

RÉPUBLIQUE ALGÉRIENNE DÉMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTÈRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPÉRIEUR ET DE LA RECHERCHE
SCIENTIFIQUE

UNIVERSITÉ MUSTAPHA STAMBOULI DE MASCARA

Faculté des Sciences Exactes

Département de chimie



Thèse présentée en vue de l'obtention du diplôme de DOCTORAT
En Chimie

***Contribution au développement des méthodes
d'estimation des enthalpies de formation de
molécules organiques***

Présenté par : Mr. ARGOUB Kadda

Devant le jury :

Président	YAHIAOUI Ahmed	Pr.	Université Mustapha Stambouli de Mascara
Rapporteur	BENKOUIDER Ali Mustapha	Pr.	Université Mustapha Stambouli de Mascara
Examineur	BOUSALEM Smain	Pr.	Centre Universitaire d'Ain Témouchent
Examineur	FERRAHI Mohamed Isam	Pr.	Université d'Oran 1
Examineur	KESSAS Rachid	Pr.	Université USTO

Année universitaire : 2016 - 2017

Remerciements

Ce travail a été réalisé au sein du Laboratoire de chimie Organique, Macromoléculaire et des Matériaux à l'Université de Mustapha Stambouli de MASCARA sous la direction de Pr. **Benkouider Ali Mustapha**.

Monsieur **Benkouider Ali Mustapha**, professeur l'Université de Mustapha Stambouli de MASCARA, a dirigé mes travaux avec la conviction, les qualités pédagogiques et l'enthousiasme communicatif dont il sait faire preuve. C'est à la fois un privilège et une expérience exceptionnelle que d'avoir pu bénéficier de ses conseils. Ce travail doit beaucoup à son soutien et à ses encouragements, Merci.

Tous mes remerciements vont également à Monsieur **YAHIAOUI Ahmed** Professeur à l'Université de MASCRA pour m'avoir fait l'honneur de présider le jury de soutenance.

Mes sincères remerciements vont également à monsieur **BOUSALEM Smain** Professeur au Centre Universitaire d'Ain Témouchent, et Monsieur **FERRAHI Mohamed Isam** Professeur à l'Université de d'Oran 1 pour avoir accepté d'examiner ce travail.

J'aimerais exprimer mes vifs remerciements à Monsieur **KESSAS Rachid** Professeur à université MB USTO pour l'honneur qu'il m'a accordé en acceptant d'examiner ce travail.

Je voudrais aussi exprimer toute ma reconnaissance à **mon père, mes sœurs et mes frères** qui tout au long de ces années d'études n'ont cessé de m'encourager.

Pour n'oublier personne: **Merci** à tous ceux qui ont partagé avec moi un moment de travail ou de détente ces dernières années.

Contenu

Liste des figures	vi
Liste des Tableaux	viii
Nomenclature	xi
Introduction générale	1
Chapitre I: Concepts de base et revus bibliographiques	4
I.1 Introduction	4
I.2 Notions fondamentales d'enthalpie de formation.....	4
I.2.1 Équation d'état.....	5
I.2.2 Les quatre fonctions d'état : U, H, F et G	5
I.2.3 Enthalpie	7
I.2.4 Enthalpie de transformations physiques	8
I.2.5 Transformations atomiques et moléculaires.....	10
I.2.5.a Enthalpie d'ionisation.....	10
I.2.5.b Enthalpie de fixation d'électrons.....	10
I.2.5.c Enthalpie de liaison	11
I.2.6 Enthalpie des transformations chimiques.....	11
I.2.6.a Enthalpie de réaction.....	11
I.2.6.b Enthalpie de formation:.....	13
I.2.7 Détermination expérimentale d'enthalpie de formation.....	13
I.2.8 Définition et origines de la calorimétrie.....	13
I.2.9 Classification opérationnelle des calorimètres.....	14
I.3 Méthodes de contribution de groupes	16
I.3.1 Introduction.....	16
I.3.2 Classes des fragments des méthodes de contribution de groupes.....	16
I.3.3 Revue des méthodes de contribution de groupes donnant l'enthalpie de formation.....	20
I.3.3.a Méthode de Benson	20
I.3.4 Méthode de Joback et al	21
I.3.5 Méthode de Constantinou et Gani (CG).....	23
I.3.6 Méthode de Domaliski et Hearing	24
I.3.7 Méthode de Cohen.....	24
I.3.8 Méthodes de Salmon et Dalmazzone.....	24
I.3.9 Méthode de Marrero et Gani.....	25
I.3.10 Méthode de S.P. Verevkin.....	27
I.3.11 Méthodes de Mohammad Hossein Keshavarz.....	28
I.3.12 Estimation des propriétés des mélanges.....	28
I.3.12.a Méthode de ASOG.....	29
I.3.12.b Méthode UNIFAC	30

