

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية

وزارة التعليم العالي والبحث العالي

جامعة الشهيد حمه لخضر – الوادي

كلية التكنولوجيا

مذكرة نهاية الدراسة لنيل شهادة

ماستر أكاديمي

ميدان : التكنولوجيا

شعبة: هندسة الطرائق

تخصص: هندسة كيميائية

إعداد الطلبة:

فرحات صفاء

باقي سارة

هاني يسرى

الموضوع

إيجاد علاقة رياضية لإحدى او لعدة خصائص فيزيوكيميائية بدلالة

الواصفات الجزيئية للمركبات الكيميائية

نوقشت يوم://2020 أمام اللجنة المكونة من:

رئيسا

د. عمار بن مية

مناقشا

د. سهيلة منصر

مؤطرا

عبد الغمي سروي

السنة الجامعية:2021/2020

إهداء

الحمد لله وكفى والصلاة على الحبيب المصطفى وأهله ومن وفى أما بعد:

الحمد لله وفقنا لتتمين هذه الخطوة في مسيرتنا الدراسية بمذكرتنا هذه ثمرة الجهد والنجاح بفضلته
تعالى مهداة الي الوالدين الكريمين أمي الغالي التي تعبت وصبرت وتحملت لوصولي الي ما أنا

عليه الي قوتي ودعمي الي جسري المتين، حفظهما الله وأطال الله في عمرهما

الي شريكي وسندي في حياتي وضلعي الذي لا يمل ولا يميل زوجي الذي كان ومازال مصدر
دعمي. الي أميرتي الصغيرة زينب والي كل عائلتي الكريمة أخوتي الأحبة، الي رفيقات المشوار

اللاتي قاسمني تفاصيله وأيامه بحلوها

ومرها رعاهم الله.

الي كل من سعى لوصولي الي هذه الرتبة الي أساتذتي ومعلميين

الي كل من كان لهم أثر على حياتي. الي كل من أحبهم قلبي ونسيهم قلبي.

الإهداء

بسم الله واسع العطاء والجود والصلاة والسلام على نبيه خير خلق الله محمد سيد الوجود.

احمد الله على منه وتوفيقه لإتمام عملي هذا الذي ارجو ان ينال رضاه.

اهدي عملي الى من تعب وسعى لإيصالي وطمح لرؤيتي في اعلى الدرجات الى معنى الكفاح والنضال وكان
عونا لي وقدوتي لتحدي الصعاب

والدي الغالي على قلبي حفظه الله تعالى.

الى من كانت عوناً وسنداً و أساساً موجوداً بذات كياني الى من علمتني الصبر والاجتهاد وكانت سبباً للوصول
الى من غمرتني بالعطف والحنان وشجعتني على مر الأيام اعز

ملاك في الوجود امي الغالية.

الى من عشت معهم ايامي حلوها ومرها اخوتي اخواتي كل باسمه وفقهم الله للوصول

الى أرقى المناصب.

الى رفيقات الدرب الذين جمعنتي بهم الحياة واطهروا لي ما هو أجمل من الحياة واخص منهم

مريم سارة صفاء ابتهاج 😊.

الى استاذي الفاضل **سروطي عبد الغني** على مجهوداته وكل أساتذتي بقسم هندسة طرائق.

الى كل من عرفهم قلبي ولم يخطهم قلبي اليكم جميعاً اهدي ثمرة جهدي.

اهداء

الحمد لله عز وجل على فضله ومنه وعونه لإتمام هذا العمل اما بعد

إلى سكان قلبي

إلى رجل الكفاح، إلى من زرع فيا القيم والمبادئ الإسلامية، إلى من أفتى زهرة شبابه

في تربية أبنائه إلى من سعي لأجل راحتى ونجاحي. إلى من افتخر به إلي أعظم

واعز رجل في الكون **أبي الحبيب**.

إلى القلب النابض إلى رمز الحنان والحب والتضحية يا من كانت دعواتها الصادقة سر نجاحي إلي

من تشاركني أفراحي وأساتي..... **غاليتي أمي**.

إلى مسندي وسندي قوتي وملجئي إلى نور حياتي ورفيق دربي **زوجي العزيز**

إلى من تمنوا لي النجاح والتوفيق أختي وإخواني الأعزاء، والى من كانوا لي أوفياء

صديقاتي رفيقات المشوار.

وإلى من ساعدنا في إتمام هذا العمل الدكتور الفاضل **عبد الغني سروطي** وكل من ساهم من قريب او بعيد.

إلى أجمل شعور وأجمل هدية هذه السنة على الرغم من الصعوبات إلى النور الذي أضاء

عنمة أيامي **ابني القادم بإذن الله تعالى**.

اهدي لهم هذا الجهد المتواضع، سائلنا الله العلي القدير أن يتابع به انه سميع مجيب.

شكر وتقدير

الحمد لله رب العالمين والصلاة والسلام على المصطفى صل الله عليه وسلم وعلى صحبه ومن تبعهم

بإحسان الى يوم الدين أما بعد:

نتقدم بأسمى آيات الشكر والامتنان والتقدير الى الذين حملوا رسالة العلم والمعرفة

ولا يسعنا في هذا المقام الا ان نتوجه بالشكر والتقدير الى استاذنا الفاضل

سروطي عبد الغني

على اشرافه وتتبعه لإنجاز هذا العمل وتقديمه لنا من نصائحه وتوجيهاته القيمة وملاحظاته الدقيقة

جعلها الله في ميزان حسناته.

كما نشكر أيضا أساتذة قسم هندسة طرائق والى كل من ساهم في انجاز هذا العمل

وكل من ساعدنا على اتمامه

والى كل من خصنا بنصيحة او دعاء نسأل الله ان يحفظهم وان يجازيهم خيرا.

الملخص

يعد التقييم الدقيق للمحتوى الحراري للتبخر واعتماده على درجة الحرارة أمراً بالغ الأهمية في دراسة انتقال الحالة من السائل الى البخار. يتضمن الحساب النظري لانتالبي التبخر على أساس معادلة كلايرون الارتباط بين ضغط البخار ودرجة الحرارة ومعادلة الحالة، وبالتالي فإن الصيغة الصريحة غير متوفرة. لذلك كان تطوير نماذج QSPR امر مهم، والتي يمكن الاعتماد عليها للتنبؤ ببعض الخصائص الفيزيوكيميائية، والتي تجعل من الممكن ايضا تقييم المحتوى الحراري للتبخر للمركبات العضوية. طبقنا تقنيات الانحدار الخطي المتعدد وغير الخطي بواسطة كأداة لتسهيل التنبؤ مع ثلاث مجموعات من الواصفات الجزيئية. بحيث تحتوي قاعدة البيانات على 438 مركب، بعد الحسابات والتحليل كانت معاملات التوافق (للتدريب والتحقق) للانحدار الخطي المتعدد تشير الى $R^2_{Tra}=0.99$ و $R^2_{Val}=0.687$ على التوالي، واما بالنسبة للانحدار الغير الخطي اشارت الى ($R^2_{Tra}=0.91$ و $R^2_{Val}=0.86$).

الكلمات المفتاحية: نموذج QSPR، الواصفات الجزيئية، المحتوى الحراري للتبخر، درجة الارتباط التنبؤ.

Abstract

After the evaluation process of enthalpy and its dependence on temperature in the study of the state transition from liquid to vapor. where the trace calculation of the enthalpy of evaporation on the basis of carbon's equation includes the relationship between vapor pressure and temperature and the equation of state. therefore, the development of model QSPR was necessary, as it relied on them in predicting the physicochemical properties as it was also possible to assess the heat content of organic compounds in our study, we applied multiple linear and nonlinear regression techniques by means of a tool to facilitate prediction with three sets of partial descriptors so that the database contains 438 compounds, and after the calculations and analysis, the agreement coefficients for the multiple linear regression were $R^2_{Tra} = 0.99$ and $R^2_{Val} = 0.687$ As for the nonlinear regression were $R^2_{Val} = 0.86$ and $R^2_{Tra} = 0.91$

key words: model QSPR, descriptors Molecular, enthalpy of vaporization, The degree of correlation prediction

فهرس العناوين

الاختصارات

فهرس الاشكال

فهرس الجداول

مقدمة عامة

المراجع

الخاتمة العامة

الملاحق

الصفحة	الفصل الأول: مراجعة ببليوغرافية	
3	المركبات العضوية	1.I
4	طبيعة الروابط في المركبات العضوية	1.1.I
4	تصنيف المركبات العضوية	2.1.I
4	حسب نوع الروابط	1.2.1.I
4	حسب العناصر الموجودة فيها	2.2.I
5	الخصائص الفيزيائية والديناميكية الحرارية	2.I
5	الأهمية	1.2.I
5	الخواص الفيزيائية	1.1.2.I
5	الخواص الكيميائية	2.1.2.I
5	الخصائص الديناميكية الحرارية	3.1.2.I
6	إنتالبي التبخر	3.I
7	التحديد التجريبي لقياس إنتالبي التبخر	1.3.I
7	المبدأ	1.1.3.I
7	حساب المحتوى الحراري للتبخر	2.3.I
7	مثال على حساب عملية التجفيف	1.2.3.I
10	طرق مساهمة المجموعة	1.4.I
10	المبدأ الأساسي	1.1.4.I
11	التسلسل الهرمي للمجموعات	2.1.4.I
11	رتبة المجموعة 0 المساهمة الذرية	1.2.1.4.I
11	رتبة المجموعة 1 مساهمة الروابط بين الذرات	2.2.1.4.I
12	رتبة المجموعة 2 مساهمة المجموعات الوظيفية	3.2.1.4.I
13	طريقة BENSON	2.4.I
13	تعريف	1.2.4.I
14	تعريف العناصر الزائفة	2.2.4.I
15	تمديد طريقة BENSON إلى المرحلة السائلة والمرحلة الصلبة	3.4.I
15	طرق التوصيف الجزئي	1.3.4.I
16	طريقة VATANI, MEHRPOOYA ET GHARAGHEIZI	5.I

الفصل الثاني: الأدوات والتقنيات المستخدمة

18	التحليل الكمي للعلاقة بين الخصائص والبنية الهيكلية	1.II
18	تعريف	1.1.II
18	المبدأ	1.2.II
19	بناء النموذج	1.3.II
19	الواصفات الجزئية	2.II
20	تاريخه	2.1.II
22	مجموعات الواصفات الجزئية	2.2.II
23	الواصفات البنيوية	1.2.2.II
24	تعداد المجموعات الوظيفية	2.2.2.II
25	تقسيم الذرة المركزية	3.2.2.II
26	تقنيات الانحدار	3.II
26	الانحدار الخطي المتعدد (RLM)	1.3.II
28	XLSTAT	2.3.II
29	اختيار النموذج	2.2.3.II
30	الطرق العامة للاختيار	3.2.3.II
31	اختيار النموذج بتقدير خطأ التعميم	4.2.3.II
32	التحقق	5.2.3.II

الجزء العملي

	الفصل III: طرق ومنهجية العمل	
33	إنشاء قاعدة البيانات وتحديد الواصفات الجزئية	1.III
34	منهجية إعداد قاعدة البيانات	2.III
34	تصميم قاعدة البيانات	1.2.III
36	إعداد قاعدة البيانات	2.2.III
37	تجميع الواصفات الجزئية	1.2.2.III
38	طرق تحليل البيانات	3.III
38	الانحدار الخطي المتعدد	1.3.III
40	الانحدار غير الخطي (الشبكات العصبونية)	1.1.3.III
41	طريقة التحليل	1.2.3.III
42	مرحلة التدريب	1.1.2.3.III
42	مرحلة التحقق	2.1.2.3.III
42	معاملات التوافق	3.3.III

الفصل VI: نتائج وتحليل ومناقشة

43	نتائج الانحدار الخطي المتعدد	1.VI
48	تحليل ومناقشة نتائج الانحدار الخطي المتعدد	1.1.VI
50	نتيجة انحدار الشبكة العصبونية الاصطناعية (NRN)	2.VI
52	تحليل ومناقشة	1.2.VI

قائمة الاختصارات

QSAR Relation structure–activité quantitative

QSPR Relation structure–propriété quantitative

EQMA Erreur quadratique moyenne commise sur l'ensemble d'apprentissage

EQMT Erreur quadratique moyenne commise sur l'ensemble du test

MCE Moyenne carrés des erreurs

RMCE Racine carrée de la MCE.

MAPE Pourcentage d'erreur absolue moyenne

DW Coefficient de Durbin–Watson

Cp Coefficient de Mallows

AIC Critère d'information d'Akaike (Akaike's Information Criterion)

SBC Critère Bayésien de Schwarz (Schwarz's Bayesian Criterion)

PC Critère de prédiction d'Amemiya (Amemiya's Prediction Criterion)

RLM Régression linéaire multiple

F Coefficient de Fisher

nSK Nombre de non–H atomes

SCBO Somme des ordres de liaison classique (H appauvri)

nO Nombre d'atomes d'oxygène

قائمة الاختصارات

nF Nombre d'atomes de fluor

nHM Nombre d'atomes lourds

R² le coefficient de corrélation

الصفحة	العنوان	الرقم
6	اعتماد درجات حرارة التبخر على الماء والميثانول والبنزين والأسيتون	1.I
7	الإعداد التجريبي إنتالبي التبخر	2.I
8	(a) التبخر المنتظم للماء في الورق، (b) قياس المقاومة لتدفق البخار = I/Gp = المقاومة بسبب الورق ، I / Gr = المقاومة بسبب الطبقة الحدودية.	3.I
25	رسم توضيحي للهيكل الهرمي للجزيئات غير المنتظمة والبيئات الذرية الدائرية. يتم عرض منطقة الجزيء التي تتمركز عليها القطعة، جنبًا إلى جنب مع بنية شجرة الجزيء والواصف الناتج.	1.II
27	تمثيل رسومي للانحدار متعدد الخطوط لمتغيرين مستقلين x_1 و x_2 ومتغير تابع واحد y	2.II
34	تمثيل تخطيطي لهيكل قاعدة البيانات العلائقية	1.III
36	البحث عن بيانات المركبات استنادا إلى رقم سجل CAS	2.III
37	البحث عن بيانات الواصفات الجزيئية استنادا إلى رقم سجل CAS	3.III
39	نافذة برنامج XLSTAT (اختيار الانحدار)	4.III
39	مربع حوار الانحدار الخطي	5.III
40	الرسم البياني يعطي لمحة عامة عن بنية الشبكة العصبونية.	6.III
44	العلاقة الخطية بين القيمة التجريبية والتنبؤية للواصفات البنوية	1.VI
45	العلاقة الخطية بين القيمة التجريبية والتنبؤية للتقسيم حسب الذرة المركزية	2.VI
46	العلاقة الخطية بين القيمة التجريبية والتنبؤية لتعداد المجموعة الوظيفية	3.VI
48	العلاقة الخطية بين القيمة التجريبية والتنبؤية لتجميع المجموعات	4.VI
51	العلاقة الغير الخطية بين القيمة التجريبية والتنبؤية لتدريب	5.VI
52	العلاقة الغير الخطية بين القيمة التجريبية والتنبؤية لتحقيق	6.VI

فهرس الجداول

الصفحة	العنوان	الجدول
13	تقسيم جزيء butane إلى مجموعات من الرتبة 0، ومجموعات من الرتبة 1 ومجموعات من الرتبة 2.	2.I
14	أسماء ذرات الكربون وفقاً لتجهين المدارات الذرية.	2.I
15	متوسط وقيمة الجذر التربيعي المتوسط التي تم الحصول عليها بناءً على توقعات المحتوى الحراري لتبخر لـ 1017 جزيء $CxHy$, $CxHyOz$, $CxHyNw$ و $CxHyNwOz$	3.I
17	الاعدادات الإحصائية لمعاملات طريقة GHARAGHEIZI VATANI, MEHRPOOYA ET	4.I
22	قائمة مجموعات الواصفات من برنامج الحوسبة دراغون DRAGON	1.II
24	بعض الواصفات الجزيئية في قائمة أرقام المجموعة الوظيفية المستخدمة	2.II
26	الواصفات الجزيئية من قائمة واصفات الذرة المركزية للجزيئات غير المنتظمة المستخدمة	3.II
43	المتغيرات الخاصة بالنموذج مع المعاملات الخاصة بكل واصف للواصفات البنوية	1.VI
44	معاملات التوافق الواصفات البنوية	2.VI
45	المتغيرات الخاصة بالنموذج مع المعاملات الخاصة بكل واصف لتقسيم حسب الذرة المركزية	3.VI
45	معاملات التوافق التقسيم حسب الذرة المركزية	4.VI
46	المتغيرات الخاصة بالنموذج مع المعاملات الخاصة بكل واصف لتعداد المجموعة الوظيفية	5.VI
46	معاملات التوافق تعداد المجموعة الوظيفية	6.VI
47	المتغيرات الخاصة بالنموذج مع المعاملات الخاصة بكل واصف لتجميع المجموعات	7.VI
47	معاملات التوافق تجميع المجموعات	8.VI
49	يوضح بعض المركبات التي لها نفس القيم التجريبية	9.VI
49	يوضح بعض المتماكبات في قاعدة البيانات	10.VI
50	المتغيرات الخاصة بالنموذج مع المعاملات الخاصة بكل واصف للشبكة العصبونية	11.VI
51	معاملات التوافق الشبكة العصبونية	12.VI

المقدمة عامة

أدى تطوير برامج الكمبيوتر الموثوقة مع جانب نمو قوة الحوسبة إلى تمكين إنشاء تقنيات النمذجة الجزيئية، والتي أصبح الآن لا يمكن الاستغناء عنها.

شهدت النمذجة الجزيئية تطوراً مهماً للغاية في العقود الأخيرة في العديد من فروع التطبيق، وهي البنية الإلكترونية للذرة والجزيئات والمجمعات العضوية المعدنية، وتقييم خصائصها الطيفية والمغناطيسية أو هيكلية الجزيئات ذات الأهمية البيولوجية. هذه هي مجموعة تقنيات الدراسة والتعامل مع المشكلات الكيميائية على الكمبيوتر دون الحاجة إلى الذهاب إلى المخبر لإجراء التجارب. [CHTITA,2016].

أصبح استخدام طرق بديلة للتجريب، من بينها علاقات خصائص / نشاط البنية الكمية

(QSPR / QSAR) ذات أهمية كبيرة وحتى موصى بها في اللوائح الجديدة (REACH).

[CHTITA,2016].

يلعب تطوير النماذج التنبؤية للعلاقات الكمية بين البنية والنشاط والملكية (QSAR / RQSP) دوراً مهماً في تصميم المواد الكيميائية ذات الاستخدام الدقيق، مثل المستحضرات الصيدلانية. نظراً للتطبيق الواسع لأنواع مختلفة من المواد الكيميائية في حياة الإنسان، تعد نمذجة QSAR / QSPR أداة مفيدة للتنبؤ بالنشاط البيولوجي والخصائص الفيزيائية والكيميائية والسمية للمواد الكيميائية غير المختبرة. [Wilson, Free,1964].

تلعب الواصفات الجزيئية دوراً مهماً في تطوير نموذج QSAR / QSPR لأنها تمثل كميًا المعلومات الكيميائية المشفرة. فهي لا تساعد فقط في اشتقاق ارتباط رياضي بين التركيب الكيميائي والاستجابة للفائدة، ولكنها تسمح أيضًا باكتشاف الجانب الميكانيكي المتضمن في عملية كيميائية حيوية ويستخدم تحليل QSAR/QSPR الآن على نطاق واسع كأداة منطقية لاكتشاف الأدوية وتقييم المخاطر البيئية. [M. Grover, B. Singh, M. Bakshi, S. Singh,2000]

الهدف من هذا العمل هو تطوير نماذج QSPR جديدة للتنبؤ بالخصائص الفيزيائية والكيميائية الخطرة لمثل هذه الأنظمة المعقدة. بناء على ما سبق من الدراسات سنقوم بدمج البيانات التجريبية المتاحة التي ستسمح بتطوير النماذج التنبؤية والتحقق من صحتها. سنقوم بدراسة المحتوى الحراري للتبخر وهي خاصية فيزيائية والحرارة اللازمة لتبخير 1 مول من المادة عند نقطة غليانها تحت الضغط القياسي (KPa 101.325) وتقاس حرارة التبخر بالكيلوجول لكل مول (kj/mol).

وتتكون هذه المذكرة من اربعة فصول يتم تناولها تباعا فيما يلي:

- ✓ يقدم الفصل الأول شرح المركبات العضوية، وأهمية الخصائص الفيزيائية والديناميكية الحرارية (المحتوى الحراري لتبخر)، ومراجعة بيليوغرافية للطرق التنبؤية.
 - ✓ لفصل الثاني مخصص لتعريف النموذج المدروس (QSPR)، وشرح الواصفات الجزيئية والتقنيات المستخدمة.
 - ✓ في الفصل الثالث نشرح منهجية إعداد قاعدة البيانات ومراحل منهجية الحساب بواسطة البرمجيات المستخدمة.
 - ✓ تم وصف طريقة الحساب المختارة أخيراً بالتفصيل في الفصل الرابع المخصص لعرض النتائج التي تم الحصول عليها ومناقشة هذه النتائج.
- أخيراً، يتم تطبيق التقنية المطورة على العديد من المركبات الكيميائية.

الجزء النظري

الفصل الأول

مراجعة بيولوجرافية

الفصل الأول: مراجعة بيليوغرافية

ظهر مصطلح الكيمياء العضوية لأول مرة في عام 1807 بفضل السويدي (JACOB BERZÉLIUS). يعرف بأنه مركب عضوي أي أنواع كيميائية تنشأ من المواد الحية. قام كيميائيون آخرون، مثل (FRIEDRICH WÖHLER) أو (AUGUST KÉKULÉ)، بعمل الكثير لتطوير الكيمياء العضوية.

في وقت لاحق، تسمح العديد من التركيبات العضوية بإنتاج مركبات صناعية، ومن ثم يصبح من الضروري وضع تعريف جديد لليوم للكيمياء العضوية هي كيمياء مركبات الكربون الطبيعية أو الاصطناعية. إلى جانب الكربون، تحتوي الأنواع العضوية على مجموعة منخفضة فقط من العناصر:

الهيدروجين H، الأكسجين O، النيتروجين N أو نادراً الكبريت S، الفوسفور P والكلور Cl [DEUDON, 2008].

في هذا الفصل سوف ندرس بشكل عام المواد النشطة والتي يمكن تقديمها في حالات مختلفة: السوائل والمواد الهلامية والمواد الصلبة. فإن الهدف الأساسي لهذه الدراسة هو تقدير المحتوى الحراري لتبخير للمركبات العضوية، بأكثر قدر ممكن من الدقة.

في الجزء الثاني من هذا الفصل بحث علمي عن بعض طرق تقدير مساهمة المجموعات والواصفات الجزيئية (Descripteurs moléculaires).

1.1. المركبات العضوية:

المركبات العضوية هي المركبات الكيميائية التي تحتوي على عنصر الكربون بصفة أساسية، وترتبط ذرة الكربون فيها بعناصر أخرى مثل الهيدروجين، والأكسجين، والنيتروجين، والفوسفور وغيرها بروابط تساهمية، ويمكن أن يطلق على المركبات العضوية اسم مركبات الكربون، وفي الطبيعة يوجد مصدران مهمان لمركبات الكربون هما البترول، والفحم.

يقع عنصر الكربون في المجموعة الرابعة من الجدول الدوري، والعدد الذري لذرة عنصر الكربون هو 6، ويحتوي المدار الأخير فيه على أربع إلكترونات، لذلك فإنّ عنصر الكربون قادر على المشاركة بأربعة روابط مع نفسه أو غيره من العناصر، بالإضافة إلى قدرته على تشكيل سلاسل عديدة ومتفرعة بأطوال متنوعة ومركبات حلقيّة، وبسبب ذلك يكون عنصر الكربون العديد من المركبات، وهذا ما يفسر وجود الملايين من المركبات العضويّة من حولنا، ويسمى فرع الكيمياء المختص بدراسة المركبات العضويّة بالكيمياء العضويّة.

1.1.1. طبيعة الروابط في المركبات العضويّة:

تُعرف الروابط التي يكونها عنصر الكربون مع العناصر في المركبات العضويّة باسم الروابط التساهميّة أو التشاركيّة، ولهذا السبب فإنّ أغلب المركبات العضويّة غير موصلة للتيار الكهربائي، وتختلف أنواع الروابط التساهميّة التي يجريها الكربون مع غيره من العناصر ومن أنواع الروابط التي يجريها الكربون:

- **الرابطة التساهميّة الأحاديّة:** يتشارك الكربون مع ذرة أخرى بزوج من الإلكترونات، وذلك مثل مركب الميثان. CH_4
- **الرابطة التساهميّة الثنائيّة:** يتشارك الكربون مع ذرة أخرى بزوجين من الإلكترونات، وذلك مثل مركب الإيثين C_2H_4
- **الرابطة التساهميّة الثلاثيّة:** يتشارك الكربون مع ذرة أخرى بثلاثة أزواج من الإلكترونات، وذلك مثل مركب الإيثاين C_2H_2 .

1.2.1. تصنيف المركبات العضوية:

1.2.1.1. حسب نوع الروابط:

المركبات العضوية المشبعة: هي المركبات العضوية التي ترتبط العناصر فيها بروابط تساهمية أحادية فقط مثل الألكانات.

المركبات العضوية غير المشبعة: هي المركبات العضوية التي ترتبط بروابط تساهمية ثنائية أو ثلاثية إضافة للرابطة الأحادية، مثل الألكينات

1.2.2.1. حسب العناصر الموجودة فيها:

الهيدروكربونات: هي مواد عضوية تحتوي على عنصري الهيدروجين والكربون فقط، وتشمل الهيدروكربونات عائلة الألكانات، والألكينات، والألكينات، والمواد الأروماتية العطرية، وتعدّ المواد البترولية أو مشتقات النفط من المواد الهيدروكربونية، وتتدرج هذه المواد من مواد متطايرة ذات كثافة قليلة إلى مواد ثقيلة ذات كثافة عالية، ومن المواد البترولية المعروفة غاز الميثان وغاز الاوكتان وغيرها من المشتقات النفطية.

مشتقات الهيدروكربونات: هي مواد عضوية تحتوي على عنصري الهيدروجين والكربون وعناصر أخرى مثل الأكسجين والنيتروجين، وغيرها، وتشمل مشتقات الهيدروكربونات عائلات عدة مثل الكحولات، والإثيرات، والأمينات، كيتونات، والأميدات، وغيرها.

❖ تتميز كل عائلة من العائلات السابقة بمجموعات وظيفية تميزها عن بعضها، وتم تشكيل التصنيف

الكيميائي السابق بناءً على هذه المجموعة الوظيفية، وتُعرف المجموعة الوظيفية بأنها ذرة أو

مجموعة من الذرات المرتبطة بذرة الكربون في المركبات العضوية، وهي المسؤولة عن إكسابها

صفات كيميائية وفيزيائية مميزة متشابهة في العائلة الواحدة، تميزها عن غيرها من العائلات.

[Rand Al Saleh,2016]

I. 2. الخصائص الفيزيائية والديناميكية الحرارية:

I. 2.1. الأهمية:

I. 1.1.2.1. الخواص الفيزيائية:

الخصائص التي لا تغير الطبيعة الكيميائية للمادة. الخاصية المادية للمادة النقية هي أي شيء يمكن ملاحظته دون تغيير هوية المادة. تتكون الملاحظات عادة من عدد قليل أنواع المقاييس العددية، على الرغم من وجود وصف نوعي (غير رقمي) أكثر خصائص في بعض الأحيان. هناك الكثير من الخصائص الفيزيائية وسيكون لكل مؤلفة لديها قائمة مختلفة من الأمثلة. بعض الأمثلة على الخصائص الفيزيائية: اللون، نقطة التجمد، نقطة الغليان [Mazouzi A et Noui Ch].

I. 2.1.2. الخواص الكيميائية:

الخصائص الكيميائية هي خصائص عنصر أو تشكل في التفاعلات الكيميائية. على سبيل المثال، حقيقة أن الصوديوم يتفاعل مع الماء هي خاصية كيميائية.

I. 3.1.2.1. الخصائص الديناميكية الحرارية:

الخصائص الديناميكية الحرارية على وجه الخصوص هي عملية تصف كيف تؤثر التغيرات الفيزيائية في بيئة المركب مثل الضغط ودرجة الحرارة على المركب وكيف يغير المركب بدوره ضغط ودرجة حرارة محيطه. حيث أن درجة الحرارة والضغط يؤثران على الخواص الحركية ومدى التفاعلات الكيميائية وكذلك

خصائص التدفق المواد الكيميائية، فهذه الخصائص مهمة للصناعة الكيميائية [Mazouzi A et Noui]
.[Ch]

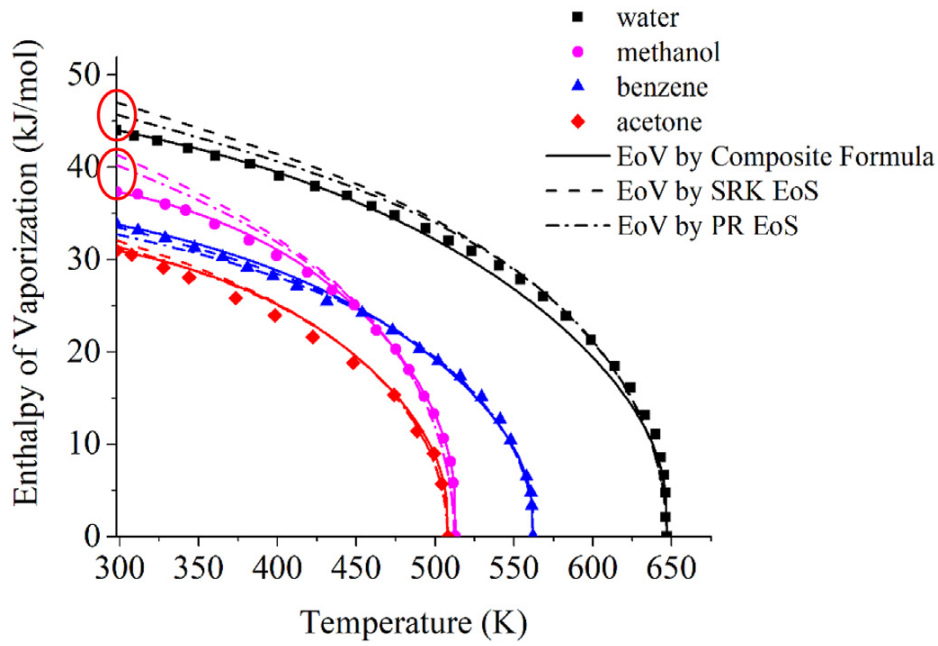
3.I. إنتالبي التبخر (enthalpy of vaporization):

تُعرف أيضاً ب حرارة التبخر أو حرارة التبخير هي الطاقة المطلوبة لتحويل كم ما من المادة إلى الحالة الغازية.

ويتم تعريفها على أنها الحرارة اللازمة لتبخير مول واحد من المادة عند نقطة غليانها. تحت الضغط القياسي (101.325 kPa) ويتم التعبير عن حرارة التبخر بالكيلو جول لكل مول (kJ/mol) واستخدام الكيلو جول لكل كيلو جرام (kJ/kg) أيضاً جائز، ولكن ليس شائع الاستخدام. كما أن هناك تعبيرات أخرى يمكن استخدامها مثل وحدة الحرارة البريطانية (Btu/lb).

ونظراً لأن التبخير هو عكس عملية التكثيف، فإن المصطلح حرارة التكثف يستخدم أيضاً. ويتم تعريف الأخير على أنه الحرارة المفقودة عندما يتم تكثيف مول واحد من المادة عند درجة الغليان في ظروف الضغط القياسية [State Dehai Yu].

حرارة تبخر الماء تقريبا 2260 (kJ/kg) والذي يساوي تقريبا 40.8 (kJ/mol). وهذه كمية كبيرة نسبياً وهي خمسة أضعاف الطاقة اللازمة لتسخين الماء من صفر إلى 100 درجة مئوية.



الشكل 1.I اعتماد درجات حرارة التبخر على الماء والميثانول والبنزين والأسيتون.

1.3.I. التحديد التجريبي لقياس إنتالبي التبخر:



الشكل 2. الإعداد التجريبي إنتالبي التبخر

I. 1.1.3. المبدأ:

يحدث تبخر السائل بامتصاص الحرارة. لتحديد المحتوى الحراري للتبخير، يتم تبخير كتلة معروفة من السائل الذي سيتم فحصه في وعاء تبخير خاص في تيار من الهواء. يمكن تحديد كمية الحرارة الممتصة، والتي تتوافق مع المحتوى الحراري للتبخير، عن طريق السرعات الحرارية.

