pyridinediamine	C5H7N3	-9.9	-7.82981297	-2.07018703

## Annexes

1-phényl-5-méthyl-1H-tétrazole	C8H8N4	285.9	277.409117	8.49088295
1,2,3-propanetriol 1-dodécanoate	C15H30O4	-1164.6	-1164.6	3.9745E-10
acide 2-butynedioïque	C4H2O4	-580.6	-593.981211	13.3812108
acide dodécanoïque	C12H24O2	-776.5	-754.983758	-21.5162423
acide oxalique	C2H2O4	-824.4	-865.627531	41.2275313
3-benzyl-6-isopropyl-2,5-pipérazinedione	C14H18N2O2	-395.5	-405.533931	10.033931
3-benzyl-6-méthyl-2,5-pipérazinedione	C12H14N2O2	-374	-342.473418	-31.5265815
1,1,4,4-tétraphényl-1,3-butadiène	C28H22	328.9	336.145785	-7.24578543
3-phényl-1,2,4-oxadiazol-5(4H)-one	C8H6N2O2	-110.8	-126.629733	15.8297334
1,2,4-Tri-tert-butylbenzène	C18H30	-253.8	-250.456537	-3.34346345
acide 1,3-benzènedicarboxylique diméthyl ester	C10H10O4	-733.5	-767.928142	34.428142
1,3,5-Tri-tert-butylbenzène	C18H30	-325.6	-302.79443	-22.8055702
N,N'-diméthyl-N,N'-dinitroéthanediamide	C4H6N4O6	-305.5	-326.008662	20.5086617
3-isopropyl-2,5-pipérazinedione	C7H12N2O2	-507.9	-567.205037	59.3050369
L-proline	C5H9NO2	-512.3	-567.116623	54.8166227
(+) $\beta$ -desmotroposantonin acétate	C17H20O4	-891	-880.357686	-10.6423137
(-) $\alpha$ -desmotroposantonin acétate	C17H20O4	-875.6	-848.442517	-27.1574835
8-quinolinol	C9H7NO	-85.6	-105.506569	19.9065687
1,1,4,4-tétraphénylbutane	C28H26	162	169.932004	-7.93200403
9-méthyl-9H-carbazole	C13H11N	104.2	67.3617264	36.8382736
2(R),3(S)-1,2,3,4-butanetétrol	C4H10O4	-919.4	-932.121653	12.7216527
9,10-diphénylanthracène	C26H18	308.7	301.183289	7.5167114
acide 4-aminobenzoïque	C7H7NO2	-414	-406.725739	-7.27426066
2,5,8-triamino-1,3,4,6,7,9,9b-heptaazaphénalène	C6H6N10	14.4	14.4	-2.1373E-10
DL-phénylalanine	C9H11NO2	-462.8	-458.467934	-4.33206554
N-(4-éthoxyphényl)urée	C9H12N2O2	-469.7	-427.458209	-42.2417912
tétracyano-p-quinodiméthane	C12H4N4	627.6	627.6	-2.3731E-07
1,1,2-triphényléthane	C20H18	129.2	124.619393	4.58060678
2-naphtyl acétate	C12H10O2	-309.6	-301.382138	-8.2178621
acide phénylcarbamique butyl ester	C11H15NO2	-398.5	-406.725739	8.22573934

## Annexes

1,8-cyclotétradécadiyne	C14H20	145.3	164.379427	-19.0794273
4-nitroso-diphénylamine	C12H10N2O	212.8	294.834485	-82.0344846
acide peroxydicarbonique dicyclohexyl ester	C14H22O6	-1103.6	-1094.73989	-8.86010823
N,N-diacétylaniline	C10H11NO2	-364	-370.793348	6.7933475
D-arginine	C6H14N4O2	-626	-605.366537	-20.6334633
2,7-diméthylphénantrène	C16H14	36.4	56.0152799	-19.6152799
2,2'-carbonylbis-(1H-pyrrole)	C9H8N2O	-26.1	-16.8870515	-9.21294845
acide benzènepentacarboxylique	C11H6O10	-2110.8	-2118.44705	7.64704988
acide adamantane-2-carboxylique	C11H16O2	-637.35	-642.610163	5.26016302
1,2,3,4,5,6,7,8,9,10,11,12-dodécahydro-triphénylène	C18H24	-194.1	-181.888763	-12.2112375
acide 3,5-diméthyl-2-carboxy-1H-pyrrole-4-propanoïque diméthyl ester	C12H17NO4	-857.3	-879.04437	21.7443699
acide 3,5-Di-tert-butylbenzoïque	C15H22O2	-627.2	-594.684038	-32.515962
9,10-dihydro-9,10-éthanoanthracène-11,11,12,12-tétracarbonitrile	C20H10N4	655.3	632.337572	22.962428
1,3-diamino-2,4,6-trinitrobenzène	C6H5N5O6	-101.5	-75.9189303	-25.5810697
[2.2]paracyclophane	C16H16	144.8	137.228151	7.5718494
5-hydroxytétrazole	CH2N4O	3.1	14.94345	-11.84345
N,N-diméthyl-2,4-dinitroaniline	C8H9N3O4	-31.6	-31.5999999	-1.2015E-07
1,2,3-propanetriol 2-dodécanoate	C15H30O4	-1160.3	-1180.83126	20.5312643
DL-5-éthyl-5-méthyl-2,4-imidazolidinedione	C6H10N2O2	-574.4	-572.121436	-2.27856401
1,3,5,7-tétraméthyladamantane	C14H24	-366.6	-360.688806	-5.91119447
trans-4-nitrostilbène	C14H11NO2	100.7	100.699999	6.7085E-07
(E)-azobenzène	C12H10N2	308.6	316.706109	-8.10610879
Dioxybisméthanol	C2H6O4	-679.4	-684.188245	4.78824475
N-méthyl-N-(2-nitroxyéthyl)nitramine	C3H7N3O5	-150.21	-193.693431	43.4834312
acide (S)- $\alpha$ -hydroxybenzèneacétique	C8H8O3	-598.2	-530.613581	-67.5864186
3,3'-diamino-2,2',4,4',6,6'-hexanitrobiphényle	C12H6N8O12	-15.4	-139.87149	124.47149
1-méthyl-5-méthylaminotétrazole	C3H7N5	189.9	162.881767	27.0182334
1,3-benzènedicarboxamide	C8H8N2O2	-439.6	-430.943568	-8.65643156
3,4-dicyanofuroxane	C4N4O2	458.1	442.049698	16.0503019

## Annexes

1,3,6-triphénylcycloheptatriène	C25H20	272.5	273.866667	-1.36666668
Hexaphénylthane	C38H30	480	466.330517	13.6694826
N,N'-diheptylurée	C15H32N2O	-637.3	-631.421449	-5.87855126
5-phényl-1H-tétrazole	C7H6N4	292.7	307.189201	-14.4892009
2,5-diphényl-2H-tétrazole	C13H10N4	381.2	324.697042	56.5029585
Méthylglyoxime	C3H6N2O2	-133.6	-140.92739	7.3273895
N,N-diphényl-N'-éthylurée	C15H16N2O	-153.7	-157.730261	4.03026082
3-picrylamino-1,2,4-triazole	C8H5N7O6	150.6	156.560457	-5.96045714
acide undécanedioïque	C11H20O4	-1101.1	-1076.37709	-24.7229059
1-hydroxy-L-proline	C5H9NO3	-678.7	-660.031065	-18.6689346
2-méthyl-4-hydroxypyridine	C6H7NO	-184.8	-191.298454	6.49845382
2-(3,3-diacétoxypropényl)-5-nitrofurane	C11H11NO7	-877.4	-831.321404	-46.0785957
3-(5-nitro-2-furyl)-2-propenal	C7H5NO4	-164.2	-172.638598	8.43859805
acide 5-nitro-2-furancarboxylique méthyl ester	C6H5NO5	-472.5	-333.203466	-139.296534
1,5-diphénylformazane	C13H12N4	456.1	458.954272	-2.85427211
(E)-1,2-bis(4-méthylphényl)éthène	C16H16	57.9	66.2718569	-8.37185687
4-benzyl-2,5-oxazolidinedione	C10H9NO3	-560.66	-552.765006	-7.89499446
2,4,N-trinitro-N-méthylaniline	C7H6N4O6	14.9	47.9786365	-33.0786365
Pentaphénylthane	C32H26	358.9	347.013569	11.8864314
2,2',4,4',6,6'-hexanitroazobenzène	C12H4N8O12	240	207.237732	32.7622683
bis(2,2-dinitropropyl)amine	C6H11N5O8	-268.9	-251.645644	-17.2543557
N,N'-dioctylurée	C17H36N2O	-717.8	-773.660017	55.8600167
N,N'-didécylurée	C21H44N2O	-882.1	-879.984098	-2.11590178
méthyl(4-nitrophényl)carbamate	C8H8N2O4	-429.4	-429.4	4.0754E-08
benzo[c]phénanthrène	C18H12	184.7	243.728614	-59.0286139
2,2-diméthyladamantane	C12H20	-257.4	-290.866197	33.4661965
Diphénylfurazane	C14H10N2O	326.2	294.834485	31.3655154
acide tétradécaneperoxyïque	C14H28O3	-753.5	-738.177969	-15.3220313
N-nitrobis(2,2,2-trinitroéthyl)amine	C4H4N8O14	-30.7	-39.0456237	8.34562373
hexahydro-7-méthyl-2H-azépin-2-one	C7H13NO	-362.6	-410.079044	47.4790435
Pérylène	C20H12	182.6	188.520862	-5.92086186

## Annexes

5-amino-3,4-diméthylisoxazole	C5H8N2O	-83	-84.1227456	1.12274561
(E)-2,2',4,4',6,6'-hexanitrostilbène	C14H6N6O12	78.24	61.6172147	16.6227853
7,7-diméthyl-bicyclo[2.2.1]heptane	C9H16	-148.9	-145.065264	-3.83473554
3,5-diphénylisoxazole	C15H11NO	143.8	109.330987	34.4690126
[18]annulène	C18H18	163.3	165.625082	-2.32508223
3,6-diéthyl-oct-4-yne-3,6-diol	C12H22O2	-484.9	-538.146945	53.2469455
N-méthyl-2,4-dinitroaniline	C7H7N3O4	-67.8	-34.0879607	-33.7120393
9,9'-biphénanthryl	C28H18	212.3	209.901337	2.39866255
Fluoranthène	C16H10	187.8	209.203776	-21.4037761
benzoyl(cyclohexyloxy)carbonylpéroxyde	C14H16O5	-747.7	-757.17449	9.47449039
2-méthyl-napht[2,3-d]oxazole	C12H9NO	-53	103.761881	-156.761881
1-méthyl-5-phényl-1H-tétrazole	C8H8N4	289.5	289.302883	0.19711713
Acénaphtylène	C12H8	185.6	211.072649	-25.4726489
2,2,3,3-tétranitrobutane	C4H6N4O8	-183.2	-176.787437	-6.41256301
1,1,1,3,5,5,5-heptanitropentane	C5H5N7O14	-154.4	-90.531088	-63.868912
acide triméthylbutanedioïque	C7H12O4	-1002.49	-990.901067	-11.5889326
acide triéthylbutanedioïque	C10H18O4	-1082.6	-1083.70974	1.10973648
5-phényl-1,2,4-oxadiazol-3(2H)-one	C8H6N2O2	-5.4	2.5127603	-7.9127603
3-nitrobiphényle	C12H9NO2	65.1	77.42762	-12.32762
Di-2-pyrrolylméthane	C9H10N2	124.1	112.747439	11.3525611
1-acétyl-1H-tétrazole	C3H4N4O	81	83.8877142	-2.88771416
4,6-diacétyl-1,3-benzènediol	C10H10O4	-777.8	-776.191043	-1.60895739
2,4-diacétyl-1,3-benzènediol	C10H10O4	-758.14	-748.823475	-9.3165255
Triphénylène	C18H12	151.5	143.956156	7.54384449
Chrysène	C18H12	145.1	150.435177	-5.33517669
acide 2,4-diméthyl-5-carboxy- $\alpha$ -oxo-1H-pyrrole-3-oxoacétique diéthyl ester	C13H17NO5	-1019.2	-1031.42096	12.2209631
acide 3,5-diméthyl-1H-pyrrole-2-carboxylique éthyl ester	C9H13NO2	-478.7	-469.476639	-9.22336141
acide 4,5-diméthyl-1H-pyrrole-2-carboxylique éthyl ester	C9H13NO2	-453.4	-491.955351	38.5553508
acide 3,5-diméthyl-4-éthyl-1H-pyrrole-2-carboxylique éthyl ester	C11H17NO2	-538.5	-543.964694	5.4646942

## Annexes

acide 2,4-diméthyl-1H-pyrrole-3-carboxylique éthyl ester	C9H13NO2	-465.1	-470.125735	5.02573455
acide 2,5-diméthyl-1H-pyrrole-3-carboxylique éthyl ester	C9H13NO2	-479.9	-481.597568	1.69756777
acide 4,5-diméthyl-1H-pyrrole-3-carboxylique éthyl ester	C9H13NO2	-471.1	-471.541812	0.44181249
acide 2,4,5-triméthyl-1H-pyrrole-3-carboxylique éthyl ester	C10H15NO2	-492.8	-497.744772	4.94477197
acide 5-formyl-2,4-diméthyl-1H-pyrrole-3-carboxylique éthyl ester	C10H13NO3	-654.5	-656.865601	2.36560099
acide 4-formyl-3,5-diméthyl-1H-pyrrole-2-carboxylique éthyl ester	C10H13NO3	-645.8	-626.277515	-19.5224846
2,9-diméthyl-2,9-décanediol	C12H26O2	-803	-785.730409	-17.2695912
2,10-diméthyl-2,10-undécanediol	C13H28O2	-841	-842.419067	1.41906697
2,11-diméthyl-2,11-dodécanediol	C14H30O2	-849.7	-838.924973	-10.7750269
hexahydro-5-méthyl-2H-azépin-2-one	C7H13NO	-364.4	-359.53045	-4.86955031
2,2,6,6-tétraméthyl-4-hydroxypipéridine-1-oxyde	C9H18NO2	-392.7	-450.132304	57.4323041
rhodoporphyrine (XV) diméthyl ester	C34H38N4O4	-534	-524.691046	-9.30895375
acide 5-nitro-2-acétoxy-2,5-dihydro-2-furancarboxylique méthyl ester	C8H9NO7	-924.4	-910.834479	-13.5655205
acide pentaméthylbenzoïque	C12H16O2	-538.6	-520.399157	-18.2008434
1,4,5-trinitronaphtalène	C10H5N3O6	36.4	14.7692295	21.6307705
2-phényl-5-méthyl-2H-tétrazole	C8H8N4	274.2	272.945818	1.25418233
4,4'-dinitrohydrazobenzène	C12H10N4O4	105.5	92.2766619	13.2233381
1,2,3-propanetriol 1-décanoate	C13H26O4	-1118.5	-1136.04155	17.5415538
Diadamantane	C14H20	-244.1	230.08512	-474.18512
1,1,1,2-tétraphényléthane	C26H22	221.3	170.965764	50.3342356
benzo[c]cinnoline	C12H8N2	292.4	297.188804	-4.78880402
benzo[h]quinoline	C13H9N	159.9	165.94578	-6.04577967
acide trans-cyclohexane-1,2-dicarboxylique	C8H12O4	-973.3	-964.341839	-8.95816149
3,6-dibenzyl-2,5-pipérazinedione	C18H18N2O2	-287.6	-309.966447	22.3664465
[2.2]métacyclophane	C16H16	78.5	86.3497435	-7.84974349
2,2',2'',2''',4,4',4'',4''',6,6',6'',6'''-dodécannitroquatrathényle	C24H6N12O24	213.1	175.727165	37.3728354