I.4	Calculs ab initio.....	32
I.4.1	L'équation de Schrödinger.....	33
I.4.2	Approximations.....	34
I.4.2.a	Approximation de Born-Oppenheimer	34
I.4.2.b	Approximation de Hartree	35
I.4.2.c	Approximation de Hartree-Fock.....	36
I.4.2.d	Théorie fonctionnelle de la densité	38
I.4.2.e	Fonctionnelle d'échange et corrélation.....	39
I.4.2.f	Approximation de la densité locale (LDA).....	39
I.4.2.g	Approximation du gradient généralisé (GGA)	40
I.4.3	Méthodes <i>ab initio</i> pour calculer l'enthalpie de formation standard.....	40
I.5	Conclusion.....	41
Chapitre II: Prédiction des enthalpies de formation à l'état solide		43
II.1	Introduction	43
II.2	Outils de calculs des enthalpies de formation.....	44
II.2.1	Programme de découpage automatique.....	45
II.2.2	Programme d'estimation des contributions	47
II.3	Développement de la méthode de prédiction des enthalpies de formation à l'état solide	48
II.3.1	Banque d'enthalpies et types de composés étudiés.....	51
II.3.2	Les différents types de corrections.....	55
II.3.2.a	Corrections de structure	56
II.3.2.b	Corrections des interactions à longue distance.....	57
II.3.2.c	Interactions entre groupes fonctionnels	61
II.4	Mise au point du modèle.....	61
(1540-80-3)	1,8-cyclotetradecadiyne (02)	69
	69	
II.5	Résultats et discussions	72
II.5.1	Résultats obtenus.....	72
II.5.2	Exemples d'applications illustratifs.....	74
II.6	Étude comparative	78
II.7	Conclusion.....	82
Chapitre III: Nouvelle méthode de prédiction des enthalpies de formation à l'état liquide....		84
III.1	Introduction	84
III.2	Développement de la méthode de prédiction des enthalpies de formation à l'état liquide	84
III.2.1	Banque d'enthalpies et types de composés étudiés	85
III.3	Mise au point du modèle	88
III.3.1	Exemples d'applications illustratifs	94
III.4	Résultat et discussion	96

III.5	Étude comparative	99
III.6	Conclusion	104
Chapitre IV: Nouvelle méthode de prédiction des enthalpies de formation à l'état gazeux.		105
IV.1	Introduction	105
IV.2	Élaboration d'une nouvelle méthode de prédiction des enthalpies de formation à l'état gazeux.....	106
IV.2.1	Banque d'enthalpies et types de composés étudiés.....	106
IV.2.2	Nouveaux groupes en phase gazeux.....	109
IV.3	Mise au point du modèle.....	109
IV.3.1	Exemples d'applications illustratifs.....	118
IV.4	Résultat et discussion.....	121
IV.5	Étude comparative	123
IV.6	Conclusion.....	125
Chapitre V: Réseaux de neurones pour la prédiction des enthalpies de formation		126
V.1	Introduction	126
V.2	Principes des réseaux de neurones artificiels.....	127
V.2.1	Neurone formel	127
V.2.2	Réseau de neurones multicouches (MPC).....	128
V.2.3	Apprentissage des réseaux de neurones	129
V.2.4	Les réseaux non bouclés et les réseaux bouclés.....	129
V.3	Mise en œuvre des modèles neuronaux.....	130
V.4	Résultats, discussion et comparaison.....	133
V.4.1	Résultats, discussion et comparaison à l'état solide.....	133
V.4.2	Résultats, discussion et comparaison à l'état liquide.....	138
V.4.3	Résultats, discussion et comparaison à l'état gazeux.....	143
V.5	Conclusion.....	147
Chapitre VI: Calcul ab-initio des enthalpies de formation à l'état gazeu		149
VI.1	Introduction	149
VI.2	Mise en œuvre des calculs.....	150
VI.3	Les paramètres d'entrée	150
VI.3.1	Fichier d'entrée	150
VI.3.2	Les modèles de calcul	152
VI.3.3	Choix de modèle chimique.....	153
VI.3.3.a	Niveau de théorie	153
VI.3.3.b	Jeu de fonction de base	153
VI.3.4	Type de calculs.....	153
VI.3.4.a	Optimisation de la géométrie	154
VI.3.4.b	Fréquences et thermochimie.....	154
VI.3.4.c	Optimisation géométrique avec calcul des fréquences.....	155
VI.4	Calcul de l'enthalpie de formation à 298,15°C.....	156

VI.5	Résultats et discussions	158
VI.6	Exemples illustratifs	159
VI.7	CONCLUSION	160
	Conclusion générale	162
VI.8	Bibliographie	166
	Annexe A : Résultats de prédiction des enthalpies standards de formation à l'état Solide	169
	Annexe B : Résultats de prédiction des enthalpies standards de formation à l'état liquide.....	205
	Annexe C : Résultats de prédiction des enthalpies standards de formation à l'état gazeux.....	236
	Annexe D : Résultats des calculs des enthalpies standards de formation suivant la DFT.	271