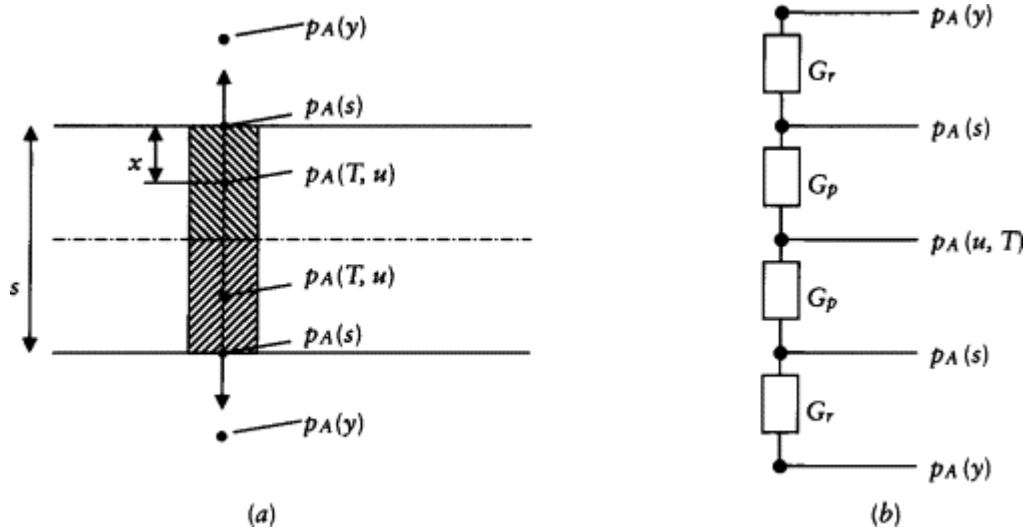
2.3.I. حساب المحتوى الحراري للتبخر:

1.2.3.I. مثال على حساب عملية التجفيف

يمكن تقسيم المشاكل التي يتم مواجهتها في حسابات عملية التجفيف إلى فئتين: عوامل الطبقة الحدية خارج ظروف المادة والرطوبة، ومشكلة نقل الحرارة داخل المادة. يصعب حل الأخير رياضياً، ويرجع ذلك في الغالب إلى السائل المتحرك عن طريق التدفق الشعري. يميل التدفق الشعري إلى موازنة اختلافات الرطوبة داخل المادة أثناء عملية التجفيف. تتطلب المناقشة الرياضية للتدفق الشعري النظر في معادلة الزخم الخطي للمياه وتتطلب معرفة ضغط الماء، واعتماده على محتوى الرطوبة ودرجة الحرارة، وقوة مقاومة التدفق بين الماء والمادة. نظراً للطبيعة المعقدة لهذا، لا يتم النظر فيه هنا (M.B.).

سنقوم بتغطية نموذج تجفيف بسيط لفحص إشعاع الورق المطلي الأكثر جفافاً. نفترض أنه لا توجد اختلافات كبيرة في درجة الحرارة أو الرطوبة في اتجاه سمك نسيج الورق، وأن درجة الحرارة T والرطوبة u ثابتان في اتجاه السماكة. يتطلب هذا الافتراض تجاهل الإجراء الشعري، وتدرج ضغط الماء يساوي صفراً على افتراض $\partial u / \partial x = \partial T / \partial x = 0$. كيف يمكن أن يظل توزيع الرطوبة منتظماً؟

الطريقة الوحيدة هي تجاهل التدفق الشعري وافتراض أن تبخر الماء يحدث بالتساوي في سمك النسيج الورقي. باستخدام مجفف إشعاعي، يكون هذا النهج معقولاً إذا تم امتصاص الطاقة الإشعاعية بالتساوي داخل الويب. بافتراض أن الطبقات الحدودية على جانبي الويب متشابهة، يتم توزيع تدفق البخار بشكل متماثل إلى مركز الويب. يظهر نموذج التبخير وانجراف الماء في الشكل 3 (M.B.).



الشكل 3. I (a) التبخر المنتظم للماء في الورق ، (b) قياس المقاومة لتدفق البخار ؛ $l/Gp =$ المقاومة

بسبب الورق ، $l / Gr =$ المقاومة بسبب الطبقة الحدودية.

$$(1.I) \quad \frac{\partial p_A}{\partial x} = \frac{p_A(s) - p_A(T, u)}{\Delta x}$$

حيث $\Delta x = s / 4$ و s هي سماكة نسيج الورق (الشكل 3.I). يمكن تمثيل تدفق البخار عبر الطبقة

الحدودية على (الشكل 3.I).

$$(2. I) \quad \rho_A v_{Ax} = k'_c \frac{M_A p}{RT} \ln \frac{p - p_A(y)}{p - p_A(s)}$$

$$k'_c = \left(\frac{\alpha}{\rho c_p} \right) \quad \text{حيث}$$

$$(3.I) \quad j_A = k_c (c_A(s) - c_A(y))$$

$$(4.I) \quad = k'_c \frac{p}{p_{BM}} (c_A(s) - c_A(y))$$

$$(5.I) \quad = k'_c c (p_A(s) - p_A(y))$$

$$(6.I) \quad = k'_c \frac{c \ln \frac{p_B(s)}{p_B(y)}}{p_B(y) - p_B(s)} (p_A(s) - p_A(y))$$

$$(7.I) \quad = k'_c c \ln \frac{p - p_A(y)}{p - p_A(s)} \quad (p = p_A + p_B)$$

بالإشارة إلى

$$(8.I) \quad \rho_A v_{Ax} = M_A j_A = k'_c \frac{M_A p}{RT} \ln \frac{p - p_A(y)}{p - p_A(s)}$$

أو مكافئ لي الدالة اللوغاريتمية في المعادلة. (2. I) يمكن كتابتها ك

$$(9.I) \quad \ln \frac{p-p_A(y)}{p-p_A(s)} = \ln \left(1 + \frac{p_A(s)-p_A(y)}{p-p_A(s)} \right)$$

عندما $(p_A(s) - p_A(y))/(p - p_A(s)) < 1$ ، يمكن تطوير دالة لوغاريتمية لسلسلة

$$(\ln (1+x) = x - x^2/s + \dots)$$
 ، وباستخدام الحد الأول يعطي التقريب

$$(10. I) \quad \ln \frac{p-p_A(y)}{p-p_A(s)} \approx \frac{p_A(s)-p_A(y)}{p-p_A(T,u)}$$

في هذا التقريب يتم استبدال $p_A(s)$ في المقام بـ $P_A (T,u)$

نستخدم الرموز التالية:

$$(11.I) \quad G_r = k'_c \frac{M_A p}{RT} \frac{1}{p-p_A(T,u)}$$

$$(12.I) \quad G_p = \varepsilon \frac{p}{p-p_A(T,u)} \frac{M_A}{RT} D_{AB} \frac{1}{\Delta x}$$

$$(13.I) \quad G_r = k'_c \frac{M_A p}{RT} \frac{1}{p-p_A(T,u)}$$

$$(14.I) \quad G_p = \varepsilon \frac{p}{p-p_A(T,u)} \frac{M_A}{RT} D_{AB} \frac{1}{\Delta x}$$

باستخدام التقريب (1. I) في المعادلة (2.I) يؤدي إلى صيغة تدفق البخار

$$(13. I) \quad \rho_A v_{Ax} = G_p (p_A(T, u) - p_A(s)) = G_r (p_A(s) - p_A(y))$$

$$(14. I) \quad \rho_A v_{Ax} = G (p_A(T, u) - p_A(y))$$

$$(15. I) \quad \frac{1}{G} = \frac{1}{G_r} + \frac{1}{G_p}$$

يتم تحديد التبخر الكلي على جانبي نسيج بواسطة المعادل. (4.324) مضروبًا في 2. إذا كانت

طاقة الإشعاع الممتصة في نسيج الورق هي طاقة الإشعاع الممتصة، فيمكن كتابة توازن الطاقة ك

$$\dot{Q}'' (Wm^{-2})$$

$$(16.I) \quad Q'' = C'' \frac{dT}{dt} + \frac{2G(p_A(T,u)-p_A(y))}{T,u}$$

حيث (T.u) هي حرارة تبخير الماء و" C هي السعة الحرارية للشبكة ($J m^{-2}K^{-1}$). يمكن حساب هذا من:

$$(17. I) \quad C'' = m''(c_{p1} + uc_{p2})$$

حيث "m هي الكتلة المربعة للمادة الجافة للشبكة الورقية ($kg m^{-2}$)، c_{p1} هي الحرارة النوعية للمادة الجافة، و C_{p2} هي الحرارة النوعية للماء.

تغير الرطوبة بسبب التبخر

$$(18. I) \quad -m'' \frac{du}{dt} = 2G(p_A(T, u) - p_A(y))$$

العلامة السلبية في المعادلة. يرجع إلى حقيقة أن $(du / dt) < 0$ يمثل صافي التبخر إلى المناطق المحيطة.

حساب ارتفاع درجة الحرارة في كل مرة t مع Eq. (16. I) ومكافئ. (18. I) يعطي التغير المقابل في الرطوبة. نظرًا لأن الوظيفة G والضغط $P_A (T.u)$ معقدان، يتم استخدام الحلول العددية.

1.4. I طرق مساهمة المجموعة (Méthodes de contribution de groups):

1.1.4. I المبدأ الأساسي:

تتجمع تحت مصطلح "طرق مساهمة المجموعة" جميع الأساليب التنبؤية التي تجعل من الممكن تقييم أي خاصية من خلال المساهمات المتعلقة بأجزاء الجزيئات.

تتم دراسة طرق مساهمة المجموعة بانتظام. كما أنها تتيح حسابًا سريعًا وبسيطًا للكميات الديناميكية الحرارية المختلفة للمواد أو المخاليط النقية. في عام 1932، أثبت (HUFFMANN PARKS ET) أن بعض الوظائف الديناميكية الحرارية من المركبات العضوية يمكن حسابها بشكل معقول من المعلمات ذات الصلة للتركيبات الجزيئية. منذ ذلك الحين، سعى العديد من المؤلفين إلى إنشاء الطرق التنبؤية، يتم تطبيقها

في الغالب على حساب الخصائص الديناميكية الحرارية في الطور الغازي، مثل المحتوى الحراري للتكوين $(\Delta g^{\circ}Hf)$ ، والسعات الحرارية (cp_g) والنتروبية $(S^{\circ}g)$ [Salmon, 2006].

2.1.4.I. التسلسل الهرمي للمجموعات:

أظهر (BENSON ET BUSS) في عام 1958 أنه من الممكن إنشاء نظام هرمي فيما يتعلق بقوانين الجمع مما يجعل من الممكن تقييم بعض الخصائص الجزيئية [Salmon, 2006].

1.2.1.4.I. رتبة المجموعة 0 المساهمة الذرية:

يتوافق التقسيم إلى مجموعات من الدرجة 0 مع مراعاة كل ذرة موجودة في جزيء معين. وبالتالي، تشكل كل ذرة مجموعة من المركب المدروس. أي عنصر ينتمي إلى مصفوفة MENDELEÏEV يمكن أن يكون مجموعة من الترتيب 0. وبالتالي تعتبر الخاصية المرغوبة المتعلقة بالمركب المدروس عبارة عن مجموع المساهمات الذرية [Salmon, 2006].

2.2.1.4.I. رتبة المجموعة 1 مساهمة الروابط بين الذرات:

يتم تقطيع الجزيء، في هذه الحالة، إلى عناصر مختلفة لا تعتمد على بيئتها. في الواقع، إذا كانت نفس المجموعة موجودة في جزيء واحد أو في آخر، فإن قيمة مساهمتها تظل كما هي مهما كانت المجموعة. أو الذرة التي تتعلق بها. على سبيل المثال، إذا كانت المجموعة $-CH_3$ في جزيء ما مرتبطة بمجموعة $-CH_2-$ ، فإن مساهمتها هي نفسها كما لو كانت هذه المجموعة مرتبطة بمجموعة $-OH$. لذلك ليس للتفاعلات بعيدة المدى أي تأثير في هذه الحالة [Salmon, 2006].

الجمع بين البساطة النسبية والدقة المرضية (بترتيب 40 إلى 80 kJ.mol^{-1} لحساب المحتوى الحراري لتشكيل [الدقة مقبولة لبعض عدد المركبات ذات المحتوى الحراري الكبير للتكوين بالقيمة المطلقة])، غالبًا ما تستخدم الطرق التي تستخدم مساهمات من مجموعات من الدرجة الأولى. ومع ذلك، من الضروري

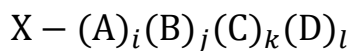
الإشارة إلى أن بعض هذه الأساليب لا يمكن الاعتماد عليها. في الواقع، تقدير درجات حرارة الغليان العادية (اختلاف درجات الحرارة أساسي في عمليات الفصل) مع مشاركة (HORVATH). بالإضافة إلى ذلك، يتطلب تقييم درجة الحرارة الحرجة للمركبات بهذه الطرق تحديداً تجريبياً لدرجات حرارة الغليان العادية. ومع ذلك، هذه ليست غير متاحاً في المؤلفات.. علاوة على ذلك، فإن تمثيل الهياكل الجزيئية حسب مجموعات الرتبة 1، في بعض الحالات، مبسط للغاية (من خلال تعريف المجموعات نفسه) بحيث لا يمكن تمييز الأيزومرات (isomers).

من أجل التغلب على العوائق المختلفة التي تقدمها هذه التقنيات، اقترح FEDORS طريقة لتقدير درجة الحرارة الحرجة بناءً على التركيب الجزيئي للمركبات. على الرغم من دقتها غير المرضية غالباً ما يُوصى بهذه التقنية نظراً لطبيعتها التنبؤية البحتة (DAUBERT AND DANNER).

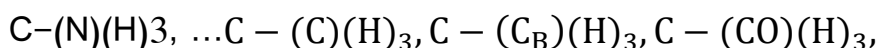
أما بالنسبة لـ JALOWKA و DAUBERT بالإضافة إلى DAUBERT و BARTAKOVITS، فقد استخدموا طريقة مساهمة مجموعات ذات رتبة أعلى، مستوحاة من تقنية وضع تم تنفيذه بواسطة BENSON. الذي قدم فكرة المجموعات الوظيفية.

3.2.1.4.I. رتبة المجموعة 2 مساهمة المجموعات الوظيفية:

تتكون المجموعة من ذرة مركزية ذات تكافؤ أكبر من 1، وجميع الروابط التي تشكلها مع جيرانها. يمكن كتابة مجموعة بهذه الطريقة التالي:



حيث تمثل X الذرة المركزية التي ترتبط بها i ذرة (ذرات) A، j ذرة (ذرات) B، k ذرة (ذرات) C، l ذرة (ذرات) D يمكننا أن نأخذ ذرة الكربون كمثال، C. إذا كانت الأخيرة ذرة مركزية، فيمكنها تكوين عدة مجموعات، مثل:

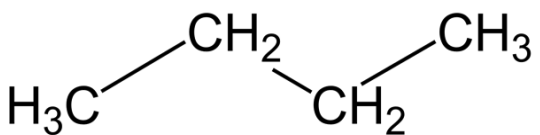


الفصل الأول: مراجعة بيليوغرافية

في طرق مساهمة المجموعة من الدرجة الثانية، يتم أخذ البيئة الكاملة لكل ذرة مركزية في الاعتبار، على عكس التقنيات التي تستخدم مجموعات من الدرجة الأولى. هذا النوع من المساهمة يجعل من الممكن الحصول على نتائج بدقة مرضية تمامًا لحساب الكميات الحرارية الكيميائية (بترتيب 4 kJ .mol⁻¹) [Salmon, 2006].

من أجل توضيح الأقسام المختلفة المذكورة أعلاه (في الفقرات 1.2.1.4.I , 2.2.1.4.I , 3.2.1.4.I).

خذ على سبيل المثال جزيء "بسيط"، جزيء البيتان (butane):

الاسم العلمي	الصيغة الكيميائية	CAS	الشكل الجزيئي
البيتان Butane	C ₄ H ₁₀	106-97-8	

يصف الجدول أدناه التوزيع الذي يجب تنفيذه عند استخدام طريقة مساهمة المجموعة من أجل 0 أو 1 أو 2.

الجدول 1. I: تقسيم جزيء butane إلى مجموعات من الرتبة 0، ومجموعات من الرتبة 1 ومجموعات من الرتبة 2.

الطريقة	المجموعة	عدد المجموعات
طريقة الرتبة 0	C	4
	H	10
طريقة الرتبة 1	-CH ₃	2
	-CH ₂ -	2
طريقة الرتبة 2	C-(C)(H) ₃	2
	C-(C) ₂ (H) ₂	2

2.4.I . طريقة BENSON:

1.2.4.I . تعريف:

تستخدم طريقة BENSON مساهمات من مجموعات من الدرجة الثانية. تسمح لنا العلاقات التالية بتقدير المحتوى الحراري القياسي لتكوين الطور الغازي عند 298.15 كلفن (K)، والقدرات الحرارية، والانتروبيا المعيارية عند 298.15 كلفن (K) والمحتوى الحراري القياسي لتكوين الطور الغازي عند 298.15 كلفن (K):

$$(19. I) \quad \Delta H_f^0 = \sum_k N_k (d_f h_k)$$

$$(20. I) \quad c_p^0(T) = \sum_k N_k (c_{pk})$$

$$(21. I) \quad \text{مع } S^0 = \sum_k N_k (s_k) + S_s^0$$

$$(22. I) \quad S_s^0 = \sum_k R \ln (N_{oi}) - R \ln (N_{ts})$$

$$(23. I) \quad \text{مع } \Delta_f G_g^0 = \Delta_f H_g^0 - 298,15 \times (S^0 - S_{el}^0)$$

$$(24. I) \quad S_d^0 = \sum_e N_e (S_e^0)$$

N_k : عدد مجموعات النوع k في الجزيء

مساهمة المجموعة : $d_f h_k \quad c_{pk} \quad s_k$

S_s^0 : الانتروبيا القياسية لتناظر الجزيء ؛

N_{oi} : عدد الأيزومرات الضوئية للجزيء (أي المتشابهة)؛

N_{ts} : العدد الإجمالي للتناظر

S_{el}^0 : الانتروبيا المطلقة للعناصر المكونة للجزيء عند T و Pa 101325؛

S_e^0 : الانتروبيا المطلقة لعنصر موجود في الجزيء عند T و Pa 325 101؛

العلاقة التي تهمنا هنا هي المعادلة (21. I)، مما يسمح لنا بتقدير المحتوى الحراري القياسي

لتكوين المركبات في حالة الغاز المثالية.

لاحظ أن طريقة BENSON لها مجال تطبيق واسع إلى حد ما يتضمن، بالإضافة إلى العناصر C، H، O، N، S و P، والهالوجينات (X)، والمعادن (Al، Ge، Pb، إلخ)، والمعادن الانتقالية (Ti، V، Cr، Fe، ...) والقلويات والمعادن الأرضية القلوية (Na، K، Mg، ... إلخ) [Anna S].

2.2.4.I تعريف العناصر الزائفة:

يُطلق على كل عنصر مكون لمجموعة ما عنصراً زائفاً. وهكذا، في المجموعة C- (N) (CO) ((C) (H)، تكون الذرات أو مجموعات الذرات C و N و CO و H عناصر زائفة من مجموعة الدرجة الثانية المذكورة أعلاه [Anna S].

تميز طريقة BENSON بين عدة أنواع من ذرات الكربون، لا سيما بعد تهجين المدارات الذرية:

الجدول 1. 2: أسماء ذرات الكربون وفقاً لتهجين المدارات الذرية.

تهجين	نوع الارتباط	تسمية
sp ³	سند واحد	C
sp ²	رابطة مزدوجة	C _d
sp	السندات الثلاثية	C _t

علاوة على ذلك، يمثل CB ذرة كربون تنتمي إلى نواة بنزين و CBF ذرة كربون تنتمي إلى نواة بنزين، وهي نفسها مرتبطة بنواة بنزين أخرى. يتوافق CA مع ذرة كربون ألين ويمثل CI ذرة كربون في مجموعة imino. وبالمثل، هناك ذرات نيتروجين مختلفة. تضاف إلى العنصر N الذرات المسماة NI (من مجموعة imino) و NA (من مجموعة azo).

يتم تمييز العناصر الزائفة متعددة الذرات: CO مجموعة كربونيل (carbonyl)، CN (مجموعة cyano)، NO (مجموعة nitroso) و NO₂ (مجموعة nitro) بالإضافة إلى ذلك، يتوافق N₃ مع وظيفة (azide Abdelghani S).

3.4.I. تمديد طريقة BENSON إلى المرحلة السائلة والمرحلة الصلبة:

1.3.4.I طرق التوصيف الجزيئي:

نشر DOMALSKI و HEARING، في عام 1993، دراسة عن 1512 جزيئاً تحتوي على عناصر الكربون، والهيدروجين، والأكسجين، والنيتروجين، والكبريت، والهالوجينات.

من المركبات التي تمت دراستها لا يدعي أنها شاملة. الهدف الرئيسي من هذه الدراسة هو إثبات قابلية تطبيق طريقة BENSON على المرحلة المكثفة. فيما يتعلق بالمرحلة الصلبة، الذي جعل من الممكن إنشاء جميع مساهمات مجموعات C-H، C-H-O و Benson C-H، C-H-O مفيدة لتقدير المحتوى الحراري معيار التدريب.

الجدول 3.1: متوسط وقيمة الجذر التربيعي المتوسط التي تم الحصول عليها بناءً على توقعات المحتوى الحراري للطور الصلب القياسي لـ 1,017 جزيء CxHyNwOz و CxHy، CxHyOz، CxHyNw.

الصيغة العامة	عدد الجزيئات	المتوسط المتبقي	معدل الجذر التربيعي
CxHy	142	26,1	51
CxHyOz	217	21,1	36,2
CxHyNw و CxNw	42	34,3	63,5
CxHyNwOz و CxNwOz	253	34,6	65,3
مجموع	654	28,3	53,9

تم استخدام إجراء منهجي لتحديد مساهمات المجموعة المختلفة. كان المؤلفون مهتمين في البداية بـ n-alkanes. تم حساب المساهمات التي تحتوي على ذرات الكربون والهيدروجين فقط. تم إصلاح هذه القيم ثم جعل من الممكن تحديد مساهمات المجموعات المشاركة في الألكانات المستبدلة، ثم الألكينات، والألكينات، والمركبات العطرية، إلخ.

الاختلاف الأساسي لهذه التقنية مقارنة بالطريقة التي قدمها BENSON هو معالجة التفاعلات البغيضة التي تولدها ذرات الهيدروجين للمجموعات الميثيل المرتبطة بالكربون الثالث أو الرباعي. تُعزى مساهمة المجموعة إلى الجزيئات التي تحتوي على ذرات الكربون هذه. على سبيل المثال، يتطلب 2- methyl butane تصحيحات من هذا النوع في حين أن 3-ethylpentane لا يتطلبها. يحل هذا النهج محل نهج بنسون للتفاعلات اليسرى.

تم تقديم الدراسة المقارنة، في المراحل الثلاث، للقيم المقاسة والمحسوبة لمحتوى المحتوى الحراري للتكوين والسعات الحرارية والنتروبية.

وأظهرت التقديرات التي أجريت على المراحل الثلاث أن 67% من الفروق بين المحتوى الحراري للتدريب التي تم الحصول عليها من الأدبيات وتلك التي تم حسابها كانت أقل من 4 $\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$. كان 16 % منهم بين 4 و 8 $\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ ، والباقي 17 % كان أعلى من 8 $\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$. وتجدر الإشارة إلى أن المؤلفين لا يفرقون بين الثلاثة المراحل، ولكن تعطي نتيجة إجمالية. التقارير الخاصة بكل مرحلة من المراحل الثلاث، مأخوذة بشكل منفصل، مفقودة من الدراسة المنشورة هناك طرق عديدة لحساب ΔH . إحدى الطرق التي تصنف على أنها طرق المساهمة الجماعية: طريقة "ALI VATANI, MEHDI MEHRPOOYA ET FARHAD GHARAGHEIZI".

5.I طريقة VATANI, MEHRPOOYA ET GHARAGHEIZI:

طريقة VATANI, MEHRPOOYA ET GHARAGHEIZI طريقة لتقدير المحتوى الحراري القياسي للتدريب. النماذج المطورة قابلة للتطبيق على المركبات العضوية. يعتمد مبدأ التقنية المستخدمة على الواصفات الجزيئية. في هذه الطريقة، تم دراسة نموذج جديد لـ QSPR للتنبؤ بـ $\Delta_f H^0$ من 1115 مركب عضوي. تنتمي هذه المركبات إلى جميع عائلات المواد،

باتباع النموذج الذي تم الحصول عليه يمكن تطبيقه للتنبؤ بـ $\Delta_f H^0$ لمركب. يمكن كتابة المعادلات المميزة للنماذج المطورة بالشكل التالي:

$$(25. I) \quad \Delta_f H^0 = w_0 - w_1 * nSK + w_2 * SCBO + w_3 * SCBO + w_4 * nF + w_5 * nHM$$

w_i : $i = 1, 2, 3, 4, 5$ معامل الانحدار

nSK : عدد الذرات غير H

$SCBO$: مجموع درجات الروابط الكلاسيكية (مستنفذ H)

No : عدد ذرات الأكسجين

nF : عدد ذرات الفلور.

nHM : عدد الذرات الثقيلة

يتم عرض المعلمات الإحصائية لمعاملات المعادلة (25. I) في الجدول (4. I)

الجدول 4.1: المعلمات الإحصائية لمعاملات طريقة VATANI, MEHRPOOYA ET .GHARAGHEIZI

الرقم	المتغيرات	معامل التراجع (w_i)	أخطاء معامل التراجع	المعامل القياسي لتراجع
1	تقاطع	50.16088267	4.075696	0
2	nSK	80.52012489	1.175295	3.60196
3	SCBO	53.64545627-	0.983722*	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

الفصل الثاني

الأدوات والتقنيات المستخدمة

الفصل الثاني: الأدوات والتقنيات المستخدمة

إن تطوير النماذج الرياضية QSPR التي تربط الخصائص الفيزيائية والكيميائية بالهيكل الجزيئي يجعل من الممكن، شرح أصل هذه الخصائص، ومن ناحية أخرى، التنبؤ بها للجزيئات من أجل البيانات التجريبية الغير متوفرة.

يمكن وصف المراحل الرئيسية لإعداد نموذج QSPR على النحو التالي: استخراج الوصفات من التركيب الجزيئي، واختيار الوصفات المناسبة للدراسة فيما يتعلق الخاصية التي تم تحليلها، واستخدام الوصفات كمتغيرات توضيحية لتحديد علاقة تربطهم الخصائص المعنية. يجب التحقق من صحة كل نموذج مقابل مجموعات بيانات الاختبار.

يهدف هذا العمل إلى تقديم موجز للأدوات المختلفة المستخدمة لتنفيذ نموذج QSPR وتقييماتها بواسطة تقنيات الانحدار الخطي وقواعد البيانات التجريبية، والوصفات الجزيئية (Descripteurs moléculaires)، واختيار الوصفات ذات الصلة، وطرق تحليل البيانات باستخدام برنامج XLSTAT والأساليب المختلفة المعروضة في هذا الفصل هي تلك المستخدمة أثناء دراستنا.

1.1.1. التحليل الكمي للعلاقة بين الخصائص والبنية الهيكلية (Analyse quantitative de) : (relation, structure- Propriétés

1.1.1. تعريف :

تعتمد طرق QSPR على افتراض أن خاصية المركب الكيميائي مرتبطة بهيكله، وبشكل أكثر تحديداً يؤكد هذا النهج أن خاصية وهيكل مادة كيميائية مركبة مرتبطان بخوارزمية رياضية معينة، هذا يعتمد على الفرضية الأساسية "المركبات الكيميائية المماثلة لها أنشطة مماثلة". بالإضافة إلى ذلك، عندما يتم التعبير عن المعلمات الجزيئية بالأرقام، يمكن للمرء أن يقترح علاقة رياضية، أو علاقة خاصة بنية كمية. بحكم التعريف، فإن QSPR هو نموذج رياضي يجمع بين واحد أو أكثر من المتغيرات الكمية المشتقة من التركيب الكيميائي، مع قياس كمي لخاصيته [CHTITA, 2017].

1.2.1. المبدأ :

يتمثل مبدأ نموذج QSPR، كما يوحي اسمها في إنشاء علاقة رياضية تربط كمي بالخصائص الجزيئية إلكترونيا وهندسيا على حد سواء والتي تسمى الوصفات (Descripteurs)، يمكن ملاحظتها

عيانيا (النشاط البيولوجي، السمية، الخصائص الفيزيائية والكيميائية، إلخ) لسلسلة من المركبات الكيميائية المماثلة باستخدام طرق تحليل البيانات. كما أن الشكل العام لمثل هذا النموذج هو كما يلي:

$$F(\text{الواصفات}) = \text{الخاصية}$$

الهدف من هذه الطريقة هو تحليل البيانات الهيكلية من أجل اكتشاف العوامل المحددة للخصائص المقاسة، للقيام بذلك يمكن استخدام أنواع مختلفة من الأدوات الإحصائية [REGADI, 2012]. بمجرد إعداد هذه العلاقة والتحقق من صحتها في مجموعة التحقق، يمكن استخدامها بعد ذلك للتنبؤ بخصائص الجزيئات الجديدة، التي لا تتوفر لها القيمة التجريبية، أو حتى للجزيئات التي لم يتم تصنيعها بعد. يمكن أيضًا استخدام مثل هذه النماذج، في حالات معينة، لفهم الظواهر الجزيئية التي تتطوي عليها خاصية الاهتمام بشكل أفضل [FAYET, 2010].

1.3.11 بناء النموذج (construction du modèle):

في الممارسة العملية يبدأ التطوير الفعلي للنموذج بجمع أكبر عدد ممكن من البيانات التجريبية الموثوقة. تتمثل الخطوة التالية في تطوير سلسلة من الواصفات التي تميز الهياكل الجزيئية الإلكترونية والهندسية للمركبات في قاعدة البيانات من أجل ربطها بالخاصية التجريبية المدروسة. ثم يتم استخدام أدوات تحليل البيانات للمساعدة في اختيار الواصفات المناسبة وإعداد النموذج نفسه. بمجرد تطوير النموذج، يجب التحقق من صحة النموذج من حيث الارتباط (في مجموعة بيانات التدريب). يتم تقدير قوتها أي تأثير مركبات مجموعة التدريب على النموذج، من خلال طرق التحقق الداخلية. لتقدير قوتها التنبؤية، من الضروري بعد ذلك الحصول على بيانات تجريبية إضافية لتحديد قدرة النموذج على التنبؤ بهذه القيم. أخيرًا، بالنسبة لأي نموذج من المهم معرفة نوع الجزيئات التي يمكن استخدامها أم لا، أي معرفة مجال قابليتها للتطبيق.

2.11 الواصفات الجزيئية (Descripteurs moléculaires):

الواصف الجزيئي هو متغير (قيمة عددية) خاصة بتركيبه كيميائية معينة. يمكن الحصول على هذه القيم تجريبيًا أو حسابها من بنية الجزيء. تسمح الواصفات المحسوبة بعمل تنبؤات دون الحاجة إلى تخليق الجزيئات، وغالبًا ما يتم تجميعها في عدة اصناف D1 و D2 و D3. تلعب الواصفات الجزيئية دورًا أساسيًا في دراسة علاقة خاصية التركيب الكمي. كما يتم استخدامها كمتغيرات مستقلة للتنبؤ بخاصية متغير تابع. [CHTITA, 2016].

إن استخدام الوصفات الجزيئية في تطوير نماذج QSPR ليس بالمهمة السهلة. بادئ ذي بدء تم إدخال عدد كبير جداً من الوصفات الجزيئية ذات التعقيدات المختلفة والتصميمات المختلفة في السنوات الأخيرة، بعد ذلك خلال هذا الوقت لم يتم وضع قاعدة صارمة لاختيار الوصفات المناسبة من العدد الكبير من الوصفات المتاحة. غالباً ما كان هذا الاختيار قائماً على الحدس الكيميائي للباحثين، أو باتباع التقاليد [CHTITA, 2017].

2.1.11 تاريخه :

يرتبط تاريخ الوصفات الجزيئية ارتباطاً وثيقاً بتاريخ ما يمكن اعتباره أحد أهم المفاهيم العلمية في الجزء الأخير من القرن التاسع عشر والقرن العشرين بأكمله، أي مفهوم التركيب الجزيئي. تميزت السنوات ما بين 1860 و1880 بنزاع قوي حول مفهوم التركيب الجزيئي، نشأ عن الدراسات التي أجريت على المواد التي تظهر التماثل البصري ودراسات كيكولي (Kekulé) (1861-1867) حول بنية البنزين. مفهوم الجزيء يعتقد أنه جسم ثلاثي الأبعاد تم اقتراحه لأول مرة من قبل باتليروف (Butlerov) (1861-1865)، ويسليسينوس (Wislicenus) (1869-1873)، وفان هوف (Van't Hoff) (1874-1875)، ولو بيل (Le Bel) (1874). "La chimie dans l'espace" من قبل Van't Hoff في عام 1875 علامة بارزة في الفهم ثلاثي الأبعاد للتركيبات الكيميائية.

يمكن اعتبار الوصفات الجزيئية أهم تحقيق لنظرية Crum-Brown. أطروحة دكتوراه في جامعة Edinburgh (1861)، بعنوان "In the chemical composition theory"، يوضح أنه كان رائداً في علوم الكيمياء الرياضية، طور في ذلك نظاماً للتمثيل الرسومي للمركبات والذي يتطابق بشكل أساسي مع النظام المستخدم اليوم. صيغته هي الأولى التي أظهرت بوضوح كلاً من التكافؤ وربط الذرات في المركبات العضوية. في ختام رسالته في الدكتوراه، كتب: "لا يبدو لي أنه من غير المحتمل أن نكون قادرين على تكوين نظرية رياضية للكيمياء، تنطبق على جميع حالات التكوين وإعادة التكوين" في عام 1864، نشر ورقة مهمة عن "نظرية المركبات المتشابهة Theory of Isomeric Compounds" باستخدام صيغته الرسومية (graphical formulae)، التي ناقش فيها أنواعاً مختلفة من التماكب، مخمناً الصلة بين الرياضيات والكيمياء. في وقت لاحق اقترح Crum-Brown و Fraser، وجود علاقة بين بيولوجية نشاط القلويات المختلفة وتكوينها الجزيئي. بشكل أكثر تحديداً، العمل الفسيولوجي لمادة في نظام بيولوجي معين (θ) عرف على أنه وظيفة (f) من بنيتها الكيميائية (C) (chemical constitution).

$$\theta = f(C)$$

وبالتالي، فإن أي تغيير في البنية الكيميائية ΔC ، سينعكس على النشاط البيولوجي، يمكن اعتبار هذه المعادلة أول صياغة عامة للعلاقة الكمية بالنشاط. تم الإبلاغ عن فرضية أخرى حول وجود ارتباطات بين التركيب الجزيئي والخصائص الفيزيائية والكيميائية في عمل كورنر (Körner) والتي تناولت مع توليف بنزين ثنائي الاستبدال واكتشاف مشتقات *ortho* و *meta* و *para*: كان يُعتقد أن الألوان المختلفة للبنزين المستبدلة مرتبطة بالاختلافات في التركيب الجزيئي ومتغيرات المؤشر لكل من *ortho* و *meta* و *para* يمكن اعتبار الاستبدال أول ثلاث واصفات جزيئية.