## Annexes

N-glycyl-DL-valine	C7H14N2O3	-836.3	-850.781758	14.4817579
1H-naphto[1,2-d]triazole	C10H7N3	258	240.628573	17.3714275
1,2,3-propanetriol 2-hexadécanoyl ester	C19H38O4	-1271.5	-1257.6998	-13.800204
1,2-anhydro-3,4,5,6-alloinositol	C6H10O5	-916.7	-892.0678	-24.6321996
1-amino-5-phényl-1H-tétrazole	C7H7N5	305.1	320.813771	-15.7137713
$\alpha$ -époxyconduritol-E tétranitrate	C6H6N4O13	-445.5	-427.096401	-18.4035987
1,3,8-trinitronaphtalène	C10H5N3O6	22.5	65.7749463	-43.2749463
acide 4-acétyl-3,5-diméthyl-1H-pyrrole-2-carboxylique éthyl ester	C11H15NO3	-667.4	-667.453436	0.05343591
16,6acide dodécanepéroxoïque	C12H24O3	-694	-701.830809	7.83080874
azo-bis(2,2',4,4',6,6'-hexanitrodiphényl)	C24H6N14O24	472.4	467.646952	4.75304813
3-phényléicosane	C26H4	-552.6	-547.509114	-5.0908864
2,2',4,4'-tétraméthyl-3,3'-dicarbéthoxy-dipyrrylméthène	C19H24N2O4	-825.8	-818.839157	-6.96084305
1,1,2,2-Cyclopropane-tetracarbonitrile	C7H2N4	-513.3	-476.211101	-37.0888992
méthanetétracarbonitrile	C5N4	576.1	566.899885	9.20011466
acide 3,5-diméthyl-1H-pyrrole-2,4-dicarboxylique diéthyl ester	C12H17NO4	-920.6	-926.860883	6.26088332
1-acétyl-1H-imidazole	C5H6N2O	-119.9	-117.844685	-2.05531462
biphényl-2-carbonitrile	C13H9N	232.7	246.323756	-13.623756
(Z)-1,2-bis(4-méthylphényl)éthène	C16H16	97.4	83.9291103	13.4708897
bis(hydroxyméthyl)urée	C3H8N2O3	-727.8	-716.965171	-10.8348287
(dinitrométhyl)benzène	C7H6N2O4	-41.8	-50.1913722	8.39137215
N,N-diphénylacétoacétamide	C16H15NO2	-229.8	-234.538491	4.73849136
coproporphyrin-(I) tétraméthyl ester	C40H46N4O8	-1543.8	-1543.48052	-0.31947577
acide 3,5-diméthyl-4-vinyl-1H-pyrrole-2-carboxylique éthyl ester	C11H15NO2	-473.2	-470.123809	-3.07619101
Biphénylène	C12H8	331.6	261.350214	70.2497865
méthyl phénylcarbamate	C8H9NO2	-188.4	-243.084438	54.6844383
6,7-benzoquinoline	C13H9N	147.8	147.8	3.8654E-12
Acridine	C13H9N	178.8	200.712789	-21.9127885
acide furancarboxylique	C5H4O3	-499.15	-566.662941	67.5129407
1-méthyladiamantane	C15H22	-247.7	-254.759981	7.05998075

## Annexes

$\alpha$ -D-glucose	C6H12O6	-1281.5	-1264.58385	-16.9161462
1,2-bis-(5-tétrazolyl)-éthane	C4H6N8	439.3	425.705863	13.5941373
acide 1,3,5-benzènetricarboxylique triméthyl ester	C12H12O6	-1102.5	-1102.5	1.1596E-11
2,3,7,8,12,13,17,18-octaéthyl-21H,23H-porphine	C36H46N4	-183.7	-183.7	-1.2199E-10
1H-naphto[2,3-d]triazole	C10H7N3	273.9	317.533752	-43.6337524
pyridinium dicyanométhylide	C8H5N3	395.3	411.266122	-15.9661218
1,4,5,8-tétraméthylnaphtalène	C14H16	-18.5	-44.5156552	26.0156552
3,3,5,5-tétraméthyl-1-pyrazoline	C7H14N2	-23.3	-55.5890573	32.2890573
2,3-diazabicyclo[2.2.1]hept-2-ène	C5H8N2	151.8	164.779572	-12.9795721
Aminonitroguanidine	CH5N5O2	23.4	15.725482	7.67451804
1,2,3-benzoxadiazole	C6H4N2O	235.8	234.01562	1.78438045
1,1,2-Tri-p-tolyléthane	C23H24	15.6	-250.660844	266.260844
Azulène	C10H8	209.2	187.343268	21.8567324
N-butylpentanamide	C9H19NO	-466.9	-472.115382	5.21538208
Cubane	C8H8	531.79	517.950609	13.8393914
4,0acide D-glutarique 3,6-lactone	C6H8O7	-1475.5	-1485.10771	9.60771391
5,5'-bitétrazole	C2H2N8	518.4	502.548731	15.8512687
Di-p-tolylacétylène	C16H14	224.6	297.027676	-72.427676
Norbornane	C7H12	-97.9	-123.619049	25.7190493
bicyclo[2.2.2]octane	C8H14	-148.2	-169.406484	21.2064841
Triéthylènediamine	C6H12N2	26.3	27.158355	-0.85835504
bicyclo[3.3.1]nonane	C9H16	-178.66	-177.947174	-0.7128257
trans-anti-trans-tétradécahydro-anthracène	C14H24	-293.3	-294.981149	1.6811493
Adamantane	C10H16	-195.5	-175.837919	-19.6620809
chloroporphyrin-e6-triméthyl ester	C37H42N4O6	-983.8	-966.978338	-16.8216621
2,4-dinitrophénoxyéthanol	C8H8N2O6	-400.9	-438.296662	37.3966617
3-azabicyclo[3.2.2]nonane	C8H15N	-102	-105.506569	3.50656869
bicyclo[3.3.2]décane	C10H18	-165.1	-145.065264	-20.0347355
tricyclo[8.2.2.24,7]hexadécane	C16H28	-247.4	-247.749228	0.34922822
3-méthyladiadamantane	C15H22	-261	-256.651805	-4.34819518

## Annexes

2,4,5,7-tétranitrocarbazole	C12H5N5O8	18	47.45	-29.45
N-nitro-bis(2,2-dinitropropyl)amine	C6H10N6O10	-232.7	-210.627393	-22.0726074
N-nitroso-(2,2-dinitropropyl)amine	C6H10N6O9	-192.7	-174.931516	-17.7684838
1-nitro-3-guanidinourée	C2H5N5O3	-313.3	-236.486464	-76.8135358
1H-pyrazole	C3H4N2	103.3	83.9291103	19.3708897
1H-imidazole	C3H4N2	49.8	61.5574049	-11.7574049
3,4-dihydroxy-3-cyclobutène-1,2-dione	C4H2O4	-606.4	-599.940519	-6.45948105
2,2,6,6-tétraméthyl-4-oxo-1-pipéridinyloxy	C9H16NO2	-298.5	-364.511235	66.011235
Pyrazine	C4H4N2	139.2	115.795772	23.4042281
[3.3]paracyclophane	C18H20	25.02	84.0788098	-59.0588098
1,1-Di-o-tolyléthylène	C16H16	88	107.459797	-19.4597968
1,1-Di-p-tolyléthylène	C16H16	85.9	66.2718569	19.6281431
2-éthyl-2-(hydroxyméthyl)-1,3-propanediol trinitrate	C6H11N3O9	-481.5	-486.065925	4.56592499
bicyclo[3.3.3]undécane	C11H20	-152.6	-148.763139	-3.83686107
Cyclododécane	C12H24	-306.6	-271.229793	-35.3702066
Cyclotétradécane	C14H28	-374.1	-382.657565	8.55756531
1,4,8,11-tétraazacyclotétradécane	C10H24N4	-119.5	-119.895057	0.39505693
Cyclopentadécane	C15H30	-378.1	-364.511235	-13.588765
Cyclohexadécane	C16H32	-410.1	-396.466388	-13.6336122
5-cyclohexène-(1 $\alpha$ ,2 $\beta$ ,3 $\beta$ ,4 $\alpha$ )-1,2,3,4-tétrol tétranitrate	C6H6N4O12	-387.7	-380.887419	-6.81258084
Cycloheptadécane	C17H34	-432.6	-425.172333	-7.42766717
éthylméthyl maléimide	C7H9NO2	-470.3	-455.83654	-14.4634597
Cyclotriacontane	C30H60	-906.2	-906.582924	0.38292415
1,4-benzènedicarboxamide	C8H8N2O2	-436.6	-429.480065	-7.11993486
saccharose octanitrate	C12H14N8O27	-1432.5	-1432.57586	0.07586358
DL-alanine	C3H7NO2	-569	-556.445709	-12.5542906
2-phényl-1H-pyrrole	C10H9N	136.9	153.657347	-16.7573469
4-méthyladiadamantane	C15H22	-262.34	-261.499785	-0.84021542
1,3,5-triamino-2,4,6-trinitrobenzène	C6H6N6O6	-146.9	-149.528136	2.62813598
N-alanylphénylalanine	C12H16N2O3	-717.6	-725.069955	7.46995525

## Annexes

$\alpha$ -D-xylose	C5H10O5	-1057.9	-1023.84942	-34.0505822
1,12-diméthylbenz[a]anthracène	C20H16	135.56	177.706094	-42.1460938
acide oxalique diphenyl ester	C14H10O4	-548.4	-548.8	0.4
3,9-diméthylbenz[a]anthracène	C20H16	76.2	109.330987	-33.1309874
endo-bicyclo[2.2.1]heptane-2-carbonitrile	C8H11N	18.3	18.7279738	-0.42797381
2,2',4,4',6-pentanitrobenzophénone	C13H5N5O11	-115.9	-114.501438	-1.39856203
1H-pyrrole-2-carboxaldéhyde oxime	C5H6N2O	4.2	6.65172299	-2.45172299
2-méthyl-6-hydroxypyridine	C6H7NO	-212.5	-370.64364	158.14364
D-leucine	C6H13NO2	-639.1	-636.33907	-2.76093019
DL-leucine	C6H13NO2	-643.1	-591.646454	-51.4535463
acide 2-oxopentanedioïque	C5H6O5	-1026.3	-1031.42096	5.12096311
acide benzène-pentacarboxylique pentaméthyl ester	C16H16O10	-1929.7	-1930.23236	0.53235812
[16]annulène	C16H16	543.1	543.1	-1.9778E-07
Tétraméthylbutanedinitrile	C8H12N2	14.1	32.3103621	-18.2103621
2,2',4,4',6,6',6''-octanitroterphényle	C18H6N8O16	93.8	83.8877142	9.91228584
2-amino-2,4,6-cycloheptatrièn-1-one	C7H7NO	-32.6	-32.4887129	-0.1112871
4-acétamidobiphényle	C14H14N2O	-161.5	-156.931515	-4.56848523
2-méthyl-2-nitro-1-phényl-1-propanol	C10H13NO3	-319.2	-318.724448	-0.47555157
acide 8,13-diéthyl-3,7,12,17,20-pentaméthyl-21H,23H-porphine-2propanoïque méthyl ester	C33H38N4O2	-387.6	-374.377341	-13.2226593
phylloérythrine monométhyl ester	C34H36N4O3	-368.6	-393.8039	25.2039
1,2,3-propanetriol 2-décanoate	C13H26O4	-1099.4	-1111.08989	11.689887
1,2,3-propanetriol 1-benzoate	C10H12O4	-782	-785.730409	3.73040877
D-alanine	C3H7NO2	-563.6	-552.765006	-10.8349945
désoxyphylloérythrine monométhyl ester	C34H38N4O2	-182.1	-184.49867	2.3986701
1,2,3-propanetriol 2-tétradécanoate	C17H34O4	-1222.6	-1212.14512	-10.4548825
D-mannose	C6H12O6	-1265.6	-1257.6998	-7.90020395
benzotrifuroxane	C6N6O6	622.8	634.706574	-11.9065742
N-nitro-1H-1,2,4-triazol-3-amine	C2H3N5O2	109.7	109.7	-1.1013E-11
N-nitrosobis(2,2,2-trinitroéthyl)amine	C4H4N8O13	49.2	8.19802853	41.0019715
1,3-diphényl-1-tétrazène	C12H12N4	406.89	408.278627	-1.38862723

## Annexes

acide racémique-2,3-diéthylbutanedioïque	C8H14O4	-1032.7	-1038.03512	5.33511701
acide méso-2,3-diéthylbutanedioïque	C8H14O4	-1026.2	-1061.1645	34.9645031
N,N'-bis(2-méthoxyphényl)téréphtalamide	C22H20N2O4	-517.14	-519.007039	1.86703905
1-hydroxy-2,2,6,6-tétraméthyl-4-pipéridinol	C9H19NO2	-446.5	-389.95394	-56.5460604
1-hydroxy-2,2,6,6-tétraméthyl-4-pipéridinone	C9H17NO2	-379.5	-387.266195	7.76619473
$\alpha$ -D-galactose	C6H12O6	-1321.3	-1320.87969	-0.42030556
4,5-diméthylphénantrène	C16H14	89	85.9431537	3.05684626
trans-1,2-Di-o-tolyléthène	C16H16	74.9	66.2718569	8.62814313
5,6-diméthylchrysène	C20H16	132.2	108.388467	23.8115331
(1,1'-bipyrrolidine)-2,2',5,5'-tétrone	C8H8N2O4	-717	-735.015848	18.0158476
acide 2,4-diméthyl-5-carboxy-1H-pyrrole-3-propanoïque 5-éthyl ester	C12H17NO4	-940.5	-918.205161	-22.2948394
2,6-bis(picrylamino)-3,5-dinitropyridine	C17H7N11O16	80.5	80.5	7.4181E-12
propanedioyl dihydrazide	C3H8N4O2	-333.11	-352.447063	19.3370634
1,1,1-trinitro-2-phényléthane	C8H7N3O6	-22.3	-28.4788868	6.17888683
$\alpha$ -D-glucose 2,3,4,5,6-pentaacétate	C16H22O11	-2249.4	-2252.52966	3.12966216
acide D-glutarique 1,4-lactone	C6H8O7	-1437.5	-1404.87547	-32.6245336
2,3-diméthyl-2,3-dinitrobutane	C6H12N2O4	-311.5	-300.965827	-10.5341725
acide 1,2,4,5-benzène-tétracarboxylique diméthyl ester	C12H10O8	-1480.3	-1464.25571	-16.0442875
acide (E)-1-propène-1,2,3-tricarboxylique	C6H6O6	-1233.3	-1231.82207	-1.47792693
acide 3,5-diméthyl-4-(1-oxopropyl)-1H-pyrrole-2-carboxylique éthyl ester	C12H17NO3	-685.1	-685.1	-1.2838E-09
2-méthyl-2-nitro-1,3-propanediol dinitrate	C4H7N3O8	-374.9	-351.501803	-23.3981969
1,1,2,2-Tétra-p-tolyléthane	C30H30	73.6	99.167428	-25.567428
1,12-diméthylbenzo[c]phénantrène	C20H16	152	127.566233	24.4337666
3-nitroisoxazolidine-2-oxyde	C3H4N2O4	-51.1	-60.0412447	8.94124471
cis-1,1'-diméthyl-5,5'-azotétrazole	C4H6N10	665	889.039371	-224.039371
2,2'-diméthyl-5,5'-azotétrazole	C4H6N10	712.5	675.929251	36.5707489
butanedioyl dihydrazide	C4H10N4O2	-367	-312.122607	-54.8773927
N-nitrodiméthylamine	C2H6N2O2	-75.4	-80.3760324	4.97603239
1,4-dinitropipérazine	C4H8N4O4	-56	-79.35196	23.35196