Liste des figures

Figure 1: Enthalpie de sublimation à une température donnée est la somme des enthalpies de fusion et la vaporisation à cette température [4].....	10
Figure 2: Enthalpie de réaction correspond à la différence d'enthalpie entre les produits de la réaction et les réactifs [5].	12
Figure 3: Représentation schématique d'un calorimètre [8].....	14
Figure 4: 1,1'-ethenylidenebis [4-methylbenzene] (CAS : 2919-20-2).	18
Figure 5: 11,9-nonadiol.....	19
Figure 6: N-Phenyl-1,4-benzenediamine.....	20
Figure 7: Génération de SMILES : molécule de Ciprofloxacine.....	46
Figure 8 : Programme de recherche automatisée des groupes.	47
Figure 9 : Étapes du développement de la méthode de prédiction des enthalpies de formation à l'état solide, liquide et gazeuse.....	50
Figure 10: Structure du cubane	56
Figure 11 : Exemple de deux molécules ayant un ou plusieurs cycles aromatiques fusionnés à un cycle non aromatique.	60
Figure 12 : Relation entre les valeurs expérimentales et prédites de ΔfH_{solid} pour les 1222 molécules à l'état solide.....	73
Figure 13 : Évaluation globale des résultats de prévision de l'enthalpie standard de formation en phase solide de 1222 composés étudiés.	74
Figure 14: Classification des valeurs des EAM fournies par la nouvelle méthode et les deux autres méthodes concurrentes (1222 molécules).....	80
Figure 15: Exemples de molécules à écart massif (2,3,7,8,12,13,17,18-octaethyl-21H, 23H-porphine).....	81
Figure 16 : Exemple de quelques composés en phase liquide utilisés pour le développement de la méthode.....	87
Figure 17 : Relation entre les valeurs expérimentales et prédites de l'enthalpie de formation de 900 molécules étudiées à l'état liquide.....	98
Figure 18 : Dispersion des erreurs absolue des 900 molécules à l'état liquide.	99
Figure 19 : Classification des valeurs des EAM de la méthode proposée et celles des méthodes concurrentes pour la prédiction de ΔfH_{liq}° en phase liquide.	104
Figure 20 : Correlation entre les valeurs expérimentales et prédites de ΔfH_{gaz}°	122
Figure 21 : Dispersion des erreurs de prédiction des ΔfH_{gaz}° pour 750 molécules à l'état gazeux.	123
Figure 22 : Intervalles limitant les erreurs absolues moyennes de prédiction de ΔfH_{gaz}°	125
Figure 23: Neurone formel.....	128
Figure 24: Réseau multicouches (MCP) comportant une seule couche cachée	129
Figure 25: Prédiction des enthalpies de formation en utilisant les réseaux de neurones.....	130
Figure 26: Présentation du réseau de neurones pour la prédiction des $\Delta H_{f,S}$ à l'état solide	132

Figure 27: Présentation du réseau de neurones pour la prédiction des $\Delta H_f, L$ à l'état liquide	132
Figure 28: Présentation du réseau de neurones pour la prédiction des $\Delta H_f, G$ à l'état gazeux	132
Figure 29: Corrélation entre les valeurs expérimentales et prédites par le réseau de neurones à l'état solide.....	134
Figure 30: Classification des valeurs des EAM correspond aut modèle neuronal à l'état solide.....	137
Figure 31: Corrélation entre les valeurs expérimentales et prédites par le réseau de neurones à l'état liquide.....	139
Figure 32 : Dispersion des erreurs absolues des 900 molécules à l'état liquide.	140
Figure 33: Classification des valeurs des EAM correspond aut modèle neuronal à l'état liquide.	143
Figure 34: Corrélation entre les valeurs expérimentales et prédites par le réseau de neurones à l'état gazeux.....	144
Figure 35 : Dispersion d'erreur absolue des 750 molécules à l'état gazeux.	145
Figure 36: Classification des valeurs des EAM correspond aut modèle neuronal à l'état gaz	147
Figure 37: Fenêtre de commande pour générer des paramètres d'entrée sur le G09	151
Figure 38: Relation entre les valeurs expérimentales et estimées (par la DFT) de l'enthalpie de formation de 30 molécules à l'état gaz.....	159

Liste des Tableaux

Tableau 1 : Découpage de la molécule de 1,1'-ethenylidenebis [4-methylbenzene] en groupes..	19
Tableau 2 : Découpage de la molécule de 1,9-nonadiol en groupes.	19
Tableau 3 : Découpage de la molécule de N-Phenyl-1,4-benzenediamine en groupes.....	20
Tableau 4 : Erreurs absolues moyennes et déviations standard obtenues grâce à la méthode de Joback et Reid [17].....	22
Tableau 5 : Erreurs absolues moyennes obtenues grâce à la méthode de Constantinou et Gani [19].....	23
Tableau 6 : Erreurs absolues moyennes et écart type a obtenues grâce à la méthode d'Anna Salmon [24]	25
Tableau 7 : Description d'ensemble des données expérimentales - Méthode de Marrero et Gani	27
Tableau 8 : Paramètres statistiques décrivant le modèle de perdition de l'enthalpie de formation à l'état de gaz, développé par Marrero et Gani [26].....	27
Tableau 9 : Exemple de quelques composés hydrocarbonés.	52
Tableau 10 : Exemple de quelques composés oxygénés.....	53
Tableau 11 : Exemple explicatif des composés azotés.	54
Tableau 12 : Exemple explicatif des composés contenant les éléments C, H, N, O.....	55
Tableau 13 : Description des corrections d'interactions répulsives engendrées par les atomes d'hydrogène.....	58
Tableau 14 : Interactions entre les substitutions sur un cycle aromatique autre que benzénique	59
Tableau 15 : Description des corrections concernant les molécules benzéniques fusionnées.	59
Tableau 16 : Description des corrections concernant les molécules autres que benzéniques fusionnées.	60
Tableau 17 : Description des corrections concernant les molécules cycliques non aromatiques fusionnées a un cycle aromatique	60
Tableau 18 : Valeurs de contributions de groupes du premier ordre donnant l'enthalpie de formation à l'état solide.....	65
Tableau 19 : Valeurs de contributions de groupes du second ordre donnant l'enthalpie de formation à l'état solide.....	67
Tableau 20 : Valeurs de contributions de groupes du troisième ordre donnant l'enthalpie de formation à l'état solide.....	68
Tableau 21 : Valeurs de contributions des nouveaux groupes proposés.	71
Tableau 22 : Résultats de prédiction d'enthalpie standard de formation en phase solide.	72
Tableau 23 : Comparaison des performances de prédiction entre notre modèle et les autres modèles de la littérature.....	79
Tableau 24 : Comparaison de l'écart absolu moyen entre ce modèle et les autres modèles.....	79
Tableau 25 : Valeurs de contributions de groupes de premier ordre d'enthalpie de formation à l'état liquide.....	91