أدى العمل الأساسي لهاميت (Hammett) إلى ظهور مبدأ " σ - ρ " في تحديد التأثيرات البديلة للتفاعلات العضوية. كان الهدف من هذا العمل هو البحث عن علاقات طاقة حرة خطية (LFER) تم اشتقاق الثوابت الفراغية والإلكترونية والكارهة للماء للعديد من البدائل واستخدمت في نموذج مضاف لتقدير النشاط البيولوجي لسلسلة متجانسة من المركبات. أول نهج نظري QSAR / QSPR، يتعلق بالبيولوجيا تعود الأنشطة والخصائص الفيزيائية والكيميائية إلى الفهارس العددية النظرية المشتقة من التركيب الجزيئي إلى نهاية الأربعينيات. كان مؤشر وينر (Wiener index) وعدد بلات Platt number، اللذين تم اقتراحهما في عام 1947 لنمذجة نقطة غليان الهيدروكربونات، كانت أول الواصفات الجزيئية النظرية تعتمد على الرسم البياني النظري. في الخمسينيات من القرن الماضي، كان العمل الأساسي لـ Taft في الكيمياء العضوية الفيزيائية هو أساس العلاقات بين الخواص الفيزيائية والكيميائية وطاقات تفاعل المذيب (علاقات طاقة المحلول الخطي، LSER)، على معلمات الستريك والقطب والرنين للمجموعات البديلة في المركبات المتجانسة.

في منتصف الستينيات، بقيادة العمل الرائد لهانش، بدأ نهج QSAR/QSPR يتخذ شكله الحديث. تعريف هانش (Hansch) أدت النماذج إلى انفجار في تطوير تحليل QSAR والأساليب ذات الصلة. أصبح هذا النهج المعروف باسم تحليل Hansch، ولا يزال أداة أساسية لنمذجة QSAR. في الوقت نفسه، طور Free and Wilson نموذجًا للمساهمات البديلة المضافة في الأنشطة البيولوجية بإعطاء دفعة إضافية لتطوير استراتيجيات QSAR. في الستينيات، تم اقتراح العديد من الواصفات الجزيئية الأخرى، مما يشير إلى بداية الدراسات المنهجية للواصفات الجزيئية، والتي تستند أساسًا إلى نظرية الرسم البياني. يعود استخدام الواصفات الكيميائية الكمية في نمذجة QSAR/QSPR إلى أوائل السبعينيات، لقد تم تصميمها بالفعل قبل عدة سنوات لتشفير المعلومات حول الخصائص ذات الصلة للجزيئات في إطار كيمياء الكم. أدى العمل الأساسي لبالابان Balaban و رانديتش Randić وكير Kier وهال Hall إلى مزيد من التطورات

الهامة في مناهج QSAR استنادًا إلى الفهارس الطوبولوجية. كامتداد طبيعي للتمثيل الطوبولوجي للجزيء، تم أخذ الجوانب الهندسية للتركيبات الجزيئية في الاعتبار منذ منتصف الثمانينيات، مما أدى إلى تطوير 3D-QSAR، والذي يستغل المعلومات حول الهندسة الجزيئية. تم اشتقاق الوصفات الهندسية من الإحداثيات المكانية ثلاثية الأبعاد للجزيء، ومن بينها كان هناك فهارس الظل، واصفات مساحة السطح الجزيئية المشحونة، واصفات WHIM فهارس الجاذبية، واصفات EVA، واصفات 3D-MORSE، وواصفات GETAWAY.

في أواخر الثمانينيات، تم اقتراح استراتيجية جديدة لوصف خصائص الجزيء، بناءً على مجالات التفاعل الجزيئي، والتي تتكون من طاقات التفاعل بين الجزيء والمجسات، في نقاط مكانية محددة في الفضاء ثلاثي الأبعاد. تم استخدام مجسات مختلفة (مثل جزيء الماء ومجموعة الميثيل والهيدروجين) لتقييم طاقات التفاعل في آلاف من نقاط الشبكة حيث تم دمج الجزيء. كنتيجة نهائية لهذا النهج، تم الحصول على حقل سلمي (شعري) لقيم طاقة التفاعل التي تميز صياغة الجزيء. تم اقتراح نموذج شبكي لمقارنة الجزيئات عن طريق محاذاتها في الفضاء ثلاثي الأبعاد واستخراج المعلومات الكيميائية من مجالات التفاعل الجزيئي لأول مرة من قبل جودفورد Goodford في طريقة GRID ثم من قبل كرامر، باترسون وبونس (Cramer, Patterson, Bunce) في تحليل المجال الجزيئي المقارن (COMFA). أخيرًا، ظهر اهتمام متزايد من المجتمع العلمي في السنوات الأخيرة بالفحص الافتراضي وتصميم المكتبات الكيميائية، حيث تم اقتراح العديد من مناهج التشابه/التنوع والطرق المستندة إلى الخلايا ووظائف التسجيل بناءً على التوصيفات الهيكلية مثل البصمات الجزيئية [Todeschini et Consonni, 2009].

2.2.11 مجموعات الوصفات الجزيئية:

في الواقع تعتمد الوصفات الجزيئية على عدة نظريات مختلفة، مثل كيمياء الكم، ونظرية المعلومات، والكيمياء العضوية، ونظرية الرسم البياني، وما إلى ذلك. وتستخدم لنمذجة العديد من الخصائص المختلفة للمواد الكيميائية فيها. المجالات العلمية مثل علم السموم، والكيمياء التحليلية، الكيمياء الفيزيائية، الخ. حاليًا، من الممكن حساب 1664 واصفًا جزيئيًا مدرجًا في الجدول التالي والتي يمكن تصنيفها إلى 20 مجموعة [REGADI, 2012].

الجدول 1.1: قائمة مجموعات الوصفات من برنامج الحوسبة دراغون (DRAGON Le Cloirec) (P,2002)

Descripteurs moléculaire	الوصفات الجزيئية	العدد	Descripteurs moléculaire	الوصفات الجزيئية	العدد
Descripteurs constitutionnelle	الوصفات البنوية	48	Autocorrélations 2D	الارتباطات التلقائية ثنائية الأبعاد	96
Profils moléculaires Randic	الملاحح الجزيئية راندي	41	Descripteurs ESCAPADE	واصفات الهروب	197
Descripteurs topologiques	الوصفات الطوبولوجية	119	Indices contiguïté Affilez	شحد مؤشرات التواطؤ	107
Descripteurs géométriques	الوصفات الهندسية	74	Groupe fonctionnel chiffre	تعداد المجموعة الوظيفية	121
Marche et comptes de chem	الأسواق والحسابات الكيميائية	47	Charge valeurs propres	تحميل قيمه مميزة	64
Descripteurs RDF	واصفات RDF	150	Fragments d'atome centré	تقسيم الذرة المركزية	120
Connectivité indices	مؤشرات التوصيل	33	Indices de charge topologique	مؤشرات الحمولة الطوبولوجي	21
Descripteurs 3D-MORSE	واصفات D-3 MORSE	160	Descripteurs de charge	واصفات التحميل	14
Information indice	المعلومات الم	47	Indices valeurs propres à base	المؤشرات القائمة على القيمة الذاتية	44
Descripteurs WHIM	واصفات WHIM	99	Les propriétés moléculaire	الخصائص الجزيئية	

1.2.2.11 الوصفات البنوية (Descripteurs constitutionnelle):

إن أبسط طريقة لتمثيل نظام جزيئي هو النظر في تركيبته الكيميائية، دون مراعاة أي اعتبارات هندسية أو إلكترونية. الأمثلة النموذجية للوصفات البنوية هي:

- عدد الذرات (nO, Nn, nH, nC) (...)
- عدد المجموعات الوظيفية (OH, COOH, NO₂, ...)
- عدد الروابط (مفردة nBT, مزدوجة nDB, عطرية nAB, ...)
- عدد الحلقات (عطرية nCIC أم لا)
- الوزن الجزيئي (MW)

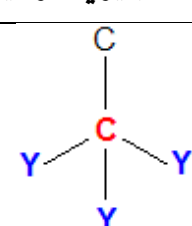
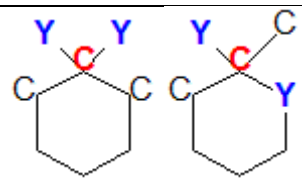
تستخدم هذه الواصفات بشكل شائع بسبب بساطتها الشديدة ليس فقط من وجهة نظر مفاهيمية ولكن قبل كل شيء حسابية. وهي بشكل ملحوظ أساس تحليلات المجموعة المساهمة، مثل طريقة بنسون، حيث يتم تقديم تأثير البدائل كقيمة مجدولة.

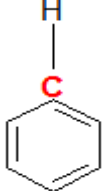
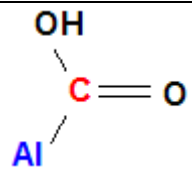
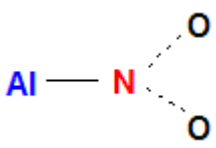
إذا تم استخدام هذا النوع من الواصف للحصول على أبسط نماذج QSPR، فإن الأخير يمكن أن يشكل مشكلة لتفسير جيد لآليات التفاعل المتضمنة للخاصية المدروسة. على سبيل المثال، لا يمكنهم التمييز بين الأيزومرات. ومع ذلك، بالنسبة للغالبية العظمى من الخصائص، فإن موضع البديل يعدل القيمة التجريبية للممتلكات. المعايير البنيوية في مثل هذه الحالات معيبة، من الضروري إذن اللجوء إلى فئات أخرى من الواصفات [Hemmer,2008]

II.2.2.2. تعداد المجموعة الوظيفية (Groupe fonctionnel chiffre):

يمكن تعريف أرقام المجموعة الوظيفية على أنها مجموعات كيميائية وظيفية، وهي مجموعات ذرات ذات تفاعل مميز ومحدد مثل: NH_2C ، NSH ، $NOCH_3$ ، $NC = O$ ، NNH_2 ، $NCOOH$ ، NOH ، $NBENZ$ ، ... إلخ. مداخل تمثل عدد الأوكسيدريل، الكربوكسيل، الأمينيك، الكربونيليك، الميثوكسي، الثيو، الميثيلين، والفينيل هذه المجموعات الوظيفية على التوالي [Todeschini and Consonni,2009]

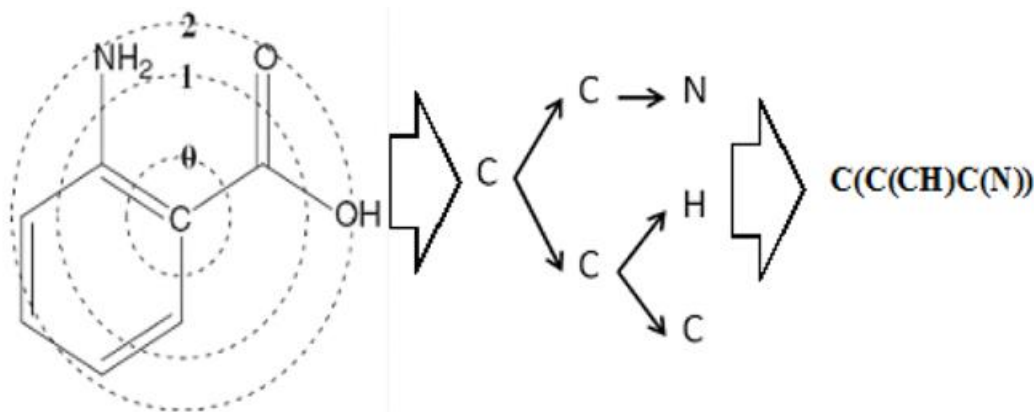
أرقام المجموعة الوظيفية مقارنة بأرقام المجموعات التي وجد أنها ذات دلالة إحصائية في نمذجة ارتباط المستقبيلات هي: CO_2 ، PO_4 ، $N +$ ، N ، OH ، $C = O$ ، $ether$ و $Thio-ether$ ، هالوجين، مجموعات sp^3 و sp^2 ذرات الكربون، عدد الروابط الدوارة. ودعونا نتذكر بعض الواصفات الجزيئية في الجدول التالي 2.11: نقدم بعض الواصفات الجزيئية في قائمة أرقام المجموعة الوظيفية المستخدمة. (<http://michem.disat.unimib.it/chm/Help/edragon/FunctionalGroupCounts11.htm>)

الرمز	الشكل البنيوي للوظيفة	تعريف
nCp		عدد المحطات الطرفية $C (sp^3)$ $Y =$ أي ذرة طرفية أو مجموعة غير متجانسة (i.e. H, X, OH, NH_2 ,...)
nCrs		عدد الحلقات الثانوية $C (sp^3)$ $H = Y$ أو أي ذرة مغايرة
n=C=	$C = C = C$	عدد مجموعات allenes

nCbH		عدد البنزين غير المستبدل C(sp ²)
nR#CH/X	$Y-C \equiv C$	عدد المحطة الطرفية C (sp) = Y أي ذرة طرفية أو مجموعة غير متجانسة (H، X، OH، NH ₂ ، إلخ)
nRCOOH		عدد الأحماض الكربوكسيلية (العطرية)
nRNO ₂		عدد مجموعات النيترو (الأليفاتية) H = Al أو المجموعة الأليفاتية المرتبطة من خلال الكربون

3.2.2.ii تقسيم الذرة المركزية (Fragments d'atome centré) :

الذرة المتمركزة في لجزء غير منتظم تتكون من ذرة مركزية واحدة محاطة ب واحد أو أكثر من المواقع الذرية مفصولة عن المركز بنفس المسافة الطوبولوجية. تم تقديم هذا النوع من الأجزاء الهيكلية في أوائل الخمسينيات من القرن الماضي بواسطة Tatevskii، ثم من قبل Benson للتنبؤ ببعض الخصائص الفيزيائية والكيميائية للمركبات العضوية في سياق الأنظمة المضافة [Varnek and Tropsha, 2008]. ترتكز هذه الذرة هرم للجزيئات الموضحة أدناه في الشكل، فئة إضافية من الواصف الهيكل الفرعي [Adams, 2010].



الشكل 1.1: رسم توضيحي للهيكل الهرمي للجزيئات غير المنتظمة والبيئات الذرية الدائرية.

يتم عرض منطقة الجزيء التي تتمركز عليها القطعة، جنبًا إلى جنب مع بنية شجرة الجزيء والواصف الناتج.

وسنذكر بعض الواصفات الجزيئية في الجدول ادناه.

الجدول 3.11: الواصفات الجزيئية من قائمة واصفات الذرة المركزية للجزيئات غير المنتظمة المستخدمة في هذه الدراسة.

الرمز	اسم الواصف الجزيئي	الرمز	اسم الواصف الجزيئي
C-001	CH3R / CH4	C-015	=CH2
C-002	CH2R2	.C-012	CR2X2
C-003	CHR3	C-024	R--CH--R
C-004	CR4	C-016	=CHR
C-005	CH3X	H-047	H ^a attached to C ¹ (sp ³) / C ⁰ (sp ²)
C-006	CH2RX	O-058	O=
C-017	=CR2	C-026	R--CX--R
C-025	R--CR--R	C-040	R-C(=X)-X / R-C#X / X=C=X
H-046	H ^a attached to C ⁰ (sp ³) no X attached to next C	H-050	H attached to heteroatom
H-051	H attached to alpha-C ^b	O-056	Alcohol
O-059	Al-O-Al	F-082	F ^a attached to C ² (sp ³)
F-083	F ^a attached to C ³ (sp ³)	Cl-089	Cl ^a attached to C ¹ (sp ²)
O-060	Al-O-Ar / Ar-O-Ar / R..O..R / R-O-C=X	H-052	H ^a attached to C ⁰ (sp ³) with 1X attached to next C

[<http://michem.disat.unimib.it/chm/Help/edragon/ListAtomCentredFragments.html>]

3. II تقنيات الانحدار (Techniques des régressions):

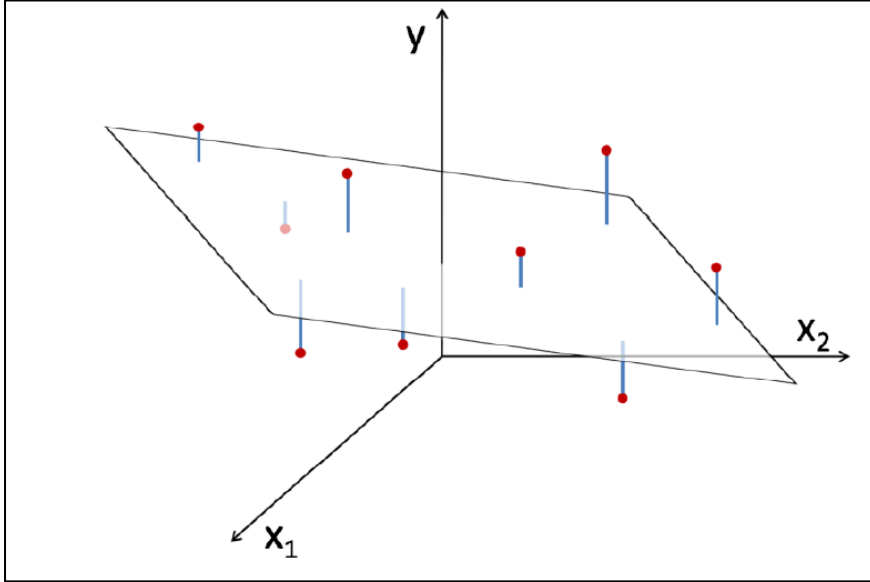
3. II. 1 الانحدار الخطي المتعدد (Régression linéaire multiple) (RLM):

منذ عام 1964، ظهر النهج الحالي QSPR بفضل مساهمة المجموعة، وفي السنوات الأخيرة تم استخدام الواصفات الجزيئية. تم إنشاء معظم نماذج QSPR باستخدام تقنية الانحدار متعدد المتغيرات. يؤسس تحليل الانحدار ارتباطاً بين متغير تابع يمثل الخاصية الكيميائية والعديد من المتغيرات المستقلة، وهي الواصفات (المتنبئين). غالباً ما يتم التعبير عن هذا الارتباط بأنه انحدار خطي متعدد (RLM).

$$(II.1) \quad y = a_0 + a_1x_1 + a_2x_2 + \dots + a_nx_n$$

حيث a_l هي معاملات الانحدار [Matta, 2010].

يعطي الشكل تمثيلاً رسومياً لمتغيرين تابعين. إنها في الواقع مسألة تحديد المستوى الأقرب لجميع النقاط في الفضاء (بمعنى المربعات الصغرى). مع المتغيرات n ستكون مستويًا من الرتبة n .



الشكل II. 2: تمثيل رسومي للانحدار متعدد الخطوط لمتغيرين مستقلين x_1 و x_2 ومتغير تابع واحد y

ثم يتم تحديد المعادلة من قاعدة بيانات لعينات p التي يُعرف بها كل من المتغيرات التابعة والمتغير

المستقل. لذلك فهي مسألة النظر في نظام المعادلات p :

$$(II.2) \quad \begin{aligned} y_1 &= a_0 + a_1x_{1,1} + a_2x_{2,1} + \dots + a_nx_{n,1} + \varepsilon_1 \\ y_2 &= a_0 + a_1x_{1,2} + a_2x_{2,2} + \dots + a_nx_{n,2} + \varepsilon_2 \\ &\dots \\ y_p &= a_0 + a_1x_{1,p} + a_2x_{2,p} + \dots + a_nx_{n,p} + \varepsilon_p \end{aligned}$$

حيث تمثل القيم المتبقية ε_i خطأ النموذج، الذي يتكون من عدم اليقين بشأن المتغير التابع y_i من ناحية، من المتغيرات المستقلة x_l من ناحية أخرى، ولكن أيضاً من خلال المعلومات الواردة في المتغيرات المستقلة ولكن لا يتم التعبير عنها عبر التابع المتغيرات.

يمكن كتابة نظام المعادلات هذا في شكل المصفوفة التالية:

$$(II.3) \quad \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & x_{1,1} & \cdots & x_{n,1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_{1,p} & \cdots & x_{n,p} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ \vdots \\ a_p \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \varepsilon_1 \\ \vdots \\ \varepsilon_p \end{pmatrix}$$

إما بطريقة مكثفة:

$$(II.4) \quad Y = XA + \varepsilon$$

تتكون الطريقة بعد ذلك من اختيار معاملات المتجه A مع ضمان تقليل مجموع تربيع الانحرافات بين القيم المتوقعة والقيم الفعلية على قاعدة البيانات بأكملها، وهذا تحت غطاء بعض افتراضات البداية [Fayet, 2013].

يُفترض أن المتغيرات المستقلة x_i ، كما يوحي اسمها، مستقلة عن بعضها البعض وأن عدم اليقين الخاص بها لا يكاد يذكر. بعد ذلك، يُفترض أن تكون العينات المختلفة مستقلة عن بعضها البعض وتتبع التوزيع عادي. يُفترض أن الخطأ نفسه يتبع التوزيع الطبيعي المتمركز عند 0. أخيراً بطبيعته يُفترض أن اعتماد y على x_i خطي. القيمة المتوقعة للمتغير التابع إذن هي:

$$(II.5) \quad \hat{y}_i = \hat{a}_0 + \hat{a}_1 x_{1,i} + \cdots + \hat{a}_n x_{n,i}$$

لذلك يمكن تعريف القيم المتبقية على أنها الفرق بين قيم y المتوقعة والملاحظة.

$$(II.6) \quad \varepsilon_i = y_i - \hat{y}_i$$

إنها إذن مسألة إيجاد المعاملا \hat{a}_i لتقليل مجموع مربعات هذه القيم المتبقية لقاعدة البيانات بأكملها:

$$\begin{aligned} \min[\sum(\varepsilon_i)^2] &= \min[\sum(y_i - \hat{y}_i)^2] = \min\left[\sum(y_i - \hat{a}_0 - \hat{a}_1 x_{1,i} - \cdots - \hat{a}_n x_{n,i})^2\right] \\ &= \min(Y - X\hat{A})^T (Y - X\hat{A}) \end{aligned} \quad (II.7)$$

يمكن الحصول على المعاملات من معادلة المصفوفة التالية:

$$(II.8) \quad \hat{A} = (X^T X)^{-1} X^T Y$$

II.3.2. XLSTAT :

XLSTAT هي أداة لتحليل البيانات والإحصاءات لبرنامج Microsoft Excel. يوفر العديد من الميزات التي تجعل من Excel أداة قوية وسهلة الوصول. لتلبية معظم احتياجات تحليل البيانات والنمذجة. يمكن الوصول إلى جميع وظائف XLSTAT من أيقونة تمت إضافتها إلى شريط قوائم Excel. استخدام Excel كواجهة يجعل هذا البرنامج سهل الاستخدام وفعال. جودة الحسابات مماثلة لجودة البرنامج. وXLSTAT يغطي معظم احتياجات الإحصائي، سواء كان خبيراً أو مبتدئاً.

تلمي الوحدات الاختيارية احتياجات أكثر تحديداً (التحكم الإحصائي في العملية، وتحليل تأثيرات الجرعات في الكيمياء والصيدلة). إنه يعمل مع جميع إصدارات Excel، من الإصدار 97 إلى الإصدار الحالي تحت بيئات Windows وMac.

يسمح XLSTAT بتصحيح مصفوفات التغيرات لتأثيرات التغيرات والترابط الذاتي التي قد تحدث بشكل خاص في الحالات التي يكون فيها الوقت متضمناً (سلاسل كرونولوجية، بيانات طولية).

[Addinsoft-Team, 2020]

II.3.2.2. اختيار النموذج (Sélection du modèle) :

يتيح لنا XLSTAT تحديد المتغيرات التي تعد جزءاً من النموذج النهائي. هناك أربع طرق متاحة منها النموذج الأفضل (Meilleur modèle): تتيح هذه الطريقة إمكانية اختيار أفضل نموذج من بين جميع النماذج التي تشتمل على عدد من المتغيرات التي تتراوح من "متغيرات الحد الأدنى" إلى "متغيرات الحد الأقصى". علاوة على ذلك يمكن للمستخدم اختيار "المعيار" لتحديد أفضل نموذج. يمكن اختيار المعيار من بين ما يلي: المحدد R^2 ، متوسط مربعات الأخطاء (MCE)، C_p de Mallows، AIC de Schwarz، Akaike de Schwarz، SBC، Amemiya de PC

[<https://www.xlstat.com/fr/solutions/fonctionnalites/regression-lineaire>].

وسنعمد في دراستنا على معاملات التعديل R^2 حيث لا تهدف النمذجة إلى توفير نموذج يناسب بيانات التجريبية الموجودة فقط، ولكن أيضاً قادر على التنبؤ بقيمة المخرجات في الأمثلة الجديدة وهذا يسمى بالتعميم [Abram,2008].

R^2 : معامل تحديد النموذج. يتم تفسير R^2 على أنها نسبة تباين المتغير التابع التي يشرحها النموذج. كلما اقترب R^2 من 1، كان النموذج أفضل، من عيوب R^2 هو أنه لا يأخذ في الاعتبار عدد المتغيرات المستخدمة لملاءمة النموذج ويتم تحديد قيمتها من خلال:

ليكن R_i الخطأ الذي ارتكبه النموذج الذي يعتبر في المثال i

$$(II.9) \quad R_i = y(x^i) - g(x^i, \theta)$$

حيث $y(x^i)$ هي القيمة المقاسة للكمية التي سيتم نمذجتها على سبيل المثال i و $g(x^i, \theta)$ تساوي تقدير النموذج لهذا المثال نفسه. خطأ النموذج في البيانات التعلم E_A apprentissage ، يمكن تقييمه من خلال متوسط الخطأ التربيعي في التعلم تسمى أيضًا EQMA:

$$(II.10) \quad E_A = \sqrt{\frac{1}{N_A} \sum_{i=1}^{N_A} (R_i)^2}$$

حيث E_A هو عدد الأمثلة المستخدمة لبناء النموذج. غالبًا ما يتم تصور جودة نموذج التعلم على مخطط مبعثر، حيث يتم رسم قيم كمية الفائدة المقدرة بواسطة النموذج، كدالة للقيم المقاسة لهذه الكمية. جودة النمذجة هي الأفضل كلما اقتربت نقاط هذا الرسم البياني من المنصف الأول. يمكن ضبط النقاط لهذا الخط

يتم تقييمها من خلال معامل التحديد

$$(II.11) \quad R^2 = \frac{\sum_{i=1}^{N_A} (y^i - \bar{y})^2}{\sum_{i=1}^{N_A} (g(x^i, \theta) - \bar{y})^2}$$

حيث \bar{y} هو متوسط القيم المقاسة. هذا المعامل يساوي نسبة التباين الموضح إلى التباين الإجمالي للمخرجات. كلما اقتربنا من 1 زادت قوة الارتباط بين القيم المقاسة والمتوقعة. توفر القيم الوسيطة معلومات عن درجة الاعتماد الخطي بين المتغيرين.

لا يعد الخطأ في قاعدة التعلم وحدها مؤشرًا جيدًا على جودة النموذج؛ يجب أن يكون النموذج الجيد قادرًا على حساب العلاقة الحتمية بين المتغيرات والكمية المنمذجة، دون التكيف مع عشوائية بيانات التدريب. لذلك من الضروري معرفة كيفية تقدير هذه القدرة [Abram,2008].

3.2.3. II الطرق العامة للاختيار (Méthode générale de sélection):

أثناء النمذجة، نبحث عن كل من التعقيد الأنسب للمشكلة المدروسة، ومعلمات النموذج المقابل. يجب أن يكون النموذج بالفعل معقدًا بدرجة كافية لمراعاة العلاقة بين المتغيرات التوضيحية والكمية المنمذجة، ولكن يجب ألا يكون معقدًا للغاية حتى لا يكون شديد الحساسية للارتباط الموجود بين البيانات. في الواقع، عندما يزداد تعقيد النموذج المدروس، هناك عمومًا انخفاض في تكلفة التدريب، لأن النموذج يناسب بشكل أكثر دقة بيانات التدريب. من ناحية أخرى، يتناقص خطأ التعميم ليصل إلى الحد الأدنى ثم

يزداد مع تعقيد النموذج، لأن الأخير يتم بعد ذلك تركيبه بشكل مفرط على بيانات التدريب، والارتباط الموجود بين هذه البيانات. تُعرف هذه المفاضلة أيضًا باسم معضلة تباين التحيز: يميز التحيز الفرق بين التقديرات والمقاييس، ويعكس التباين تأثير اختيار قاعدة التعلم على النموذج. علاوة على ذلك، عندما لا تكون النماذج التي تم النظر فيها خطية فيما يتعلق بمعلماتها، فإن اختيار النموذج الأمثل لا يقتصر فقط على اختيار أفضل مجموعة من الوظائف، كما هو الحال بالنسبة للنماذج الخطية (نماذج متعددة الحدود أو مجموعات خطية ووظائف غير معلمة). لذلك يتم الاختيار في كثير من الأحيان على عدة مراحل.

- بالنسبة للنماذج غير الخطية في معلماتها، يتم إجراء الاختيار الأول ضمن مجموعة وظائف معينة. في الواقع، لا تكون دالة التكلفة (cost) التربيعية في اعدادات النموذج، ولا تحتوي على حد أدنى فريد. وبالتالي، فإن تحسين هذه الوظيفة يمكن أن يؤدي إلى اختلاف في الحدود الدنيا، وبالتالي إلى نماذج مختلفة من نفس التعقيد. لذلك من الضروري إجراء العديد من التدريبات، لتعقيد معين، واختيار التدريب المحتمل تمتلك أفضل خصائص التعميم.
- من الضروري بعد ذلك الاختيار، من بين أفضل النماذج ذات التعقيدات المختلفة، الذي يقدم قدرات تعميم أفضل [Abram,2010].

4.2.3. II (Sélection du modèle par estimation de) التعميم خطأ (l'erreur de généralisation)

لا يمكن تقييم خطأ التعميم بالضبط؛ إن حجم قاعدة البيانات المتاحة محدود بالفعل، والتوزيع الاحتمالي للبيانات، الذي يعتمد عليه هذا الخطأ، غير معروف بشكل عام. لذلك من الضروري إيجاد ملف تقريب هذا الخطأ التعميم. وبالتالي سنقدم الطرق الأكثر استخدامًا لإجراء هذه التحديدات. تتمثل الطريقة الأكثر شيوعًا، والمعروفة باسم طريقة التحقق البسيطة، في إنشاء مجموعتين من مجموعة البيانات: يتم ضبط معلمات النموذج على أساس التعلم، ويتم تقييم خطأ التعميم على أساس التحقق من الصحة. يتم تعريف الخطأ في التحقق بطريقة مشابهة لتكلفة التعلم:

$$(II.12) \quad E_V = \sqrt{\frac{1}{N_V} \sum_{i=1}^{N_V} (R_i)^2}$$

حيث E_V هو عدد الأمثلة في قاعدة بيانات التحقق.

بالنسبة للنماذج ذات التعقيد المعين، تتكون طريقة الاختيار من إجراء العديد من الدروس المستفادة من التهيئة المختلفة للمعلمات، عندما نتعامل مع نموذج غير خطي في معلماته. من الضروري بعد ذلك

الاختبار من بين النماذج التي تم الحصول عليها، والتي توفر أدنى خطأ في التحقق من الصحة. هذه طريقة سريعة جدًا، ولكنها ذات فعالية محدودة، خاصة عندما يكون عدد الأمثلة المتاحة منخفضًا. في الواقع، إذا كان عدد الأمثلة صغيرًا، يكون التباين في تقدير خطأ التعميم كبيرًا؛ وبالتالي فإن تكلفة التحقق تعتمد بشدة على اختيار قاعدة التحقق [A.R. Katritzky,2002]

بالإضافة إلى ذلك لا يتم استخدام أمثلة قاعدة التحقق لتقدير اعدادات النموذج، وقد تكون غير متوفرة: النموذج غير ملائم لأنواع معينة من الأمثلة، وقدرات التعميم محدودة. لذلك، غالبًا ما يتم تقدير خطأ التعميم باستخدام طرق أخرى، مثل (le leave-one-out أو la validation croisée). [Abram,2003].

II.3.2.5 التحقق (La validation) :

التحقق من الصحة: قم بتنشيط هذا الخيار إذا كنت تريد استخدام عينة فرعية من البيانات للتحقق من صحة النموذج.

مجموعة التحقق من الصحة (Validation Set): اختر أحد الخيارات التالية لتحديد كيفية الحصول على الملاحظات المستخدمة للتحقق:

- عشوائية (Random): يتم اختيار الملاحظات بشكل عشوائي يجب بعد ذلك تحديد "عدد الملاحظات n"
- الصفوف الأخيرة (Last rows): يتم تحديد الملاحظات الأخيرة n للتحقق من الصحة يجب بعد ذلك تحديد "عدد الملاحظات N".