## Annexes

N-nitrobis(2-hydroxyéthyl)amine dinitrate	C4H8N4O8	-260.4	-247.749228	-12.6507718
Cyanamide	CH2N2	58.8	58.7999997	2.8662E-07
1-acétamido-2-nitroguanidine	C3H7N5O3	-193.9	-196.873294	2.97329373
5-méthyl-N-nitro-1H-1,2,4-triazol-3-amine	C3H5N5O2	54.02	129.423102	-75.4031016
1,4-dinitrobutane	C4H8N2O4	-251.6	-265.664589	14.0645885
[6.6]paracyclophane	C24H32	-193.6	-206.651292	13.0512917
5-amino-1H-tétrazole	CH3N5	206.8	213.657384	-6.85738418
acide carbonique dicyclohexyl ester	C13H22O3	-833.5	-827.517686	-5.98231394
2,2',4,4',6,6'-hexanitrobiphényle	C12H4N6O12	68.5	52.0807373	16.4192627
DL-isoleucine	C6H13NO2	-637.4	-633.020697	-4.37930343
2,8,12,18-tétraéthyl-3,7,13,18-tétraméthyl-21H,23H-porphine	C32H38N4	-2.3	2.5127603	-4.8127603
2,7,12,17-tétraéthyl-3,8,13,18-tétraméthyl-21H,23H-porphine	C32H38N4	-25.2	-415.770413	390.570413
3a,4,5,6,7,7a-hexahydro-4,7-méthanoindène	C10H14	-25.2	26.8831068	-52.0831068
$\alpha$ -phénylglyoxime	C8H8N2O2	42.4	42.4	1.1492E-08
Dicyandiamide	C2H4N4	20.3	29.2784069	-8.97840692
Oxamide	C2H4N2O2	-502.9	-492.129425	-10.7705754
2-éthoxy-1,3,5-trinitrobenzène	C8H7N3O7	-207.5	-370.64364	163.14364
4-hydroxy-2H-pyran-3,3,5,5,(4H,6H)-tétraméthanol	C9H18O6	-1268.7	-1267.07479	-1.62520914
acide 3,5-diméthyl-4-propyl-1H-pyrrole-2-carboxylique éthyl ester	C12H19NO2	-577.9	-592.748807	14.8488068
acide 1,2,3,4-benzène-tétracarboxylique	C10H6O8	-1562.3	-1562.33191	0.03191412
9,10-dihydro-9,10[1',2']benzénoanthracène	C20H14	216	237.594236	-21.5942363
cis-1,4-Di-tert-butyl-cyclohexane	C14H28	-374.1	-382.31814	8.21814004
trans-1,4-Di-tert-butyl-cyclohexane	C14H28	-403.3	-394.670641	-8.62935945
1,4,5,8-tétranitronaphtalène	C10H4N4O8	47.5	13.9677205	33.5322795
N-méthyl-N,2,4,6-tétranitroaniline	C7H5N5O8	25.9	2.5127603	23.3872397
acide 1,2,3,5-benzène-tétracarboxylique	C10H6O8	-1570.8	-1562.33191	-8.46808588
acide 1-amino-2,5-diméthyl-1H-pyrrole-3,4-dicarboxylique diéthyl ester	C12H18N2O4	-766.4	-780.374964	13.9749637
1,4-diméthyl-7-(1-méthyléthyl)-azulène	C15H18	61.1	68.4704521	-7.37045206

## Annexes

3-méthyl-4-nitrofuroxane	C3H3N3O4	97.9	66.2718569	31.6281431
N-benzoylglycine	C9H9NO3	-623	-623	-7.0747E-09
1,4-diméthyl-2,3-diaza-bicyclo[2.2.2]oct-2-ène	C8H14N2	18.8	32.2621086	-13.4621086
2,2',4,4',5,5'-hexaméthylidiphénylméthane	C19H24	-157.4	-196.020545	38.6205448
Glycolurile	C4H6N4O2	-498.7	-505.947354	7.24735381
2,4,6-tripicryl-1,3,5-triazine	C21H6N12O18	300	307.118756	-7.11875618
acide méthylbutanedioïque	C5H8O4	-960	-945.934932	-14.065068
acide (E)-2-méthyl-2-butènedioïque	C5H6O4	-826.4	-819.397325	-7.00267547
2-norbornène	C7H10	53.1	47.45	5.65
Diphényléthyne	C14H10	312.4	335.061561	-22.6615605
acide 3,5-diméthyl-1H-pyrrole-2,4-dicarboxylique 4-méthyl ester	C9H11NO4	-846.2	-852.017574	5.81757396
3-benzyl-2,5-pipérazinedione	C11H12N2O2	-347.5	-322.013914	-25.4860864
acide octanedioïque	C8H14O4	-1051.1	-1042.25445	-8.84554526
acide tridécanedioïque	C13H24O4	-1152.6	-1158.76574	6.16574199
N,N'-dinitro-1,2-éthanediamine	C2H6N4O4	-104.1	-111.639976	7.53997624
Heptadecanoic acid	C17H34O1	-489.2	-517.416708	28.2167083
acide éicosanoïque	C20H40O2	-1012.4	-1019.63595	7.23594786
acide (E)-13-docosénoïque	C22H42O2	-961.1	-950.263594	-10.8364062
D-ribose	C5H10O5	-1054.3	-1056.27132	1.97131586
acide 2-acétoxybenzoïque	C9H8O4	-760	-760	-7.803E-08
acide L-ascorbique	C6H8O6	-1177.7	-1195.63032	17.9303241
acide 1,2,4,5-benzène-tétracarboxylique diéthyl ester	C14H14O8	-1644.2	-1662.29489	18.0948916
5,7-dinitro-1-picrylbenzotriazole	C12H4N8O10	298.4	298.4	1.4085E-07
2,4-dinitrophénol	C6H4N2O5	-238.5	-187.475329	-51.0246706
1,5-diméthyl-tétrazole	C3H6N4	185	185	2.9019E-11
1-phényl-5-hydroxy-tétrazole	C7H4N4O	108.2	109.330987	-1.13098744
2,2',2'',4,4',4'',6,6',6''-nonanitroterphényle	C18H5N9O18	130.9	127.234204	3.66579579
Trinitrométhane	CHN3O6	-49.8	-45.9906793	-3.80932069
acide 8,13-diéthyl-3,7,12,17-tétraméthyl-21H,23H-porphine-2propanoïque méthyl ester	C32H36N4O2	-392.6	-427.096401	34.4964013

## Annexes

5,6,11,12-tétraphénylnaphtacène	C42H28	611.6	590.555959	21.0440409
acide benzènehexacarboxylique	C12H6O12	-2298.7	-2284.5326	-14.1674037
2,4-dinitro-1,3-benzènediol	C6H4N2O6	-417.9	-408.821229	-9.07877067
Triphénylméthane	C19H16	170.8	164.379427	6.42057267
N,N-diphénylacétamide	C14H13NO	-44.3	-34.0879607	-10.2120393
3-éthyl-2,4,5-triméthyl-1H-pyrrole	C9H15N	-90.58	-108.839775	18.2597747
N'-éthyl-N-méthyl-N-phénylurée	C10H14N2O	-304.7	-253.655496	-51.0445037
(E,E)-diphényléthanedione dioxime	C14H12N2O2	16.2	15.341645	0.85835504
acide 2,4-diméthyl-1H-pyrrole-3-carboxylique méthyl ester	C8H11NO2	-423	-414.94367	-8.05633037
5-(1 $\alpha$ ,2 $\beta$ ,3 $\beta$ ,4 $\alpha$ )-1,2,3,4-cyclohexènetétrol	C6H10O4	-841.1	-832.808199	-8.29180079
1,1,1-triphényléthane	C20H18	156.1	134.565774	21.5342258
1,2-dinitrobenzène	C6H4N2O4	-4.4	-4.39999986	-1.4081E-07
acide 1,2,4-benzènetricarboxylique	C9H6O6	-1190.1	-1180.83126	-9.26873566
5-méthylamino-1H-tétrazole	C2H5N5	193.4	187.611409	5.78859124
Protoadamantane	C10H16	-152.5	-233.087513	80.587513
1,3,5-triphénylformazane	C19H16N4	541.8	1159.74602	-617.94602
2-méthyl-2,3,3-trinitrobutane	C5H9N3O6	-332.21	-337.11351	4.90351026
N-nitrosuccinimide	C4H4N2O4	-329.4	-338.680772	9.28077217
1,2-bis(3-carboxypropanoyl) hydrazine	C8H12N2O6	-1337.1	-1354.83499	17.7349869
$\beta$ -cyanopropiophénone	C10H9NO	-71.7	-65.0017542	-6.69824577
5-méthoxy-1H-tétrazole	C2H4N4O	69.1	49.7495265	19.3504735
1-phényl-1H-tétrazole	C7H6N4	339.3	403.725742	-64.425742
2,7-diméthylbenzo-[1,2-d,3,4-d]bisoxazole	C10H8N2O2	-209.6	-189.17986	-20.4201399
1,2-Di-p-tolyléthane	C16H18	-42.9	-65.0907553	22.1907553
p-benzylidèneaniline	C13H11N	184.9	164.379427	20.5205727
[2.2]métaparacyclophane	C16H16	130.2	135.140414	-4.94041426
acide 3-phényl-2-propénoïque anhydride	C18H14O3	-348.5	-327.454213	-21.0457867
(E,E)-1,4-diphénylbutadiène	C16H14	174.1	98.7045174	75.3954826
acide 3-(2-furanyl)-2-propénoïque	C7H6O3	-460.24	-411.205778	-49.0342217
N,N'-dicarbéthoxy-éthylènediamine	C8H16N2O4	-982.5	-966.978338	-15.5216621

## Annexes

Butanamide	C4H9NO	-365.8	-383.555926	17.7559265
acide 4-aminohexanoïque	C6H13NO2	-661.1	-592.584728	-68.5152724
Tétraméthyl diazétine	C6H12N2	86.7	99.8103691	-13.1103691
1-méthyl-5-aminotétrazole	C2H5N5	179.41	184.430667	-5.02066678
5-(diméthylamino)-tétrazole	C3H7N5	182.2	182.338454	-0.13845371
acide 5-(hydroxyméthyl)-3-méthyl-1H-pyrrole-2,4-dicarboxylique diéthyl ester	C12H17NO5	-1057.8	-952.014452	-105.785548
1,2,3-propanetriol 1-hexadécanoyl ester	C19H38O4	-1286.3	-1249.61675	-36.6832481
5,5'-méthylènebis(acide 2,4-diméthyl-1H-pyrrole-3carboxylique)diéthyl ester	C19H26N2O4	-859.8	-859.046426	-0.75357406
acide tétradécanoïque	C14H28O2	-835.8	-831.234075	-4.56592499
acide 3,5-diméthyl-1H-pyrrole-2,4-dicarboxylique diméthyl ester	C10H13NO4	-853.4	-866.993467	13.5934671
Dotriacontane	C32H66	-970.7	-950.263594	-20.4364062
5-amino-1-phényl-1H-tétrazole	C7H7N5	311	301.916808	9.08319236
2-phényl-5-carboxytétrazole	C8H6N4O2	-41.4	-69.8431995	28.4431995
5,8-diméthylbenzo[c]phénantrène	C20H16	105.4	109.044743	-3.64474347
2,6-bis(picrylazo)-3,5-dinitropyridine	C17H5N13O16	596	596	-6.5938E-12
Benzamide	C7H7NO	-204.6	-242.151674	37.5516742
acide 2-nitrobenzoïque	C7H5NO4	-398.7	-398.554017	-0.14598258
Protoporphyrine	C34H34N4O4	-531.9	-672.825626	140.925626
acide éthanedioïque diméthyl ester	C4H6O4	-758.8	-770.429622	11.6296222
acide 1,3,5-benzènetricarboxylique	C9H6O6	-1193.5	-1138.79142	-54.7085841
3,4-dicyano-1,2,4-oxadiazole	C4N4O	444.4	436.230073	8.16992684
N-glycylglycine	C4H8N2O3	-750.9	-760.547166	9.64716604
Nitroguanidine	CH4N4O2	-87.07	-79.8189914	-7.25100858
Glyoxime	C2H4N2O2	-89.2	-156.556719	67.356719
2,6-diméthylbenzo-[1,2-d,5,4-d]bisoxazole	C10H8N2O2	-217.6	-222.449703	4.84970262
3-cyano-5-(cyanofurazanyl)-1,2,4-oxadiazole N-oxyde	C6N6O3	547.5	548.352175	-0.85217519
acide 4-aminobutanoïque	C4H9NO2	-581.2	-607.595538	26.3955382
3,6-bis(hydroxyméthyl)-2,5-pipérazinedione	C6H10N2O4	-879.2	-876.326501	-2.87349949