Tableau 26 : Valeurs de contributions de groupes de deuxième ordre d'enthalpie de formation à l'état liquide.	93
Tableau 27 : Valeurs de contributions de groupes de troisième ordre d'enthalpie de formation à l'état liquide.	94
Tableau 28 : indicateurs statistiques d'évaluation des performances du modèle développé pour l'estimation d'enthalpies de formation en phase liquide.	97
Tableau 29 : Intervalles limitant les erreurs absolues moyennes de modèle développé.....	97
Tableau 30 : Indicateurs statistiques correspond aux différentes classes de la base des données introduites	98
Tableau 31 : Comparaison détaillée de EAM, ET et de D_{MAX} entre le modèle développé et les deux méthodes compétitives pour la prédiction de ΔfH_{liq}° en phase liquide.....	101
Tableau 32 : Comparaison détaillée d'EAM, entre le modèle développé et les deux méthodes compétitives pour la prédiction de ΔfH_{liq}° en phase liquide.....	103
Tableau 33 : Exemple de quelques composés hydrocarbonés en phase gazeux.	107
Tableau 34 : Exemple de quelques composés oxygénés en phase gazeux.	107
Tableau 35 : Exemple de quelques composés azotés en phase gazeux.	108
Tableau 36 : Exemple de quelques composés de type CHNO en phase gazeux.....	108
Tableau 37 : Valeurs de contributions de groupes du premier ordre donnant l'enthalpie de formation à l'état gazeux.....	113
Tableau 38 : Valeurs de contributions de groupes du second ordre donnant l'enthalpie de formation à l'état gazeux.....	115
Tableau 39 : Valeurs de contributions de groupes du troisième ordre donnant l'enthalpie de formation à l'état gazeux.....	116
Tableau 40 : Valeurs de contributions des nouveaux groupes proposés à l'état gazeux.	118
Tableau 41 : Différents indicateurs statistiques du molécules à l'état gazeux.	121
Tableau 42 : Classification des erreurs absolues de prédiction de ΔfH_{gaz}°	122
Tableau 43 : Pourcentage des composés en fonction de leurs erreurs de prédiction des ΔfH_{gaz}°	123
Tableau 44 : Comparaison entre la méthode proposée et celle de Benson et al.....	124
Tableau 45 : Intervalles limitant les erreurs absolues moyennes de prédiction de ΔfH_{gaz}°	124
Tableau 46 : Performances statistiques du modèle neuronal pour la prédiction des $\Delta fH_{solid}^{\circ}$	133
Tableau 47 : Classification des erreurs absolues moyennes issues du modèle neuronal proposé et les des modèles concurrents à l'état solide.	136
Tableau 48 : Comparaison entre le modèle neuronal proposé et les modèles concurrents en utilisant l'erreur absolue moyenne à l'état solide.	136
Tableau 49 : Performances statistiques du modèle neuronal pour la prédiction des ΔfH_{liq}°	138
Tableau 50 : Résultats de prédiction d'enthalpie standard de formation en phase liquide. .	140
Tableau 51 : Classification des valeurs des EAM correspond au modèle neuronal à l'état liquide.....	141