- الصفوف الأولى N (First N grades): يتم اختيار الملاحظات الأولى N للتحقق من صحة النموذج يجب بعد ذلك تحديد "عدد الملاحظات N".

- متغير المجموعة (Group variable): إذا اخترت هذا الخيار فأنت بحاجة إلى تحديد متغير ثنائي مع 0 و 1 فقط تحدد الأحاد الملاحظات لاستخدامها في التحقق (Addinsoft-Team, 2020)

تم اختبار دقة الارتباطات باستخدامها للتنبؤ بالخاصية ذات الأهمية لمجموعة التحقق المناسبة. تتكون هذه المجموعة من مواد مماثلة لتلك الموجودة في مجموعة التدريب والتي تُعرف بخاصية الفائدة لها تجريبيًا. يتم تقييم القدرة التنبؤية للارتباط من خلال مقارنة القيمة المتوقعة والقيمة التجريبية لكل خاصية. لتقييم جودة أداء الارتباط لنماذج QSPR، تم أيضًا حساب الخصائص الحرجة والعوامل اللامركزية لجميع المواد في قاعدة البيانات تم استخدام المعلمات الإحصائية، لمقارنة أداء الارتباط والقدرة التنبؤية لنماذج MLR. [Mauro Banchemo, 2018].

الجزء العملي

الفصل الثالث

طرق ومنهجية العمل

الفصل III: طرق ومنهجية العمل

تحدثنا في الفصول السابقة عن تصميم الطرق التنبؤية وتطويرها في حساب الخواص الفيزيائية والكيميائية، وفصلنا منهجية تطوير طريقة "QSPR" باستخدام أدوات مثل الانحدار الخطي المتعدد والانحدار غير الخطي.

سنتطرق في هذا الفصل لمنهجية العمل بتفصيل انطلاقاً من كيفية اعداد بنك المعلومات وعملية جمع الواصفات الجزئية الى كيفية اعداد النموذج الرياضي لحساب انتالبي التبخر.

1. III إنشاء قاعدة البيانات وتحديد الواصفات الجزئية :

يعتمد نموذج QSPR، من خلال بنائه، بشكل كبير على البيانات المرجعية التجريبية وبالتالي فان اختيار قاعدة البيانات هي نقطة حرجة في تطويرها.

في معظم الحالات، يتم أخذ البيانات التجريبية من الرسائل العلمية ولكي تكون ذات جودة جيدة، يجب أن تتكون قاعدة البيانات من بيانات تجريبية موثوقة قدر الإمكان، حيث ستأثر الاخطاء فيها على النموذج. لذلك من المهم اختيار البيانات ذات درجة عدم اليقين المنخفضة من أجل الحد من الاخطاء التجريبية. في الواقع لا يمكن أن يكون النموذج أكثر قوة من الناحية الإحصائية من البيانات النظرية التي تم تطويرها.

بالإضافة إلى ذلك، يجب الحصول على البيانات وفقاً لبروتوكول تجريبي واحد فان الظروف التجريبية بشكل عام لها تأثير قوي على القيم التي تم الحصول عليها وتعد تعريف الخاصية من حيث الشروط التجريبية هي أيضا نقطة مهمة في العملية.

بقدر الإمكان يجب أن تكون قاعدة البيانات أيضاً مميزة لمجموعة القيم التي قد تواجهها الخاصية حيث سيتم تحديد مجال تطبيق النموذج النهائي جزئياً على هذا المعيار بشكل عام، يمكن توقع نماذج أكثر تنبؤاً على مجموعة واسعة من القيم [Serouti,2012].

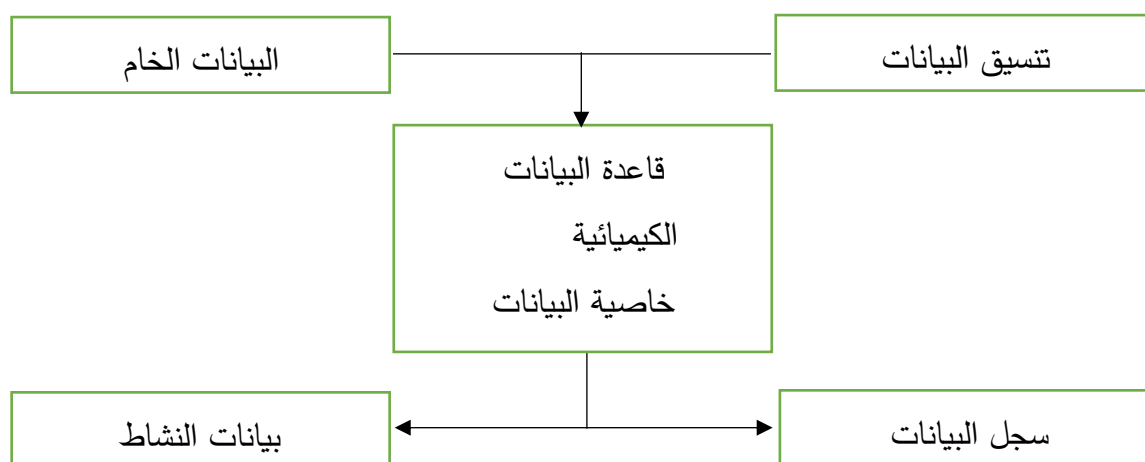
2. III منهجية إعداد قاعدة البيانات :

1.2. III تصميم قاعدة البيانات :

تعد الحاجة إلى التحليل السريع للكميات المتزايدة من المواد الكيميائية وأرشفتها وإدارتها أحد الجذور الرئيسية للمعلومات الكيميائية للبحث والتطوير (recherche et développement) لهذه الأغراض، فإن تصميم وتنفيذ أنواع مختلفة من قواعد البيانات له أهمية كبيرة.

يعتبر مفهوم "قاعدة البيانات العلائقية" أساسياً لتصميم قاعدة بيانات المتقدمة حيث يتم ربط المكونات وأنواع مختلفة من المعلومات وإتاحتها للمستخدم في السياق. على سبيل المثال، في الكيمياء، يمكن لقاعدة بيانات علائقية بسيطة تخزين الهياكل المركبة والتوافر والبيانات التحليلية وإصدار أكثر تقدماً يمكن أن تتضمن قاعدة البيانات هذه أيضاً بيانات المقايسة الحيوية أو بيانات النشاط لهذه المركبات.

يعد استخدام قواعد البيانات الكيميائية العلائقية أحد أهم الجوانب التي تدخل في العديد من تطبيقات المعلوماتية الكيميائية. بالإضافة إلى ذلك، توفر قواعد البيانات العلائقية منصة مناسبة للتفاعل بين العلماء الحاسبيين والتجريبيين



الشكل III 1. تمثيل تخطيطي لهيكل قاعدة البيانات العلائقية

في قواعد البيانات العلائقية، يتم تخزين أنواع مختلفة من المعلومات في جداول بيانات مختلفة. يتم تسهيل الاتصال بين العناصر المختلفة لقاعدة البيانات بشكل عام من خلال استخدام لغة الاستعلام العلمي. عادة، يتواصل المستخدم مع قاعدة البيانات باستخدام لغة الاستعلام العلمي "المخفية" من خلال واجهة رسومية تفاعلية لاسترداد المعلومات من قواعد البيانات العلائقية. من السمات المهمة لتصميم قاعدة البيانات العلائقية أنه يمكن دمج الأنواع المختلفة لهياكل البيانات وأدوات البرامج بسهولة وتحويلها إلى بنية قاعدة

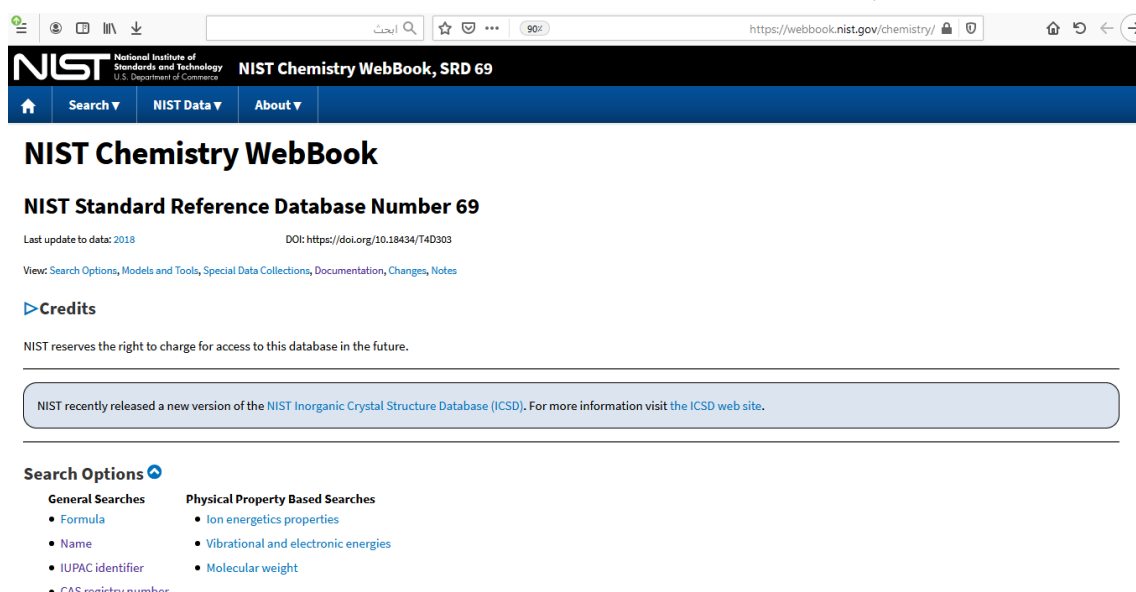
الفصل III: طرق ومنهجية العمل

بيانات متسقة. يسمح ذلك بتخصيص قواعد البيانات المحلية لتطبيقات محددة. يعرض الشكل 1 بشكل تخطيطي الأنواع المختلفة من البيانات وعناصر قواعد البيانات التي تحتاج عمومًا إلى دمجها لدعم عمل فرق الكيمياء التركيبية أو الطبية وتوثيق جهودهم و لا يزال تصميم وتنفيذ قواعد البيانات هذه من المهام الرئيسية للمعلومات الكيميائية كما تم تحقيق ذلك من خلال عدد من شركات البرمجيات التي توفر قاعدة بيانات للمجمع التجاري والعلمي. [Bunin, Siesel, Morales et Bajorath, 2007]

2.2.III إعداد قاعدة البيانات :

أولاً اعتمدنا في جمع قاعدة البيانات الأولية على رقم الـ CAS في هذا الجزء تم الحصول على جميع قيم الخصائص التجريبية من قاعدة بيانات المعهد الوطني للمعايير والتكنولوجيا (NIST). بلغ عدد المركبات المجمعة 438 مركبًا تحتوي على العديد من العائلات الكيميائية وهي (الأحماض، والإسترات، والأكسجين متعدد الوظائف، والكحول)، وثانيًا نبحت عن قيم المحتوى الحراري لتبخير من NIST ويتم تسجيل الهياكل الجزيئية تحت صيغة 2D Mol.

NIST: (المعهد الوطني للمعايير والتكنولوجيا) كتاب الكيمياء على الويب (الشكل 2)



NIST National Institute of Standards and Technology U.S. Department of Commerce

NIST Chemistry WebBook, SRD 69

Search NIST Data About

NIST Chemistry WebBook

NIST Standard Reference Database Number 69

Last update to data: 2018 DOI: <https://doi.org/10.18434/T4D303>

View: Search Options, Models and Tools, Special Data Collections, Documentation, Changes, Notes

Credits

NIST reserves the right to charge for access to this database in the future.

NIST recently released a new version of the NIST Inorganic Crystal Structure Database (ICSD). For more information visit the ICSD web site.

Search Options

- General Searches
 - Formula
 - Name
 - IUPAC identifier
 - CAS registry number
- Physical Property Based Searches
 - Ion energetics properties
 - Vibrational and electronic energies
 - Molecular weight

الفصل III: طرق ومنهجية العمل

https://webbook.nist.gov/chemistry/cas-ser/

NIST National Institute of Standards and Technology U.S. Department of Commerce **NIST Chemistry WebBook, SRD 69**

Search NIST Data About

Search for Species Data by CAS Registry Number

Please follow the steps below to conduct your search:

1. Enter a registry number (e.g., 74-82-8):
2. Select the desired units for thermodynamic data:
 SI calorie-based
3. Select the desired type(s) of data:

Thermodynamic Data	Other Data
<input checked="" type="checkbox"/> Gas phase	<input checked="" type="checkbox"/> IR spectrum
<input checked="" type="checkbox"/> Condensed phase	<input checked="" type="checkbox"/> THz IR spectrum
<input checked="" type="checkbox"/> Phase change	<input checked="" type="checkbox"/> Mass spectrum
<input checked="" type="checkbox"/> Reaction	<input checked="" type="checkbox"/> UV/Vis spectrum
<input checked="" type="checkbox"/> Ion energetics	<input checked="" type="checkbox"/> Gas Chromatography
<input checked="" type="checkbox"/> Ion cluster	<input checked="" type="checkbox"/> Vibrational & electronic energy levels
	<input checked="" type="checkbox"/> Constants of diatomic molecules
	<input checked="" type="checkbox"/> Henry's Law
4. Press here to search:

CAS registry numbers are copyrighted by the American Chemical Society. Redistribution rights for CAS registry numbers are reserved by the American Chemical Society. "CAS registry" is a registered trademark of the American Chemical Society.

© 2018 by the U.S. Secretary of Commerce on behalf of the United States of America. All rights reserved.

Copyright for NIST Standard Reference Data is governed by the Standard Reference Data Act.

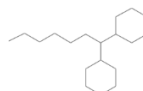
https://webbook.nist.gov/cgi/cbook.cgi?ID=2090-15-5&Units=SI&c1

NIST National Institute of Standards and Technology U.S. Department of Commerce **NIST Chemistry WebBook, SRD 69**

Search NIST Data About

Heptane, 1,1-dicyclohexyl-

- **Formula:** C₁₉H₃₆
- **Molecular weight:** 264.4891
- **IUPAC Standard InChI:**
 InChI=1S/C19H36/c1-2-3-4-11-16-19(17-12-7-5-8-13-17)18-14-9-6-10-15-18/h17-19H, 2-16H2, 1H3
[Download the identifier in a file.](#)
- **IUPAC Standard InChIKey:** HFTHOHVOENQDAX-UHFFFAO1SA-N
- **CAS Registry Number:** 2090-15-5
- **Chemical structure:**



This structure is also available as a 2d Mol file or as a computed 3d SD file
 The 3d structure may be viewed using Java or Javascript.

- **Other names:** 1,1-Dicyclohexylheptane; Cyclohexane, 1,1'-heptylidenebis-
- **Permanent link** for this species. Use this link for bookmarking this species for future reference.
- **Information on this page:**
 - Condensed phase thermochemistry data
 - Phase change data
 - Mass spectrum (electron ionization)
 - References
 - Notes
- **Options:**
 - Switch to calorie-based units

Data at NIST subscription sites:

T _{sub}	241.48	K	N/A	Anonymous, 1968	Uncertainty assigned by TRC = 0.5 K; TRC
T _{sub}	230.	K	N/A	Gollis, Belenyessy, et al., 1962, 3	Uncertainty assigned by TRC = 1.66 K; TRC
T _{sub}	238.	K	N/A	Chel'tsova and Petrov, 1957	Uncertainty assigned by TRC = 5. K; TRC

Enthalpy of vaporization

Δ _{vap} H (kJ/mol)	Temperature (K)	Method	Reference	Comment
87.8	330.	A	Stephenson and Malanowski, 1987	Based on data from 293.-368. K. See also Dykx, Svoboda, et al., 1999; AC
73.8	437.	M,G	Stephenson and Malanowski, 1987	Based on data from 422.-458. K. See also Schiessler and Whitmore, 1955; AC

In addition to the Thermodynamics Research Center (TRC) data available from this site, much more physical and chemical property data is available from the following TRC products:

- SRD 103a – Thermo Data Engine (TDE) for pure compounds.
- SRD 103b – Thermo Data Engine (TDE) for pure compounds, binary mixtures and chemical reactions
- SRSD 2 – Web Thermo Tables (WTT), "lite" edition
- SRSD 3 – Web Thermo Tables (WTT), professional edition
- SRD 147 – Ionic Liquids Database
- SRD 156 – Clathrate Hydrate Physical Property Database

الشكل III.2: البحث عن بيانات المركبات استنادا إلى رقم سجل CAS

1.2.2.III تجميع الوصفات الجزيئية :

تم جمع الوصفات الجزيئية من الموقع التالي (michem.disat.unimib) حيث بلغ عدد الوصفات الجزيئية المجمعة للوصفات البنوية 150 واصفا من أصل 400، التقسيم حسب الذرة المركزية 250 واصفا من أصل 400 وتعداد المجموعة الوظيفية 38 واصفا من أصل 400 هذه الوصفات خاصة بقاعدة البيانات التي تحتوي على 438 مركبا.

MOLE db - Molecular Descriptors Data Base
dig into the knowledge! Milano Chemometrics and QSAR Research Group

back to query form :: help :: new search

Found 1 molecules, showing 1-1

Name	MC No	CAS No	Formula	MW	
1. 6-methyl-1,2,3,4-tetrahydronaphthalene	86994	1680-51-9	C ₁₁ H ₁₄	146.25	show details

Show a descriptor for all the matching molecules:
 Block: constitutional descriptors descriptor: MW
 Sort by descriptor value

Select descriptor block and fields to be saved:
 MC no NCI no Name Formula CAS no MW SMILES
 Block: constitutional descriptors
 As txt file, fields separated by: Tab

back to query form :: help :: new search

MOLE db - Molecular Descriptors Data Base
dig into the knowledge! Milano Chemometrics and QSAR Research Group

back to query form :: help :: new search

Found 1 molecules, showing 1-1

Name	MC No	CAS No	Formula	MW	
1. 6-methyl-1,2,3,4-tetrahydronaphthalene	86994	1680-51-9	C ₁₁ H ₁₄	146.25	show details

Show a descriptor for all the matching molecules:
 Block: constitutional descriptors descriptor: MW
 Sort by descriptor value

Select descriptor block and fields to be saved:
 MC no NCI no Name Formula CAS no MW SMILES
 Block: constitutional descriptors
 As txt file, fields separated by: Tab

back to query form :: help :: new search

الشكل III. 3 : البحث عن بيانات الوصفات الجزيئية استنادا إلى رقم سجل CAS

3.III طرق تحليل البيانات :

إعداد نماذج QSPR ليس بالأمر السهل وتكمن الصعوبة الأولى في الاختلاف في المقاييس الموجودة بين البيانات المراد ربطها، حيث يكون الهيكل على نطاق جزيئي بينما تكون الخصائص التي سيتم التنبؤ بها على نطاق مجهري. بالإضافة إلى ذلك، فإنه يأخذ في الاعتبار مشاكل عدم اليقين على مستوى الهياكل الجزيئية (مستوى الحساب المرتبط) والبيانات التجريبية (بروتوكولات القياس).

تكمن إحدى المشكلات المهمة أيضًا في معالجة كميات كبيرة من البيانات. قد يلزم تحليل عدد كبير من الواصفات والجزيئات، ولكن لا توجد قاعدة صارمة لاختيار أكثرها أهمية من بين مجموعة كاملة من تلك المتاحة. في الواقع، هناك العديد من الأدوات وهي مسألة إيجاد الطريقة الأنسب للحصول على نموذج موثوق من البيانات المتاحة. اعتمادًا على الحالة، هناك عدة طرق ممكنة، ومن الضروري بعد ذلك اختيار الطريقة التي تسمح بأفضل توصيف للنظام. الطرق المختلفة المعروضة أدناه هي تلك المستخدمة أثناء الدراسة، لتطوير النماذج (أكثر أو أقل من المعلمات، خطي أو غير خطية أو قابلة للتفسير أو لا)، يجب اختيار الأعدادات الأكثر صلة وتحقق من صحة هذه النماذج (داخليًا أو خارجيًا) وتحديد مجالات تطبيقها. [Fayet, 2006]

1.3.III الانحدار الخطي المتعدد :

لقد أجرينا الحسابات باستخدام برنامج XLSTAT وتم الحصول على نتائج هذه الواصفات بالرجوع إلى القيم التجريبية. نختار أعدادات التحقق (Validation) للنموذج بواسطة 88 جزيء والتي تمثل 20 % من العدد الاجمالي لقاعدة البيانات التي تحتوي على 438 مركبا.

يتم اعطاء شكل المعادلة التي تتم بواسطتها حسابات XLSTAT على النحو التالي:

$$(III.1) \quad P(x) = A + \sum_{i=0}^n w_i x_i$$

P: خاصية (ΔH_{vap}) انتالبي التبخير

A : ثابتة

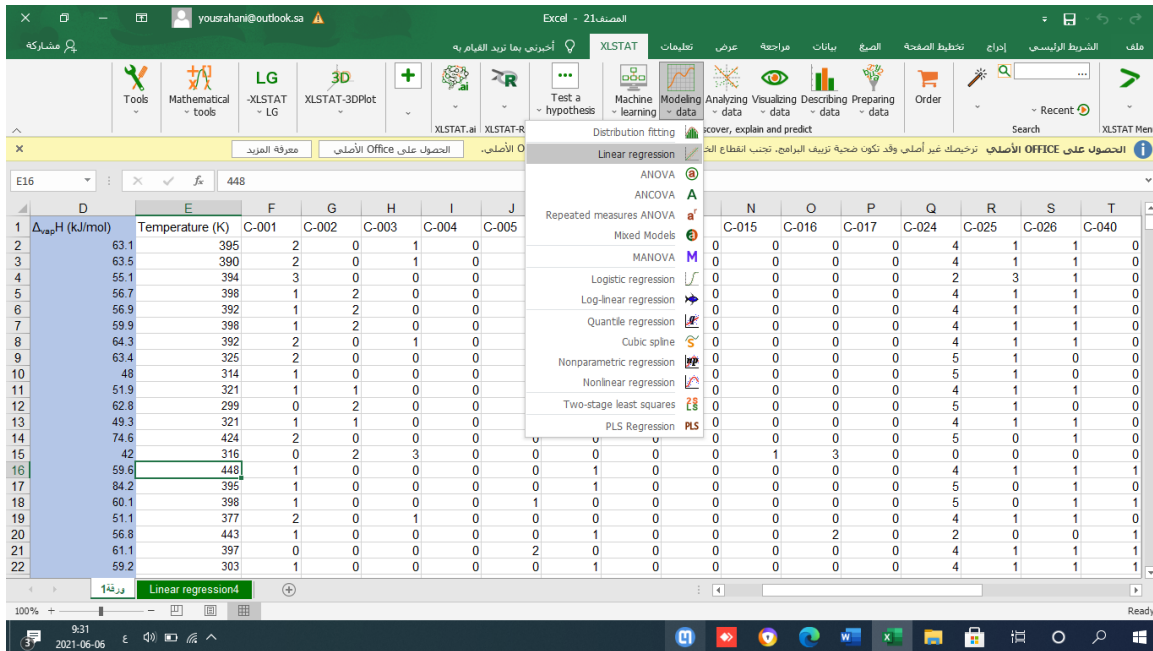
w : المتغيرات (المعاملات) x ; $x = 0, 1, 2, \dots, n$

x : متغيرات الخاصية (الواصفات الجزيئية) $x = 0, 1, 2, \dots, n$

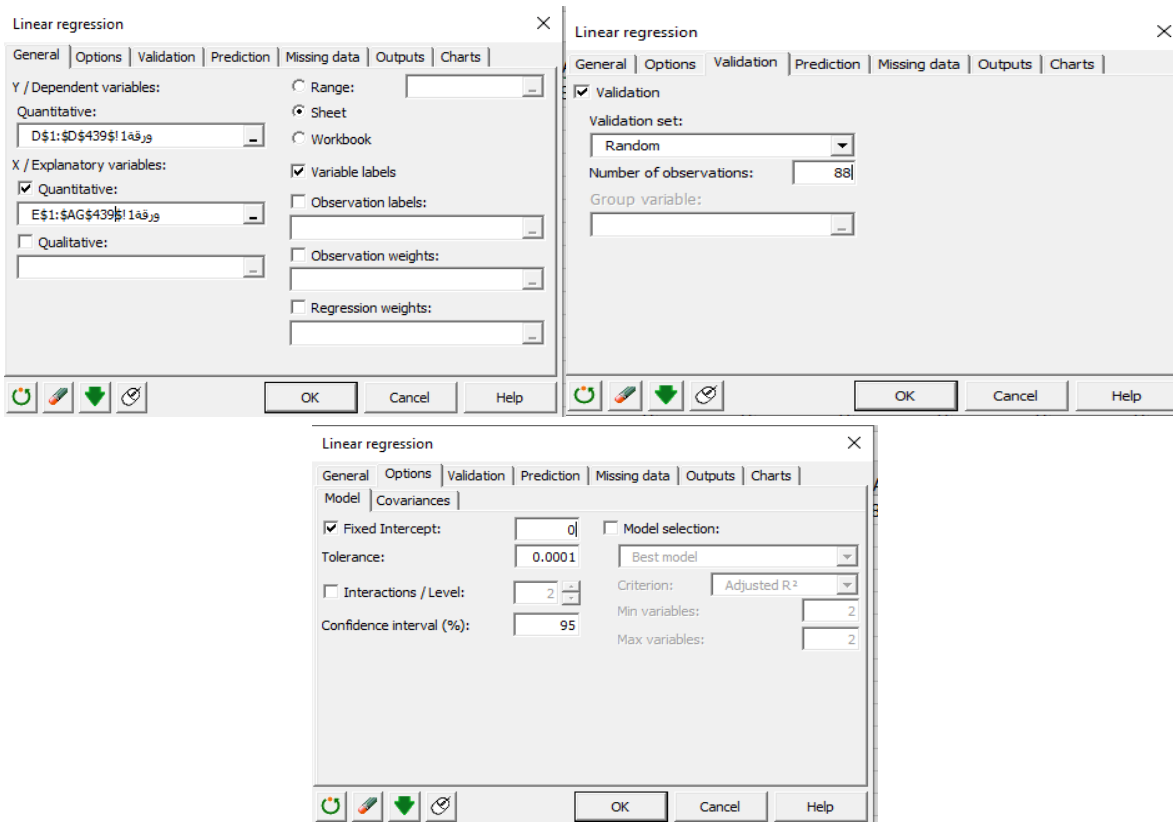
ويتم العمل ضمن الخطوات التالية:

الفصل III: طرق ومنهجية العمل

نفتح ورقة Excel ونبدأ تشغيل برنامج XLSTAT بالنقر فوق الرمز الأخير من شريط القائمة وستظهر لنا قائمة تحتوي على مهام البرنامج المختلفة وهي موضحة كالتالي:



الشكل III.4: نافذة برنامج XLSTAT (اختيار الانحدار)

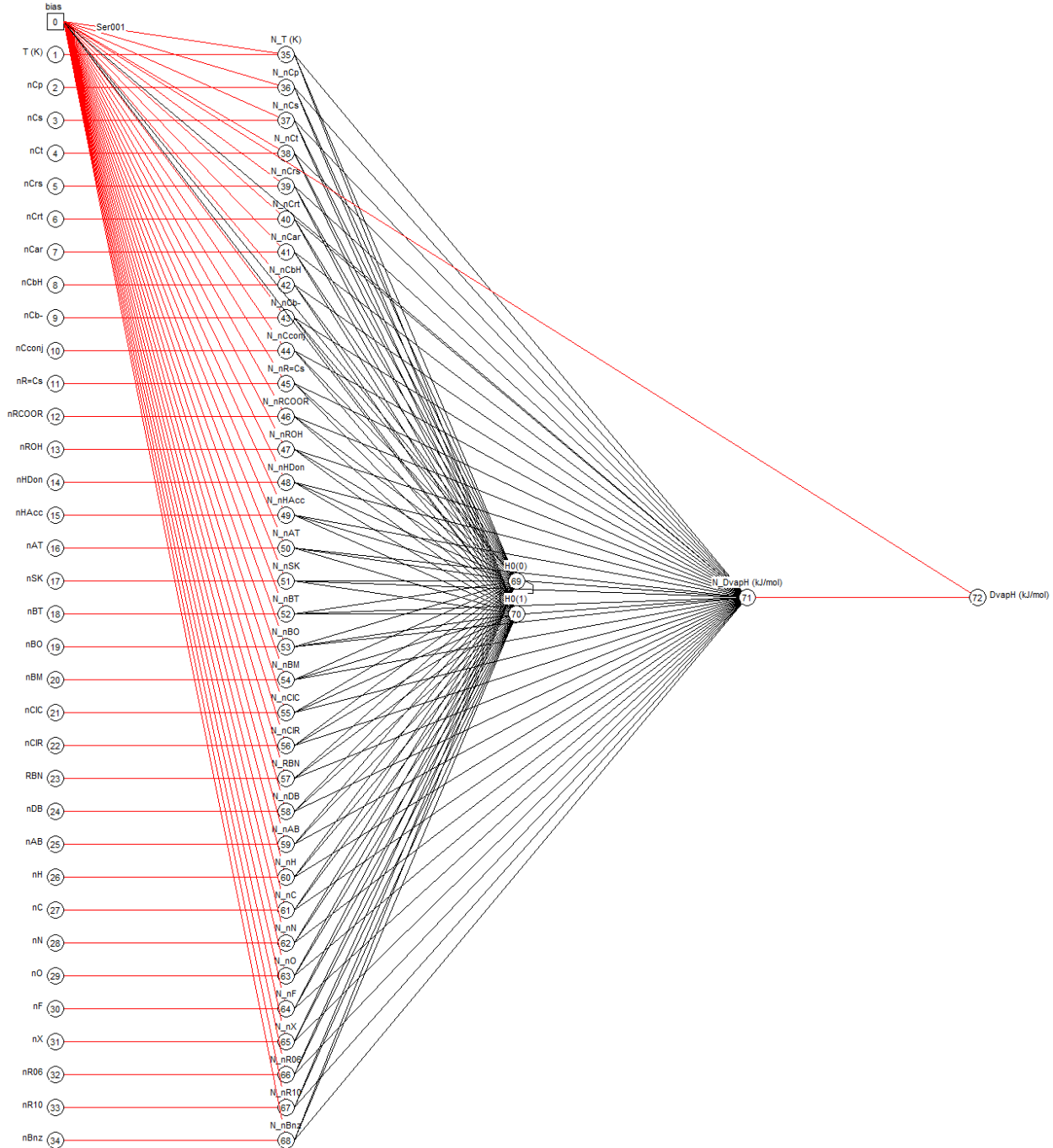


الشكل III.5: مربع حوار الانحدار الخطي

1.3.III الانحدار غير الخطي (الشبكات العصبونية):

• هيكل الشبكة العصبونية:

يوضح الرسم البياني بشكل عام كيفية إدخال البيانات وخطوات المرور المؤدية إلى المخرج.



الشكل III.6: الرسم البياني يعطي لمحة عامة عن بنية الشبكة العصبونية.

• مستوى الإدخال (Le niveau input):

في هذا المستوى يتم تحويل كل من الإدخالات إلى قيم بين 0 و 1 عن طريق التقييس مع اعتبار الحد الأقصى (يساوي 1) والحد الأدنى (يساوي 0) من كل القيم.

التحيز: (Le biais "w0") هو المصطلح الثابت لوظيفة الشبكة العصبية يساوي 0.1 في حالتنا.

الطبقة العصبونية للإدخال (La Couche de neurones entrée): في هذا المستوى تحدد الشبكة الوظائف التي تميز توزيع قيم كل من المدخلات وربطها بوزن "wi" خاص بها.

طبقة الخلايا العصبونية المخفية (La couche de neurones cachés): في هذا المستوى يتم تحديد الوظيفة الرياضية التي تميز تأثير كل من الداخلة على الخارجة.

طبقة الخلايا العصبونية للإخراج (La couche de neurones de sortie) يلخص الخطوات السابقة ويطور الوظيفة النهائية التي تؤدي إلى النواتج الموحدة.

مستوى الانتاج: (Le niveau output) هو ناتج من النموذج (المحتوى الحراري لتبخير) المعاد تحويله إلى وحدات المشكلة (kJ.mol⁻¹) والدالة غير الخطية للإدخال وضبط الشبكة تتم كتابتها بالشكل التالي:

$$P(x) = \frac{1}{1+e^{-nx}} \quad (III.2)$$

P: خاصية (ΔH_{vap} انثالي التبخير)

w : المتغيرات (المعاملات) X (i=0, 1, 2,...,n)

x : متغيرات الخاصية (الواصفات الجزيئية) (i=0, 1, 2, ..., n)

III.1.2.3. طريقة التحليل:

يجب إجراء تحليل البيانات بواسطة الشبكة العصبية المكونة من مجموعتين منفصلتين تستخدمان خلال مرحلتين مرحلة تدريب (4/5 من البيانات) ومرحلة التحقق (1/5 من البيانات) .

يتم أخذ البيانات عن طريق الرسم العشوائي دون استبدال يجب أن يكون التوزيع الإحصائي أقرب ما يمكن بين القاعدتين الفرعيتين التي تشكلت خلال المرحلتين.