## Annexes

3-isopropyl-6-(2-méthyl-propyl)-2,5-pipérazinedione	C11H20N2O2	-635.13	-634.029915	-1.10008495
2-nitro-2-propyl-1,3-propanediol	C6H13NO4	-627.6	-675.620776	48.0207758
Glycine	C2H5NO2	-533.5	-549.19994	15.6999403
L-alanine	C3H7NO2	-561.91	-563.958497	2.04849704
Serine	C3H7NO3	30.5	26.1679345	4.33206549
benzo[a]anthracène	C18H12	165.3	173.469927	-8.16992684
1',2',3',4'-tétrahydro-1,2-dinaphtylméthane	C21H20	44.1	67.7039489	-23.6039489
acide aspartique	C4H7NO4	-977.5	-966.978338	-10.5216621
L-glutamine	C5H10N2O3	-832.7	-830.441487	-2.25851316
acide L-glutamique	C5H9NO4	-1009.4	-1001.21966	-8.18033581
acide 2,2-diéthylbutanedioïque	C8H14O4	-1038	-1028.77463	-9.2253749
1,8-diméthylnaphtalène	C12H12	24.3	14.7692295	9.53077047
acide 1,2,4,5-benzènetétracarboxylique dipropyl ester	C16H18O8	-1761.7	-1750.68069	-11.0193094
acide 1,2,3-benzènetricarboxylique	C9H6O6	-1160.9	-1157.87405	-3.02594725
Créatine	C4H9N3O2	-539.7	-552.251534	12.5515339
acide hexadécanoïque	C16H32O2	-897.8	-876.557118	-21.2428819
acide octadécanoïque	C18H36O2	-958.2	-942.030272	-16.1697282
Urée	CH4N2O	-334.2	-305.168335	-29.0316647
(E,Z)-diphényléthanedione dioxime	C14H12N2O2	53.3	39.6624962	13.6375038
(Z,Z)-diphényléthanedione dioxime	C14H12N2O2	41.8	47.45	-5.65
2,6-dinitrophénol	C6H4N2O5	-212.3	-212.3	1.9469E-07
β-D-fructose	C6H12O6	-1267.7	-1311.08964	43.3896359
D-sucrose	C12H22O11	-2226.1	-2224.68381	-1.41619097
N-acétyl-N-cyclohexyl-phénylamine	C14H19NO	-300	-262.638748	-37.3612523
acide (-)-2,3-diméthylbutanedioïque	C6H10O4	-983.7	-1082.41149	98.7114886
L-asparagine monohydrate	C4H10N2O4	-1095.7	-1104.2616	8.5615967
acide octadécaneperoxyïque	C18H36O3	-861.7	-855.348221	-6.35177933
acide 2-méthoxybenzoïque	C8H8O3	-542.79	-571.103046	28.3130459
9,10-diméthyl-1,2-benzanthracène	C20H16	139.8	594.705562	-454.905562
(Z,Z)-1,4-diphénylbutadiène	C16H14	187.9	186.733312	1.16668821

## Annexes

2-aminoacridine	C13H10N2	-5.06	-4.14956065	-0.91043935
2,6-diméthylnaphtalène	C12H12	-7.8	14.94345	-22.74345
acide 2-naphtalèneacétique	C12H10O2	-372	-394.86251	22.8625095
2,7-diméthylnaphtalène	C12H12	-6.5	-6.5	4.3729E-11
tétra-p-tolyléthène	C30H28	171.2	179.690348	-8.49034812
3-méthyl-2,5-oxazolidine-dione	C4H5NO3	-608.8	-608.434959	-0.36504086
3-((4-hydroxyphényl)méthyl)-2,5-pipérazinedione	C11H12N2O3	-521	-549.19994	28.1999403
1,3,5-Tripicrylbenzene	C24H9N9O18	-244.1	-243.320885	-0.77911487
2,2',2'',2''',4,4',4'',4''',6,6',6'',6'''-dodécanitro-3,3'bis(phénylazo)biphényle	C24H6N16O24	723.83	739.215	-15.385
acide (Z)-1-propène-1,2,3-tricarboxylique	C6H6O6	-1232.7	-1264.52387	31.823874
acide 3-méthoxybenzoïque	C8H8O3	-561.7	-543.964694	-17.7353058
Triphényléthylène	C20H16	233.4	216.672821	16.7271787
N,N'-dibenzylidène-hydrazine	C14H12N2	334	314.409282	19.5907181
1,4-benzènediméthanol	C8H10O2	-1224.4	-1264.52387	40.123874
N-méthyl-2,6-dinitroaniline	C7H7N3O4	-14.9	-33.6774264	18.7774264
Octadécane	C18H38	-577.4	-617.871226	40.4712258
2-méthyl-2-nitropropane	C4H9NO2	-231.5	-298.950512	67.4505118
2,2,3,3-tétraméthylbutane	C8H18	-275.1	-274.94164	-0.15835961
2,2-dinitropropane	C3H6N2O4	-192.4	-217.872649	25.472649
1,1,1-trinitroéthane	C2H3N3O6	-112.9	-100.877107	-12.0228933
β-lactose	C12H22O11	-2236.7	-2240.69129	3.99129408
acide 3-pyridinecarboxylique	C6H5NO2	-345.4	-349.691428	4.29142832
2-éthyl-2-nitro-1,3-propanediol	C5H11NO4	-618.8	-618.8	-9.562E-08
acide 2,2-diméthylbutanedioïque	C6H10O4	-989.2	-972.020381	-17.1796187
5-nitrofurazone	C6H6N4O4	-226.4	-225.754079	-0.64592074
N,N'-1,2-éthanediylbis-(N-(carboxyméthyl)glycine)	C10H16N2O8	-1788.1	-1779.93252	-8.16748449
octahydro-4,7-méthano-1H-indène	C10H16	-114.4	-111.483212	-2.91678777
L-tyrosine	C9H11NO3	-709.4	-519.985804	-189.414196
2,3-dinitroaniline	C6H5N3O4	-14.2	-37.1741747	22.9741747

## Annexes

1,8-dinitronaphtalène	C10H6N2O4	39.7	26.820537	12.879463
Créatinine	C4H7N3O	-239.3	-226.430122	-12.8698783
3-méthyl-2,4,6-trinitrophénol	C7H5N3O7	-256.3	-270.940619	14.6406187
N'-(1-naphtyl)-N,N-diphénylurée	C23H18N2O	78.2	8.59238238	69.6076176
2,4-dinitro-1,3-diméthylbenzène	C8H8N2O4	-86.61	30.7315872	-117.341587
acide 6-aminohexanoïque	C6H13NO2	-640.6	-631.421449	-9.17855126
Ethyl N,N-diphenylcarbamate	C15H15NO2	754.6	739.215	15.385
N,N-diphénylurée	C13H12N2O	-126.7	-54.0511898	-72.6488102
Acétamide	C2H5NO	-315.6	-307.858505	-7.74149542
9,10-diméthylphénantrène	C16H14	47.6	56.0152799	-8.41527988
4-nitroso-1-naphtol	C10H7NO2	-108.2	-133.794696	25.594696
2,4-dinitro-1-naphtol	C10H6N2O5	-181.7	-286.190317	104.490317
1,5-dinitronaphtalène	C10H6N2O4	26.6	-2.98566234	29.5856623
1-méthyl-2,6-dinitrobenzène	C7H6N2O4	-52.4	-70	17.6
2,6-dinitroaniline	C6H5N3O4	-51	-604.098227	553.098227
2-méthoxy-1,3,5-trinitrobenzène	C7H5N3O7	-160.6	-169.813351	9.21335123
N-benzyl-diphénylamine	C19H17N	182.8	124.442386	58.3576144
acide 2-méthylbenzoïque anhydride	C16H14O3	-537.2	-503.164543	-34.0354567
acide méso-2,3-diméthylbutanedioïque	C6H10O4	-979.6	-983.320044	3.72004429
acide racémique-2,3-diméthylbutanedioïque	C6H10O4	-984	-966.087658	-17.9123423
Galactitol	C6H14O6	-1364.1	-1365.51619	1.41619097
DL-proline	C5H9NO2	-533.3	-531.592056	-1.70794428
2-nitrofurane	C4H3NO3	-106.4	-95.9687564	-10.4312436
acide cis-cyclohexane-1,2-dicarboxylique	C8H12O4	-968.3	-971.303049	3.00304865
3,4-dinitroaniline	C6H5N3O4	-34.18	-15.2878037	-18.8921963
2,4-dinitro-1-éthoxybenzène	C8H8N2O5	-226.9	-264.16775	37.2677499
1-(2-naphtalénylméthyl) naphtalène	C21H16	160.2	156.560457	3.63954286
acide (R,S)- $\alpha$ -hydroxybenzèneacétique	C8H8O3	-589.9	-575.727463	-14.1725375
N,N'-diméthyl-N,N'-diphénylurée	C15H16N2O	-75.02	-59.9110595	-15.1089405
N,N-diphényl-N'-2-hydroxyéthylurée	C15H16N2O2	-321.9	-265.664589	-56.2354115
éthylène-bis-diphénylurée	C28H26N4O2	-201.67	-192.494823	-9.17517709

## Annexes

1,3,5-triphénylbenzène	C24H18	223	229.3947	-6.3946996
2,2,7,7-tétraméthyl-octa-3,5-diyne	C12H18	154.5	109.330987	45.1690126
9,10-dihydro-anthracène	C14H12	66.4	88.6678363	-22.2678363
4,4'-diméthylbiphényle	C14H14	12.2	15.725482	-3.52548196
biphényl-4,4'-diacétamide	C16H16N2O2	-472.5	-392.547553	-79.9524475
2-(diacétoxy-méthyl)furane	C9H10O5	-891.5	-883.120485	-8.37951486
$\alpha$ -oxobenzèneacétonitrile	C8H5NO	38.9	8.1993052	30.7006948
$\beta$ -oxobenzènepropanenitrile	C9H7NO	-22.4	6.66912815	-29.0691282
5-amino-2-méthyl-2H-tétrazole	C2H5N5	202.5	190.479616	12.0203836
N-DL-leucylglycine	C8H16N2O3	-868.4	-853.949215	-14.4507847
N-(1H-tétrazol-5-yl)-acétamide	C3H5N5O	-5.7	2.5127603	-8.2127603
5-méthyl-2,4-imidazolidinedione	C4H6N2O2	-489.8	-507.039793	17.2397933
acide 2-aminohexanoïque	C6H13NO2	-640.8	-626.277515	-14.5224846
DL-ornithine	C5H12N2O2	-665.8	-665.8	-1.6041E-10
4,6-dinitro-1,3-diméthylbenzène	C8H8N2O4	-102.7	-116.163385	13.4633851
4,6-dinitro-1,3-benzènediol	C6H4N2O6	-441.83	-439.206446	-2.62355402
[1.8]paracyclophane	C21H26	-82.7	-80.5840982	-2.11590178
1H-1,2,4-triazole-3-amine	C2H4N4	76.8	38.1711865	38.6288135
3-isopropylphénol	C9H12O	-40	-35.7148677	-4.28513234
L-leucine	C6H13NO2	-640.65	-635.629163	-5.02083712
2,5-dinitroaniline	C6H5N3O4	-47.7	-17.007275	-30.692725
(Z)-1,2-bis(4-nitrophényl)éthylène	C14H10N2O4	74.1	77.9781092	-3.87810916
2,4,6-trinitrophénoxyéthyl nitrate	C8H6N4O10	-292.8	-315.972485	23.1724847
2-(2,4-dinitrophénoxy)-éthanol nitrate	C8H7N3O8	-292.8	-258.47045	-34.3295496
2-méthyl-2-nitro-3-phényl-1-propanol	C10H13NO3	-347.8	-328.484137	-19.315863
2,4,6-trinitro-1,3,5-tris(méthylnitramino)benzène	C9H9N9O12	112.3	121.557456	-9.25745559
Tribenzylamine	C21H21N	139.7	148.92947	-9.22947048
4-méthyl-diphénylamine	C13H13N	48.9	83.5595788	-34.6595788
Nitroguanylazide	CH2N6O2	295.1	269.923984	25.1760163
2-isopropyl-2-nitro-1,3-propanediol	C6H13NO4	-625.2	-628.597463	3.39746296

## Annexes

3-hydroxy-4-méthoxy-benzaldéhyde	C8H8O3	-459	-498.721632	39.7216323
1,2,3-propanetriol 2-octadécanoyl ester	C21H42O4	-1329.4	-1263.59209	-65.8079067
N,N'-dinitro-N,N'-bis(2-hydroxyéthyl)oxamide dinitrate	C6H8N6O12	-567.4	-580.672769	13.2727692
acide 4-nitrobenzoïque	C7H5NO4	-427.9	-338.10122	-89.7987798
1,4-benzènedicarbonitrile	C8H4N2	268.2	260.121268	8.07873242
acide benzènehexacarboxylique hexaméthyl ester	C18H18O12	-2225	-2206.80081	-18.1991943
tétrahydro-1,2,4,5-tétrazine-3,6-dione	C2H4N4O2	-261.5	-274.636506	13.1365058
4-éthyl-3,5-diméthyl-1H-pyrrole-2-carboxaldéhyde	C9H13NO	-255.9	-271.255033	15.3550328
1,3-benzènedicarbonitrile	C8H4N2	271.4	271.4	-4.3258E-11
bis(2,2,2-trinitroéthoxy)méthane	C5H6N6O14	-403.4	-402.903204	-0.49679628
4-pyridinol	C5H5NO	-149.83	-178.440888	28.6108882
Pentanamide	C5H11NO	-379.6	-287.450248	-92.1497522
n-propylcarbamate	C4H9NO2	-561.2	-552.765006	-8.43499446
chlorin-p6-triméthyl ester	C36H40N4O6	-1263	-1246.6871	-16.3129049
Hexanamide	C6H13NO	-426.9	-406.725739	-20.1742607
5-(di(2-propényl)amino)-1H-tétrazole	C7H11N5	350.2	352.766531	-2.5665309
acide 5-aminohexanoïque	C6H13NO2	-652.6	-635.919109	-16.6808908
4,4'-méthylènebis(acide 3,5-diméthyl-1H-pyrrole-2carboxylique)diéthyl ester	C19H26N2O4	-872.3	-855.006203	-17.2937968
Octanamide	C8H17NO	-474.5	-452.187243	-22.3127572
acide tétraméthylbutanedioïque	C8H14O4	-1015.2	-1004.98935	-10.2106514
trinitroacétonitrile	C2N4O6	171.5	153.192092	18.3079085
Tétraphénylméthane	C25H20	246	226.42051	19.5794897
Triméthylurée	C4H10N2O	-331.5	-322.558774	-8.94122577
1,1,2,2-tétraphényléthane	C26H22	213.1	244.881642	-31.7816423
Tétraphényléthylène	C26H20	311.5	288.698253	22.8017467
Tétraphénylhydrazine	C24H20N2	457.9	457.9	3.817E-08
2,4-diméthyl-1,3,5-trinitrobenzène	C8H7N3O6	-103.81	-90.7587083	-13.0512917
bicyclo[2.2.1]hept-5-ène-2,2,3,3-tétracarbonitrile	C11H6N4	617.3	617.3	-8.6061E-11