Tableau 52 : indicateurs statistiques d'évaluations des performances de modèle développé pour l'estimation d'enthalpie de formation en phase liquide pour les différentes classes des molécules étudiées	142
Tableau 53 : Intervalles limitant les erreurs absolues moyennes de modèle développé	142
Tableau 54 : Performances statistiques du modèle neuronal pour la prédiction des ΔfH_{gaz}°	143
Tableau 55 : Performances statistiques du modèle neuronal pour la prédiction des ΔfH_{gaz}° suivant les classes chimiques.	144
Tableau 56 : Classification des valeurs des EAM correspond aut modèle neuronal à l'état gaz.....	145
Tableau 57 : Classification des erreurs de prédiction des ΔfH_{gaz}° en fonction des familles chimiques.	146
Tableau 58 : Performances statistiques du modèle neuronal pour la prédiction des ΔfH_{Gaz}°	146
Tableau 59 : Intervalles limitant les erreurs absolues moyennes de prédiction de l'enthalpie de formation à l'état gaz à base des réseaux de neurones artificiel.	147
Tableau 60 : Exemple de fichier d'entrée Gaussian.....	152
Tableau 61 : Exemple de fichier de sortie Gaussian 09.....	156
Tableau 62 : Résultat d'optimisation des paramètres atomiques.	157
Tableau 63 : Résultats de prédiction d'enthalpie standard de formation pour les 30 molécules en phase gaz suivant la DFT et MCG.....	158
Tableau 64 : Exemples de calcul de l'enthalpie de formation des composés cycliques contenant les éléments C et H par la méthode de DFT.....	160
Tableau 65 : Banque de données thermochimiques d'enthalpie de formation concernant les 1222 molécules à l'état solide	170
Tableau 66 : valeurs des poids et biais du réseau de neurones pour la prédiction des enthalpies de formation des composés à l'état solide.....	202
Tableau 67 : Banque de données thermochimiques d'enthalpie de formation concernant les 900 molécules à l'état liquide	206
Tableau 68 : valeurs des poids et biais du réseau de neurones pour la prédiction des enthalpies de formation des composés à l'état liquide.....	233
Tableau 69 : Banque de données thermochimiques d'enthalpie de formation concernant les 900 molécules à l'état gazeux.....	237
Tableau 70 : Valeurs de contributions des nouveaux groupes proposés à l'état gazeux avec des exemples illustratifs.....	257
Tableau 71 : les 314 valeurs des poids et biais des trois couches de FFNNs de modèle d'estimation des enthalpies de formation des composés organiques à l'état gazeux.	268
Tableau 72 : Banque de données thermochimiques d'enthalpie de formation concernant les 30 molécules à l'état gaz.....	273

Nomenclature

H : Enthalpie

U : Energie interne

P : Pression

V : Volume

Q_v : Chaleur à volume constant

Q_p : Chaleur à pression constante

ΔH_c^0 : Enthalpie standard de combustion

ΔH_f^0 : Enthalpie standard de formation

i : Réactif(s)

j : Produit(s)

ν_i et ν_j : Coefficients stoechiométriques

$\Delta H_f^0 g$: Enthalpie de formation en phase gazeuse, à T = 298,15 K

$\Delta G_f^0 g$: Enthalpie libre de formation en phase gazeuse, à T = 298,15 K

ΔH_{fus} : Enthalpie de fusion

$\Delta H_{vap}(T_{eb})$: Enthalpie de vaporisation à T_{eb}

$d_f h_k$, $d_g h_k$, $d_{fus} h_k$, $d_{vap} h_k$: Contributions de groupes

$d_{f1} h_k$, $d_{g1} h_k$, $d_{vap1} h_k$: Contributions de groupes de premier ordre

$d_{f2} h_k$, $d_{g2} h_k$, $d_{vap2} h_k$: Contributions de groupes de deuxième ordre

T : Température absolue

T_c : Température critique

T_{eb} : Température d'ébullition

T_r : Température réduite

ν_j : Nombre de groupes

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

N_i : Nombre de groupes i dans la molécule.

a_i, b_i, c_i : Contributions de groupes.

N_i : Nombre de groupes i dans la molécule.

α_i, β_i : Contributions de groupes.

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

d_{fhk} : Contributions de groupes.

S_{el}^0 : Entropie absolue des éléments formant la molécule à T et 101 325 Pa.

S_e^0 : Entropie absolue d'un élément contenu dans la molécule à T et 101 325 Pa.

$\widehat{\Delta H_{f_n}^0}$: Prédiction de l'enthalpie de formation de la n ème molécule.

$\Delta H_{f_n}^0$: Valeur expérimentale de l'enthalpie de formation de la n ème molécule.

$\Delta_{ion}H$: Enthalpie d'ionisation.

$\Delta_{fe}H$: Enthalpie de fixation d'électrons.

Δ_rH : Enthalpie de réaction.

$\Delta_{sub}H$: Enthalpie de sublimation.

N : Nombre total de molécules utilisées dans la recherche des valeurs de contribution de groupes.

EMR : Erreur moyenne relative.

EAM : Erreur absolue moyenne.

ET : Ecart type.

EQM : Erreur quadratique moyenne.

EAM_{MAX} : Déviation maximale

E_{cin} : Énergie cinétique macroscopique du système.

E_{pot} : Énergie potentielle macroscopique du système.

A_i : Force généralisée.

dx_i : Variation infinitésimale d'une grandeur extensive.

$\delta_e S$: Entropie d'échange.

μ : Potentiel chimique

μ_j : Potentiel chimique de l'espèce j

a, b, c, d , etc. : Constantes dépendant uniquement du gaz.