تقوم الشبكة العصبية بتحليل بيانات الإدخال وفقاً لهاتين المرحلتين:

الفصل الرابع

النتائج والتحليل والمناقشة

الفصل VI: نتائج وتحليل ومناقشة

في هذه المرحلة، تم تطوير وتقييم نماذج لحساب انتالبي التبخر الخطية وغير الخطية للتنبؤ بأنشطة مركبات الاختبار. تتكون الدراسة التي أجريناها من الانحدار الخطي المتعدد (MLR) المتاح في برنامج XLSTAT والشبكة العصبية الاصطناعية (ANN) المتوفرة في برنامج NeuroOne 5.

1.VI. نتائج الانحدار الخطي المتعدد:

تم استخدام تحليل الانحدار الخطي المتعدد (MLR)، استنادًا إلى التخلص من الواصفات غير المهمة (واحدًا تلو الآخر) حتى نموذج الملائم (لجميع الواصفات والنموذج الكامل)، للعثور على نموذج خطي لحساب انتالبي التبخر، والذي يأخذ الشكل التالي:

$$P(x) = A + \sum_{i=0}^n w_i x_i \quad (VI.1)$$

P : انتالبي التبخر (ΔH_{vap} (kJ / mol).

A : ثابتة

w : المتغيرات (المعاملات) $x_i = 0, 1, 2, \dots, n$

x : متغيرات الخاصية (الواصفات الجزيئية) $i = 0, 1, 2, \dots, n$

A. الواصفات البنوية:

في الجدول 1.VI نجد المتغيرات الخاصة بالنموذج لحساب ΔH_{vap} (kJ / mol) التي هي ممثلة

في الواصفات البنوية مع المعاملات الخاصة بكل واصف على حدى والثابت A الذي يساوي 0.5.

جدول 1.VI المتغيرات الخاصة بالنموذج مع المعاملات الخاصة بكل واصف:

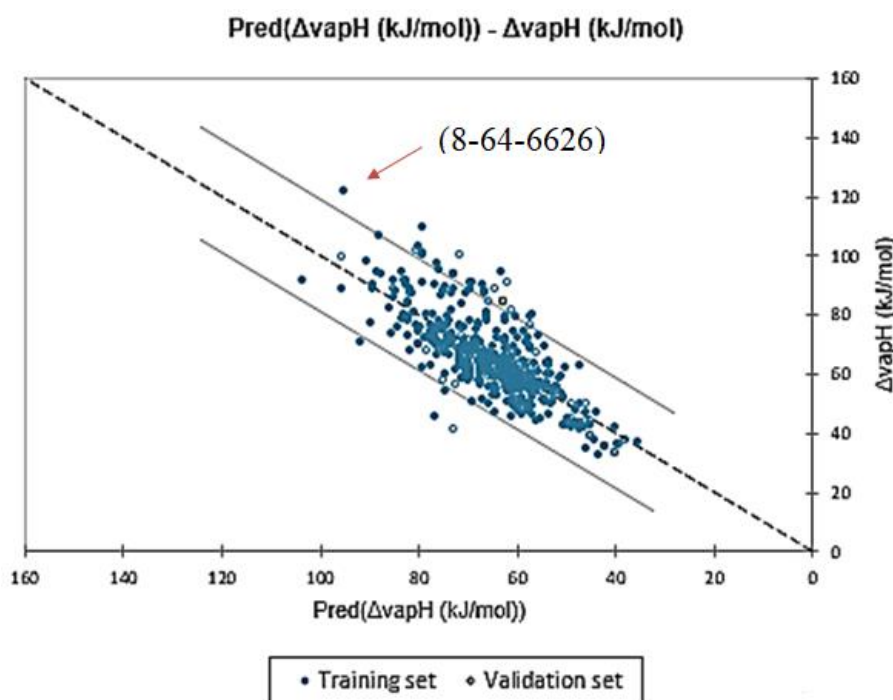
x_i	w_i	x_i	w_i	x_i	w_i
A	0.5	SCBO	-0.852	Nh	0.000
T	-0.235	nCIC	0.733	nC	0.402
nAT	16.362	nCIR	0.049	nN	0.033
nSK	1.822	RBN	0.040	nO	0.020
nBT	-17.084	nDB	-0.071	nF	-0.136
nBO	0.000	nAB	0.000	nX	-0.024
nBM	0.214	nR10	1.158	nBnz	-4.618
nR06	-2.055				

يتم عرض الإحصائيات المتعلقة بمعاملات التوافق لنموذج الانحدار الخطي المتعدد لمجموعات الوصفات البنوية في الجداول أدناه.

الجدول 2.VI معاملات التوافق للنموذج الخاصة بالوصفات البنوية.

MAPE		RMCE		R ²		الوصفات
Val	Tra set	Val	Tra set	Val	Tra set	الوصفات البنوية
9.744	10.518	9.872	9.513	0.614	0.981	

يمثل الرسم البياني علاقة الخطية بين القيمة التجريبية والحسابية لانتالبي التبخر ويوضح مجال الثقة (Intervalle de confiance) والنقاط الأكثر والاقل ارتباطا للوصفات البنوية.



الشكل 1.VI العلاقة الخطية بين القيمة التجريبية والتنبؤية للنموذج الخاصة بالوصفات البنوية.

B. التقسيم حسب الذرة المركزية:

في الجدول 3.VI نجد المتغيرات الخاصة بالنموذج لحساب ΔH_{vap} (kJ/mol) التي هي ممثلة

في التقسيم حسب الذرة المركزية مع المعاملات الخاصة بكل واصف على حدى والثابت A.

الجدول 3.VI المتغيرات الخاصة بالنموذج الخطي مع المعاملات الخاصة بكل واصف.

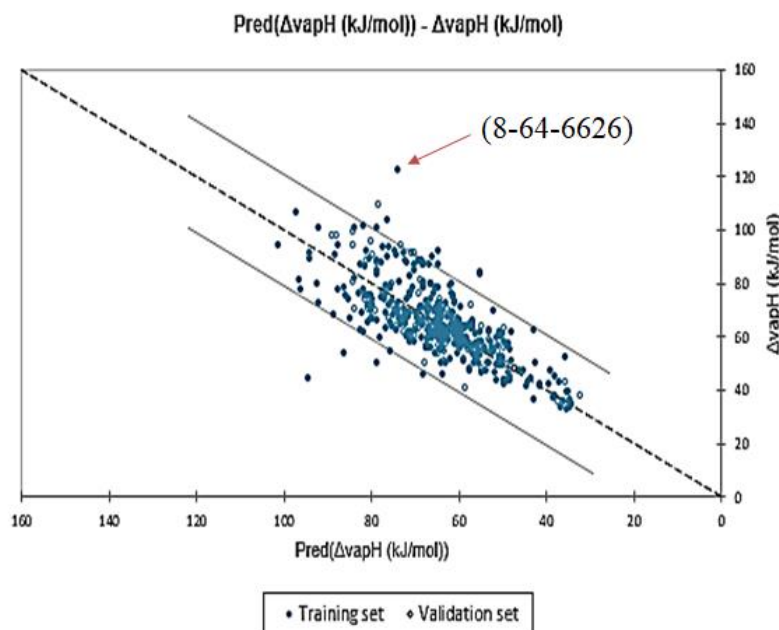
x_i	w_i	x_i	w_i	x_i	w_i
A	0	C-015	1.844	H-051	-1.309
T	0.046	C-016	2.399	H-052	-2.428
C-001	11.727	C-017	4.999	O-056	10.066
C-002	9.353	C-024	3.808	O-057	4.814
C-003	6.064	C-025	3.191	O-058	1.782
C-004	4.426	C-026	3.510	O-059	0.107
C-005	5.638	C-040	3.489	O-060	1.729
C-006	2.984	H-046	-2.989	F-082	-13.707
C-008	1.670	H-047	0.000	F-083	1.523
C-012	30.561	H-050	3.647	CI-089	0.445

يتم عرض الإحصائيات المتعلقة بمعاملات التوافق لنموذج الانحدار الخطي المتعدد لمجموعات واصفات التقسيم حسب الذرة المركزية في الجداول ادناه.

الجدول 4.VI معاملات التوافق للنموذج الخاصة واصفات التقسيم حسب الذرة المركزية.

MAPE		RMCE		R ²		الواصفات
Val	Tra set	Val	Tra set	Val	Tra set	التقسيم حسب الذرة المركزية
11.418	11.154	11.869	10.478	0.604	0.977	

يمثل الرسم البياني علاقة الخطية بين القيمة التجريبية والحسابية لانتالبي التبخر ويوضح مجال الثقة والنقاط الأكثر والاقل ارتباطا لتقسيم حسب الذرة المركزية.



الشكل 2.VI: العلاقة الخطية بين القيمة التجريبية والتنبؤية للنموذج الخاصة بواصفات التقسيم حسب الذرة المركزية.

C. تعداد المجموعة الوظيفية:

في الجدول 5.VI يمثل المتغيرات الخاصة بالنموذج لحساب ΔH_{vap} (kJ/mol) التي هي ممثلة في تعداد المجموعة الوظيفية مع المعاملات الخاصة بكل واصف على حدى والثابت $A=2$.
الجدول 5.VI المتغيرات الخاصة بالنموذج مع المعاملات الخاصة بكل واصف.

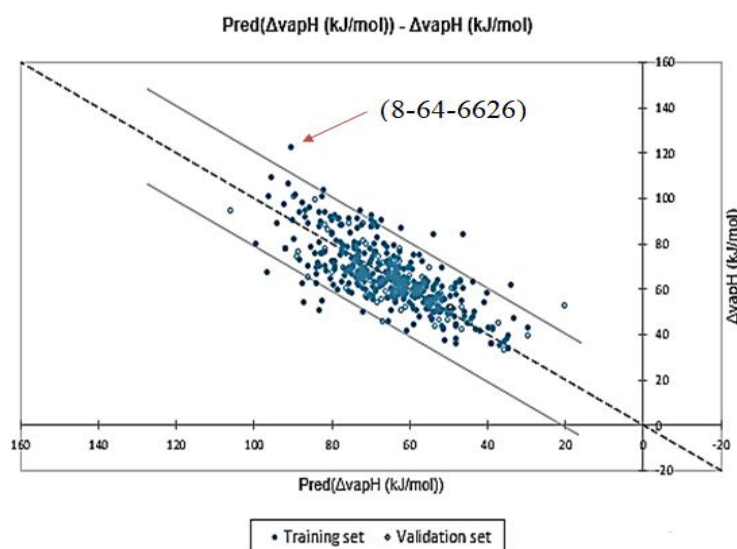
x_i	w_i	x_i	w_i	x_i	w_i
nCp	2.975	nCb-	-3.890	nROH	7.810
nCs	3.611	nCconj	1.010	nArOH	-1.003
nCt	1.990	Nr=Cp	-1.768	Nror	6.752
nCq	4.040	Nr=Cs	1.769	nArOR	4.580
nCrs	-0.719	Nr=Ct	5.429	nArX	0.530
nCrt	2.402	Nrcoor	8.131	nHDon	7.423
nCar	7.063	nArCOOR	7.224	nHAcc	0.584
nCbH	-3.243	nArCO	3.222	T	0.044

يتم عرض الإحصائيات المتعلقة بمعاملات التوافق لنموذج الانحدار الخطي المتعدد لمجموعات واصفات تعداد المجموعة الوظيفية في الجداول ادناه.

الجدول 6.VI معاملات التوافق للنموذج الخاصة بواصفات تعداد المجموعة الوظيفية.

MAPE		RMCE		R ²		الواصفات
Val	Tra set	Val	Tra set	Val	Tra set	تعداد المجموعة الوظيفية
12.407	11.499	11.075	10.515	0.601	0.976	

يمثل الرسم البياني علاقة الخطية بين القيمة التجريبية والحسابية لانتالبي التبخر ويوضح مجال الثقة والنقاط الأكثر والاقل ارتباطا لتعداد المجموعة الوظيفية.



الشكل 3.VI: العلاقة الخطية بين القيمة التجريبية والتنبؤية للنموذج الخاصة بواصفات تعداد المجموعة الوظيفية.

D. تجميع المجموعات:

في الجدول 7.VI يوضح المتغيرات الخاصة بالنموذج لحساب ΔH_{vap} (kJ/mol) التي هي ممثلة في تجميع المجموعات مع المعاملات الخاصة بكل واصف على حدى والثابت A الذي يساوي 0.5. جدول 7.VI المتغيرات الخاصة بالنموذج مع المعاملات الخاصة بكل واصف.

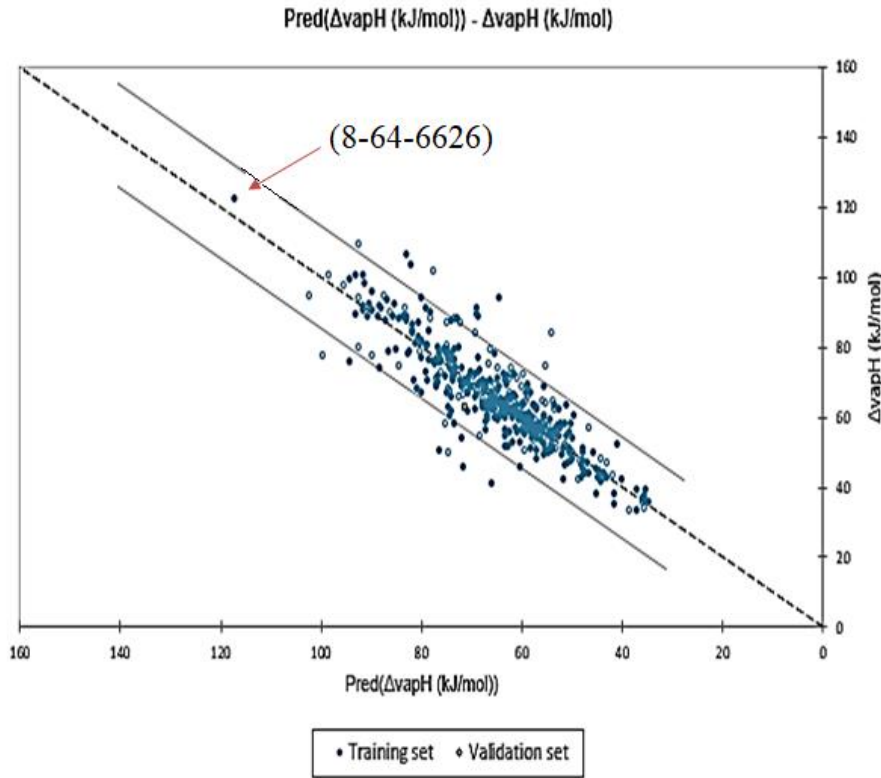
x_i	w_i	x_i	w_i	x_i	w_i
T(k)	-0.057	nCrT	-2.025	nR=Cs	4.175
nCp	2.330	nCar	2.426	nR=Ct	-2.011
nCs	0.572	nCbH	-0.848	nRCOOR	-1.589
nCt	-4.489	nCb-	-13.062	nArCOOR	1.079
nCq	-2.369	nCconj	-0.264	nArCO	-0.125
nCrs	-2.060	nR=Cp	1.186	nROH	4.355
nArOH	-6.362	nSK	23.991	nCIR	1.002
nROR	-7.095	nBT	-28.604	RBN	-1.928
nArOR	4.327	nBO	0.000	nDB	-2.512
nArX	3.077	nBM	8.281	nAB	0.000
nHDon	8.177	SCBO	-11.667	nH	0.000
nHAcc	-0.737	nCIC	30.221	nC	6.503
nN	-2.450	C-006	5.545	H-050	0.977
nO	3.270	C-008	0.814	H-051	0.710
nF	-6.597	C-012	5.373	H-052	-0.275
nX	-7.224	C-015	1.202	O-056	-3.394
nR06	3.502	C-016	-5.299	O-057	-0.630
nR10	-1.856	C-017	0.000	O-058	-8.358
nBnz	-0.607	C-024	-6.999	O-059	-1.510
C-001	1.995	C-025	2.086	O-060	-9.379
C-002	3.892	C-026	4.052	F-082	1.397
C-003	5.008	C-040	5.366	F-083	3.338
C-004	0.000	H-046	0.020	CI-089	0.325
C-005	7.309	H-047	0.000	H-050	0.977

يتم عرض في الجداول ادناه الإحصائيات المتعلقة بمعاملات التوافق لنموذج الانحدار الخطي المتعدد لمجموعات واصفات الثلاثة السابقة في مجموعة واحدة.

الجدول 8.VI معاملات التوافق للنموذج الخاصة بواصفات المجموعات الثلاثة السابقة في مجموعة واحدة.

MAPE		RMCE		R ²		الواصفات
Val	Tra set	Val	Tra set	Val	Tra set	تجميع المجموعات
8.788	6.934	13.268	7.372	0.687	0.990	

يمثل الرسم البياني علاقة الخطية بين القيمة التجريبية والحسابية لانتالبي التبخر ويوضح مجال الثقة والنقاط الأكثر والاقبل ارتباطا بوصفات المجموعات الثلاثة السابقة في مجموعة واحدة.



الشكل 4.VI: العلاقة الخطية بين القيمة التجريبية والتنبؤية للنموذج الخاصة بوصفات المجموعات الثلاثة السابقة في مجموعة واحدة.

1.1.VI. تحليل ومناقشة نتائج الانحدار الخطي المتعدد:

تعتبر النتائج المعروضة سابقا على مدى دقة نموذج المقترح فان معامل تحديد النموذج R^2 يبين لنا نسبة تباين المتغير، علما ان كلما اقترب من 1 كان النموذج أفضل وتظهر قيمه في المجموعات الثلاثة متقاربة ومحصورة بين $98.2\% < R^2 \text{ Tra set} < 96\%$ و $69\% < R^2 \text{ Val} < 60\%$ واما بالنسبة لمعاملات متوسط نسبة الخطأ المطلق (MAPE) ومتوسط جذر الخطأ التربيعي (RMCE) كلما انخفضت قيمهم كانت نتائج النموذج أفضل. لهذا جاءت النتائج المتحصل عليها بالنسبة RMCE محصورة بين 7 و12 في حالة التدريب (Apprentissage)، وبين 9 و14 في حالة التحقق (Validation). اما بالنسبة MAPE فكانت محصورة بين 6 و12 في حالة التدريب (Apprentissage)، وبين 8 و13 في حالة التحقق (Validation). هذا فيما يخص مجموعات الوصفات الثلاثة.

من هذه النتائج لاحظنا ان أفضل قيمة من بين المجموعات الثلاثة هي الوصفات البنيوية.

بغية تحسين النتائج جمعنا المجموعات الثلاثة في قاعدة بيانات واحدة، بحيث أظهرت نتائج أفضل بناء على قيمة $R^2_{Tra\ set}=99\%$ و $R^2_{Val}=68.7\%$. اما بالنسبة لمعاملات متوسط نسبة الخطأ المطلق (MAPE) ومتوسط جذر الخطأ التربيعي (RMCE) فكانت النتائج متقاربة.

ادت دراسة الارتباط بين الواصفات في مجال الثقة الى تصنيفها بين (-5, +5): فالواصفات الاقل ارتباطا والمقصود بها النقاط الشاذة التي لا تتطابق قيمها التجريبية مع قيمها التنبؤية عن الخاصية المراد تقديرها (ΔH_{vap}) وعلى سبيل المثال نجد المركب ($C_{17}H_{13}N$) [8-64-6626] المشترك بين المجموعات الثلاث المدروسة والمشار لها بسهم في الاشكال (VI.1، VI.3، VI.2) وبغرض تحسين النتائج بتجميع المجموعات الثلاث في نموذج واحد حيث نجد ان هذه القيمة ظهرت داخل مجال الثقة (الشكل VI.4). يمكن ان تكون الواصفات مهمة للنموذج التي لها ارتباط كبير تعطينا معلومات متشابهة عن الخاصية المراد تقديرها (ΔH_{vap}).

يوضح لنا الرسم البياني (الشكل VI.1، VI.2، VI.3، VI.4) ان هناك عدد قليل من المركبات في قائمة التدريب والتحقق تقع خارج مجال الثقة، ويمكن ان نفسر تحصلنا على قيمة التحقق منخفضة لتأثر سلوك وأداء النموذج الرياضي بعدة عوامل منها وجود عدد متكرر من المتماكبات (موضحة في الجدول VI.9)، وأيضاً وجود نفس القيم التجريبية في عدد مختلف من المركبات في (الجدول VI.10). من جهة اخرى يبين لنا الرسم البياني لنتائج الانحدار الخطي (الشكل VI.1، VI.2، VI.3، VI.4) انه من بين النماذج 4 كان النموذج الموضح في الشكل VI.4 هو الأفضل.

الجدول 9.VI: يوضح بعض المتماكبات في قاعدة البيانات.

Molecular formula	CAS
$C_{12}H_{12}$	581-40-8
$C_{12}H_{12}$	575-43-9
$C_{12}H_{12}$	582-16-1
$C_{12}H_{12}$	581-42-0
$C_{12}H_{12}$	1127-76-0

الجدول 10.VI: يوضح بعض المركبات التي لها نفس القيم التجريبية.

Molecular formula	CAS	$\Delta vapH$ (kJ/mol)
$C_{15}H_{24}O$	2219-84-3	67.1
$C_{14}H_{29}Br$	112-71-0	67.1
$C_{12}H_{10}O$	101-84-8	67.1
$C_{11}H_{24}O$	5457-41-0	67.1
$C_9H_{10}O_2$	501-52-0	67.0

2.VI نتيجة انحدار الشبكة العصبونية الاصطناعية (NRN) :

مقارنة بالنتائج في الانحدار الخطي المتعدد اعتمدنا مباشرة على الحالة التي جمعنا فيها المجموعات الثلاثة في مجموعة واحدة وهذا راجع لتحليل النتائج السابقة التي اسفرت على أفضل نتيجة.

في الجدول VI.11 يبين المتغيرات الخاصة بالنموذج لحساب ΔH_{vap} (kJ / mol) التي هي ممثلة في تجميع المجموعات مع المعاملات الخاصة بكل واصف على حدى والثابت A الذي يساوي 0.1. ومعادلة النموذج موضحة بالشكل التالي:

$$\Delta H_{vap} = 65.3587 + 14.3 * \left(w_{71} + \frac{w_{72}}{2} (1 + \tanh N_1) + \frac{w_{73}}{2} (1 + \tanh M) + \sum_{i=74, j=0}^{107,33} w_i * (c_j + b_j x_j) \right) \quad (2.VI)$$

$$M = w_{35} + \sum_{i=36, j=0}^{69,33} w_i + \frac{w_{70}}{2} (1 + \tanh N_1)$$

$$N_1 = w_0 + \sum_{i=1, j=0}^{34,33} w_i * (c_j + b_j x_j)$$

الجدول VI.11: المتغيرات الخاصة بنموذج الشبكة العصبونية الاصطناعية.

Xi	ci	bi	wi		
T (K)	-6,831	0,018	-0,175	-0,306	1,444
nCp	-1,079	0,694	-0,107	0,062	-1,587
nCs	-0,953	0,213	-0,118	-0,098	-0,288
nCt	-0,395	1,254	-0,147	-0,328	0,105
nCrs	-0,339	0,455	-0,278	-0,051	0,525
nCrt	-0,234	1,602	0,069	0,154	-0,032
nCar	-0,899	0,197	0,179	0,272	-0,043
nCbH	-0,845	0,273	0,190	0,476	-0,022
nCb-	-0,800	0,557	0,503	-0,689	0,375
nCconj	-0,383	1,234	0,088	-0,333	-0,279
nR=Cs	-0,303	1,599	-0,188	-0,298	-0,420
nRCOOR	-0,385	2,188	-0,464	0,071	-0,039
nROH	-0,324	2,840	-0,230	-0,713	-0,077
nHDon	-0,509	1,740	-0,827	-0,201	-0,020
nHAcc	-0,638	0,446	0,345	0,150	0,082
nAT	-3,520	0,108	0,240	-0,031	0,056
nSK	-4,181	0,299	0,071	-0,171	0,046
nBT	-3,698	0,114	0,203	0,139	-0,222
nBO	-3,833	0,274	0,017	-0,133	1,052
nBM	-1,025	0,192	0,210	0,132	-0,306
nCIC	-0,980	0,937	0,108	-0,326	0,595
nCIR	-0,657	0,448	-0,185	-0,648	-0,194
RBN	-1,163	0,223	-0,248	0,315	-0,682
nDB	-0,733	1,207	-0,076	0,651	0,112
nAB	-0,888	0,189	0,854	-0,144	0,320

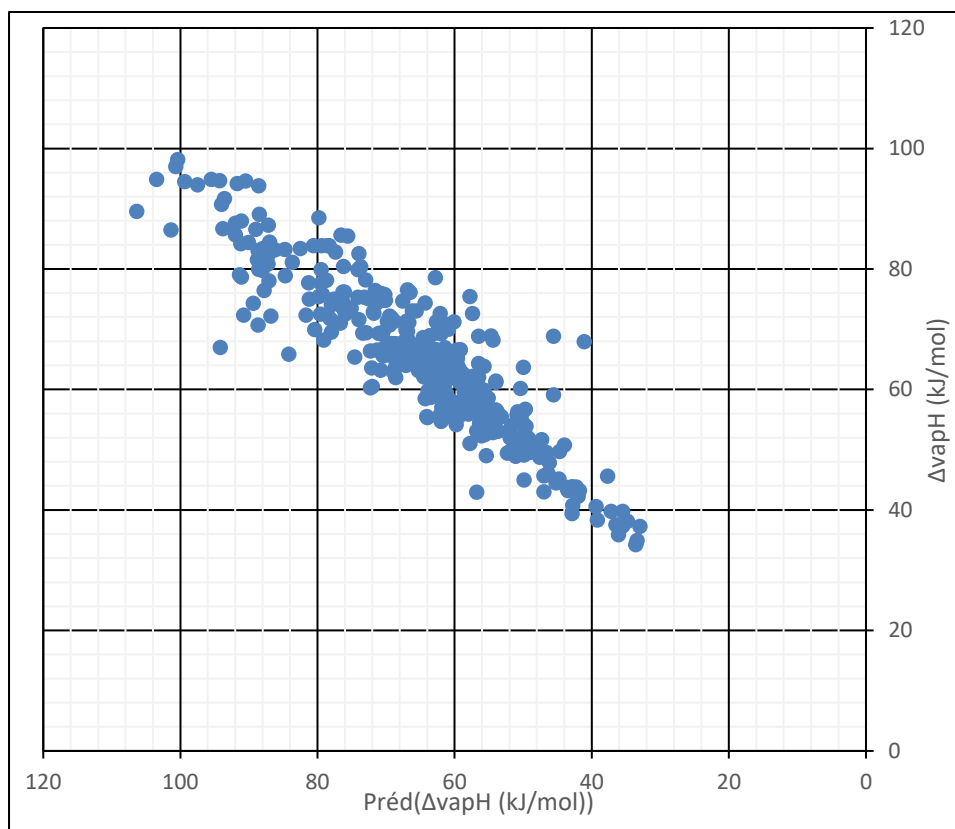
nH	-2,367	0,128	0,026	0,061	-0,005
nC	-4,509	0,365	-0,268	-0,038	-0,016
nN	-0,344	2,283	-0,057	0,566	-0,491
nO	-0,822	0,766	-0,322	-0,184	-0,257
nF	-0,106	0,560	0,172	0,131	0,188
nX	-0,178	0,529	-0,212	0,381	-0,441
nR06	-0,962	1,030	-0,071	0,282	-0,767
nR10	-0,283	1,719	0,231	-0,117	-0,269
nBnz	-0,878	1,121	-0,438	-0,070	0,086
			0,179	0,324	0,168
			-0,101	0,247	0,065

يتم عرض في الجداول ادناه الإحصائيات المتعلقة بمعاملات التوافق لنموذج الانحدار للشبكة العصبونية الاصطناعية لمجموعات واصفات الثلاثة السابقة في مجموعة واحدة.

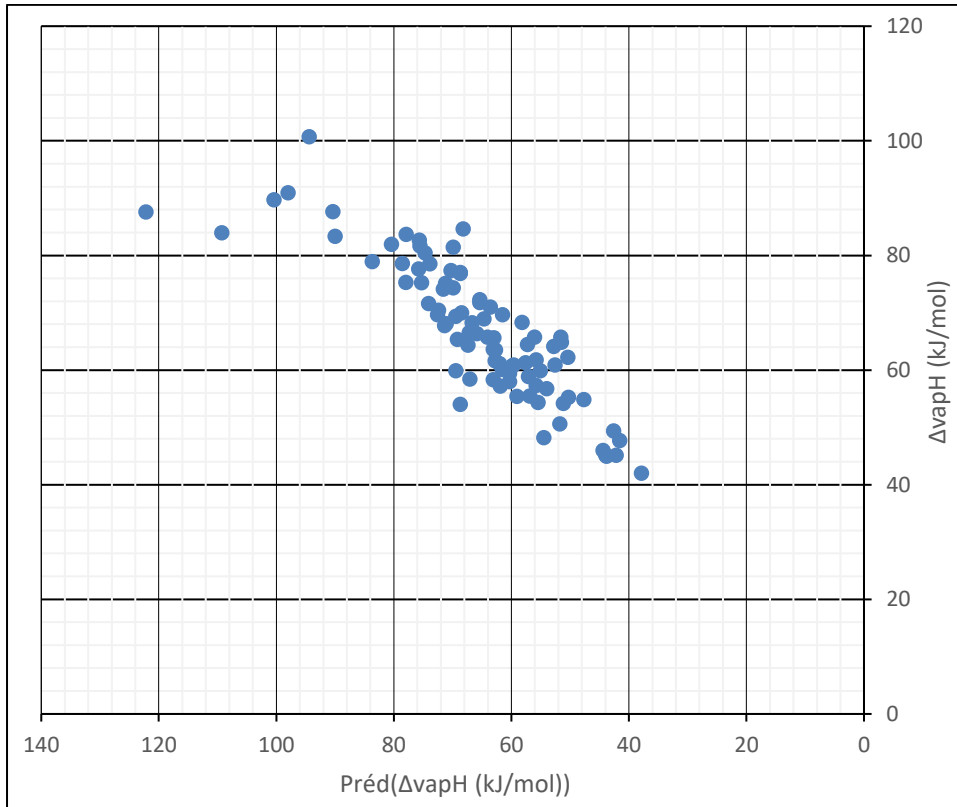
الجدول 6.VI معاملات التوافق للنموذج الخاصة بالانحدار للشبكة العصبونية الاصطناعية.

EQMV	EQMA	R ² Val	R ² Tra set	الواصفات
28,31	18,29	0,86	0,91	تجميع المجموعات

يمثل الرسم البياني الشكل VI.5 و VI.6 العلاقة غير الخطية (الشبكة العصبونية) بين القيمة التجريبية والحسابية لتدريب والتحقق لانتالبي التبخر ويوضح مجال الثقة والنقاط الأكثر والاقل ارتباطا لتجميع المجموعات.



الشكل 5.VI: العلاقة غير الخطية بين القيم التجريبية والتنبؤية لتدريب



الشكل 6.VI : العلاقة غير الخطية بين القيم التجريبية والتنبؤية لتحقيق.

1.2.VI. تحليل ومناقشة:

بغرض الحصول على نتائج أفضل عملنا على تعقيد النموذج الرياضي باستعمال طريقة الانحدار غير الخطي (الشبكة العصبونية) للتحقق من صحته من حيث الارتباط واطهرت ان قيمة R^2_{val} للانحدار غير الخطي زادت مقارنة بقيمة الانحدار الخطي المتعدد اي $R^2_{val} = 0.687 < 0.86$ اما قيمة R^2 $T_{ra set}$ للانحدار غير خطي انخفضت الى 91 %.

خاتمة

تمكنت ANN من إنشاء علاقة أكثر إرضاءً بين الواصفات الجزيئية وخاصية المركبات المدروسة مقارنة بـ MLR؛ لكن الجانب الأكثر سلبية من هذه الطريقة هو حقيقة أنها نموذجها معقد، في حين أن نموذج نهج MLR يعطي أكثر مرونة وقابلية للتفسير ويعطي شرحاً جيداً للخصائص باستخدام الواصفات. وبالتالي، يمكننا تعرف على الخاصية المدروسة للمركبات الجديدة مقارنة بالمركبات المدروسة باستخدام نماذج MLR. مع الأخذ في الاعتبار النتائج المذكورة أعلاه. لذلك، فإن النماذج المقترحة ستقلل من وقت وتكلفة التوليف في تحديد الخصائص.

الخاتمة العامة

كان النموذج الحالي نتيجة دراسة على المحتوى الحراري للتبخر 438 مركبًا. تم اختيار هذه المركبات من جميع عائلات المركبات. كما أن بساطة استخدامه هي إحدى مزايا هذا النموذج. في هذا العمل تعاملنا مع مشكلة تنبأ بقيم المحتوى الحراري للتبخر، ولهذا قمنا بربط أنواع مختلفة من المتغيرات (الواصفات) لحساب (ΔH_{vap}) بطريقة QSPR بعد اختيار الواصفات (الواصفات الدستورية، المجموعات الوظيفية، أجزاء من الذرة المركزية). أظهرت عملية التحديد أنه من الممكن الحصول على نتائج أفضل عند التجميع. تم تطوير هذه الطريقة للمركبات التي تحتوي على ذرات الكربون والهيدروجين والأكسجين والنيتروجين. وفقًا للتحليلات الإحصائية لقيم الخصائص التجريبية السابقة والتنبؤية، وتفسير الرسوم البيانية، نرى أن القيم التي هي خارج مجال الدقة تظهر القيم المتطرفة التي تشير إلى جزيئات غير مرتبطة ينتج عدم الانتظام عن وجود الهالوجينات مثل (Cl، Br)، روابط الهيدروجين، van der waals، والعطرية، أو مجموعات مثل (NH_2) القادرة على إعطاء مزدوج إلكتروني. تعتمد جودة النموذج على معاملات التوافق (R^2 ، RMCE، MAPE)، تخبرنا قيمة R^2 أن درجة ارتباط الخصائص بالبنية الهيكلية لتجميع الكتل المختلفة كانت الأفضل لأن قاعدة البيانات تحتوي على عدد متغيرات أكبر وتقدم نموذجًا يتوافق مع تنبؤات الخصائص.