## Annexes

Tartramide	C4H8N2O4	-1212.9	-1213.03681	0.13680671
acide 1,2,4,5-benzènetétracarboxylique tétraméthyl ester	C14H14O8	-1435.8	-1452.09434	16.294338
acide phénylbutanedioïque	C10H10O4	-841.8	-846.585749	4.78574942
acide 2-éthylbutanedioïque	C6H10O4	-994.3	-973.606433	-20.6935669
acide (R)-hydroxybutanedioïque	C4H6O5	-1109	-1103.36991	-5.63009254
acide tridécanoïque	C13H26O2	-816.1	-785.730409	-30.3695912
L-phénylalanine	C9H11NO2	-468.8	-433.482733	-35.3172673
4-méthyl-1,1'-biphényle	C13H12	55.4	70.7390875	-15.3390875
acide 5-nitrofurane-2-carboxylique	C5H3NO5	-524.2	-549.318012	25.1180123
pyrophaeophorbide-a-monométhyl ester	C34H36N4O3	-376.1	-372.346857	-3.7531429
4,6-diamino-1,3,5-triazin-2(1H)-one	C3H5N5O	-299.7	-318.830424	19.1304237
6-amino-1,3,5-triazine-2,4(1H,3H)-dione	C3H4N4O2	-498.4	-530.992692	32.5926924
acide nonadécanoïque	C19H38O2	-987.8	-975.177875	-12.6221254
2,4,6-trinitrophénylhydrazine	C6H5N5O6	36.7	125.122971	-88.4229709
5-méthyluracile	C5H6N2O2	-463.2	-455.83654	-7.36345969
acide 5-aminopentanoïque	C5H11NO2	-614.71	-604.145928	-10.5640723
N-serylserine	C6H12N2O5	-1179.1	-1180.83126	1.73126434
Uracile	C4H4N2O2	-430.4	-434.142458	3.74245833
cis-4-nitrostilbène	C14H11NO2	130.2	146.130264	-15.9302639
5-méthyl-5H-indéno[2,1-b]quinoline	C17H13N	198.8	200.712789	-1.91278851
3,3,2acide 1,2,4,5-benzènetétracarboxylique tétraéthyl ester	C18H22O8	-1589.8	-1596.84413	7.04412798
1-(1H-tétrazol-5-yl)-guanidine	C2H5N7	132.3	124.186028	8.11397203
1,1,4,6,7-pentaméthylindane	C14H20	-177.9	-177.9	-5.0931E-09
1-(2-propényl)-5-(2-propénylamino)tétrazole	C7H11N5	348.6	339.861437	8.73856277
éthènetétracarbonitrile	C6N4	620.3	590.465822	29.8341779
hexahydro-2(1H)-azocinone	C7H13NO	-349.1	-306.255814	-42.8441865
Pentetic Acid	C14H23N3O10	791.7	838.041433	-46.3414331
2-pipéridone	C5H9NO	-306.6	-289.536875	-17.0631246
(E,E,E)-1,5,9-cyclododécatriène	C12H18	26.3	11.2023373	15.0976627
1,2-bis(2-cyano-2-propyl)-hydrazine	C8H14N4	116.2	124.619393	-8.41939322

## Annexes

acide D-glutamique	C5H9NO4	-1003.32	-990.901067	-12.4189326
1,7-dihydro-6H-purin-6-one	C5H4N4O	-112.4	-116.748195	4.34819518
4,5-diméthyl-4-cyclohexène-1,1,2,2-tétracarbonitrile	C12H10N4	465.3	431.398176	33.9018236
acide dodécanedioïque	C12H22O4	-1135.8	-1137.45284	1.65283762
N,N'-bis(3-méthoxyphényl)téréphtalamide	C22H20N2O4	-553.5	-543.964694	-9.5353058
D-mannitol	C6H14O6	-1337.4	-1319.98801	-17.4119948
acide salicylique	C7H6O3	-604.1	-617.70862	13.60862
acide 3-N-phénylamino-2-naphtoïque	C17H13NO2	-265.4	-195.32903	-70.07097
5-nitro-2-furancarboxaldéhyde	C5H3NO4	-227.9	-243.070497	15.170497
3,7-dihydro-1H-purine-2,6-dione	C5H4N4O2	-381.9	-368.724139	-13.1758612
acide urique	C5H4N4O3	-624.6	-625.752101	1.15210132
Pentaméthylbenzène	C11H16	-137.6	-143.520862	5.92086186
2-méthyladamantane	C11H18	-221.3	-205.26857	-16.0314298
5-nitro-2-furamide	C5H4N2O4	-332.3	-327.263704	-5.03629629
1,3-diméthyladamantane	C12H20	-286.4	-274.888435	-11.5115645
acide phénylalanine-N-carboxylique diméthyl ester	C12H15NO4	-776.3	-770.429622	-5.87037777
hexacyclo[6.2.1.13,6.02,7.04,10.05,9]dodécane	C12H14	51.5	54.0917491	-2.59174912
L-asparagine	C4H8N2O3	-789.6	-810.392306	20.7923059
DL-lysine	C6H14N2O2	-681.5	-682.588997	1.08899692
2-nitro-1-phénylpropène	C9H9NO2	-18.2	-51.3327111	33.1327111
1,3,5-triméthyladamantane	C13H22	-332.6	-324.076325	-8.5236751
acide 1-méthyl-1-phényléthyl ester benzèncarbopéroxoïque	C16H16O3	-231.7	-217.988209	-13.7117912
β-D-méthylglucopyranoside	C7H14O6	-1242.8	-1037.82838	-204.971623
L-histidine	C6H9N3O2	-442.1	-404.176585	-37.9234153
chlorin-e6-triméthyl ester	C37H42N4O6	-947.7	-938.490204	-9.20979635
Cytosine	C4H5N3O	-223.6	-206.228573	-17.3714275
N,N'-bis(4-méthoxyphényl)téréphtalamide	C22H20N2O4	-552.4	-550.920557	-1.47944329
N,3,3,3-tétranitro-N-(2,2,2-trinitroéthyl)-propylamine	C5H6N8O14	-88.7	111.744256	-200.444256
L-valine	C5H11NO2	-623.5	-635.497865	11.9978654

## Annexes

L-thréonine	C4H9NO3	-777.3	-772.949756	-4.35024404
2,5-diphényl-1,3,4-oxadiazole	C14H10N2O	163.4	144.288346	19.1116536
2-pyridinol	C5H5NO	-173.3	-184.49867	11.1986701
acide hexadécaneperoxyïque	C16H32O3	-806.6	-799.628881	-6.97111869
L-tryptophane	C11H12N2O2	-415.6	-414.137779	-1.46222064
Adénine	C5H5N5	94.7	94.7	-1.5845E-11
L-isoleucine	C6H13NO2	-643.3	-638.437787	-4.8622133
Guanine	C5H5N5O	-184.7	-187.922883	3.22288343
3,4,5,6-tétraméthylphénantrène	C18H18	21.3	21.3000004	-4.2773E-07
(E)-1,2-bis(4-nitrophényl)éthylène	C14H10N2O4	54.9	77.9781092	-23.0781092
2,4,5,7-tétraméthylphénantrène	C18H18	6.3	18.5646547	-12.2646547
2-(diéthylamino)acétamide	C6H14N2O	-359.2	-367.937094	8.73709379
5-cyano-1H-tétrazole	C2HN5	397.9	397.9	-1.0278E-08
1,5-diphényl-1H-tétrazole	C13H10N4	402	394.164835	7.83516475
5,5'-hydrazotétrazole	C2H4N10	565.2	599.101824	-33.9018236
3-(5-tétrazolylazo)-pentan-2,4-dione	C6H8N6O2	13.7	18.7279738	-5.02797381
5-amino-1-(2-propényl)-1H-tétrazole	C4H7N5	260.5	272.945818	-12.4458177
2,2'-diéthyl-5,5'-azotétrazole	C6H10N10	623.8	636.799561	-12.9995609
5-amino-2-(2-propényl)-2H-tétrazole	C4H7N5	280.6	273.866667	6.73333332
acide 3-méthyl-5-(1-hydroxyéthyl)-1H-pyrrole-2,4-dicarboxylique diéthyl ester	C13H19NO5	-1148.3	-1165.67538	17.3753775
acide 2,4-diméthyl-1H-pyrrole-5-carboxylique méthyl ester	C8H11NO2	-422.3	-428.254703	5.95470264
4-diphénylamino-carbonilmorpholine	C17H18N2O2	-217.8	-198.198896	-19.6011035
N-pipéridyl-N,N'-diphénylformamide	C18H20N2O	-109.4	-109.4	4.6015E-11
1,2-dinitroéthane	C2H4N2O4	-181.4	-174.933569	-6.46643098
acide racémique-2,3-diphénylbutanedioïque	C16H14O4	-744.6	-733.211814	-11.3881857
N-valylphénylalanine	C14H20N2O3	-774.6	-771.681806	-2.91819358
2,2-diméthyl-1,3-dinitropropane	C5H10N2O4	-281	-242.184517	-38.8154831
2-méthyl-2-nitro-1-propanol	C4H9NO3	-411	-413.390365	2.39036465
(E)-butènedinitrile	C4H2N2	265.4	268.59902	-3.19901974
1-méthyladamantane	C11H18	-241.6	-224.590809	-17.0091907

## Annexes

2-méthyl-2-nitro-1,3-propanediol	C4H9NO4	-579.4	-593.981211	14.5812108
5,5-diméthyl-2,4-imidazolidinedione	C5H8N2O2	-536.1	-547.674567	11.5745672
2-(hydroxyméthyl)-2-méthyl-1,3-propanediol	C5H12O3	-749.9	-765.274622	15.3746223
2-amino-2-(hydroxyméthyl)-1,3-propanediol	C4H11NO3	-732.6	-711.336207	-21.2637929
acide 2-hydroxy-1,2,3-propanetricarboxylique	C6H8O7	-1548.6	-1562.33191	13.7319141
2-éthyl-2-(hydroxyméthyl)-1,3-propanediol	C6H14O3	-756.3	-763.346213	7.04621337
pentaérythritol tétranitrate	C5H8N4O12	-547.8	-531.393778	-16.406222
2,2'-azo-bis-isobutyronitrile	C8H12N4	243.9	243.9	-6.483E-11
acide benzoïque 2-benzoylhydrazide	C14H12N2O2	-202.14	-197.23649	-4.90351026
acide 2,4-diméthyl-5-(1-oxopropyl)-1H-pyrrole-3-carboxylique éthyl ester	C12H17NO3	-703.54	-710.791009	7.25100858
Propanamide	C3H7NO	-340.2	-354.082051	13.882051
1,2-diacétyl-1,2-diphénylhydrazine	C16H16N2O2	-191.63	-187.849573	-3.78042695
acide (S)-2-hydroxypropanoïque	C3H6O3	-710.2	-745.719357	35.5193566
1,2,4,5-Tétra-tert-butylbenzène	C22H38	-297.9	-300.400078	2.50007811
Camphène	C10H16	-80.54	-70.1246195	-10.4153805
2,2'-bis(4-hydroxyphényl)propane	C15H16O2	-371.9	-367.937094	-3.96290621
1,1,1,5,9,9,9-heptanitro-3,7-dioxa-5-azanonane	C6H8N8O16	-387.9	-327.518942	-60.3810585
1,1,1,5,7,9,13,13,13-nonanitro-3,11-dioxa-5,7,9-triazatridécane	C8H12N12O20	-344.9	-362.98088	18.0808798
1,2,3,4-tétraphényl-1,3-butadiène	C28H22	357.7	316.706109	40.9938912
DL-thréonine	C4H9NO3	-765.8	-798.164654	32.3646542
2,2,6,6-tétraméthyl-4-pipéridinone	C9H17NO	-338.2	-331.736435	-6.46356549
acide adamantane-1-carboxylique	C11H16O2	-646.2	-636.092843	-10.1071565
1-naphtyl acétate	C12H10O2	-305	-301.382138	-3.6178621
Acénaphène	C12H10	70.3	76.5842214	-6.28422136
acide 1,2-benzènedicarboxylique dicyclohexyl ester	C20H26O4	-935.9	-949.159308	13.2593084
acide 1,2-benzènedicarboxylique diphényl ester	C20H14O4	-492.8	-492.8	6.8212E-13
Phénantrène	C14H10	111.8	125.693	-13.893
benzo[f]quinoline	C13H9N	148.9	156.560457	-7.66045714
2-méthyl-1',2'-naphtoxazole	C12H9NO	-87.86	-74.7665299	-13.0934701

## Annexes

N,N'-diéthyl-N,N'-diphénylurée	C17H20N2O	-150.8	-171.608267	20.8082674
N-nitroso-diphénylamine	C12H10N2O	225.8	248.17559	-22.3755902
1-nitronaphtalène	C10H7NO2	42.6	50.1216428	-7.52164282
9H-carbazole	C12H9N	99.4	116.246392	-16.8463918
acide 1-naphtalèneacétique	C12H10O2	-362.3	-388.547201	26.247201
benzal-3-hydrazino-5-méthyl-1,2,4-triazole	C10H11N5	247.1	264.67399	-17.5739904
L-sorbose	C6H12O6	-1273.3	-1249.61675	-23.6832481
Hexaméthylbenzène	C12H18	-162.76	-184.788788	22.028788
Xylitol	C5H12O5	-1130	-1138.41177	8.41176729
1,1'-(1,3-butadiyne-1,4-diyl)bis-benzène	C16H10	514.7	533.515771	-18.8157711
2-nitroaniline	C6H6N2O2	-27.4	-7.49734187	-19.9026581
3,5-diphényl-1,2,4-oxadiazole	C14H10N2O	205.4	204.555777	0.84422298
2,4,6-trinitrophénol	C6H3N3O7	-249.2	-238.584698	-10.6153024
acide 1,2-benzènedicarboxylique	C8H6O4	-789.4	-812.195103	22.7951029
acide 1,2,4,5-benzènetétracarboxylique	C10H6O8	-1572.3	-1547.34003	-24.9599713
2-aminobiphényle	C12H11N	93.1	-13.9615722	107.061572
9-aminoacridine	C13H10N2	158.8	164.379427	-5.57942733
Phtalonitrile	C8H4N2	274.8	292.290377	-17.4903774
Naphtalène	C10H8	77.9	84.6725471	-6.7725471
2,3-diméthyl-1H-indole	C10H11N	1.6	26.8831068	-25.2831068
1H-indole-2,3-dione	C8H5NO2	-263.6	-266.324332	2.72433244
2-méthylnaphtalène	C11H10	44.9	40.0533643	4.84663573
hexanitroéthane	C2N6O12	79.5	46.5336627	32.9663373
2,2,2-trinitroéthanol	C2H3N3O7	-261.2	-261.2	6.1664E-10
Naphtacène	C18H12	157.2	137.263202	19.9367978
Biphenyl	C12H10	-317	-348.034521	31.0345212
2-(diacétoxy-méthyl)-5-nitrofurane	C9H9NO7	-910.4	-915.312888	4.9128883
3,6-diaminoacridine	C13H11N3	125.5	95.7362169	29.7637831
4-aminobiphényle	C12H11N	80.5	-4.49030913	84.9903091
acide 3-hydroxy-2-naphtoïque	C11H8O3	-549.2	-548.8	-0.4
Phénazine	C12H8N2	241.84	283.881596	-42.0415962