S et G : Taille et groupe, respectivement. Les coefficients d'activités γ_i^S et γ_i^G .

x_j : Fraction molaire du composé j dans le mélange

s_j : Nombre de groupes fonctionnels dans la molécule j

u_{kj} : Nombre des interactions de groupe k dans la molécule j

Γ_k : Coefficient d'activité du groupe k dans le mélange

Γ_k^* : Coefficient d'activité du groupe k dans l'état standard

A_{kl}, A_{lk} : Paramètres de groupe d'interaction qui dépendent de la température.

x_i : Fraction molaire du composé i

θ_i : Fraction surfacique

Φ_i : Fraction volumique

r_i : Volume moléculaire de Van der Waals

q_i : Surface moléculaire

u_{ki} : Nombre de groupes de type k dans la molécule i

R_k : Contribution de groupe au volume

Q_k : Contribution de groupe à la surface

$V_{\omega k}$: Groupes de volume publiés par Bondi

$A_{\omega k}$: Groupes de surface publiés par Bondi

Θ_m : Fraction surfacique du groupe m

X_m : Fraction molaire du groupe m dans le mélange

U_{mn} : Mesure de l'énergie d'interaction entre les groupes m et n

a_{mn} : Contribution de groupe-interaction

ψ : Fonction d'onde

T_n : Energie cinétique des noyaux composant le système

T_e : Energie cinétique des électrons du système

V_{nn} : Interaction coulombienne noyau - noyau,

V_{en} : Interaction coulombienne électron - noyau

V_{ee} : Interaction coulombienne électron - électron.

DFT: density functional theory

R : Fonction d'onde nucléaire

$\phi(\mathbf{r}, \mathbf{R})$: Fonction d'onde électronique correspondant aux positions $\{R_j\}$

Ω_i : Énergie potentielle de l'électron dans ce champ

H_{el} : Hamiltonien électronique

E_H : Énergie d'interaction électrostatique moyenne de Hartree

E_x : Énergie d'échange

$V_{H(\mathbf{r})}$ et $V_{X(\mathbf{r})}$: Potentiels d'interactions

V_{ext} : Potentiel coulombien extérieur dû aux noyaux de charge positive

$F(\rho)$: Énergie cinétique des électrons et l'énergie d'interaction coulombienne.

$T(\rho)$: Terme d'énergie cinétique

$Exc(\rho)$: Terme d'échange et corrélation

FBE : Enthalpie formelle de liaison

FSE₀ : Enthalpie formelle stérique du conformère de plus basse énergie

SM : Terme correctif

FSE : Enthalpie formelle stérique "brute"

FSE corrigée : Enthalpie formelle stérique corrigée

EAL : Énergie ab initio de la molécule

ZPE : Énergie au point zéro

Introduction générale

Plusieurs développements les plus significatifs dans la chimie, physique et génie chimique au cours du siècle dernier ont été basés sur les contributions de la thermodynamique. Le nombre sans cesse croissant d'articles contenant des données expérimentales sur les propriétés thermodynamiques et sur les équilibres des phases, ainsi que sur les nouvelles techniques expérimentales et les progrès dans la théorie et la simulation par ordinateur, démontrent la croissance sans relâche de ce champ d'activité. En revanche, les propriétés thermodynamiques des composés enregistrées par Chemical Abstracts sont connues pour une fraction minuscule, vu que le nombre de nouveaux composés trouvés ou synthétisés a considérablement augmenté ces dernières années.

Les enthalpies de formations appartiennent à ces propriétés thermodynamiques qui sont parmi les propriétés les plus importantes, jouant un rôle central dans la recherche et le développement. En effet, l'enthalpie de formation représente un enjeu important voire capital dans plusieurs domaines ou applications scientifiques telles que la synthèse de nouvelles molécules, le développement des matériaux énergétiques, la thermochimie, la simulation en chimie et en génie chimique, la prévention des risques chimiques (emballements thermiques réactionnels), et la combustion.

En revanche, les techniques calorimétriques pour la mesure des enthalpies de réactions sont très coûteuses et parfois difficiles à mesurer notamment si le composé concerné est métastable, toxique, ou s'il possède d'autres propriétés dangereuses. Il est donc intéressant de disposer de méthodes permettant d'obtenir des enthalpies de formation par un calcul entièrement prédictif notamment dans le cas de la recherche de nouveaux matériaux énergétiques du futur qui nécessite une connaissance a priori de cette propriété.

Plusieurs méthodes ont été proposées pour estimer l'enthalpie de formation des composés purs notamment à l'état gazeux. Malheureusement, ces méthodes ne s'appliquent qu'à de petites familles de molécules spécifiques ce qui rend ces méthodes

inutilisables à des fins d'extrapolation et la plupart d'entre elles affichent des erreurs de prédiction relativement élevées. Ceci est particulièrement vrai pour les composés énergétiques à l'état solide.

Le but de ce travail est donc de développer de nouvelles méthodes prédictives permettant d'estimer avec la meilleure précision possible les enthalpies de formation des composés organiques purs à partir uniquement de leurs structures moléculaires, et de donner une analyse détaillée de leurs performances par rapport aux méthodes précédemment publiées. Les méthodes proposées sont destinées à la fois aux composés à l'état condensé (solide et liquide) et ceux se trouvant à l'état gazeux, avec des intervalles de prédiction fiables et larges. Une attention particulière a été portée sur les composés à l'état solide et plus particulièrement sur les molécules énergétiques contenant des groupements azotés et oxygénés dont l'enthalpie de formation est relativement élevée. Ce choix repose sur le fait qu'il y a relativement peu de travaux en ce qui concerne la phase condensée. L'approche de contribution de groupes d'ordre trois est principalement adoptée pour le développement des modèles proposés. Également, la méthode de la théorie fonctionnelle de la densité est utilisée.