أخيرًا، يوصى بالنقاط التالية:

الاستمرار في تطوير الطريقة التي تم وضعها خلال هذه الدراسة بجمع عدة جزيئات التي تحتوي على ذرات بخلاف C، H، O و N التي تم تحديدها لتوسيع قاعدة البيانات للحصول على نتائج أفضل. حساب قيم الواصف الجزيئي. لذلك سيكون قدرًا كبيرًا من البيانات التجريبية ضروريًا لتطوير الطريقة المقدمة في هذا العمل حتى تكون كاملة قدر الإمكان. ولكن ليس من السهل دائمًا قياس قيم المحتوى الحراري بشكل تجريبي.

سيكون من المتصور أيضًا إنشاء برنامج يسمح بآتمة حساب المحتوى الحراري للتبخر. سيكون هذا عمليًا للغاية وسيسمح للأشخاص الذين ليسوا على دراية بطرق الواصف الجزيئي باستخدام النتائج المقدمة في هذه المذكرة على وجه الخصوص. بالإضافة إلى ذلك، فإن تطوير البرمجيات سيجعل من الممكن تحسين قيم الواصف الجزيئي التي تم تحديدها أثناء الدراسة الحالية بشكل كبير. سيطبق هذا طرقًا أخرى، على سبيل المثال طريقة توقيع الواصف الجزيئي، والرسم البياني للآلة، ... إلخ.

نقترح من خلال دراستنا تبين انه لو تمت الدراسة بتوظيف مجموعات اخر تختلف عن المجموعات المختارة لكانت النتائج أفضل وأكثر دقة.

المراجع

1. **State Dehai Yu**, Zheng Chen "A theoretical analysis on enthalpy of vaporization: Temperature dependence and singularity at the critical"
2. **Kirkham Principles of Soil and Plant Water Relations** .2nd Edition. Write a review. Author: M.B. Kirkham. Hardcover ISBN: 9780124200227.eBook ISBN: 9780124200784. Imprint: Academic Press. Published Date: 21st April 2014.
3. **Anna Salmon et Didier Dalmazzone**; (Prediction of Enthalpy of Formation in the Solid State „at 298.15 K... using Second-Order Group Contributions. Part 1. Carbon-Hydrogen and Carbon-Hydrogen-Oxygen Compounds), American Institute of Physics. 2006.
4. **Benjamin T. Goodman**; (Thermodynamic Property Prediction for Solid Organic Compounds Based on Molecular Structure) Brigham Young University – Provo (2003).
5. **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).
6. **GOULON-SIGWALT-ABRAM** ; thèses de doctorat (Une nouvelle méthode d'apprentissage de données structurées : applications à l'aide à la découverte de médicaments), Université Paris
7. **Guillaume FAYET** ; Thèses de doctorat (développement de modèles QSPR pour la prédiction des propriétés d'explosibilités des composés nitro-aromatiques) ; Université Pierre et Marie Curie ; 2006.
8. **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).
9. **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/); 2007
10. **Hansch C**; (1969), a quantitative approach to biochemical structure activity relationships. Accounts of chemical research,
11. **R Todeschini, V Consonni** ; Molecular Descriptors for Chemoinformatics, Volumes I & II ; 2009
12. [<http://michem.disat.unimib.it/chm/Help/edragon/>].
13. S.W. Benson, J.H. Buss, *J. Chem. Phys.*, **1958**

14. **Samuel Edward A** ; Thèse de doctorat (Molecular Similarity and Xenobiotic Metabolism) Université de Cambridge, 2010
15. **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)
16. **CHTITA, Samir**. Modélisation de molécules organiques hétérocycliques biologiquement actives par des méthodes QSAR/QSPR. Recherche de nouveaux médicaments. Meknès : Université Moulay Ismail, Faculte des sciences, 2017.
17. **Mounir Ghamali1, Samir Chtita1, Mohammed Bouachrine2, Tahar Lakhlifi1**. Méthodologie générale d'une étude RQSA/RQSP. Revue Interdisciplinaire. Voll, n°1 (2016)
18. **Addinsoft-Team**. XLSTAT 2020. Paris, France: Addinsoft, 2020.
19. **Mauro Banchero * ID and Luigi Manna**. Article Comparison between Multi-Linear- and Radial-Basis-Function-Neural-Network-Based QSPR Models for The Prediction of The Critical Temperature, Critical Pressure and Acentric Factor of Organic Compounds. Molecules 2018
20. **Chérif F. Matta**; Quantum Biochemistry, University Halifax, Nova Scotia, Canada B3H 4J3, 2010
21. **NIST** (National Institute of Standards and Technology) Chemistry WebBook [http://webbook.nist.gov/chemistry/].
22. **Markus C. Hemmer**; Expert Systems in Chemistry Research; Taylor & Francis Group 2008.
23. **Alexandre Varnek et Alex Tropsha**; Chemoinformatics Approaches to Virtual Screening. Royal Society of Chemistry (www.rsc.org) 2008.
24. https://mawdoo3.com/%D9%85%D8%A7%D9%87%D9%8A%D8%A7%D9%84%D9%85%D8%B1%D9%83%D8%A8%D8%A7%D8%AA_%D8%A7%D9%84%D8%B9%D8%B6%D9%88%D9%8A%D8%A9.
25. Le Cloirec P. (2002). Introduction au traitement de l'air, Les techniques de l'ingénieur Traité environnement (G 1700)
26. B. A. BUNIN, B. SIESEL, G. A. MORALES, J. BAJORATH; Chemoinformatics: Theory, Practice, and Products; P.O. Box 17, 3300 AA Dordrecht, the Netherlands, 2007.
27. A.R. Katritzky., D.C. Fara., R.O. Petrukhin, (2002), Top. Med. Chemm ,1333-1356.
28. S.M. Free, J.W. Wilson, A mathematical contribution to structure–activity studies. J. Med. Chem.1964.

29. M. Grover, B. Singh, M. Bakshi, S. Singh, Quantitative structure- Property relationships in pharmaceutical research Part2. Pharm. Sci. Tech. Today, 2000.

N°	Compound	Molecular formula	CAS registry number	$\Delta_{\text{vap}}H$ (kJ/mol)
1	4-isopropylphenol	C ₉ H ₁₂ O	99-89-8	63.1
2	2-isopropylphenol	C ₉ H ₁₂ O	88-69-7	63.5
3	2,3,5-trimethylphenol	C ₉ H ₁₂ O	697-82-5	55.1
4	4-propylphenol	C ₉ H ₁₂ O	645-56-7	56.7
5	2-propylphenol	C ₉ H ₁₂ O	644-35-9	56.9
6	3-propylphenol	C ₉ H ₁₂ O	621-27-2	59.9
7	3-isopropylphenol	C ₉ H ₁₂ O	618-45-1	64.3
8	2-phenyl-2-propanol	C ₉ H ₁₂ O	617-94-7	63.4
9	benzyl ethyl ether	C ₉ H ₁₂ O	539-30-0	48
10	4-ethylanisole	C ₉ H ₁₂ O	1515-95-3	51.9
11	3-phenyl-1-propanol	C ₉ H ₁₂ O	122-97-4	62.8
12	3-ethylanisole	C ₉ H ₁₂ O	10568-38-4	49.3
13	phenylhydrazone acetone	C ₉ H ₁₂ N ₂	103-02-6	74.6
14	5-vinyl-2-norbornene	C ₉ H ₁₂	3048-64-4	42
15	ethyl 2-aminobenzoate ethyl anthranilate	C ₉ H ₁₁ NO ₂	87-25-2	59.6
16	ethyl carbanilate	C ₉ H ₁₁ NO ₂	101-99-5	84.2
17	N-methylacetanilide	C ₉ H ₁₁ NO	579-10-2	60.1
18	1-bromo-4-isopropylbenzene	C ₉ H ₁₁ Br	586-61-8	51.1
19	2-furanacrylic acid, ethyl ester	C ₉ H ₁₀ O ₃	623-20-1	56.8
20	methyl 4-methoxybenzoate	C ₉ H ₁₀ O ₃	121-98-2	61.1
21	ethyl salicylate	C ₉ H ₁₀ O ₃	118-61-6	59.2
22	3-methylbenzoic acid, methyl ester	C ₉ H ₁₀ O ₂	99-36-5	60.3
23	2-phenyl-1,3-dioxolane	C ₉ H ₁₀ O ₂	936-51-6	62.1
24	3-phenylpropionic acid	C ₉ H ₁₀ O ₂	501-52-0	67
25	phenoxymethyloxirane	C ₉ H ₁₀ O ₂	122-60-1	60.3
26	phenylacetylene	C ₈ H ₆	536-74-3	42.6
27	1,4-bistrifluoromethylbenzene	C ₈ H ₄ F ₆	433-19-2	41.8
28	perfluoroethylcyclohexane	C ₈ F ₁₆	335-21-7	37.2
29	2,5-dimethylpyridine	C ₇ H ₉ N	589-93-5	44.4
30	4-hydroxytoluene	C ₇ H ₈ O	106-44-5	62
31	2-chlorobenzaldehyde	C ₇ H ₅ ClO	89-98-5	49.8
32	1-trifluoromethyl-4-chlorobenzene	C ₇ H ₄ ClF ₃	98-56-6	42.2
33	2,3,4,5,6-pentafluorotoluene	C ₇ H ₃ F ₅	771-56-2	36.1
34	2,4-dimethyl-2-pentanol	C ₇ H ₁₆ O	625-06-9	49.7
35	4-methyl-1-hexanol	C ₇ H ₁₆ O	818-49-5	62.6
36	(dl) 2,3-dimethylpentane	C ₇ H ₁₆	565-59-3	33
37	3,3-dimethylpentane	C ₇ H ₁₆	562-49-2	34.8
38	(dl) butyric acid, 2,3-dihydroxypropyl ester	C ₇ H ₁₄ O ₃	557-25-5	80.4
39	ethyl isovalerate	C ₇ H ₁₄ O ₂	108-64-5	42.8
40	methyl hexanoate	C ₇ H ₁₄ O ₂	106-70-7	45.2
41	cis 1,2-dimethylcyclopentane	C ₇ H ₁₄	1192-18-3	35.5
42	trans 4-methyl-2-hexene	C ₇ H ₁₄	3683-22-5	33.6
43	(dl) 2,3-dimethylpent-1-ene	C ₇ H ₁₄	3404-72-6	33.4
44	ethylcyclopentane	C ₇ H ₁₄	1640-89-7	35.5
45	diethyl malonate	C ₇ H ₁₂ O ₄	105-53-3	63.3
46	butyl acrylate	C ₇ H ₁₂ O ₂	141-32-2	44.8
47	propyl methacrylate	C ₇ H ₁₂ O ₂	2210-28-8	41.6
48	1-heptyne	C ₇ H ₁₂	628-71-7	37.9

49	3-ethylcyclopentene	C ₇ H ₁₂	694-35-9	36.5
50	diallylcyanamide	C ₇ H ₁₀ N ₂	538-08-9	52.3
51	perfluoroheptane	C ₇ F ₁₆	335-57-9	37.7
52	N,N-bis 2-hydroxyethyl ethylenediamine	C ₆ H ₁₆ N ₂ O ₂	4439-20-7	91.2
53	dipropyl disulfide	C ₆ H ₁₄ S ₂	629-19-6	47
54	dipropyl sulfide	C ₆ H ₁₄ S	111-47-7	42.9
55	diisopropyl sulfide	C ₆ H ₁₄ S	625-80-9	39.4
56	2-(ethylthio)-2-methylpropane	C ₆ H ₁₄ S	14290-92-7	39.2
57	ethyl linoleate	C ₂₀ H ₃₆ O ₂	544-35-4	72.6
58	nonadecane	C ₁₉ H ₄₀	629-92-5	76.2
59	1-bromononadecane	C ₁₉ H ₃₉ Br	4434-66-6	77.9
60	nonadecanoic acid	C ₁₉ H ₃₈ O ₂	646-30-0	94.4
61	methyl stearate	C ₁₉ H ₃₈ O ₂	112-61-8	98
62	7-cyclohexyltridecane	C ₁₉ H ₃₈	13151-92-3	75.6
63	1,1-dicyclohexylheptane	C ₁₉ H ₃₆	2090-15-5	87.8
64	butyl benzyl phthalate	C ₁₉ H ₂₀ O ₄	85-68-7	89
65	octadecanal	C ₁₈ H ₃₆ O	638-66-4	75.7
66	1-octadecene	C ₁₈ H ₃₆	112-88-9	76.4
67	stearonitrile	C ₁₈ H ₃₅ N	638-65-3	78.6
68	triethylene glycol, bis(2-ethylbutyrate)	C ₁₈ H ₃₄ O ₆	95-08-9	91.7
69	dibutyl decanedioate	C ₁₈ H ₃₄ O ₄	109-43-3	106.4
70	dodecylbenzene	C ₁₈ H ₃₀	123-01-3	92
71	dipentylphthalate	C ₁₈ H ₂₆ O ₄	131-18-0	99.4
72	butylcyclohexylphthalate	C ₁₈ H ₂₄ O ₄	84-64-0	94.3
73	1,6-diphenylhexane	C ₁₈ H ₂₂	1087-49-6	88
74	1-methyl-7-isopropylphenanthrene	C ₁₈ H ₁₈	483-65-8	54
75	2-tert-butyl-9,10-anthraquinone	C ₁₈ H ₁₆ O ₂	84-47-9	101.4
76	heptadecane	C ₁₇ H ₃₆	629-78-7	91.1
77	1-bromoheptadecane	C ₁₇ H ₃₅ Br	3508-00-7	71.6
78	heptadecanoic acid	C ₁₇ H ₃₄ O ₂	506-12-7	100.7
79	isopropyl tetradecanoate	C ₁₇ H ₃₄ O ₂	110-27-0	70.2
80	undecylbenzene	C ₁₇ H ₂₈	6742-54-7	66.7
81	menthyl benzoate	C ₁₇ H ₂₄ O ₂	6284-35-1	69.9
82	4-(tert-butylphenyl) salicylate	C ₁₇ H ₁₈ O ₃	87-18-3	90.4
83	5-methyl-5H-indeno[2,1-b]quinoline	C ₁₇ H ₁₃ N	6626-64-8	122.2
84	2,3-benzofluorene	C ₁₇ H ₁₂	243-17-4	84.7
85	1,2-benzofluorene	C ₁₇ H ₁₂	238-84-6	83.7
86	benzanthrone	C ₁₇ H ₁₀ O	82-05-3	91.4
87	hexadecylamine	C ₁₆ H ₃₅ N	143-27-1	66.9
88	dioctyl disulfide	C ₁₆ H ₃₄ S ₂	822-27-5	73.9
89	1-hexadecanethiol	C ₁₆ H ₃₄ S	2917-26-2	72.4
90	1-hexadecanol	C ₁₆ H ₃₄ O	36653-82-4	100.4
91	hexadecane	C ₁₆ H ₃₄	544-76-3	68.5
92	2-methylpentadecane	C ₁₆ H ₃₄	1560-93-6	62
93	1-bromohexadecane	C ₁₆ H ₃₃ Br	112-82-3	71.9
94	hexadecanoic acid	C ₁₆ H ₃₂ O ₂	57-10-3	97.5
95	ethyl tetradecanoate	C ₁₆ H ₃₂ O ₂	124-06-1	71.8
96	butyl dodecanoate	C ₁₆ H ₃₂ O ₂	106-18-3	75.8
97	1-hexadecene	C ₁₆ H ₃₂	629-73-2	61.5
98	decylcyclohexane	C ₁₆ H ₃₂	1795-16-0	76.7
99	palmitonitrile	C ₁₆ H ₃₁ N	629-79-8	70.1

100	oxa-2-cycloheptadecanone	C ₁₆ H ₃₀ O ₂	109-29-5	71.6
101	2,6-di-tert-butyl-4-ethylphenol	C ₁₆ H ₂₆ O	4130-42-1	62.8
102	pentaethylbenzene	C ₁₆ H ₂₆	605-01-6	56.5
103	decylbenzene	C ₁₆ H ₂₆	104-72-3	78
104	dibutyl phthalate	C ₁₆ H ₂₂ O ₄	84-74-2	80.4
105	di-sec-butyl phthalate	C ₁₆ H ₂₂ O ₄	4489-61-6	93.8
106	dibutyl terephthalate	C ₁₆ H ₂₂ O ₄	1962-75-0	86.2
107	bis(α-methylbenzyl) ether	C ₁₆ H ₁₈ O	93-96-9	62.1
108	1,2,3,6,7,8-hexahdropyrene	C ₁₆ H ₁₆	1732-13-4	72
109	benzyl cinnamate	C ₁₆ H ₁₄ O ₂	103-41-3	89.4
110	1,2,3,10b-tetrahydrofluoranthene	C ₁₆ H ₁₄	20279-21-4	68
111	N-phenyl-2-naphthylamine	C ₁₆ H ₁₃ N	135-88-6	88.7
112	fluoranthene	C ₁₆ H ₁₀	206-44-0	79.3
113	pyrene	C ₁₆ H ₁₀	129-00-0	78.6
114	1-pentadecanol	C ₁₅ H ₃₂ O	629-76-5	95.5
115	pentadecane	C ₁₅ H ₃₂	629-62-9	72.9
116	2,3-dimethyltridecane	C ₁₅ H ₃₂	25117-32-2	56.1
117	1-bromopentadecane	C ₁₅ H ₃₁ Br	629-72-1	69.5
118	propyl dodecanoate	C ₁₅ H ₃₀ O ₂	3681-78-5	66.9
119	methyl tetradecanoate	C ₁₅ H ₃₀ O ₂	124-10-7	79.8
120	pentadecanoic acid	C ₁₅ H ₃₀ O ₂	1002-84-2	94
121	8-pentadecanone	C ₁₅ H ₃₀ O	818-23-5	65.3
122	decylcyclopentane	C ₁₅ H ₃₀	1795-21-7	71.1
123	1-pentadecene	C ₁₅ H ₃₀	13360-61-7	65.2
124	pentadecanolide	C ₁₅ H ₂₈ O ₂	106-02-5	78.2
125	dodecyl acrylate	C ₁₅ H ₂₈ O ₂	2156-97-0	64.6
126	guaiol	C ₁₅ H ₂₆ O	489-86-1	62.2
127	2-methyl-4-(1,1,3,3-tetramethylbutyl)phenol	C ₁₅ H ₂₄ O	2219-84-3	67.1
128	2,6-di-tert-butyl-4-methylphenol	C ₁₅ H ₂₄ O	128-37-0	87.8
129	1,3,5-triisopropylbenzene	C ₁₅ H ₂₄	717-74-8	64.3
130	di-(4-tolyl)methanol	C ₁₅ H ₁₆ O	885-77-8	81.7
131	1,3-diphenylpropane	C ₁₅ H ₁₆	1081-75-0	61.5
132	2,2'-dihydroxy-4,4-dimethoxybenzophenone	C ₁₅ H ₁₄ O ₅	131-54-4	77.4
133	2,2-diphenyl-1,3-dioxolane	C ₁₅ H ₁₄ O ₂	4359-34-6	81.2
134	1,3-diphenylacetone	C ₁₅ H ₁₄ O	102-04-5	65.7
135	1,3-diphenyl-1,3-propanedione	C ₁₅ H ₁₂ O ₂	120-46-7	60.1
136	dibenzosuberone	C ₁₅ H ₁₂ O	1210-35-1	90
137	1-methylphenanthrene	C ₁₅ H ₁₂	832-69-9	76.3
138	2-methylantracene	C ₁₅ H ₁₂	613-12-7	76.1
139	1-methylamino-9,10-anthraquinone	C ₁₅ H ₁₁ NO ₂	82-38-2	103.5
140	4,4'-diisocyanatodiphenylmethane	C ₁₅ H ₁₀ N ₂ O ₂	101-68-8	90.5
141	1,1,1-trichloro-2-(4-chlorophenyl)2-(2-chlorophenyl)ethane (p,o'DDT)	C ₁₄ H ₉ Cl ₅	789-02-6	88.6
142	1,4-dihydroxy-9,10-anthraquinone	C ₁₄ H ₈ O ₄	81-64-1	74
143	9,10-anthraquinone	C ₁₄ H ₈ O ₂	84-65-1	64.3
144	p,p'-DDE	C ₁₄ H ₈ Cl ₄	72-55-9	87.2
145	diheptylamine	C ₁₄ H ₃₁ N	2470-68-0	60
146	N,N-dimethyldodecylamine	C ₁₄ H ₃₁ N	112-18-5	69.5
147	diheptyl disulfide	C ₁₄ H ₃₀ S ₂	10496-16-9	69.8
148	1-tetradecanethiol	C ₁₄ H ₃₀ S	2079-95-0	67.3
149	1-tetradecanol	C ₁₄ H ₃₀ O	112-72-1	93.6

150	1-bromotetradecane	C ₁₄ H ₂₉ Br	112-71-0	67.1
151	tetradecanoic acid	C ₁₄ H ₂₈ O ₂	544-63-8	100.4
152	methyl tridecanoate	C ₁₄ H ₂₈ O ₂	1731-88-0	74
153	dodecyl acetate	C ₁₄ H ₂₈ O ₂	112-66-3	70.5
154	ethyl dodecanoate	C ₁₄ H ₂₈ O ₂	106-33-2	67.2
155	octylcyclohexane	C ₁₄ H ₂₈	1795-15-9	62.7
156	1-tetradecene	C ₁₄ H ₂₈	1120-36-1	56.5
157	myristonitrile	C ₁₄ H ₂₇ N	629-63-0	71.4
158	diethyl decanedioate	C ₁₄ H ₂₆ O ₄	110-40-7	74.1
159	dibutyl adipate	C ₁₄ H ₂₆ O ₄	105-99-7	68.7
160	decyl methacrylate	C ₁₄ H ₂₆ O ₂	3179-47-3	62.7
161	1-cyclohexyl-3-cyclopentylpropane	C ₁₄ H ₂₆	2883-07-0	64.5
162	1,1-dicyclohexylethane	C ₁₄ H ₂₆	2319-61-1	62.1
163	N,N'-di-sec-butyl-1,4-phenylenediamine	C ₁₄ H ₂₄ N ₂	101-96-2	70.3
164	perhydrophenanthrene	C ₁₄ H ₂₄	5743-97-5	55.7
165	2,4-di-tert-butylphenol	C ₁₄ H ₂₂ O	96-76-4	69.2
166	4-(1,1,3,3-tetramethylbutyl)phenol	C ₁₄ H ₂₂ O	140-66-9	68.8
167	α-isomethylionone	C ₁₄ H ₂₂ O	127-51-5	69.5
168	β-methylionone	C ₁₄ H ₂₂ O	127-43-5	70.3
169	2-phenyloctane	C ₁₄ H ₂₂	777-22-0	61.6
170	octylbenzene	C ₁₄ H ₂₂	2189-60-8	67.4
171	1,4-di-tert-butylbenzene	C ₁₄ H ₂₂	1012-72-2	55.8
172	1-cyclohexyl-1-phenylethane	C ₁₄ H ₂₀	4413-16-5	70.8
173	1-cyclohexyl-2-phenylethane	C ₁₄ H ₂₀	1603-61-8	60.7
174	dipropyl phthalate	C ₁₄ H ₁₈ O ₄	131-16-8	73.2
175	α-pentylcinnamaldehyde	C ₁₄ H ₁₈ O	122-40-7	75.3
176	1,2,3,4,5,6,7,8-octahydrophenanthrene	C ₁₄ H ₁₈	5325-97-3	55.8
177	1,2,3,4,5,6,7,8-octahydroanthracene	C ₁₄ H ₁₈	1079-71-6	45.6
178	dibenzylamine	C ₁₄ H ₁₅ N	103-49-1	70.5
179	4-(1-phenylethyl)phenol	C ₁₄ H ₁₄ O	1988-89-2	90.8
180	dibenzyl ether	C ₁₄ H ₁₄ O	103-50-4	45.6
181	4,4'-dimethoxyazoxybenzene	C ₁₄ H ₁₄ N ₂ O ₃	1562-94-3	73.7
182	1,1-diphenylethane	C ₁₄ H ₁₄	612-00-0	68.2
183	1,2-diphenylethane	C ₁₄ H ₁₄	103-29-7	67.4
184	2,2'-dihydroxy-4-methoxybenzophenone	C ₁₄ H ₁₂ O ₄	131-53-3	75.6
185	2-hydroxy-4-methoxybenzophenone	C ₁₄ H ₁₂ O ₃	131-57-7	74.7
186	benzyl salicylate	C ₁₄ H ₁₂ O ₃	118-58-1	78.7
187	benzyl benzoate	C ₁₄ H ₁₂ O ₂	120-51-4	59.7
188	benzyl phenyl ketone	C ₁₄ H ₁₂ O	451-40-1	68.1
189	2-methylbenzophenone	C ₁₄ H ₁₂ O	131-58-8	65.1
190	9,10-dihydrophenanthrene	C ₁₄ H ₁₂	776-35-2	64
191	cis 1,2-diphenylethylene (cis stilbene)	C ₁₄ H ₁₂	645-49-8	66.5
192	1,1-diphenylethylene	C ₁₄ H ₁₂	530-48-3	59.3
193	1-methylfluorene	C ₁₄ H ₁₂	1730-37-6	71.1
194	trans 1,2-diphenylethylene trans stilbene	C ₁₄ H ₁₂	103-30-0	65.5
195	benzoic acid anhydride	C ₁₄ H ₁₀ O ₃	93-97-0	69.1
196	benzil	C ₁₄ H ₁₀ O ₂	134-81-6	69.2
197	1,1-dichloro-2,2-bis(4-chlorophenyl)ethane p,p'-DDD	C ₁₄ H ₁₀ Cl ₄	72-54-8	88.5
198	phenanthrene	C ₁₄ H ₁₀	85-01-8	87.24
199	diphenylacetylene	C ₁₄ H ₁₀	501-65-5	63.8
200	anthracene	C ₁₄ H ₁₀	120-12-7	66.7

201	acridine	C ₁₃ H ₉ N	260-94-6	66.2
202	9-fluorenone	C ₁₃ H ₈ O	486-25-9	60.9
203	1-tridecanethiol	C ₁₃ H ₂₈ S	19484-26-5	64.7
204	1-tridecanol	C ₁₃ H ₂₈ O	112-70-9	91.1
205	tridecane	C ₁₃ H ₂₈	629-50-5	65.3
206	5-butylnonane	C ₁₃ H ₂₈	17312-63-9	52.6
207	1-bromotridecane	C ₁₃ H ₂₇ Br	765-09-3	64.6
208	decyl lactate	C ₁₃ H ₂₆ O ₃	42175-34-8	76.6
209	tridecanoic acid	C ₁₃ H ₂₆ O ₂	638-53-9	90.1
210	methyl laurate	C ₁₃ H ₂₆ O ₂	111-82-0	71.4
211	2-tridecanone	C ₁₃ H ₂₆ O	593-08-8	69.6
212	7-tridecanone	C ₁₃ H ₂₆ O	462-18-0	62.7
213	6,10-dimethyl-2-undecanone	C ₁₃ H ₂₆ O	1604-34-8	59.3
214	5-butyl-4-nonene	C ₁₃ H ₂₆	7367-38-6	55.8
215	1-tridecene	C ₁₃ H ₂₆	2437-56-1	53.9
216	1-octanoyl piperidine	C ₁₃ H ₂₅ NO	20299-83-6	50
217	tridecanonitrile	C ₁₃ H ₂₅ N	629-60-7	69.5
218	decyl acrylate	C ₁₃ H ₂₄ O ₂	2156-96-9	59.6
219	β-ionone	C ₁₃ H ₂₀ O	14901-07-6	69
220	heptylbenzene	C ₁₃ H ₂₀	1078-71-3	54
221	4,4-diaminodiphenylmethane	C ₁₃ H ₁₄ N ₂	101-77-9	109.3
222	1-isopropyl-naphthalene	C ₁₃ H ₁₄	6158-45-8	50.4
223	1,6,7-trimethyl-naphthalene	C ₁₃ H ₁₄	2245-38-7	68.6
224	2-isopropyl-naphthalene	C ₁₃ H ₁₄	2027-17-0	60.3
225	N-methyldiphenylamine	C ₁₃ H ₁₃ N	552-82-9	65.2
226	N-benzylaniline	C ₁₃ H ₁₃ N	103-32-2	79.6
227	benzyl phenyl ether	C ₁₃ H ₁₂ O	946-80-5	58.8
228	diphenylmethanol	C ₁₃ H ₁₂ O	91-01-0	65.4
229	ethyl 1-naphthyl ketone	C ₁₃ H ₁₂ O	2876-63-3	74.1
230	diphenylmethane	C ₁₃ H ₁₂	101-81-5	64.1
231	2-(2'-hydroxy-5'-methylphenyl)benzotriazole	C ₁₃ H ₁₁ N ₃ O	2440-22-4	70.6
232	9-methylcarbazole	C ₁₃ H ₁₁ N	1484-12-4	73.4
233	chlorodiphenylmethane	C ₁₃ H ₁₁ Cl	90-99-3	70.4
234	2,4-dihydroxybenzophenone	C ₁₃ H ₁₀ O ₃	131-56-6	87.1
235	phenyl salicyate	C ₁₃ H ₁₀ O ₃	118-55-8	69.9
236	phenylbenzoate	C ₁₃ H ₁₀ O ₂	93-99-2	62.4
237	xanthene	C ₁₃ H ₁₀ O	92-83-1	88.7
238	9-hydroxyfluorene	C ₁₃ H ₁₀ O	1689-64-1	50.4
239	benzophenone	C ₁₃ H ₁₀ O	119-61-9	59
240	N,N-diphenylcarbodiimide	C ₁₃ H ₁₀ N ₂	622-16-2	65.6
241	fluorene	C ₁₃ H ₁₀	86-73-7	66.9
242	carbazole	C ₁₂ H ₉ N	86-74-8	65.7
243	2-chloro-6-phenylphenol	C ₁₂ H ₉ ClO	85-97-2	67.6
244	4-chlorobiphenyl	C ₁₂ H ₉ Cl	2051-62-9	66.8
245	2-chlorobiphenyl	C ₁₂ H ₉ Cl	2051-60-7	64.4
246	2-bromo-4-phenylphenol	C ₁₂ H ₉ BrO	92-03-5	57.8
247	3-bromodiphenyl ether	C ₁₂ H ₉ BrO	6876-00-2	65.4
248	4-bromodiphenyl ether	C ₁₂ H ₉ BrO	101-55-3	64.6
249	4-bromobiphenyl	C ₁₂ H ₉ Br	92-66-0	62.2
250	thianthrene	C ₁₂ H ₈ S ₂	92-85-3	71.2
251	phenoxathiin	C ₁₂ H ₈ OS	262-20-4	68.7