## Annexes

4,4'-diaminobiphényle	C12H12N2	70.7	85.4185984	-14.7185984
acide 7-aminoheptanoïque	C7H15NO2	-680.3	-708.040128	27.7401277
4-nitrobiphényle	C12H9NO2	40.5	77.42762	-36.92762
bicyclo[2.2.2]oct-2-ène	C8H12	-23.9	-4.52950494	-19.3704951
acide 2-naphtyl ester benzoïque	C17H12O2	-186.6	-181.672348	-4.92765222
acide perbenzoïque	C7H6O3	-368.2	-392.088915	23.8889153
acide 2-méthyl-1H-pyrrole-3-carboxylique éthyl ester	C8H11NO2	-411.6	-419.891625	8.29162483
N,N'-diméthyl-N-phénylurée	C9H12N2O	-219.6	-232.494986	12.8949863
acide phényl ester benzoïque	C13H10O2	-241.8	-209.123937	-32.676063
acide 4-aminobenzoïque éthyl ester	C9H11NO2	-422.3	-423.803034	1.50303415
2-hydroxybenzaldoxime	C7H7NO2	-183.9	-186.523554	2.62355402
acide 2-phénylbenzoïque	C13H10O2	-351.5	-373.940938	22.4409379
1H-benzotriazole	C6H5N3	236.5	233.847425	2.65257513
1,2-Di-o-tolyléthane	C16H18	-41.3	-63.7579298	22.4579298
2,3-butanedione dioxime	C4H8N2O2	-178.2	-188.332569	10.132569
1,2,4,5-tétraméthylbenzène	C10H14	-122.7	-111.228663	-11.4713374
N-phényl-2,4-dinitroaniline	C12H9N3O4	20.4	-15.9132539	36.3132539
benzoylcarboxypéroxyde phényl ester	C14H10O5	-486.6	-499.848236	13.2482356
2,4-dinitroaniline	C6H5N3O4	-71.4	-67.981314	-3.41868605
α-D-méthylglucopyranoside	C7H14O6	-1237.5	-1231.82207	-5.67792693
2,5-dioxo-4-imidazolidinylurée	C4H6N4O3	-730.9	-711.336207	-19.5637929
acide méthylènebutanedioïque	C5H6O4	-842.4	-755.40908	-86.9909203
acide (S)-hydroxybutanedioïque	C4H6O5	-1105.7	-1094.73989	-10.9601082
acide 4-tert-butylbenzoïque	C11H14O2	-507.52	-550.91726	43.3972601
1-(3-aminophényl)éthanone	C8H9NO	-173.6	-187.922883	14.3228834
acide 3-aminobenzoïque	C7H7NO2	-412.8	-419.891625	7.09162483
3-nitroaniline	C6H6N2O2	-38.7	-7.49734187	-31.2026581
acide 3,5-dinitrobenzoïque	C7H4N2O6	-433.1	-433.1	-3.4788E-11
1,3,5-trinitrobenzène	C6H3N3O6	-48.1	-38.7080715	-9.39192851
2-méthyl-5-nitroaniline	C7H8N2O2	-95.1	-86.4846551	-8.61534491

## *Annexes*

---

1,3-dinitrobenzène	C6H4N2O4	-27.6	29.5532071	-57.1532071
acide oxalique dihydrazide	C2H6N4O2	-295.2	-301.111194	5.91119447
Ethylènetricarbonitrile	C5HN3	412.1	412.1	7.9477E-08
1-(4-aminophényl)éthanone	C8H9NO	-182.2	-170.439142	-11.7608579
1-méthyl-4-nitrobenzène	C7H7NO2	-48.1	-48.1	1.4655E-09

**Tableau A-2** Les valeurs de la constante de l'équation III-1, pour le block de fragments d'atome centrés des descripteurs.

Variables	w <sub>i</sub>	w <sub>j</sub>
A	42.3704214	---
C-001	-88.9384745	1.70225867
C-002	-46.9382673	0.28278929
C-003	-15.4792601	0.12906944
C-004	29.9054901	-7.71575101
C-005	-126.227427	1.2022404
C-006	-84.8536241	2.18162275
C-007	-144.160155	17.5331889
C-008	-53.2767365	3.26912547
C-009	-66.71955	-34.051219
C-011	-51.4472014	50.9569368
C-012	-162.537603	72.4164598
C-013	-26.4637946	63.6551021
C-015	-30.7649552	37.76041
C-016	15.5856476	0.73861254
C-017	37.5384645	-5.80180974
C-019	-148.290268	86.0893805
C-022	147.978561	-12.2080957
C-024	0.36549653	0.0226399
C-025	19.0475353	0.00701722
C-026	-17.9817217	2.70531744
C-027	61.6874494	-0.02405769
C-028	45.4794307	-9.01421561
C-029	-27.7401325	-13.8080891
C-031	-63.2490034	26.9575891
C-032	-115.066098	-1.05011836
C-033	8.19373283	-10.0415108
C-034	-39.4828615	14.3922531
C-035	-11.9351824	0
C-036	66.8812238	0
C-037	80.439504	-14.8905077
C-038	83.3827347	-47.319526
C-039	38.3123274	-26.234841
C-040	-110.581371	13.877432
C-041	-143.611336	-11.1659899
C-042	17.940561	0
C-043	-49.2644128	-9.63676855
C-044	-162.990436	31.9613543
H-046	10.2359688	-0.09657633
H-047	0	0.26852256
H-049	-109.190748	7.56121981
H-050	-110.041767	-0.88587938

H-051	-0.23741041	-0.10782329
H-052	11.9949168	-1.04592814
H-053	9.10883351	1.63588209
O-056	-63.7021153	-1.22634296
O-057	-103.13414	2.61916238
O-058	-119.207401	-10.8521656
O-059	-45.8013834	0.29539004
O-060	-54.7173063	0.14477627
O-061	-184.432305	-1.47584355
N-066	191.810134	0.95732402
N-067	175.963539	4.97229604
N-068	219.608046	-34.1740894
N-069	207.326597	1.0125328
N-070	228.206455	-25.8931226
N-071	209.725922	8.17185129
N-072	166.216371	6.3657081
N-073	148.494525	10.5115194
N-074	162.238147	5.50746665
N-075	87.8696589	-0.46067936
N-076	348.663984	6.1246736
N-077	338.580104	4.27451622
N-078	140.325235	-3.94505597

**Tableau A-3** Les valeurs de la constante de l'équation III-1, pour les trois blocks des descripteurs.

Variables	wi	wj
	0.862	
nCp	-54.071	2.129
nCs	-38.056	0.371
nCt	-14.068	1.995
nCq	-30.972	5.216
nCrs	16.157	-0.616
nCrq	-2.911	1.334
nCar	35.539	-0.462
nCbH	-29.771	0.908
nCb-	-14.599	0.837
nCconj	-77.454	8.364
nR=Cp	141.777	-48.159
nR=Cs	67.962	-5.660
nR=Ct	58.544	-9.950
nR#C-	112.364	-2.010
nRCOOH	-206.917	-0.399
nArCOOH	-135.100	-7.426
nRCOOR	-434.540	8.341
nArCOOR	-405.358	0.346
nRCONH2	-435.790	56.009

nArCONH2	-328.178	24.673
nRCONHR	-324.491	26.412
nArCONHR	-267.310	32.105
nRCONR2	-259.696	0.000
nROCON	-543.452	0.365
nArOCON	-443.030	0.000
nRCHO	-124.003	0.000
nArCHO	-147.011	0.000
nRCO	-190.065	62.986
nArCO	-110.264	0.333
nCONN	-324.182	-2.579
nC=O(O)2	-873.569	181.284
nN=C-N<	270.032	0.000
nC(=N)N2	-7.227	0.000
nArC=N	58.519	24.683
nRCNO	349.677	-59.607
nArCNO	248.322	-11.178
nRNH2	-24.839	-32.542
nArNH2	-109.702	10.808
nRNHR	-64.414	-1.149
nArNHR	-157.886	90.603
nRNR2	-100.504	23.134
nArNR2	-62.088	0.000
nN-N	-134.989	-43.926
nN=N	-29.486	188.603
nRCN	60.970	12.120
nArCN	101.076	-5.340
nN+	-199.603	9.865
nRNHO	135.396	0.000
nRNNOx	-11.305	4.445
nArNO	-70.873	0.000
nRNO2	50.081	7.123
nArNO2	75.767	-3.573
nN(CO)2	-343.048	0.000
nC=N-N<	102.612	0.000
nROH	-329.153	13.056
nArOH	-243.043	-24.764
nOHp	95.086	-9.487
nOHs	82.252	-19.325
nOHt	-41.197	51.799
nROR	-249.627	32.277
nArOR	-233.408	0.000
nO(C=O)2	234.337	0.000
nOxiranes	205.204	0.000
nPyrrolidines	-101.221	0.000

nOxolanes	12.639	0.000
nPyrroles	-117.259	43.582
nImidazoles	-97.043	0.000
nFuranes	-205.594	0.000
nOxazoles	-283.088	37.091
nIsoxazoles	-150.963	0.000
nTriazoles	52.116	0.000
nPyridines	-93.213	0.000
nPyrimidines	-101.055	0.000
nPyrazines	-26.816	0.000
n135-Triazines	-101.575	0.000
nHDon	24.957	-4.994
nHAcc	44.158	-1.338
nHBonds	16.490	-1.944

**Tableau A-4** Les valeurs de la constante de l'équation III-1, pour les trois blocks des descripteurs.

Variables	w <sub>i</sub>	w <sub>j</sub>
A	2678.89601	---
nBT	1352.43067	-0.12291419
nBM	36.822274	-0.03907721
nCIC	-2676.64283	0.58157324
nCIR	1.25534729	-0.04072393
RBN	-3.70519564	0.01908883
nDB	-1224.47572	0.11468251
nTB	-2634.66309	0.40930412
nH	-2128.89691	0.35374404
nN	282.005873	0.92946941
nO	-1386.69656	-0.61960266
nR03	8.73748539	0
nR04	86.2620701	0
nR05	-14.5094278	12.2460917
nR06	-24.4612796	3.97742822
nR07	-103.268931	54.1399096
nR08	-18.5605071	1.83967943
nR09	6.62129462	-27.6962392
nR10	-12.3439297	-0.92589474
nR11	143.71349	-56.9941167
nR12	11.1730053	2.3724665
nBnz	-69.1774644	-15.2752528
C-001	239.707035	0.45377329
C-002	149.580247	0.27025738
C-003	89.6308369	0.98610179
C-004	11.3932766	4.48666416
C-005	195.253052	6.41328731

C-006	122.836628	-0.20613239
C-007	95.9733587	2.33909664
C-008	20.4282565	6.56365769
C-009	38.4508353	-33.3189721
C-011	-68.6713262	29.0858084
C-012	-165.968135	61.3378105
C-013	-24.3431533	17.7779092
C-015	157.420154	0.77312956
C-016	42.3165083	-14.60014
C-017	-67.2109004	8.52366778
C-019	-242.730054	-9.33976616
C-022	72.0877159	-5.92487893
C-024	171.959828	-1.68615328
C-025	69.8235573	1.50338427
C-026	41.5928541	-0.98486632
C-027	18.5874308	10.8656895
C-028	114.683419	-31.9397068
C-029	-52.0873162	17.8296745
C-031	-36.3697736	26.0301931
C-032	-40.5538161	0
C-033	140.966401	-45.5126605
C-034	12.7257382	-3.85619736
C-035	6.45592068	0
C-036	-72.032818	0
C-037	-161.533823	41.8739437
C-038	-164.208911	0
C-039	-171.130452	13.0670987
C-040	-164.681611	8.70894535
C-041	-362.220301	18.0305691
C-042	9.66663135	0
C-043	3.87977406	-17.2068491
C-044	-75.3580419	3.48529528
H-046	13.1326844	-0.17376197
H-047	0	0.40118547
H-049	42.5790009	23.3384834
H-050	25.9947262	-3.65967728
H-051	11.6549427	-0.53407512
H-052	14.7426161	-0.53596497
H-053	13.4854287	1.10422927
O-056	-150.458622	-2.89651857
O-057	-35.4621697	5.22400187
O-058	-158.15632	-3.59818291
O-059	12.6509074	0.76851872
O-060	71.108999	9.28984288
O-061	689.080417	-114.757599
N-066	-791.446142	23.4369006
N-067	-806.38599	-7.42510698

N-068	-809.064306	-3.97588805
N-069	-684.386655	-34.2865009
N-070	-781.128297	-17.5578585
N-071	-829.253218	-8.76966716
N-072	-798.964224	-7.00710022
N-073	-807.873776	6.63508139
N-074	-811.510267	-27.1029208
N-075	-1596.59402	-2.07539219
N-076	-1218.98168	-227.997627
N-077	-1224.02161	-12.2795091
N-078	-1054.50304	51.082128
nCp	-31.8523438	1.67898875
nCs	0	0.12608832
nCt	0	-2.28750261
nCq	0	0
nCrs	4.68490365	-0.35150024
nCrq	0.7559367	-6.89020319
nCar	-758.079494	0.41329137
nCbH	-4.87720567	1.47700108
nCb-	-1.76383089	0.96621914
nCconj	-9.64791789	2.11818017
nR=Cp	0	0
nR=Cs	0	13.4005744
nR=Ct	0	0
nR#C-	0	0
nRCOOH	-148.854431	-13.3532016
nArCOOH	-147.654639	-10.7534302
nRCOOR	-99.6529358	-11.8757895
nArCOOR	-93.2604791	-20.0837353
nRCONH2	8.33102869	-16.3747595
nArCONH2	-22.2637973	13.2420888
nRCONHR	-26.532886	25.7150864
nArCONHR	0.76812664	-14.1669748
nRCONR2	22.5313557	0
nROCON	17.2470182	-12.3397651
nArOCON	65.1523592	0
nRCHO	42.6475368	0
nArCHO	44.9085692	0
nRCO	96.2788612	0
nArCO	77.0230706	0
nCONN	110.542445	23.1406356
nC=O(O)2	-169.019053	41.9158741
nN=C-N<	0.72805342	0
nC(=N)N2	54.9239409	0
nArC=N	2.84252433	0
nRCNO	-168.404813	0
nArCNO	-190.346631	0

nRNH2	0	0
nArNH2	-133.648034	64.14407
nRNHR	76.2843627	0
nArNHR	72.0204409	-49.6841358
nRNR2	74.185287	-8.72210621
nArNR2	51.3730383	0
nN-N	46.3536683	-16.977394
nN=N	345.702301	-226.290254
nRCN	13.6492845	31.1317349
nArCN	70.635293	0
nN+	0	468.865179
nRNHO	113.928684	0
nRNNOx	50.6057433	0
nArNO	177.218648	0
nRNO2	2.05841953	3.38546131
nArNO2	0	221.935789
nN(CO)2	-36.3448765	0
nC=N-N<	8.34525179	0
nROH	98.1441881	6.54466044
nArOH	-15.3750568	-2.74596399
nOHp	56.9549218	-3.91828872
nOHs	30.7538099	-6.52021729
nOHt	-2.32822941	0
nROR	11.0281988	-22.1926935
nArOR	-80.8853924	0
nO(C=O)2	93.3917806	0
nOxiranes	54.1620762	0
nPyrrolidines	-79.0708391	0
nOxolanes	57.5532373	0
nPyrroles	-50.3809531	38.3286475
nImidazoles	0.92643953	0
nFuranes	-148.601462	0
nOxazoles	-161.15918	0
nIsoxazoles	-135.501738	0
nTriazoles	-43.9490702	0
nPyridines	-36.8950053	0
nPyrimidines	-8.63069694	0
nPyrazines	273.546312	0
n135-Triazines	-113.558094	0
nHDon	0	0
nHAcc	-9.76592202	0.76097825
nHBonds	6.0040228	-7.60327063

**Tableau A-5 :** 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 Salmon et Domalski et al., concernant 251 molécules.