Afin d'atteindre nos objectifs, il a été nécessaire de mener de nombreux travaux annexes tels que :

- ✓ la collecte judicieuse du plus grand nombre possible de valeurs expérimentales des enthalpies de formation puis de les valider,
- ✓ la détermination des expressions théoriques des modèles proposés,
- ✓ le développement des outils et des programmes numériques tels que la régression des paramètres des modèles, etc.

Le présent travail comporte six grands chapitres.

Le premier chapitre consiste à donner dans un premier temps des compréhensions théoriques et des notions de base sur la propriété thermodynamique que l'on cherche à modéliser. La deuxième partie de ce chapitre présente une revue bibliographique des différentes méthodes prédictives des enthalpies standards de formation à savoir les méthodes de contribution de groupes et les méthodes ab-initio. La dernière partie est consacrée à la description des outils de calculs informatiques développés dans le cadre de notre thèse.

Le deuxième, troisième et quatrième chapitres seront dédiés à la mise en place pratique des modèles de contribution de groupes d'ordre trois pour la prédiction des

enthalpies standards de formation à l'état solide, liquide et gaz, respectivement. Dans chaque chapitre, les résultats de prédiction obtenus sont discutés, analysés et comparés aussi bien à des valeurs expérimentales existantes qu'à des valeurs calculées par des méthodes concurrentes issues de la littérature.

Le cinquième chapitre présente une autre approche de modèles prédictifs basés sur les réseaux de neurones afin d'améliorer le pouvoir prédictif et la qualité de l'estimation des modèles proposés. En effet, l'utilisation des réseaux de neurones pour l'estimation des propriétés thermodynamiques des molécules est devenue un domaine en plein essor, en raison des progrès très rapides de la simulation moléculaire et les calculateurs numériques. Trois modèles basés sur les réseaux de neurones artificiels sont proposés pour chaque état physique. De même, les résultats trouvés sont discutés et comparés, à la fois, avec ceux des méthodes développées dans le cadre de cette thèse, et avec ceux des méthodes trouvées dans la littérature et des valeurs expérimentales existantes.

Le dernier chapitre quant à lui, présente une autre approche différente de modélisation de l'enthalpie de formation basée sur théorie fonctionnelle de la densité (DFT). Un modèle prédictif a été développé pour l'estimation de l'enthalpie de formation à l'état gazeux utilisant le logiciel GAUSSIAN. La suite du chapitre est consacrée à la présentation et la description des résultats, suivi par une étude comparative entre les valeurs expérimentales et les valeurs issues des méthodes de contribution de groupes.

Enfin, une conclusion générale récapitulant les principaux résultats obtenus et évoquant les perspectives de ce travail sera donnée.

Chapitre I: Concepts de base et revus bibliographiques

I.1 Introduction

L'enthalpie de formation est une quantité thermodynamique importante voire capitale dans plusieurs domaines et applications scientifiques notamment dans la synthèse de nouvelles molécules et des matériaux énergétiques ainsi que dans la prévention des risques chimiques.

Dans ce premier chapitre, nous abordons dans premier temps les différentes notions théoriques liées au calcul des enthalpies de formation des composés organiques purs. Dans un deuxième temps, une description du concept de contribution de groupes, qui est à la base de notre travail est avancée. Suivra une description des notions de base des méthodes ab initio de chimie quantique.

Enfin, les outils de calculs numériques développés dans le cadre de ce travail seront présentés.

I.2 Notions fondamentales d'enthalpie de formation

Il serait inexact de définir et décrire l'enthalpie de formation sans décrire quelques notions fondamentales de la thermodynamique. C'est à partir des d'équations d'états usuelles en thermodynamique que l'enthalpie de formation est défini. Certains énoncés peuvent être donnés de ces équations d'état, et ce n'est pas l'objet de cette partie de les recenser ou de démontrer. Nous nous contentons ici de quelques rappels en mettant l'accent sur les points qui nous paraissent les plus importants pour la suite de ce manuscrit.

La thermodynamique est née de l'étude des relations existant entre la mécanique et la chaleur. Avec l'amélioration de la compréhension des phénomènes chimiques et

électriques, le domaine d'application de la thermodynamique s'est étendu à l'étude de processus tels les phénomènes chimiques ou physiques dans lesquels des échanges d'énergie ont lieu [1]. Les études thermodynamique des systèmes permettent de comprendre leurs évolutions dans certaines conditions, par conséquent, des études de modélisations sont relaissées. La modélisation d'un système consiste à établir des relations mathématiques entre certaines variables d'état.

I.2.1 Équation d'état

Une équation d'état d'un système à l'équilibre thermodynamique est une relation qui existe entre différentes variables d'état qui déterminent son état. Elle peut être représentée par une expression mathématique :

$$E(T, P, V, N) = 0 \quad (1)$$

Il s'agit de la relation existant entre les variables d'état les plus commodes et les plus répandues ; à savoir la température et la pression, le volume occupé et la quantité de matière pour un corps pur ou pour un mélange. Cette équation est le plus souvent ramenée à une mole :

$$E(T, P, v) = 0 \quad (2)$$

Les équations d'état dépendent considérablement de l'état physique de la matière (gazeux, liquide ou solide). À l'état gazeux, il existe quelques équations d'état remarquables, par leur caractère très général, voire universel ou par leur simplicité telles que l'équation d'état des gaz parfaits ou celles de Van der Waals et Clausius. En revanche, les équations d'état des solides et des liquides sont plus complexes et il n'existe pas d'équation générale comme pour les gaz.