252	dibenzofuran	C ₁₂ H ₈ O	132-64-9	66.2
253	Dieldrin	C ₁₂ H ₈ Cl ₆	60-57-1	82.5
254	Aldrin	C ₁₂ H ₈ Cl ₆	309-00-2	75.1
255	4,4-dichlorodiphenylsulfone	C ₁₂ H ₈ Cl ₂ O ₂ S	80-07-9	59.7
256	4,4-dichlorobiphenyl	C ₁₂ H ₈ Cl ₂	2050-68-2	76
257	4,4-dibromodiphenyl ether	C ₁₂ H ₈ Br ₂ O	2050-47-7	78
258	2,2,4,4-tetrabromodiphenyl ether	C ₁₂ H ₆ Br ₄ O	5436-43-1	92
259	tributyl phosphine	C ₁₂ H ₂₇ P	998-40-3	51.7
260	tributyl phosphate	C ₁₂ H ₂₇ O ₄ P	126-73-8	61.4
261	triisobutyl phosphate	C ₁₂ H ₂₇ O ₄ P	126-71-6	62.8
262	dihexylamine	C ₁₂ H ₂₇ N	143-16-8	55.1
263	N,N-dimethyldecylamine	C ₁₂ H ₂₇ N	1120-24-7	55.2
264	dihexyl disulfide	C ₁₂ H ₂₆ S ₂	10496-15-8	64.9
265	1-dodecanethiol	C ₁₂ H ₂₆ S	112-55-0	62
266	dihexyl ether	C ₁₂ H ₂₆ O	112-58-3	64.1
267	1-dodecanol	C ₁₂ H ₂₆ O	112-53-8	84.76
268	5-dodecanol	C ₁₂ H ₂₆ O	10203-33-5	79.4
269	4-dodecanol	C ₁₂ H ₂₆ O	10203-32-4	80.6
270	(dl) 3-dodecanol	C ₁₂ H ₂₆ O	10203-30-2	78.3
271	2-dodecanol	C ₁₂ H ₂₆ O	10203-28-8	87
272	5-methylundecane	C ₁₂ H ₂₆	1632-70-8	50.3
273	dodecane	C ₁₂ H ₂₆	112-40-3	61.4
274	1-iodododecane	C ₁₂ H ₂₅ I	4292-19-7	63.5
275	1-chlorododecane	C ₁₂ H ₂₅ Cl	112-52-7	62.4
276	1-bromododecane	C ₁₂ H ₂₅ Br	143-15-7	62.2
277	dodecanoic acid	C ₁₂ H ₂₄ O ₂	143-07-7	88.8
278	decyl acetate	C ₁₂ H ₂₄ O ₂	112-17-4	61.9
279	ethyl decanoate	C ₁₂ H ₂₄ O ₂	110-38-3	59.6
280	cyclododecanol	C ₁₂ H ₂₄ O	1724-39-6	68.8
281	dodecanal	C ₁₂ H ₂₄ O	112-54-9	56.5
282	1-dodecene	C ₁₂ H ₂₄	112-41-4	51.1
283	lauronitrile	C ₁₂ H ₂₃ N	2437-25-4	60.7
284	dicyclohexylamine	C ₁₂ H ₂₃ N	101-83-7	54
285	dibutyl tartrate	C ₁₂ H ₂₂ O ₆	87-92-3	79.8
286	diisopentyl oxalate	C ₁₂ H ₂₂ O ₄	2051-00-5	58.6
287	dipropyl adipate	C ₁₂ H ₂₂ O ₄	106-19-4	63.6
288	citronellyl acetate	C ₁₂ H ₂₂ O ₂	150-84-5	68.7
289	methyl 10-undecenoate	C ₁₂ H ₂₂ O ₂	111-81-9	59.2
290	cyclododecanone	C ₁₂ H ₂₂ O	830-13-7	61
291	cis bicyclohexyl	C ₁₂ H ₂₂	92-51-3	53.8
292	6-dodecyne	C ₁₂ H ₂₂	6975-99-1	60.9
293	triethyl citrate	C ₁₂ H ₂₀ O ₇	77-93-0	68.2
294	dibutyl maleate	C ₁₂ H ₂₀ O ₄	105-76-0	41.1
295	bornyl acetate	C ₁₂ H ₂₀ O ₂	76-49-3	50.8
296	isobornyl acetate	C ₁₂ H ₂₀ O ₂	125-12-2	56.1
297	3,7-dimethyl-1,6-octadien-3-ol acetate	C ₁₂ H ₂₀ O ₂	115-95-7	57.8
298	geranyl acetate	C ₁₂ H ₂₀ O ₂	105-87-3	58.1
299	3,4-dihydro-2,2-dimethyl-4-oxo-2H-pyran-6-carboxylic acid, butyl ester	C ₁₂ H ₁₈ O ₄	532-34-3	64.7
300	1,3-dihydroxy-4-hexylbenzene	C ₁₂ H ₁₈ O ₂	136-77-6	88.1
301	2,4-dimethyl-6-tert-butylphenol	C ₁₂ H ₁₈ O	1879-09-0	54.4

302	1,3-dimethyl-5-tert-butylbenzene	C ₁₂ H ₁₈	98-19-1	59.8
303	hexamethylbenzene	C ₁₂ H ₁₈	87-85-4	56.8
304	1-cis-5-trans-9-trans-cyclododecatriene	C ₁₂ H ₁₈	4904-61-4	49.9
305	hexylbenzene	C ₁₂ H ₁₈	1077-16-3	61.6
306	1,4-diisopropylbenzene	C ₁₂ H ₁₈	100-18-5	47.6
307	N-butylacetanilide	C ₁₂ H ₁₇ NO	91-49-6	60.2
308	isopentyl salicylate	C ₁₂ H ₁₆ O ₃	87-20-7	73
309	pentyl salicylate	C ₁₂ H ₁₆ O ₃	2050-08-0	66.5
310	isopentyl benzoate	C ₁₂ H ₁₆ O ₂	94-46-2	51.6
311	cyclohexylbenzene	C ₁₂ H ₁₆	827-52-1	56.4
312	1-isopropenyl-4-isopropylbenzene	C ₁₂ H ₁₆	2388-14-9	50.9
313	diethyl phthalate	C ₁₂ H ₁₄ O ₄	84-66-2	86.8
314	1,3-benzodioxole	C ₁₂ H ₁₄ O ₄	523-80-8	70.6
315	1-acetoxy-2-methoxy-4-allylbenzene	C ₁₂ H ₁₄ O ₃	93-28-7	63.1
316	2-cyclohexyl-4,6-dinitrophenol	C ₁₂ H ₁₄ N ₂ O ₅	131-89-5	88.6
317	2,4-dichlorophenoxyacetic acid, butyl ester	C ₁₂ H ₁₄ Cl ₂ O ₃	94-80-4	76.3
318	2,4,5-trichlorophenoxyacetic acid, butyl ester	C ₁₂ H ₁₃ Cl ₃ O ₃	93-79-8	87.3
319	1,3,5-benzenetricarboxylic acid, trimethyl ester	C ₁₂ H ₁₂ O ₆	2672-58-4	75.4
320	2-ethylnaphthalene	C ₁₂ H ₁₂	939-27-5	64.7
321	2,7-dimethylnaphthalene	C ₁₂ H ₁₂	582-16-1	57.3
322	2,6-dimethylnaphthalene	C ₁₂ H ₁₂	581-42-0	57.3
323	2,3-dimethylnaphthalene	C ₁₂ H ₁₂	581-40-8	60
324	1,6-dimethylnaphthalene	C ₁₂ H ₁₂	575-43-9	63.6
325	1-ethylnaphthalene	C ₁₂ H ₁₂	1127-76-0	57.3
326	2-aminobiphenyl	C ₁₂ H ₁₁ N	90-41-5	68.6
327	diphenylamine	C ₁₂ H ₁₁ N	122-39-4	64.1
328	diphenyl disulfide	C ₁₂ H ₁₀ S ₂	882-33-7	72.4
329	diphenyl sulfide	C ₁₂ H ₁₀ S	139-66-2	60.5
330	3-phenoxyphenol	C ₁₂ H ₁₀ O ₂	713-68-8	69.5
331	2,2-dihydroxybiphenyl	C ₁₂ H ₁₀ O ₂	1806-29-7	61.7
332	1-acetylnaphthalene	C ₁₂ H ₁₀ O	941-98-0	65.4
333	2-acetylnaphthalene	C ₁₂ H ₁₀ O	93-08-3	74.1
334	4-hydroxybiphenyl	C ₁₂ H ₁₀ O	92-69-3	72.3
335	2-hydroxybiphenyl	C ₁₂ H ₁₀ O	90-43-7	94.2
336	diphenyl ether	C ₁₂ H ₁₀ O	101-84-8	67.1
337	biphenyl	C ₁₂ H ₁₀	92-52-4	57.4
338	acenaphthene	C ₁₂ H ₁₀	83-32-9	63.9
339	perfluorotributylamine	C ₁₂ F ₂₇ N	311-89-7	57.4
340	decafluorobiphenyl	C ₁₂ F ₁₀	434-90-2	49.9
341	1-undecanethiol	C ₁₁ H ₂₄ S	5332-52-5	59.3
342	2,2,4-trimethyl-3-isopropyl-3-pentanol	C ₁₁ H ₂₄ O	5457-41-0	67.1
343	1-undecanol	C ₁₁ H ₂₄ O	112-42-5	79.5
344	2-methyldecane	C ₁₁ H ₂₄	6975-98-0	55.5
345	undecane	C ₁₁ H ₂₄	1120-21-4	56.2
346	butyl 3-butoxypropionate	C ₁₁ H ₂₂ O ₃	14144-48-0	57.6
347	propyl caprylate	C ₁₁ H ₂₂ O ₂	624-13-5	58.8
348	isopropyl caprylate	C ₁₁ H ₂₂ O ₂	5458-59-3	57.5
349	undecanoic acid	C ₁₁ H ₂₂ O ₂	112-37-8	81.3
350	methyl decanoate methyl caprate	C ₁₁ H ₂₂ O ₂	110-42-9	62
351	undecanal	C ₁₁ H ₂₂ O	112-44-7	69.3
352	2-undecanone	C ₁₁ H ₂₂ O	112-12-9	51.5

353	bispiperidinomethane	C ₁₁ H ₂₂ O ₂	880-09-1	61.9
354	1-undecene	C ₁₁ H ₂₂	821-95-4	55.4
355	trans 4-undecene	C ₁₁ H ₂₂	693-62-9	52.1
356	diethyl diethylmalonate	C ₁₁ H ₂₀ O ₄	77-25-8	68.5
357	azelaic acid, dimethyl ester	C ₁₁ H ₂₀ O ₄	1732-10-1	63.6
358	octyl acrylate	C ₁₁ H ₂₀ O ₂	2499-59-4	56.2
359	10-undecenoic acid	C ₁₁ H ₂₀ O ₂	112-38-9	70.6
360	(dl) 2-ethylhexyl acrylate	C ₁₁ H ₂₀ O ₂	103-11-7	55.3
361	cycloundecanone	C ₁₁ H ₂₀ O	878-13-7	60.3
362	cyclopentylcyclohexane	C ₁₁ H ₂₀	1606-08-2	47.9
363	3,7-dimethyl-trans-2,6-octadienyl formate	C ₁₁ H ₁₈ O ₂	105-86-2	57.1
364	4-tert-butyl-2-methylphenol	C ₁₁ H ₁₆ O	98-27-1	71.3
365	2-tert-butyl-5-methylphenol	C ₁₁ H ₁₆ O	88-60-8	65.9
366	2-2-pentylphenol	C ₁₁ H ₁₆ O	87-26-3	59.6
367	4-tert-pentylphenol	C ₁₁ H ₁₆ O	80-46-6	64.2
368	2-tert-butyl-4-methylphenol	C ₁₁ H ₁₆ O	2409-55-4	63
369	2-tert-butyl-6-methylphenol	C ₁₁ H ₁₆ O	2219-82-1	62.2
370	5-phenyl-1-pentanol	C ₁₁ H ₁₆ O	10521-91-2	58.2
371	1-tert-butyl-4-methylbenzene	C ₁₁ H ₁₆	98-51-1	52.3
372	pentamethylbenzene	C ₁₁ H ₁₆	700-12-9	57.8
373	3,5-diethyltoluene	C ₁₁ H ₁₆	2050-24-0	49.6
374	1-tert-butyl-3-methylbenzene	C ₁₁ H ₁₆	1075-38-3	51.4
375	N,N-diethylbenzamide	C ₁₁ H ₁₅ NO	1696-17-9	56.5
376	N-phenylpiperidine	C ₁₁ H ₁₅ N	4096-20-2	64
377	1,2-dimethoxy-4-1-propenylbenzene	C ₁₁ H ₁₄ O ₂	93-16-3	61.9
378	1-4-methoxyphenyl-2-butanone	C ₁₁ H ₁₄ O ₂	53917-01-4	62.6
379	ethyl 2-phenylpropionate	C ₁₁ H ₁₄ O ₂	2510-99-8	63.2
380	isobutyl benzoate	C ₁₁ H ₁₄ O ₂	136-60-7	60.4
381	butyl benzoate	C ₁₁ H ₁₄ O ₂	120-50-3	63.2
382	isobutyl phenyl ketone	C ₁₁ H ₁₄ O	582-62-7	55.7
383	2,4,6-trimethylstyrene	C ₁₁ H ₁₄	769-25-5	50.9
384	4,7-dimethylindane	C ₁₁ H ₁₄	6682-71-9	54.7
385	1,1-dimethylindane	C ₁₁ H ₁₄	4912-92-9	50.1
386	4,6-dimethylindane	C ₁₁ H ₁₄	1685-82-1	56.9
387	6-methyl-1,2,3,4-tetrahydronaphthalene	C ₁₁ H ₁₄	1680-51-9	53.7
388	benzoylacetic acid, ethyl ester	C ₁₁ H ₁₂ O ₃	94-02-0	72.1
389	N,N-dimethyloctylamine	C ₁₀ H ₂₃ N	7378-99-6	54
390	dipentylamine	C ₁₀ H ₂₃ N	2050-92-2	51.2
391	1,10-decanedithiol	C ₁₀ H ₂₂ S ₂	1191-67-9	72.3
392	1-decanethiol	C ₁₀ H ₂₂ S	143-10-2	56.4
393	tetraethylene glycol dimethyl ether tetraglyme	C ₁₀ H ₂₂ O ₅	143-24-8	58
394	diethylene glycol monohexyl ether	C ₁₀ H ₂₂ O ₃	112-59-4	62.7
395	acetaldehyde dibutyl ether	C ₁₀ H ₂₂ O ₂	871-22-7	47.3
396	3,4-diethyl-3,4-hexanediol	C ₁₀ H ₂₂ O ₂	6931-71-1	54.7
397	dipentyl ether	C ₁₀ H ₂₂ O	693-65-2	46.2
398	diisopentyl ether	C ₁₀ H ₂₂ O	544-01-4	47.6
399	1-decanol	C ₁₀ H ₂₂ O	112-30-1	79.5
400	(dl) 3,7-dimethyl-1-octanol	C ₁₀ H ₂₂ O	106-21-8	79.1
401	decane	C ₁₀ H ₂₂	124-18-5	46.6
402	N,N-diethylhexanamide	C ₁₀ H ₂₁ NO	6282-97-9	47.7
403	N,-dimethylcyclohexanethylamine	C ₁₀ H ₂₁ N	101-40-6	50.2

404	1-chlorodecane	C ₁₀ H ₂₁ Cl	1002-69-3	54.4
405	1-bromodecane	C ₁₀ H ₂₁ Br	112-29-8	56.1
406	diethylene glycol monobutyl ether acetate	C ₁₀ H ₂₀ O ₄	124-17-4	57.7
407	isopentyl isovalerate	C ₁₀ H ₂₀ O ₂	659-70-1	46.4
408	neopentyl pivalate	C ₁₀ H ₂₀ O ₂	5340-26-1	49.1
409	decanoic acid capric acid	C ₁₀ H ₂₀ O ₂	334-48-5	76.4
410	octyl acetate	C ₁₀ H ₂₀ O ₂	112-14-1	54.9
411	ethyl octanoate	C ₁₀ H ₂₀ O ₂	106-32-1	53.2
412	2-ethylhexylacetate	C ₁₀ H ₂₀ O ₂	103-09-3	50.1
413	1-butylcyclohexanol	C ₁₀ H ₂₀ O	5445-30-7	55.7
414	1 menthol	C ₁₀ H ₂₀ O	2216-51-5	59.1
415	decanal	C ₁₀ H ₂₀ O	112-31-2	57.3
416	3,7-dimethyl-6-octene-1-ol	C ₁₀ H ₂₀ O	106-22-9	72.6
417	2-ethylhexyl vinyl ether	C ₁₀ H ₂₀ O	103-44-6	44.7
418	1,10-dichlorodecane	C ₁₀ H ₂₀ Cl ₂	2162-98-3	61.1
419	1-decene	C ₁₀ H ₂₀	872-05-9	43.8
420	cis 5-decene	C ₁₀ H ₂₀	7433-78-5	42.9
421	trans 5-decene	C ₁₀ H ₂₀	7433-56-9	42.3
422	trans 2-decene	C ₁₀ H ₂₀	20063-97-2	43.7
423	decanenitrile caprinitrile	C ₁₀ H ₁₉ N	1975-78-6	58
424	spiro4.5decane	C ₁₀ H ₁₈	176-63-6	44
425	d 1-isopropyl-4-methylbicyclo3.1.0hexan-3-one thujone	C ₁₀ H ₁₆ O	471-15-8	51.8
426	sebaconitrile	C ₁₀ H ₁₆ N ₂	1871-96-1	83.7
427	(dl) camphene	C ₁₀ H ₁₆	79-92-5	44
428	tetrahydrodicyclopentadiene	C ₁₀ H ₁₆	6004-38-2	43.5
429	7-methyl-3-methylene-1,6-octadiene myrcene	C ₁₀ H ₁₆	123-35-3	47
430	N,N-bis(2-hydroxyethyl)aniline	C ₁₀ H ₁₅ NO ₂	120-07-0	77.6
431	N,N-diethylaniline	C ₁₀ H ₁₅ N	91-66-7	54.5
432	N,N-dimethylphenethylamine	C ₁₀ H ₁₅ N	537-46-2	52.8
433	5-isopropyl-2-methylaniline	C ₁₀ H ₁₅ N	2051-53-8	72
434	N-butylaniline	C ₁₀ H ₁₅ N	1126-78-9	55.6
435	trimethyl orthobenzoate	C ₁₀ H ₁₄ O ₃	707-07-3	58.6
436	2-methoxy-4-propylphenol	C ₁₀ H ₁₄ O ₂	2785-87-7	78
437	ethyl levulinate	C ₇ H ₁₂ O ₃	539-88-8	58.3
438	diheptyl ether	C ₁₄ H ₃₀ O	629-64-1	63.1

Compound	Molecular formula	CAS	(Δ vapH (kJ/mol))	Pred (Δ vapH (kJ/mol))	Residual
(dl) 2,3-dimethylpentane	C ₇ H ₁₆	565-59-3	33.000	37.133	-4.133
(dl) 2,3-dimethylpent-1-ene	C ₇ H ₁₄	3404-72-6	33.400	38.416	-5.016
trans 4-methyl-2-hexene	C ₇ H ₁₄	3683-22-5	33.600	35.618	-2.018
3,3-dimethylpentane	C ₇ H ₁₆	562-49-2	34.800	41.501	-6.701
cis 1,2-dimethylcyclopentane	C ₇ H ₁₄	1192-18-3	35.500	34.704	0.796
ethylcyclopentane	C ₇ H ₁₄	1640-89-7	35.500	35.968	-0.468
2,3,4,5,6-pentafluorotoluene	C ₇ H ₃ F ₅	771-56-2	36.100	35.539	0.561

3-ethylcyclopentene	C ₇ H ₁₂	694-35-9	36.500	35.917	0.583
perfluoroethylcyclohexane	C ₈ F ₁₆	335-21-7	37.200	35.585	1.615
perfluoroheptane	C ₇ F ₁₆	335-57-9	37.700	44.976	-7.276
1-heptyne	C ₇ H ₁₂	628-71-7	37.900	41.573	-3.673
2-(ethylthio)-2-methylpropane	C ₆ H ₁₄ S	14290-92-7	39.200	35.325	3.875
diisopropyl sulfide	C ₆ H ₁₄ S	625-80-9	39.400	37.043	2.357
dibutyl maleate	C ₁₂ H ₂₀ O ₄	105-76-0	41.100	66.033	-24.933
propyl methacrylate	C ₇ H ₁₂ O ₂	2210-28-8	41.600	44.055	-2.455
1,4-bistrifluoromethylbenzene	C ₈ H ₄ F ₆	433-19-2	41.800	48.600	-6.800
5-vinyl-2-norbornene	C ₉ H ₁₂	3048-64-4	42.000	39.947	2.053
1-trifluoromethyl-4-chlorobenzene	C ₇ H ₄ ClF ₃	98-56-6	42.200	51.503	-9.303
trans 5-decene	C ₁₀ H ₂₀	7433-56-9	42.300	43.893	-1.593
phenylacetylene	C ₈ H ₆	536-74-3	42.600	48.043	-5.443
ethyl isovalerate	C ₇ H ₁₄ O ₂	108-64-5	42.800	44.708	-1.908
dipropyl sulfide	C ₆ H ₁₄ S	111-47-7	42.900	42.956	-0.056
cis 5-decene	C ₁₀ H ₂₀	7433-78-5	42.900	43.950	-1.050
tetrahydrodicyclopentadiene	C ₁₀ H ₁₆	6004-38-2	43.500	41.866	1.634
trans 2-decene	C ₁₀ H ₂₀	20063-97-2	43.700	43.721	-0.021
1-decene	C ₁₀ H ₂₀	872-05-9	43.800	46.453	-2.653
spiro4.5decane	C ₁₀ H ₁₈	176-63-6	44.000	47.542	-3.542
(dl) camphene	C ₁₀ H ₁₆	79-92-5	44.000	47.601	-3.601
2,5-dimethylpyridine	C ₇ H ₉ N	589-93-5	44.400	44.395	0.005
2-ethylhexyl vinyl ether	C ₁₀ H ₂₀ O	103-44-6	44.700	47.599	-2.899
butyl acrylate	C ₇ H ₁₂ O ₂	141-32-2	44.800	44.959	-0.159
methyl hexanoate	C ₇ H ₁₄ O ₂	106-70-7	45.200	47.688	-2.488
1,2,3,4,5,6,7,8-octahydroanthracene	C ₁₄ H ₁₈	1079-71-6	45.600	60.297	-14.697
dibenzyl ether	C ₁₄ H ₁₄ O	103-50-4	45.600	71.464	-25.864
dipentyl ether	C ₁₀ H ₂₂ O	693-65-2	46.200	48.013	-1.813
isopentyl isovalerate	C ₁₀ H ₂₀ O ₂	659-70-1	46.400	51.479	-5.079
decane	C ₁₀ H ₂₂	124-18-5	46.600	50.760	-4.160
dipropyl disulfide	C ₆ H ₁₄ S ₂	629-19-6	47.000	43.090	3.910
7-methyl-3-methylene-1,6-octadiene myrcene	C ₁₀ H ₁₆	123-35-3	47.000	46.745	0.255
acetaldehyde dibutyl ether	C ₁₀ H ₂₂ O ₂	871-22-7	47.300	47.660	-0.360
1,4-diisopropylbenzene	C ₁₂ H ₁₈	100-18-5	47.600	48.385	-0.785
diisopentyl ether	C ₁₀ H ₂₂ O	544-01-4	47.600	50.271	-2.671
N,N-diethylhexanamide	C ₁₀ H ₂₁ NO	6282-97-9	47.700	56.888	-9.188
cyclopentylcyclohexane	C ₁₁ H ₂₀	1606-08-2	47.900	44.077	3.823
benzyl ethyl ether	C ₉ H ₁₂ O	539-30-0	48.000	49.955	-1.955
neopentyl pivalate	C ₁₀ H ₂₀ O ₂	5340-26-1	49.100	51.973	-2.873
3-ethylanisole	C ₉ H ₁₂ O	10568-38-4	49.300	55.480	-6.180
3,5-diethyltoluene	C ₁₁ H ₁₆	2050-24-0	49.600	54.533	-4.933
2,4-dimethyl-2-pentanol	C ₇ H ₁₆ O	625-06-9	49.700	47.713	1.987
2-chlorobenzaldehyde	C ₇ H ₅ ClO	89-98-5	49.800	45.620	4.180
1-cis-5-trans-9-trans-cyclododecatriene	C ₁₂ H ₁₈	4904-61-4	49.900	49.724	0.176
decafluorobiphenyl	C ₁₂ F ₁₀	434-90-2	49.900	50.342	-0.442
1-octanoyl piperidine	C ₁₃ H ₂₅ NO	20299-83-6	50.000	74.530	-24.530

1,1-dimethylindane	C ₁₁ H ₁₄	4912-92-9	50.100	54.097	-3.997
2-ethylhexylacetate	C ₁₀ H ₂₀ O ₂	103-09-3	50.100	55.076	-4.976
Benzedrex	C ₁₀ H ₂₁ N	101-40-6	50.200	57.089	-6.889
5-methylundecane	C ₁₂ H ₂₆	1632-70-8	50.300	54.741	-4.441
1-isopropyl-naphthalene	C ₁₃ H ₁₄	6158-45-8	50.400	59.386	-8.986
9-hydroxyfluorene	C ₁₃ H ₁₀ O	1689-64-1	50.400	76.329	-25.929
bornyl acetate	C ₁₂ H ₂₀ O ₂	76-49-3	50.800	58.157	-7.357
1-isopropenyl-4-isopropylbenzene	C ₁₂ H ₁₆	2388-14-9	50.900	47.863	3.037
2,4,6-trimethylstyrene	C ₁₁ H ₁₄	769-25-5	50.900	50.568	0.332
1-bromo-4-isopropylbenzene	C ₉ H ₁₁ Br	586-61-8	51.100	51.614	-0.514
1-dodecene	C ₁₂ H ₂₄	112-41-4	51.100	52.988	-1.888
dipentylamine	C ₁₀ H ₂₃ N	2050-92-2	51.200	53.787	-2.587
1-tert-butyl-3-methylbenzene	C ₁₁ H ₁₆	1075-38-3	51.400	54.083	-2.683
2-undecanone	C ₁₁ H ₂₂ O	112-12-9	51.500	63.380	-11.880
isopentyl benzoate	C ₁₂ H ₁₆ O ₂	94-46-2	51.600	62.768	-11.168
tributyl phosphine	C ₁₂ H ₂₇ P	998-40-3	51.700	57.588	-5.888
d 1-isopropyl-4-methylbicyclo3.1.0hexan-3-one thujone	C ₁₀ H ₁₆ O	471-15-8	51.800	50.939	0.861
4-ethylanisole	C ₉ H ₁₂ O	1515-95-3	51.900	55.480	-3.580
trans 4-undecene	C ₁₁ H ₂₂	693-62-9	52.100	51.243	0.857
diallylcyanamide	C ₇ H ₁₀ N ₂	538-08-9	52.300	40.821	11.479
1-tert-butyl-4-methylbenzene	C ₁₁ H ₁₆	98-51-1	52.300	54.083	-1.783
5-butyl-nonane	C ₁₃ H ₂₈	17312-63-9	52.600	61.749	-9.149
Methamphetamine	C ₁₀ H ₁₅ N	537-46-2	52.800	60.312	-7.512
ethyl octanoate	C ₁₀ H ₂₀ O ₂	106-32-1	53.200	56.123	-2.923
6-methyl-1,2,3,4-tetrahydronaphthalene	C ₁₁ H ₁₄	1680-51-9	53.700	49.889	3.811
cis bicyclohexyl	C ₁₂ H ₂₂	92-51-3	53.800	54.055	-0.255
1-tridecene	C ₁₃ H ₂₆	2437-56-1	53.900	55.656	-1.756
1-methyl-7-isopropylphenanthrene	C ₁₈ H ₁₈	483-65-8	54.000	53.447	0.553
heptylbenzene	C ₁₃ H ₂₀	1078-71-3	54.000	57.037	-3.037
dicyclohexylamine	C ₁₂ H ₂₃ N	101-83-7	54.000	57.826	-3.826
N,N-dimethyloctylamine	C ₁₀ H ₂₃ N	7378-99-6	54.000	71.954	-17.954
2,4-dimethyl-6-tert-butylphenol	C ₁₂ H ₁₈ O	1879-09-0	54.400	56.363	-1.963
1-chlorodecane	C ₁₀ H ₂₁ Cl	1002-69-3	54.400	63.366	-8.966
N,N-diethylaniline	C ₁₀ H ₁₅ N	91-66-7	54.500	50.936	3.564
4,7-dimethylindane	C ₁₁ H ₁₄	6682-71-9	54.700	52.652	2.048
3,4-diethyl-3,4-hexanediol	C ₁₀ H ₂₂ O ₂	6931-71-1	54.700	68.254	-13.554
octyl acetate	C ₁₀ H ₂₀ O ₂	112-14-1	54.900	56.879	-1.979
2,3,5-trimethylphenol	C ₉ H ₁₂ O	697-82-5	55.100	53.078	2.022
dihexylamine	C ₁₂ H ₂₇ N	143-16-8	55.100	59.408	-4.308
N,N-dimethyldecylamine	C ₁₂ H ₂₇ N	1120-24-7	55.200	57.633	-2.433
(dl) 2-ethylhexyl acrylate	C ₁₁ H ₂₀ O ₂	103-11-7	55.300	54.741	0.559
1-undecene	C ₁₁ H ₂₂	821-95-4	55.400	50.377	5.023
2-methyldecane	C ₁₁ H ₂₄	6975-98-0	55.500	55.899	-0.399
N-butylaniline	C ₁₀ H ₁₅ N	1126-78-9	55.600	54.420	1.180
perhydrophenanthrene	C ₁₄ H ₂₄	5743-97-5	55.700	53.645	2.055

isobutyl phenyl ketone	C ₁₁ H ₁₄ O	582-62-7	55.700	56.657	-0.957
1-butylcyclohexanol	C ₁₀ H ₂₀ O	5445-30-7	55.700	59.424	-3.724
1,4-di-tert-butylbenzene	C ₁₄ H ₂₂	1012-72-2	55.800	58.090	-2.290
1,2,3,4,5,6,7,8-octahydrophenanthrene	C ₁₄ H ₁₈	5325-97-3	55.800	60.757	-4.957
5-butyl-4-nonene	C ₁₃ H ₂₆	7367-38-6	55.800	62.296	-6.496
2,3-dimethyltridecane	C ₁₅ H ₃₂	25117-32-2	56.100	53.303	2.797
isobornyl acetate	C ₁₂ H ₂₀ O ₂	125-12-2	56.100	55.678	0.422
1-bromodecane	C ₁₀ H ₂₁ Br	112-29-8	56.100	63.315	-7.215
undecane	C ₁₁ H ₂₄	1120-21-4	56.200	56.145	0.055
octyl acrylate	C ₁₁ H ₂₀ O ₂	2499-59-4	56.200	57.426	-1.226
cyclohexylbenzene	C ₁₂ H ₁₆	827-52-1	56.400	56.087	0.313
1-decanethiol	C ₁₀ H ₂₂ S	143-10-2	56.400	57.164	-0.764
pentaethylbenzene	C ₁₆ H ₂₆	605-01-6	56.500	58.324	-1.824
dodecanal	C ₁₂ H ₂₄ O	112-54-9	56.500	59.943	-3.443
N,N-diethylbenzamide	C ₁₁ H ₁₅ NO	1696-17-9	56.500	67.117	-10.617
4-propylphenol	C ₉ H ₁₂ O	645-56-7	56.700	55.489	1.211
2-furanacrylic acid, ethyl ester	C ₉ H ₁₀ O ₃	623-20-1	56.800	46.445	10.355
hexamethylbenzene	C ₁₂ H ₁₈	87-85-4	56.800	61.272	-4.472
2-propylphenol	C ₉ H ₁₂ O	644-35-9	56.900	52.652	4.248
4,6-dimethylindane	C ₁₁ H ₁₄	1685-82-1	56.900	55.832	1.068
3,7-dimethyl-trans-2,6-octadienyl formate	C ₁₁ H ₁₈ O ₂	105-86-2	57.100	52.305	4.795
2,7-dimethylnaphthalene	C ₁₂ H ₁₂	582-16-1	57.300	55.149	2.151
2,6-dimethylnaphthalene	C ₁₂ H ₁₂	581-42-0	57.300	57.553	-0.253
1-ethylnaphthalene	C ₁₂ H ₁₂	1127-76-0	57.300	57.610	-0.310
decanal	C ₁₀ H ₂₀ O	112-31-2	57.300	58.416	-1.116
biphenyl	C ₁₂ H ₁₀	92-52-4	57.400	52.952	4.448
perfluorotributylamine	C ₁₂ F ₂₇ N	311-89-7	57.400	57.133	0.267
isopropyl caprylate	C ₁₁ H ₂₂ O ₂	5458-59-3	57.500	56.072	1.428
butyl 3-butoxypropionate	C ₁₁ H ₂₂ O ₃	14144-48-0	57.600	59.211	-1.611
diethylene glycol monobutyl ether acetate	C ₁₀ H ₂₀ O ₄	124-17-4	57.700	54.483	3.217
2-bromo-4-phenylphenol	C ₁₂ H ₉ BrO	92-03-5	57.800	50.122	7.678
3,7-dimethyl-1,6-octadien-3-ol acetate	C ₁₂ H ₂₀ O ₂	115-95-7	57.800	55.742	2.058
pentamethylbenzene	C ₁₁ H ₁₆	700-12-9	57.800	75.052	-17.252
tetraethylene glycol dimethyl ether tetraglyme	C ₁₀ H ₂₂ O ₅	143-24-8	58.000	52.277	5.723
decanenitrile caprinitrile	C ₁₀ H ₁₉ N	1975-78-6	58.000	56.535	1.465
geranyl acetate	C ₁₂ H ₂₀ O ₂	105-87-3	58.100	59.138	-1.038
5-phenyl-1-pentanol	C ₁₁ H ₁₆ O	10521-91-2	58.200	73.428	-15.228
ethyl levulinate	C ₇ H ₁₂ O ₃	539-88-8	58.300	51.247	7.053
diisopentyl oxalate	C ₁₂ H ₂₂ O ₄	2051-00-5	58.600	58.233	0.367
trimethyl orthobenzoate	C ₁₀ H ₁₄ O ₃	707-07-3	58.600	59.754	-1.154
benzyl phenyl ether	C ₁₃ H ₁₂ O	946-80-5	58.800	59.314	-0.514
propyl caprylate	C ₁₁ H ₂₂ O ₂	624-13-5	58.800	66.992	-8.192
benzophenone	C ₁₃ H ₁₀ O	119-61-9	59.000	54.405	4.595
l menthol	C ₁₀ H ₂₀ O	2216-51-5	59.100	57.373	1.727
ethyl salicylate	C ₉ H ₁₀ O ₃	118-61-6	59.200	60.661	-1.461
methyl 10-undecenoate	C ₁₂ H ₂₂ O ₂	111-81-9	59.200	66.901	-7.701