Formule	CAS	$\Delta H_{f,s,m}^{\circ}$ (Litt.) $KJ.mol^{-1}$	Salmon		Domalski et al.		Notre travail	
			$\Delta H_{f,s,m}^{\circ}$ (Calc.) $KJ.mol^{-1}$	Residu	$\Delta H_{f,s,m}^{\circ}$ (Calc.) $KJ.mol^{-1}$	Residu	$\Delta H_{f,s,m}^{\circ}$ (Calc.) $KJ.mol^{-1}$	Residu
C6 H4 N2	100-54-9	205.8	205.5	0.3	204.3	1.5	205.13	0.67
C7H13N	100-76-5	-55	-55	0	-95.2	40.2	-60.26	5.26
C6H12N4	100-97-0	124.1	85.1	39	248	-123.9	124.1	0
C12H8N4	1017-93-2	576.1	579.9	-3.8	--	--	568.74	7.36
C13H12	101-81-5-2d	71.5	57.3	14.2	71.7	-0.2	76.4	4.9
C16H16	10311-74-7-2d	85.9	80.9	5	72.2	13.7	86.3	0.4
C14H14	103-29-7-2d	51.5	42.7	8.8	48.9	2.6	47.3	-4.2
C14H12	103-30-0-2d	136.9	146.6	-9.7	140.9	-4	152.1	15.2
C5 H3 N3	10359-20-3	348.6	348.6	0	--	--	313.38	35.22
C8 H8 N6	10444-59-4	458.1	247.8	210.3	--	--	455.18	2.92
C16H16N2	104-71-2	271.4	-117.2	388.6	--	--	265.21	6.19
C12H16N2	10507-71-8	132.3	-55.4	187.7	--	--	-16.95	149.25
C28H18	1055-23-8-2d	326.2	325.2	1	326.2	0	322.1	-4.1
C6 H8 N2	106-50-3	3.1	4.7	-1.6	2.4	0.7	7.62	-4.52
C14H18	1079-71-6-2d	-119.5	26.3	-145.8	-137.4	17.9	-116.1	3.4
C12H10N2	1080-16-6	357.7	334.6	23.1	357.7	0	366.79	-9.09
C16H18	1083-56-3-2d	-9.9	-16.8	6.9	-9.9	0	-10.6	-0.7
C6 H8 N2	108-45-2	-7.8	-1.4	-6.4	-7.6	-0.2	7.621	-15.421
C3 H6 N6	108-78-1	-87.1	-81.4	-5.7	105.5	-192.5	-65.73	-21.37
C3 H2 N2	109-77-3	187.9	187.9	0	--	--	182.24	5.66
C4 H4 N2	110-61-2	139.7	173.5	-33.8	139.7	0	138.88	0.82
C4H10N2	110-85-0	-41.8	-151.7	109.9	-40.4	-1.4	-18.77	-23.03
CH5N3	113-00-8	-56	-185.3	129.3	--	--	-73.52	17.52
C14H10	120-12-7-2d	129.2	128.8	0.4	121.7	7.5	128.2	-1
C8 H7 N	120-72-9	86.7	86.7	0	--	--	100.38	-13.68
C12H11N	122-39-4	130.2	79.8	50.4	130.2	0	106.57	23.63
C12H12N2	122-66-7	221.3	183.3	38	218.6	2.7	210.57	10.73
C16H10	129-00-0-2d	125.5	134.9	-9.4	125.6	-0.1	137.9	12.4
C11H8N4	13358-02-6	514.7	514.7	0	--	--	511.99	2.71
C10H9N	134-32-7	67.7	63.7	4	62.1	5.6	70.41	-2.71
C16H13N	135-88-6	159.9	134.8	25.1	171.5	-11.6	158.55	1.35
C12H11N3	136-35-6	331.6	331.6	0	--	--	398.94	-67.34
C5 H7 N3	141-86-6	-6.5	-24.7	18.2	42.9	-49.4	-6.5	0
C8 H8 N4	14213-16-2	289.5	289.5	0	--	--	291.01	-1.51
C28H22	1450-63-1-2d	329.9	341	-11.1	346.6	-16.7	329.5	-0.4
C18H30	1459-11-6-2d	-251.6	-236.2	-15.4	-170.8	-80.8	-274	-22.4

**Annexes**

C18H30	1460-02-2-2d	-321.9	-308.2	-13.7	-327.8	5.9	-274	47.9
C28H26	1483-64-3-2d	163.3	159.5	3.8	359.9	-196.6	150.2	-13.1
C13H11N	1484-12-4	105.5	105.5	0	148.4	-42.9	103.93	1.57
C26H18	1499-10-1-2d	308.7	280.5	28.2	303.9	4.8	299.1	-9.6
C6H6N10	1502-47-2	15.7	15.7	0	--	--	15.42	0.28
C12H4N4	1518-16-7	666.1	639.9	26.2	--	--	668.8	-2.7
C20H18	1520-42-9-2d	130.2	128.2	2	134	-3.8	127.8	-2.4
C14H20	1540-80-3-2d	147.8	276.3	-128.5	112.5	35.3	118.1	-29.7
C16H14	1576-69-8-2d	36.4	45.8	-9.4	38.8	-2.4	62.5	26.1
C18H24	1610-39-5-2d	-193.9	30	-223.9	-225.7	31.8	-190.8	3.1
C20H10N4	1625-84-9	712.5	708.7	3.8	--	--	725.52	-13.02
C16H16	1633-22-3-2d	145.1	82.4	62.7	19.4	125.7	144.7	-0.4
C14H24	1687-36-1-2d	-365.8	-364.7	-1.1	-319.3	-46.5	-369.2	-3.4
C12H10N2	17082-12-1	308.6	334.6	-26	308.6	0	366.79	-58.19
C3 H7 N5	17267-51-5	200.2	194.4	5.8	--	--	186.23	13.97
C25H20	17760-68-8-2d	273.9	336.5	-62.6	--	--	370.8	96.9
C38H30	17854-07-8-2d	511.8	393.1	118.7	511.8	0	507.3	-4.5
C7 H6 N4	18039-42-4	298	296.7	1.3	--	--	311.5	-13.5
C13H10N4	18039-45-7	395.3	364.3	31	--	--	390.11	5.19
C13H12N4	1885-34-3	457.9	457.9	0	--	--	455.81	2.09
C16H16	18869-29-9-2d	57.9	77.5	-19.6	62.2	-4.3	86.3	28.4
C32H26	19112-42-6-2d	381.2	303.4	77.8	365.4	15.8	327	-54.2
C18H12	195-19-7-2d	184.9	172	12.9	146.6	38.3	177.98	-6.92
C12H20	19740-34-2-2d	-256.3	-253.7	-2.6	-257.5	1.2	-262.5	-6.2
C20H12	198-55-0-2d	182.8	162	20.8	158.4	24.4	176.7	-6.1
C9H16	2034-53-9-2d	-148.2	-150.1	1.9	-162.3	14.1	-164.2	-16
C18H18	2040-73-5-2d	163.4	163.4	0	315.5	-152.1	164.5	1.1
C28H18	20532-03-0-2d	212.8	297.2	-84.4	204.4	8.4	322.1	109.3
C16H10	206-44-0-2d	189.9	189.9	0	161.6	28.3	189.9	0
C8 H8 N4	20743-50-4	292.4	293.5	-1.1	--	--	299.72	-7.32
C12H8	208-96-8-2d	186.7	186.7	0	143	43.7	183.1	-3.6
C9H10N2	21211-65-4	126.2	141.8	-15.6	69.7	56.5	127.76	-1.56
C18H12	217-59-4-2d	151.8	142	9.8	150.4	1.4	175.2	23.4
C18H12	218-01-9-2d	145.3	155.9	-10.6	154.6	-9.3	177.9	32.6
C8 H8 N4	22706-20-3	274.8	274.8	0	--	--	274.8	0
C14H20	2292-79-7-2d	-241.8	-220.1	-21.7	-158.7	-83.1	-237	4.8
C26H22	2294-94-2-2d	223	217.9	5.1	280.4	-57.4	245.5	22.5
C12H8N2	230-17-1	295.1	295.1	0	--	--	207.31	87.79
C13H9N	230-27-3	160.2	160.2	0	--	--	152.16	8.04
C16H16	2319-97-3-2d	78.5	78.5	0	78.5	0	109.7	31.2
C10H7N3	233-59-0	260.5	275.4	-14.9	--	--	273.21	-12.71
C7 H7 N5	23579-46-6	305.1	317.7	-12.6	--	--	289.44	15.66
C5 N4	24331-09-7	611.6	611.6	0	--	--	495.85	115.75
C13H9N	24973-49-7	232.7	219.5	13.2	219	13.7	221.49	11.21
C16H16	2510-76-1-2d	97.9	77.5	20.4	62.2	35.7	86.2	-11.7

**Annexes**

C12H8	259-79-0-2d	334	334	0	120.4	213.6	327.4	-6.6
C13H9N	260-36-6	148.9	156.7	-7.8	--	--	152.16	-3.26
C13H9N	260-94-6	179.4	176.4	3	--	--	146.16	33.24
C15H22	26460-76-4-2d	-247.4	-262.8	15.4	-193.2	-54.2	-279.8	-32.4
C4 H6 N8	26670-16-6	444.4	440.4	4	--	--	444.97	-0.57
C36H46N4	2683-82-1	-183.2	-183.2	0	--	--	-178.46	-4.74
C10H7N3	269-12-5	274.2	275.4	-1.2	--	--	273.21	0.99
C8 H5 N3	27032-01-5	397.9	397.9	0	--	--	397.9	0
C14H16	2717-39-7-2d	-18.2	-19	0.8	-77	58.8	-54.8	-36.6
C7H14N2	2721-31-5	-22.4	-22.4	0	-22.3	-0.1	0.7	-23.1
C5 H8 N2	2721-32-6	152	152	0	--	--	153.92	-1.92
C23H24	27497-47-8-2d	16.4	24.6	-8.2	15.8	0.6	29.3	12.9
C10H8	275-51-4-2d	212.3	186.1	26.2	--	--	216.7	4.4
C2 H2 N8	2783-98-4	531.8	561.5	-29.7	--	--	531.7	0.1
C16H14	2789-88-0-2d	225.8	233.5	-7.7	233.3	-7.5	255.5	29.7
C7H12	279-23-2-2d	-95.1	-95.3	0.2	-102	6.9	-99.6	-4.5
C8H14	280-33-1-2d	-146.9	-146.9	0	-146.9	0	-205.9	-59
C6H12N2	280-57-9	28.2	28.2	0	-2	30.2	23.75	4.45
C9H16	280-65-9-2d	-178.2	-178.2	0	-178.2	0	-204.1	-25.9
C14H24	28071-99-0-2d	-293.3	-318.3	25	-285.2	-8.1	-286.1	7.2
C10H16	281-23-2-2d	-194.1	-193.6	-0.5	-197.2	3.1	-198.3	-4.2
C8H15N	283-24-9	-101.5	-171.4	69.9	-149.8	48.3	-112.26	10.76
C10H18	283-50-1-2d	-164.2	-171.5	7.3	-247.2	83	-166.8	-2.6
C16H28	283-68-1-2d	-244.1	-244.1	0	-356.2	112.1	-243	1.1
C15H22	28375-86-2-2d	-260.4	-262.8	2.4	-193.2	-67.2	-279.8	-19.4
C3 H4 N2	288-13-1	105.4	44.2	61.2	--	--	133.15	-27.75
C3 H4 N2	288-32-4	49.8	129.9	-80.1	--	--	56.4	-6.6
C4 H4 N2	290-37-9	139.8	139.8	0	140.1	-0.3	163.94	-24.14
C18H20	2913-24-8-2d	26.3	22.9	3.4	26.2	0.1	27.6	1.3
C16H16	2919-19-9-2d	89	89.1	-0.1	109.4	-20.4	88.1	-0.9
C16H16	2919-20-2-2d	85.9	85.8	0.1	99.4	-13.5	88.1	2.2
C11H20	29415-95-0-2d	-152.5	-152.5	0	-152.6	0.1	-200.4	-47.9
C12H24	294-62-2-2d	-306.6	-306.6	0	-306.7	0.1	-331.1	-24.5
C14H28	295-17-0-2d	-374	-374	0	-374.3	0.3	-405.9	-31.9
C10H24N4	295-37-4	-115.9	-395.7	279.8	-139.6	23.7	-123.27	7.37
C15H30	295-48-7-2d	-376.1	-376.1	0	-376.1	0	-436.8	-60.7
C16H32	295-65-8-2d	-403.4	-403.4	0	-403.4	0	-467.5	-64.1
C17H34	295-97-6-2d	-430.4	-430.4	0	-430.4	0	-498.2	-67.8
C30H60	297-35-8-2d	-895.7	-892.6	-3.1	-882.3	-13.4	-891.7	4
C10H9N	3042-22-6	139.2	139.2	0	--	--	131.21	7.99
C15H22	30545-28-9-2d	-261.5	-262.8	1.3	-193.2	-68.3	-258.2	3.3
C20H16	313-74-6-2d	139	100.8	38.2	80	59	112.1	-26.9
C20H16	316-51-8-2d	76.2	100.8	-24.6	80	-3.8	112.1	35.9
C8H11N	3211-87-8	20.3	20.3	0	29.5	-9.2	31.72	-11.42
C16H16	3332-38-5-2d	547.5	547.5	0	280.5	267	511	-36.5

## Annexes

C8H12N2	3333-52-6	14.9	14.9	0	-57.9	72.8	36.21	-21.31
C12H12N4	35364-31-9	412.1	371	41.1	--	--	412.1	0
C16H14	3674-69-9-2d	89	45.8	43.2	38.8	50.2	62.4	-26.6
C16H16	36888-18-3-2d	74.9	80.9	-6	72.2	2.7	86.2	11.3
C20H16	3697-27-6-2d	132.5	88.5	44	80.8	51.7	112.1	-20.4
C30H30	40673-57-2-2d	73.6	80.9	-7.3	261.2	-187.6	76.8	3.2
C20H16	4076-43-1-2d	154.5	79.4	75.1	67.9	86.6	112.1	-42.4
C4H6N10	41463-68-7	723.8	754.6	-30.8	--	--	708.98	14.82
C4H6N10	41463-69-8	754.6	754.6	0	--	--	708.98	45.62
CH2N2	420-04-2	58.8	58.8	0	--	--	77.13	-18.33
C24H32	4384-23-0-2d	-192.7	-155.6	-37.1	-215.8	23.1	-161.7	31
CH3N5	4418-61-5	209.2	209.2	0	--	--	201.3	7.9
C32H38N4	448-70-4	1.6	-11.8	13.4	--	--	-4.99	6.59
C32H38N4	448-71-5	-25.2	-11.8	-13.4	--	--	-4.99	-20.21
C10H14	4488-57-7-2d	-23.9	4.8	-28.7	-28.5	4.6	8.5	32.4
C2 H4 N4	461-58-5	21.3	-108	129.3	--	--	15.52	5.78
C20H14	477-75-8-2d	217.1	217.6	-0.5	230.7	-13.6	200.8	-16.3
C14H28	4789-34-8-2d	-374.1	-387	12.9	-400.9	26.8	-367.3	6.8
C14H28	4789-35-9-2d	-401.8	-387	-14.8	-400.9	-0.9	-367.3	34.5
C15H18	489-84-9-2d	61.1	298.7	-237.6	--	--	63.7	2.6
C8H14N2	49570-30-1	20.4	20.4	0	11.4	9	18.07	2.33
C19H24	4957-16-8-2d	-154.4	-139.9	-14.5	-126.6	-27.8	-119.2	35.2
C7H10	498-66-8-2d	52.9	160.6	-107.7	52.5	0.4	18.8	-34.1
C14H10	501-65-5-2d	312.4	302.6	9.8	312	0.4	322.1	9.7
C42H28	517-51-1-2d	620.3	574.4	45.9	527.3	93	522.7	-97.6
C19H16	519-73-3-2d	171.2	168.2	3	174.1	-2.9	156.9	-14.3
C9H15N	520-69-4	-89.2	-89.2	0	-142.9	53.7	-161.61	72.41
C20H18	5271-39-6-2d	157.2	159	-1.8	204.8	-47.6	156.3	-0.9
C2 H5 N5	53010-03-0	202.5	197.6	4.9	--	--	198.01	4.49
C10H16	53130-19-1-2d	-150.8	-136.2	-14.6	-144.5	-6.3	-156.4	-5.6
C19H16N4	531-52-2	543.1	543.1	0	--	--	532.62	10.48
C7 H6 N4	5378-52-9	344.8	348.9	-4.1	--	--	349.46	-4.66
C16H18	538-39-6-2d	-42.1	-26.3	-15.8	-29.8	-12.3	-18	24.1
C13H11N	538-51-2	185	174.9	10.1	--	--	215.23	-30.23
C16H16	5385-36-4-2d	130.9	130.9	0	130.9	0	129.5	-1.4
C16H14	538-81-8-2d	178.8	181	-2.2	176	2.8	198.8	20
C6H12N2	54166-22-2	88	88	0	31.1	56.9	44.06	43.94
C2 H5 N5	5422-44-6	182.2	193.1	-10.9	--	--	189.52	-7.32
C3 H7 N5	5422-45-7	182.6	188.7	-6.1	--	--	187.16	-4.56
C32H66	544-85-4-2d	-968.3	-967.8	-0.5	-975.8	7.5	-964.4	3.9
C7 H7 N5	5467-78-7	311	306.7	4.3	--	--	296.12	14.88
C20H16	54986-63-9-2d	108.2	79.4	28.8	67.9	40.3	112.1	3.9
C18H12	56-55-3-2d	170.8	169.9	0.9	158.8	12	177.9	7.1
C21H20	56818-06-5-2d	44.1	119.2	-75.1	40	4.1	74.9	30.8
C12H12	569-41-5-2d	25.9	27.4	-1.5	1.7	24.2	10.3	-15.6

**Annexes**

C20H16	57-97-6-2d	143.8	106.8	37	80	63.8	112.1	-31.7
C16H14	5807-76-1-2d	198.8	185.4	13.4	176	22.8	198.8	0
C12H12	581-42-0-2d	-5.7	-5.7	0	1.7	-7.4	10.3	16
C12H12	582-16-1-2d	-5.4	-5.4	0	1.7	-7.1	10.3	15.7
C30H28	5831-43-6-2d	171.5	166.3	5.2	154	17.5	149.8	-21.7
C20H16	58-72-0-2d	233.4	226.6	6.8	226.2	7.2	217.1	-16.3
C14H12N2	588-68-1	339.3	26.8	312.5	--	--	330.36	8.94
C18H38	593-45-3-2d	-567.4	-551.2	-16.2	-564	-3.4	-580.1	-12.7
C8H18	594-82-1-2d	-268.9	-250.8	-18.1	-268.9	0	-259.4	9.5
C10H16	6004-38-2-2d	-112.9	-110.3	-2.6	-109.4	-3.5	-109.8	3.1
C16H14	604-83-1-2d	47.6	47.5	0.2	43.8	3.8	62.4	14.8
C19H17N	606-87-1	184.7	148.6	36.1	96.7	88.1	233.92	-49.22
C21H16	611-48-3-2d	162	167.4	-5.4	154.2	7.8	186.8	24.8
C24H18	612-71-5-2d	224.6	237.2	-12.6	219.7	4.9	276.1	51.5
C12H18	6130-98-9-2d	156.1	237.1	-81	168.8	-12.7	153.9	-2.2
C14H12	613-31-0-2d	66.4	56.3	10.1	65	1.4	100.4	34
C14H14	613-33-2-2d	14.1	22.5	-8.4	20.6	-6.5	39.8	25.7
C21H26	6169-94-4-2d	-81.9	-78.5	-3.4	-134.3	52.4	-67.3	14.6
C2 H4 N4	61-82-5	76.8	63.6	13.2	--	0	65.48	11.32
C21H21N	620-40-6	140.7	32.5	108.2	-131.4	272.1	149.85	-9.15
C13H13N	620-84-8	48.9	45.3	3.6	90.8	-41.9	53.32	-4.42
C14H15N	620-93-9	-11.6	10.7	-22.3	51.5	-63.1	7.62	-19.22
C8 H4 N2	623-26-7	268.5	280.5	-12	268.5	0	289.61	-21.11
C8 H4 N2	626-17-5	272.5	274.5	-2	270.5	2	289.61	-17.11
C7H11N5	6280-33-7	351.1	345	6.1	--	--	346.53	4.57
C25H20	630-76-2-2d	247.1	241.2	5.9	251.1	-4	274.9	27.8
C26H22	632-50-8-2d	216	213.7	2.3	219	-3	208.6	-7.4
C26H20	632-51-9-2d	311.5	304.4	7.1	311.5	0	282.2	-29.3
C24H20N2	632-52-0	457.9	457.9	0	444.3	13.6	369.87	88.03
C11H6N4	6343-21-1	622.8	622.8	0	--	--	612.11	10.69
C13H12	644-08-6-2d	55.4	57	-1.6	60	-4.6	72.6	17.2
C17H13N	6626-64-8	205.4	205.4	0	--	--	215.01	-9.61
C2 H5 N7	66591-60-4	135.6	6.2	129.3	--	--	158.86	-23.26
C14H20	6682-67-3-2d	121.2	123	-1.8	108.1	13.1	-166.5	-287.7
C7H11N5	66907-70-8	350.2	350.6	-0.4	--	--	345.61	4.59
C6 N4	670-54-2	623.8	503.4	120.4	--	--	614.24	9.56
C12H18	676-22-2-2d	26.6	180.3	-153.7	6.8	19.8	21.5	-5.1
C12H10N4	69155-29-9	472.4	472.4	0	--	--	476.42	-4.02
C11H16	700-12-9-2d	-133.6	-147.2	13.6	-129.7	-3.9	-141.7	-8.1
C11H18	700-56-1-2d	-219.6	-210.9	-8.7	-222.9	3.3	-219.6	0
C12H20	702-79-4-2d	-286.4	-279.1	-7.3	-258.3	-28.1	-284.1	2.3
C12H14	704-02-9-2d	51.1	58.4	-7.3	85	-33.9	55.6	4.5
C13H22	707-35-7-2d	-332.3	-321.9	-10.4	-288.8	-43.5	-326.7	5.6
C5 H5 N5	73-24-5	96.9	132.8	-35.9	--	--	101.98	-5.08
C18H18	7396-38-5-2d	12.2	-23.3	35.5	-36	48.2	-2.9	-15.1

**Annexes**

C2HN5	74418-40-9	402	402	0	--	--	379.62	22.38
C13H10N4	7477-73-8	406.9	407.1	-0.2	--	--	406.32	0.58
C2H4N10	74999-19-2	565.6	635.3	-69.7	--	--	576.32	-10.72
C4 H7 N5	74999-22-7	265.4	275.7	-10.3	--	--	277.7	-12.3
C6H10N10	74999-25-0	655.3	655.3	0	--	--	645.11	10.19
C4 H7 N5	74999-26-1	282.9	283.9	-1	--	--	288.89	-5.99
C4 H2 N2	764-42-1	268.2	268.2	0	--	--	279.7	-11.5
C11H18	768-91-2-2d	-239.3	-236.4	-2.9	-229.8	-9.5	-241.2	-1.9
C8H12N4	78-67-1	246	246	0	--	--	270.69	-24.69
C22H38	796-97-4-2d	-297.9	-413.8	115.9	-444.1	146.2	-370.9	-73
C10H16	79-92-5-2d	-75.4	-82.4	7	-78	2.6	-75.9	-0.5
C28H22	806-71-3-2d	358.9	358.9	0	358.9	0	329.4	-29.5
C12H10	83-32-9-2d	70.3	70.3	0	51	19.3	59.9	-10.4
C14H10	85-01-8-2d	116.2	114.9	1.3	117.5	-1.3	128.1	11.9
C13H9N	85-02-9	150.6	142.8	7.8	--	--	152.16	-1.56
C12H9N	86-74-8	101.7	20.8	80.9	151.2	-49.5	115.71	-14.01
C10H11N5	87123-46-4	258	59.5	198.5	--	--	260.91	-2.91
C12H18	87-85-4-2d	-161.5	-178.4	16.9	-155	-6.5	-174.1	-12.6
C16H10	886-66-8-2d	518.4	518.4	0	518.6	-0.2	528.7	10.3
C12H11N	90-41-5	93.8	81.6	12.2	86	7.8	80.49	13.31
C13H10N2	90-45-9	159.2	159.1	0.1	--	--	156.1	3.1
C8 H4 N2	91-15-6	280.6	273.3	7.3	273.5	7.1	289.61	-9.01
C10H8	91-20-3-2d	77.9	73.8	4.1	80.4	-2.5	75.7	-2.2
C10H11N	91-55-4	4.2	-55.5	59.7	--	--	-1.26	5.46
C11H10	91-57-6-2d	44.9	39.3	5.6	41.1	3.8	43.1	-1.8
C18H12	92-24-0-2d	158.8	183.9	-25.1	163	-4.2	177.9	19.1
C13H11N3	92-62-6	127.2	156.2	-29	--	--	124.54	2.66
C12H11N	92-67-1	81	81.5	-0.5	81	0	80.49	0.51
C12H8N2	92-82-0	243.9	223.9	20	--	0	243.9	0
C12H12N2	92-87-5	70.7	71.5	-0.8	62.6	8.1	69.68	1.02
C8H12	931-64-6-2d	-23.3	-23.3	0	-23.3	0	-88.3	-65
C6 H5 N3	95-14-7	236.5	220.4	16.1	--	--	221.23	15.27
C16H18	952-80-7-2d	-40	-23	-17	-19.8	-20.2	-18.1	21.9
C10H14	95-93-2-2d	-119.9	-110	-9.9	-104.3	-15.6	-109.3	10.6
C5HN3	997-76-2	439.3	439.3	0	--	--	446.97	-7.67

### Résumé :

L'expérience est un moyen direct pour obtenir des données de l'activité/propriété des composés organiques. Une telle expérience peut être déficiente en termes d'exigence de grands organismes expérimentaux, coûte beaucoup d'argent et prenant beaucoup de temps, en plus de la différence entre les valeurs mesurées par différents chercheurs selon les conditions expérimentales. Par conséquent, il serait impossible que l'expérience fournisse les valeurs des activités de tous les composés organiques. Par conséquent le but de ce travail est de développer une méthode des descripteurs moléculaires permettant d'évaluer les enthalpies de formation standard.

Les corrélations sont simples en application avec une précision, qui fournissent une manière simple, directe et relativement précise pour calculer les enthalpies standard de formation. Ce calcul nous donne un modèle qui nous amène aux résultats remarquables en corrélation avec les descripteurs des blocs fragments de l'atome centré, groupes fonctionnels et descripteurs constitutionnels ( $R^2 = 0,998$ ). Le résidu moyen calculé sur la représentation d'enthalpies de formation standard d'un ensemble de 856 composés moléculaires est de 22,67 KJ/mol.

**Mots clés:** Enthalpie Standard de Formation ; Composés Organiques ; Descripteurs Moléculaires ; Régression Non Linéaire.

### الملخص:

التجربة هي طريقة مباشرة للحصول على بيانات حول نشاط / خاصية المركبات العضوية. قد تكون هذه التجربة ناقصة من حيث متطلبات الكائنات التجريبية الكبيرة، وتكلف الكثير من المال وتستغرق الكثير من الوقت، بالإضافة إلى الفرق بين القيم التي يقيسها الباحثون المختلفون تبعاً للظروف التجريبية. لذلك، سيكون من المستحيل بالنسبة للتجربة توفير قيم النشاط لجميع المركبات العضوية. لذا فإن الهدف من هذا العمل هو تطوير طريقة للواصف الجزيئي لتقييم المحتوى المعياري للتدريب.

الارتباطات بسيطة في التطبيق مع الدقة، والتي توفر طريقة بسيطة ومباشرة ودقيقة نسبياً لحساب المعاني النموذجية للتدريب. تعطينا هذه العملية الحسابية نموذجاً يجعلنا نتوصل إلى نتائج ملحوظة في الارتباط مع الواصفات للذرية المركزية، المجموعات الوظيفية والواصفات البنوية ( $R^2 = 0.998$ ). متوسط باقي الحساب للمحتوى الحراري القياسي لتشكيل من مجموعة من 856 مركب جزيء هو 22.67 KJ / mol.

**الكلمات المفتاحية:** المحتوى الحراري القياسي للتشكيل. مركبات عضوية، وواصفات جزيئية، الانحدار غير الخطي.