1,1-diphenylethylene	C ₁₄ H ₁₂	530-48-3	59.300	58.610	0.690
6,10-dimethyl-2-undecanone	C ₁₃ H ₂₆ O	1604-34-8	59.300	58.869	0.431
1-undecanethiol	C ₁₁ H ₂₄ S	5332-52-5	59.300	64.837	-5.537
ethyl 2-aminobenzoate ethyl anthranilate	C ₉ H ₁₁ NO ₂	87-25-2	59.600	59.254	0.346
decyl acrylate	C ₁₃ H ₂₄ O ₂	2156-96-9	59.600	59.812	-0.212
ethyl decanoate	C ₁₂ H ₂₄ O ₂	110-38-3	59.600	61.744	-2.144
2-2-pentylphenol	C ₁₁ H ₁₆ O	87-26-3	59.600	63.125	-3.525
benzyl benzoate	C ₁₄ H ₁₂ O ₂	120-51-4	59.700	65.170	-5.470
4,4-dichlorodiphenylsulfone	C ₁₂ H ₈ Cl ₂ O ₂ S	80-07-9	59.700	65.407	-5.707
1,3-dimethyl-5-tert-butylbenzene	C ₁₂ H ₁₈	98-19-1	59.800	58.001	1.799
3-propylphenol	C ₉ H ₁₂ O	621-27-2	59.900	55.489	4.411
diheptylamine	C ₁₄ H ₃₁ N	2470-68-0	60.000	57.953	2.047
2,3-dimethylnaphthalene	C ₁₂ H ₁₂	581-40-8	60.000	65.144	-5.144
N-methylacetanilide	C ₉ H ₁₁ NO	579-10-2	60.100	59.004	1.096
1,3-diphenyl-1,3-propanedione	C ₁₅ H ₁₂ O ₂	120-46-7	60.100	74.400	-14.300
N-butylacetanilide	C ₁₂ H ₁₇ NO	91-49-6	60.200	64.022	-3.822
3-methylbenzoic acid, methyl ester	C ₉ H ₁₀ O ₂	99-36-5	60.300	49.514	10.786
phenoxymethyloxirane	C ₉ H ₁₀ O ₂	122-60-1	60.300	55.548	4.752
2-isopropylnaphthalene	C ₁₃ H ₁₄	2027-17-0	60.300	58.814	1.486
cycloundecanone	C ₁₁ H ₂₀ O	878-13-7	60.300	59.386	0.914
isobutyl benzoate	C ₁₁ H ₁₄ O ₂	136-60-7	60.400	59.399	1.001
diphenyl sulfide	C ₁₂ H ₁₀ S	139-66-2	60.500	66.739	-6.239
1-cyclohexyl-2-phenylethane	C ₁₄ H ₂₀	1603-61-8	60.700	60.443	0.257
laurionitrile	C ₁₂ H ₂₃ N	2437-25-4	60.700	62.215	-1.515
9-fluorenone	C ₁₃ H ₈ O	486-25-9	60.900	61.847	-0.947
6-dodecyne	C ₁₂ H ₂₂	6975-99-1	60.900	64.084	-3.184
cyclododecanone	C ₁₂ H ₂₂ O	830-13-7	61.000	58.484	2.516
methyl 4-methoxybenzoate	C ₉ H ₁₀ O ₃	121-98-2	61.100	59.893	1.207
1,10-dichlorodecane	C ₁₀ H ₂₀ Cl ₂	2162-98-3	61.100	60.824	0.276
tributyl phosphate	C ₁₂ H ₂₇ O ₄ P	126-73-8	61.400	61.064	0.336
dodecane	C ₁₂ H ₂₆	112-40-3	61.400	61.622	-0.222
1-hexadecene	C ₁₆ H ₃₂	629-73-2	61.500	63.831	-2.331
1,3-diphenylpropane	C ₁₅ H ₁₆	1081-75-0	61.500	70.790	-9.290
2-phenyloctane	C ₁₄ H ₂₂	777-22-0	61.600	62.696	-1.096
hexylbenzene	C ₁₂ H ₁₈	1077-16-3	61.600	62.851	-1.251
2,2-dihydroxybiphenyl	C ₁₂ H ₁₀ O ₂	1806-29-7	61.700	73.917	-12.217
decyl acetate	C ₁₂ H ₂₄ O ₂	112-17-4	61.900	61.129	0.771
bispiperidinomethane	C ₁₁ H ₂₂ N ₂	880-09-1	61.900	61.402	0.498
1,2-dimethoxy-4-1-propenylbenzene	C ₁₁ H ₁₄ O ₂	93-16-3	61.900	62.500	-0.600
4-hydroxytoluene	C ₇ H ₈ O	106-44-5	62.000	52.495	9.505
2-methylpentadecane	C ₁₆ H ₃₄	1560-93-6	62.000	61.651	0.349
1-dodecanethiol	C ₁₂ H ₂₆ S	112-55-0	62.000	62.243	-0.243
methyl decanoate methyl caprate	C ₁₁ H ₂₂ O ₂	110-42-9	62.000	65.869	-3.869
2-phenyl-1,3-dioxolane	C ₉ H ₁₀ O ₂	936-51-6	62.100	53.320	8.780
bis(α-methylbenzyl) ether	C ₁₆ H ₁₈ O	93-96-9	62.100	56.950	5.150
1,1-dicyclohexylethane	C ₁₄ H ₂₆	2319-61-1	62.100	66.908	-4.808

guaiol	C ₁₅ H ₂₆ O	489-86-1	62.200	61.813	0.387
4-bromobiphenyl	C ₁₂ H ₉ Br	92-66-0	62.200	62.304	-0.104
1-bromododecane	C ₁₂ H ₂₅ Br	143-15-7	62.200	65.232	-3.032
2-tert-butyl-6-methylphenol	C ₁₁ H ₁₆ O	2219-82-1	62.200	65.244	-3.044
phenylbenzoate	C ₁₃ H ₁₀ O ₂	93-99-2	62.400	63.070	-0.670
1-chlorododecane	C ₁₂ H ₂₅ Cl	112-52-7	62.400	69.194	-6.794
4-methyl-1-hexanol	C ₇ H ₁₆ O	818-49-5	62.600	57.085	5.515
1-4-methoxyphenyl-2-butanone	C ₁₁ H ₁₄ O ₂	53917-01-4	62.600	63.710	-1.110
octylcyclohexane	C ₁₄ H ₂₈	1795-15-9	62.700	61.439	1.261
decyl methacrylate	C ₁₄ H ₂₆ O ₂	3179-47-3	62.700	63.143	-0.443
7-tridecanone	C ₁₃ H ₂₆ O	462-18-0	62.700	66.899	-4.199
diethylene glycol monohexyl ether	C ₁₀ H ₂₂ O ₃	112-59-4	62.700	67.817	-5.117
3-phenyl-1-propanol	C ₉ H ₁₂ O	122-97-4	62.800	62.578	0.222
2,6-di-tert-butyl-4-ethylphenol	C ₁₆ H ₂₆ O	4130-42-1	62.800	71.233	-8.433
triisobutyl phosphate	C ₁₂ H ₂₇ O ₄ P	126-71-6	62.800	74.667	-11.867
2-tert-butyl-4-methylphenol	C ₁₁ H ₁₆ O	2409-55-4	63.000	61.333	1.667
4-isopropylphenol	C ₉ H ₁₂ O	99-89-8	63.100	53.506	9.594
1-acetoxy-2-methoxy-4-allylbenzene	C ₁₂ H ₁₄ O ₃	93-28-7	63.100	63.310	-0.210
diheptyl ether	C ₁₄ H ₃₀ O	629-64-1	63.100	66.973	-3.873
ethyl 2-phenylpropionate	C ₁₁ H ₁₄ O ₂	2510-99-8	63.200	57.482	5.718
butyl benzoate	C ₁₁ H ₁₄ O ₂	120-50-3	63.200	59.919	3.281
diethyl malonate	C ₇ H ₁₂ O ₄	105-53-3	63.300	51.073	12.227
2-phenyl-2-propanol	C ₉ H ₁₂ O	617-94-7	63.400	59.824	3.576
2-isopropylphenol	C ₉ H ₁₂ O	88-69-7	63.500	60.957	2.543
1-iodododecane	C ₁₂ H ₂₅ I	4292-19-7	63.500	63.234	0.266
dipropyl adipate	C ₁₂ H ₂₂ O ₄	106-19-4	63.600	57.667	5.933
1,6-dimethylnaphthalene	C ₁₂ H ₁₂	575-43-9	63.600	64.212	-0.612
azelaic acid, dimethyl ester	C ₁₁ H ₂₀ O ₄	1732-10-1	63.600	65.519	-1.919
diphenylacetylene	C ₁₄ H ₁₀	501-65-5	63.800	67.820	-4.020
acenaphthene	C ₁₂ H ₁₀	83-32-9	63.900	59.585	4.315
9,10-dihydrophenanthrene	C ₁₄ H ₁₂	776-35-2	64.000	63.863	0.137
N-phenylpiperidine	C ₁₁ H ₁₅ N	4096-20-2	64.000	64.441	-0.441
diphenylmethane	C ₁₃ H ₁₂	101-81-5	64.100	55.347	8.753
dihexyl ether	C ₁₂ H ₂₆ O	112-58-3	64.100	64.484	-0.384
diphenylamine	C ₁₂ H ₁₁ N	122-39-4	64.100	66.099	-1.999
4-tert-pentylphenol	C ₁₁ H ₁₆ O	80-46-6	64.200	63.453	0.747
3-isopropylphenol	C ₉ H ₁₂ O	618-45-1	64.300	53.677	10.623
1,3,5-triisopropylbenzene	C ₁₅ H ₂₄	717-74-8	64.300	63.131	1.169
9,10-anthraquinone	C ₁₄ H ₈ O ₂	84-65-1	64.300	63.708	0.592
2-chlorobiphenyl	C ₁₂ H ₉ Cl	2051-60-7	64.400	66.585	-2.185
1-cyclohexyl-3-cyclopentylpropane	C ₁₄ H ₂₆	2883-07-0	64.500	55.678	8.822
dodecyl acrylate	C ₁₅ H ₂₈ O ₂	2156-97-0	64.600	64.652	-0.052
1-bromotridecane	C ₁₃ H ₂₇ Br	765-09-3	64.600	64.932	-0.332
4-bromodiphenyl ether	C ₁₂ H ₉ BrO	101-55-3	64.600	65.866	-1.266
1-tridecanethiol	C ₁₃ H ₂₈ S	19484-26-5	64.700	58.987	5.713

3,4-dihydro-2,2-dimethyl-4-oxo-2H-pyran-6-carboxylic acid, butyl ester	C ₁₂ H ₁₈ O ₄	532-34-3	64.700	64.403	0.297
2-ethylnaphthalene	C ₁₂ H ₁₂	939-27-5	64.700	64.547	0.153
dihexyl disulfide	C ₁₂ H ₂₆ S ₂	10496-15-8	64.900	62.296	2.604
2-methylbenzophenone	C ₁₄ H ₁₂ O	131-58-8	65.100	62.149	2.951
1-pentadecene	C ₁₅ H ₃₀	13360-61-7	65.200	65.103	0.097
N-methyldiphenylamine	C ₁₃ H ₁₃ N	552-82-9	65.200	65.604	-0.404
8-pentadecanone	C ₁₅ H ₃₀ O	818-23-5	65.300	64.132	1.168
tridecane	C ₁₃ H ₂₈	629-50-5	65.300	67.680	-2.380
diphenylmethanol	C ₁₃ H ₁₂ O	91-01-0	65.400	62.401	2.999
3-bromodiphenyl ether	C ₁₂ H ₉ BrO	6876-00-2	65.400	69.293	-3.893
1-acetylnaphthalene	C ₁₂ H ₁₀ O	941-98-0	65.400	73.964	-8.564
trans 1,2-diphenylethylene trans stilbene	C ₁₄ H ₁₂	103-30-0	65.500	58.842	6.658
N,N-diphenylcarbodiimide	C ₁₃ H ₁₀ N ₂	622-16-2	65.600	65.760	-0.160
1,3-diphenylacetone	C ₁₅ H ₁₄ O	102-04-5	65.700	61.246	4.454
carbazole	C ₁₂ H ₉ N	86-74-8	65.700	72.372	-6.672
2-tert-butyl-5-methylphenol	C ₁₁ H ₁₆ O	88-60-8	65.900	62.647	3.253
acridine	C ₁₃ H ₉ N	260-94-6	66.200	61.728	4.472
dibenzofuran	C ₁₂ H ₈ O	132-64-9	66.200	68.951	-2.751
cis 1,2-diphenylethylene (cis stilbene)	C ₁₄ H ₁₂	645-49-8	66.500	61.468	5.032
pentyl salicylate	C ₁₂ H ₁₆ O ₃	2050-08-0	66.500	71.601	-5.101
undecylbenzene	C ₁₇ H ₂₈	6742-54-7	66.700	65.392	1.308
anthracene	C ₁₄ H ₁₀	120-12-7	66.700	70.839	-4.139
4-chlorobiphenyl	C ₁₂ H ₉ Cl	2051-62-9	66.800	66.585	0.215
hexadecylamine	C ₁₆ H ₃₅ N	143-27-1	66.900	62.508	4.392
propyl dodecanoate	C ₁₅ H ₃₀ O ₂	3681-78-5	66.900	70.842	-3.942
fluorene	C ₁₃ H ₁₀	86-73-7	66.900	79.974	-13.074
3-phenylpropionic acid	C ₉ H ₁₀ O ₂	501-52-0	67.000	74.782	-7.782
2-methyl-4-(1,1,3,3-tetramethylbutyl)phenol	C ₁₅ H ₂₄ O	2219-84-3	67.100	58.053	9.047
1-bromotetradecane	C ₁₄ H ₂₉ Br	112-71-0	67.100	59.026	8.074
diphenyl ether	C ₁₂ H ₁₀ O	101-84-8	67.100	65.838	1.262
2,2,4-trimethyl-3-isopropyl-3-pentanol	C ₁₁ H ₂₄ O	5457-41-0	67.100	67.606	-0.506
ethyl dodecanoate	C ₁₄ H ₂₈ O ₂	106-33-2	67.200	67.480	-0.280
1-tetradecanethiol	C ₁₄ H ₃₀ S	2079-95-0	67.300	67.444	-0.144
octylbenzene	C ₁₄ H ₂₂	2189-60-8	67.400	64.810	2.590
1,2-diphenylethane	C ₁₄ H ₁₄	103-29-7	67.400	68.889	-1.489
2-chloro-6-phenylphenol	C ₁₂ H ₉ ClO	85-97-2	67.600	74.235	-6.635
1,2,3,10b-tetrahydrofluoranthene	C ₁₆ H ₁₄	20279-21-4	68.000	74.448	-6.448
benzyl phenyl ketone	C ₁₄ H ₁₂ O	451-40-1	68.100	67.077	1.023
1,1-diphenylethane	C ₁₄ H ₁₄	612-00-0	68.200	67.509	0.691
triethyl citrate	C ₁₂ H ₂₀ O ₇	77-93-0	68.200	80.957	-12.757
hexadecane	C ₁₆ H ₃₄	544-76-3	68.500	55.511	12.989
diethyl diethylmalonate	C ₁₁ H ₂₀ O ₄	77-25-8	68.500	69.395	-0.895
1,6,7-trimethylnaphthalene	C ₁₃ H ₁₄	2245-38-7	68.600	59.986	8.614
2-aminobiphenyl	C ₁₂ H ₁₁ N	90-41-5	68.600	71.857	-3.257
dibutyl adipate	C ₁₄ H ₂₆ O ₄	105-99-7	68.700	58.798	9.902

phenoxathiin	C ₁₂ H ₈ OS	262-20-4	68.700	70.233	-1.533
citronellyl acetate	C ₁₂ H ₂₂ O ₂	150-84-5	68.700	76.827	-8.127
4-(1,1,3,3-tetramethylbutyl)phenol	C ₁₄ H ₂₂ O	140-66-9	68.800	64.573	4.227
cyclododecanol	C ₁₂ H ₂₄ O	1724-39-6	68.800	71.114	-2.314
β-ionone	C ₁₃ H ₂₀ O	14901-07-6	69.000	63.102	5.898
benzoic acid anhydride	C ₁₄ H ₁₀ O ₃	93-97-0	69.100	76.953	-7.853
2,4-di-tert-butylphenol	C ₁₄ H ₂₂ O	96-76-4	69.200	67.040	2.160
benzil	C ₁₄ H ₁₀ O ₂	134-81-6	69.200	68.595	0.605
undecanal	C ₁₁ H ₂₂ O	112-44-7	69.300	58.787	10.513
1-bromopentadecane	C ₁₅ H ₃₁ Br	629-72-1	69.500	65.321	4.179
N,N-dimethyldodecylamine	C ₁₄ H ₃₁ N	112-18-5	69.500	67.508	1.992
α-isomethylionone	C ₁₄ H ₂₂ O	127-51-5	69.500	70.502	-1.002
tridecanonitrile	C ₁₃ H ₂₅ N	629-60-7	69.500	71.470	-1.970
3-phenoxyphenol	C ₁₂ H ₁₀ O ₂	713-68-8	69.500	71.820	-2.320
2-tridecanone	C ₁₃ H ₂₆ O	593-08-8	69.600	67.260	2.340
diheptyl disulfide	C ₁₄ H ₃₀ S ₂	10496-16-9	69.800	68.260	1.540
menthyl benzoate	C ₁₇ H ₂₄ O ₂	6284-35-1	69.900	71.122	-1.222
phenyl salicyate	C ₁₃ H ₁₀ O ₃	118-55-8	69.900	76.615	-6.715
palmitonitrile	C ₁₆ H ₃₁ N	629-79-8	70.100	71.400	-1.300
isopropyl tetradecanoate	C ₁₇ H ₃₄ O ₂	110-27-0	70.200	73.621	-3.421
N,N'-di-sec-butyl-1,4-phenylenediamine	C ₁₄ H ₂₄ N ₂	101-96-2	70.300	66.222	4.078
β-methylionone	C ₁₄ H ₂₂ O	127-43-5	70.300	70.583	-0.283
chlorodiphenylmethane	C ₁₃ H ₁₁ Cl	90-99-3	70.400	63.269	7.131
dodecyl acetate	C ₁₄ H ₂₈ O ₂	112-66-3	70.500	67.779	2.721
dibenzylamine	C ₁₄ H ₁₅ N	103-49-1	70.500	70.957	-0.457
2-(2'-hydroxy-5'-methylphenyl)benzotriazole	C ₁₃ H ₁₁ N ₃ O	2440-22-4	70.600	72.164	-1.564
1,3-benzodioxole	C ₁₂ H ₁₄ O ₄	523-80-8	70.600	78.633	-8.033
10-undecenoic acid	C ₁₁ H ₂₀ O ₂	112-38-9	70.600	81.297	-10.697
1-cyclohexyl-1-phenylethane	C ₁₄ H ₂₀	4413-16-5	70.800	60.802	9.998
decylcyclopentane	C ₁₅ H ₃₀	1795-21-7	71.100	62.222	8.878
1-methylfluorene	C ₁₄ H ₁₂	1730-37-6	71.100	64.827	6.273
thianthrene	C ₁₂ H ₈ S ₂	92-85-3	71.200	76.833	-5.633
4-tert-butyl-2-methylphenol	C ₁₁ H ₁₆ O	98-27-1	71.300	63.103	8.197
myristonitrile	C ₁₄ H ₂₇ N	629-63-0	71.400	69.521	1.879
methyl laurate	C ₁₃ H ₂₆ O ₂	111-82-0	71.400	70.519	0.881
1-bromoheptadecane	C ₁₇ H ₃₅ Br	3508-00-7	71.600	75.262	-3.662
oxa-2-cycloheptadecanone	C ₁₆ H ₃₀ O ₂	109-29-5	71.600	76.523	-4.923
ethyl tetradecanoate	C ₁₆ H ₃₂ O ₂	124-06-1	71.800	73.558	-1.758
1-bromohexadecane	C ₁₆ H ₃₃ Br	112-82-3	71.900	73.513	-1.613
1,2,3,6,7,8-hexahdropyrene	C ₁₆ H ₁₆	1732-13-4	72.000	61.585	10.415
5-isopropyl-2-methylaniline	C ₁₀ H ₁₅ N	2051-53-8	72.000	73.339	-1.339
benzoylactic acid, ethyl ester	C ₁₁ H ₁₂ O ₃	94-02-0	72.100	59.596	12.504
4-hydroxybiphenyl	C ₁₂ H ₁₀ O	92-69-3	72.300	61.927	10.373
1,10-decanedithiol	C ₁₀ H ₂₂ S ₂	1191-67-9	72.300	63.640	8.660
1-hexadecanethiol	C ₁₆ H ₃₄ S	2917-26-2	72.400	69.158	3.242
diphenyl disulfide	C ₁₂ H ₁₀ S ₂	882-33-7	72.400	73.350	-0.950

ethyl linoleate	C ₂₀ H ₃₆ O ₂	544-35-4	72.600	68.680	3.920
3,7-dimethyl-6-octene-1-ol	C ₁₀ H ₂₀ O	106-22-9	72.600	79.003	-6.403
pentadecane	C ₁₅ H ₃₂	629-62-9	72.900	69.982	2.918
isopentyl salicylate	C ₁₂ H ₁₆ O ₃	87-20-7	73.000	76.014	-3.014
dipropyl phthalate	C ₁₄ H ₁₈ O ₄	131-16-8	73.200	73.849	-0.649
9-methylcarbazole	C ₁₃ H ₁₁ N	1484-12-4	73.400	68.461	4.939
4,4'-dimethoxyazoxybenzene	C ₁₄ H ₁₄ N ₂ O ₃	1562-94-3	73.700	73.360	0.340
dioctyl disulfide	C ₁₆ H ₃₄ S ₂	822-27-5	73.900	74.338	-0.438
1,4-dihydroxy-9,10-anthraquinone	C ₁₄ H ₈ O ₄	81-64-1	74.000	73.159	0.841
methyl tridecanoate	C ₁₄ H ₂₈ O ₂	1731-88-0	74.000	88.138	-14.138
diethyl decanedioate	C ₁₄ H ₂₆ O ₄	110-40-7	74.100	62.115	11.985
ethyl 1-naphthyl ketone	C ₁₃ H ₁₂ O	2876-63-3	74.100	64.836	9.264
2-acetylnaphthalene	C ₁₂ H ₁₀ O	93-08-3	74.100	71.757	2.343
phenylhydrazone acetone	C ₉ H ₁₂ N ₂	103-02-6	74.600	55.242	19.358
2-hydroxy-4-methoxybenzophenone	C ₁₄ H ₁₂ O ₃	131-57-7	74.700	84.527	-9.827
Aldrin	C ₁₂ H ₈ Cl ₆	309-00-2	75.100	77.300	-2.200
α-pentylcinnamaldehyde	C ₁₄ H ₁₈ O	122-40-7	75.300	66.472	8.828
1,3,5-benzenetricarboxylic acid, trimethyl ester	C ₁₂ H ₁₂ O ₆	2672-58-4	75.400	76.666	-1.266
7-cyclohexyltridecane	C ₁₉ H ₃₈	13151-92-3	75.600	76.107	-0.507
2,2'-dihydroxy-4-methoxybenzophenone	C ₁₄ H ₁₂ O ₄	131-53-3	75.600	94.175	-18.575
octadecanal	C ₁₈ H ₃₆ O	638-66-4	75.700	77.120	-1.420
butyl dodecanoate	C ₁₆ H ₃₂ O ₂	106-18-3	75.800	77.507	-1.707
4,4-dichlorobiphenyl	C ₁₂ H ₈ Cl ₂	2050-68-2	76.000	73.924	2.076
2-methylanthracene	C ₁₅ H ₁₂	613-12-7	76.100	73.421	2.679
nonadecane	C ₁₉ H ₄₀	629-92-5	76.200	78.598	-2.398
1-methylphenanthrene	C ₁₅ H ₁₂	832-69-9	76.300	73.421	2.879
2,4-dichlorophenoxyacetic acid, butyl ester	C ₁₂ H ₁₄ Cl ₂ O ₃	94-80-4	76.300	76.507	-0.207
1-octadecene	C ₁₈ H ₃₆	112-88-9	76.400	74.649	1.751
decanoic acid capric acid	C ₁₀ H ₂₀ O ₂	334-48-5	76.400	76.047	0.353
decyl lactate	C ₁₃ H ₂₆ O ₃	42175-34-8	76.600	79.918	-3.318
decylcyclohexane	C ₁₆ H ₃₂	1795-16-0	76.700	68.488	8.212
2,2'-dihydroxy-4,4-dimethoxybenzophenone	C ₁₅ H ₁₄ O ₅	131-54-4	77.400	99.572	-22.172
N,N-bis(2-hydroxyethyl)aniline	C ₁₀ H ₁₅ NO ₂	120-07-0	77.600	89.646	-12.046
1-bromononadecane	C ₁₉ H ₃₉ Br	4434-66-6	77.900	82.602	-4.702
decylbenzene	C ₁₆ H ₂₆	104-72-3	78.000	65.226	12.774
4,4-dibromodiphenyl ether	C ₁₂ H ₈ Br ₂ O	2050-47-7	78.000	75.024	2.976
2-methoxy-4-propylphenol	C ₁₀ H ₁₄ O ₂	2785-87-7	78.000	76.307	1.693
pentadecanolide	C ₁₅ H ₂₈ O ₂	106-02-5	78.200	74.040	4.160
(dl) 3-dodecanol	C ₁₂ H ₂₆ O	10203-30-2	78.300	74.735	3.565
stearonitrile	C ₁₈ H ₃₅ N	638-65-3	78.600	80.105	-1.505
pyrene	C ₁₆ H ₁₀	129-00-0	78.600	82.449	-3.849
benzyl salicylate	C ₁₄ H ₁₂ O ₃	118-58-1	78.700	86.639	-7.939
(dl) 3,7-dimethyl-1-octanol	C ₁₀ H ₂₂ O	106-21-8	79.100	66.246	12.854
fluoranthene	C ₁₆ H ₁₀	206-44-0	79.300	84.975	-5.675
5-dodecanol	C ₁₂ H ₂₆ O	10203-33-5	79.400	74.735	4.665
1-undecanol	C ₁₁ H ₂₄ O	112-42-5	79.500	73.240	6.260

1-decanol	C ₁₀ H ₂₂ O	112-30-1	79.500	75.337	4.163
N-benzylaniline	C ₁₃ H ₁₃ N	103-32-2	79.600	72.583	7.017
methyl tetradecanoate	C ₁₅ H ₃₀ O ₂	124-10-7	79.800	76.798	3.002
dibutyl tartrate	C ₁₂ H ₂₂ O ₆	87-92-3	79.800	92.463	-12.663
(dl) butyric acid, 2,3-dihydroxypropyl ester	C ₇ H ₁₄ O ₃	557-25-5	80.400	78.613	1.787
dibutyl phthalate	C ₁₆ H ₂₂ O ₄	84-74-2	80.400	79.096	1.304
4-dodecanol	C ₁₂ H ₂₆ O	10203-32-4	80.600	74.735	5.865
2,2-diphenyl-1,3-dioxolane	C ₁₅ H ₁₄ O ₂	4359-34-6	81.200	81.051	0.149
undecanoic acid	C ₁₁ H ₂₂ O ₂	112-37-8	81.300	79.971	1.329
di-(4-tolyl)methanol	C ₁₅ H ₁₆ O	885-77-8	81.700	80.029	1.671
Dieldrin	C ₁₂ H ₈ C ₁₆	60-57-1	82.500	80.448	2.052
1,2-benzofluorene	C ₁₇ H ₁₂	238-84-6	83.700	69.276	14.424
sebaconitrile	C ₁₀ H ₁₆ N ₂	1871-96-1	83.700	81.583	2.117
ethyl carbanilate	C ₉ H ₁₁ NO ₂	101-99-5	84.200	53.946	30.254
2,3-benzofluorene	C ₁₇ H ₁₂	243-17-4	84.700	81.583	3.117
1-dodecanol	C ₁₂ H ₂₆ O	112-53-8	84.760	78.567	6.193
dibutyl terephthalate	C ₁₆ H ₂₂ O ₄	1962-75-0	86.200	81.697	4.503
diethyl phthalate	C ₁₂ H ₁₄ O ₄	84-66-2	86.800	72.149	14.651
2-dodecanol	C ₁₂ H ₂₆ O	10203-28-8	87.000	75.011	11.989
2,4-dihydroxybenzophenone	C ₁₃ H ₁₀ O ₃	131-56-6	87.100	80.669	6.431
p,p'-DDE	C ₁₄ H ₈ Cl ₄	72-55-9	87.200	87.200	0.000
phenanthrene	C ₁₄ H ₁₀	85-01-8	87.240	73.844	13.396
2,4,5-trichlorophenoxyacetic acid, butyl ester	C ₁₂ H ₁₃ C ₁₃ O ₃	93-79-8	87.300	82.933	4.367
1,1-dicyclohexylheptane	C ₁₉ H ₃₆	2090-15-5	87.800	72.741	15.059
2,6-di-tert-butyl-4-methylphenol	C ₁₅ H ₂₄ O	128-37-0	87.800	78.285	9.515
1,6-diphenylhexane	C ₁₈ H ₂₂	1087-49-6	88.000	84.505	3.495
1,3-dihydroxy-4-hexylbenzene	C ₁₂ H ₁₈ O ₂	136-77-6	88.100	73.427	14.673
1,1-dichloro-2,2-bis(4-chlorophenyl)ethane p,p'-DDD	C ₁₄ H ₁₀ Cl ₄	72-54-8	88.500	85.460	3.040
1,1,1-trichloro-2-(4-chlorophenyl)2-(2-chlorophenyl)ethane (p,o'DDT)	C ₁₄ H ₉ Cl ₅	789-02-6	88.600	88.699	-0.099
2-cyclohexyl-4,6-dinitrophenol	C ₁₂ H ₁₄ N ₂ O ₅	131-89-5	88.600	90.560	-1.960
N-phenyl-2-naphthylamine	C ₁₆ H ₁₃ N	135-88-6	88.700	68.686	20.014
xanthene	C ₁₃ H ₁₀ O	92-83-1	88.700	83.055	5.645
dodecanoic acid	C ₁₂ H ₂₄ O ₂	143-07-7	88.800	83.610	5.190
butyl benzyl phthalate	C ₁₉ H ₂₀ O ₄	85-68-7	89.000	92.950	-3.950
benzyl cinnamate	C ₁₆ H ₁₄ O ₂	103-41-3	89.400	68.779	20.621
dibenzosuberone	C ₁₅ H ₁₂ O	1210-35-1	90.000	78.007	11.993
tridecanoic acid	C ₁₃ H ₂₆ O ₂	638-53-9	90.100	86.335	3.765
4-(tert-butylphenyl) salicylate	C ₁₇ H ₁₈ O ₃	87-18-3	90.400	91.564	-1.164
4,4'-diisocyanatodiphenylmethane	C ₁₅ H ₁₀ N ₂ O ₂	101-68-8	90.500	89.652	0.848
4-(1-phenylethyl)phenol	C ₁₄ H ₁₄ O	1988-89-2	90.800	68.934	21.866
heptadecane	C ₁₇ H ₃₆	629-78-7	91.100	78.973	12.127
1-tridecanol	C ₁₃ H ₂₈ O	112-70-9	91.100	83.128	7.972
N,N-bis 2-hydroxyethyl ethylenediamine	C ₆ H ₁₆ N ₂ O ₂	4439-20-7	91.200	87.898	3.302
benzanthrone	C ₁₇ H ₁₀ O	82-05-3	91.400	91.533	-0.133

triethylene glycol, bis(2-ethylbutyrate)	C ₁₈ H ₃₄ O ₆	95-08-9	91.700	88.217	3.483
dodecylbenzene	C ₁₈ H ₃₀	123-01-3	92.000	85.328	6.672
2,2,4,4-tetrabromodiphenyl ether	C ₁₂ H ₆ Br ₄ O	5436-43-1	92.000	90.335	1.665
1-tetradecanol	C ₁₄ H ₃₀ O	112-72-1	93.600	86.710	6.890
di-sec-butyl phthalate	C ₁₆ H ₂₂ O ₄	4489-61-6	93.800	79.800	14.000
pentadecanoic acid	C ₁₅ H ₃₀ O ₂	1002-84-2	94.000	92.356	1.644
2-hydroxybiphenyl	C ₁₂ H ₁₀ O	90-43-7	94.200	64.554	29.646
butylcyclohexylphthalate	C ₁₈ H ₂₄ O ₄	84-64-0	94.300	87.421	6.879
nonadecanoic acid	C ₁₉ H ₃₈ O ₂	646-30-0	94.400	102.342	-7.942
1-pentadecanol	C ₁₅ H ₃₂ O	629-76-5	95.500	89.720	5.780
hexadecanoic acid	C ₁₆ H ₃₂ O ₂	57-10-3	97.500	95.480	2.020
methyl stearate	C ₁₉ H ₃₈ O ₂	112-61-8	98.000	91.353	6.647
dipentylphthalate	C ₁₈ H ₂₆ O ₄	131-18-0	99.400	94.114	5.286
1-hexadecanol	C ₁₆ H ₃₄ O	36653-82-4	100.400	91.458	8.942
tetradecanoic acid	C ₁₄ H ₂₈ O ₂	544-63-8	100.400	92.902	7.498
heptadecanoic acid	C ₁₇ H ₃₄ O ₂	506-12-7	100.700	98.434	2.266
2-tert-butyl-9,10-anthraquinone	C ₁₈ H ₁₆ O ₂	84-47-9	101.400	77.451	23.949
1-methylamino-9,10-anthraquinone	C ₁₅ H ₁₁ NO ₂	82-38-2	103.500	82.056	21.444
dibutyl decanedioate	C ₁₈ H ₃₄ O ₄	109-43-3	106.400	82.904	23.496
4,4-diaminodiphenylmethane	C ₁₃ H ₁₄ N ₂	101-77-9	109.300	92.333	16.967
5-methyl-5H-indeno[2,1-b]quinoline	C ₁₇ H ₁₃ N	6626-64-8	122.200	117.047	5.153

Source	DF	Sum of squares	Mean squares	F	Pr > F
Model	66	1409158.411	21350.885	392.865	<0.0001
Error	261	14184.474	54.347		
Corrected					
Total	327	1423342.885			