I.2.2 Les quatre fonctions d'état : U, H, F et G

Toutes les bases théoriques de la thermodynamique peuvent être présentées en utilisant uniquement les cinq variables fondamentales, c'est-à-dire : P, V, T, U et S . Cependant, il convient souvent, dans nombre d'applications, d'utiliser des variables auxiliaires ou fonctions auxiliaires qui s'avèrent être plus appropriées à des problèmes spécifiques. On obtient logiquement ces fonctions auxiliaires par transformations de Legendre de l'énergie interne, U . La méthode des transformations de Legendre ainsi que son application aux fonctions thermodynamiques permettant d'obtenir des fonctions caractéristiques (fonction d'état extensive d'un

corps pur). Ces fonctions sont formées par des combinaisons simples de variables fondamentales.

Les quatre fonctions caractéristiques, également appelées les quatre potentiels thermodynamiques possibles d'un corps pur, sont les suivantes :

- l'énergie libre $F = F(V, T)$;
- l'enthalpie libre $G = G(p, T)$.
- l'énergie interne $U = U(V, S)$;
- l'enthalpie $H = H(p, S)$;

L'énergie libre (ou fonction de Helmotz):

$$F = U - TS = -PV + \sum_i n_i \mu_i \quad (3)$$

avec la combinaison de l'équation de l'équation Gibbs, donne :

$$dF = -SdT - PdV + \sum_i \mu_i dn_i$$

L'enthalpie libre G (ou fonction de Gibbs) :

Cette équation est définie par :

$$G = H - TS = \sum_i n_i \mu_i \quad (4)$$

Le différentiel dG couplé à la formule de Gibbs-Duhem donne :

$$dG = -SdT + VdP + \sum_i \mu_i dn_i \quad (5)$$

Nous avons ainsi défini quatre fonctions d'état thermodynamique : $U(S, V, n_i)$; $H(S, P, n_i)$; $F(T, V, n_i)$ et $G(T, P, n_i)$. La définition de l'enthalpie combinée à la relation suivante :

$$U = TS - PV + \sum_i \mu_i n_i \quad (6)$$

Donne :

$$H = U + PV = TS + \sum_i \mu_i n_i \quad (7)$$

Compte tenu de l'équation de Gibbs, ces quatre fonctions et leurs différentielles s'écrivent :

$$U = TS - PV + \sum_i \mu_i n_i \quad (8)$$

$$H = TS - \sum_i \mu_i n_i \quad (9)$$

$$F = -PV + \sum_i \mu_i n_i \quad (10)$$

$$G = \sum_i \mu_i n_i \quad (11)$$

Donc :

$$dU = TdS - PdV + \sum_{i=1}^n \mu_i dn_i \quad (12)$$

$$dH = TdS + VdP + \sum_{i=1}^n \mu_i dn_i \quad (13)$$

$$dF = -SdT - PdV + \sum_{i=1}^n \mu_i dn_i \quad (14)$$

$$dG = -SdT + VdP + \sum_{i=1}^n \mu_i dn_i \quad (15)$$

I.2.3 Enthalpie

Le mot enthalpie vient du grec, le préfixe « en » signifiant « apporter » et le mot « thalpein » signifiant « chaleur » [2]. L'enthalpie est une potentielle thermodynamique. Il s'agit d'une fonction d'état correspond à l'énergie totale d'un système thermodynamique. C'est la somme de l'énergie interne, qui est la quantité d'énergie nécessaire pour la création de système, à laquelle est additionné le travail que ce système doit exercer contre la pression extérieure pour occuper son volume.

À partir de cette relation, on voit que l'augmentation de l'enthalpie d'un système est égale à la chaleur ajoutée :

$$\delta H = dQ \quad (16)$$

à condition que le système est sous pression constante ($dP = 0$) et que le seul travail fait par le système est celle du travail de détente ($\delta\dot{W} = dQ$). Pour les systèmes à pression constante, le changement d'enthalpie est égal à la chaleur reçue par le système. Par conséquent, le changement d'enthalpie peut être conçu ou présenté sans le besoin de la mécanique de compression ou de détente; pour un système simple, avec un nombre de particules constantes, la variation d'enthalpie est la somme totale de l'énergie thermique dérivée d'un processus thermodynamique dans lequel la pression est maintenue constante. L'enthalpie totale d'un système ne peut pas être mesurée directement; la variation d'enthalpie d'un système est mesurée à la place. La variation d'enthalpie est définie par l'équation suivante:

$$\Delta H = H_F - H_I \quad (17)$$

Où ΔH est la "variation d'enthalpie" et H_F est l'enthalpie finale du système, exprimée en joules. Dans une réaction chimique, H_F et H_I sont l'enthalpie des produits finaux et initiaux du système respectivement, exprimées en joules. Pour une réaction exothermique (réaction qui libère de la chaleur) à une pression constante, le changement d'enthalpie dans le système est égal à l'énergie libérée lors de la réaction, y compris l'énergie retenue par le système et l'énergie perdu à travers l'expansion contre son environnement. D'une manière similaire, pour une réaction endothermique (réaction qui absorbe de la chaleur), la variation d'enthalpie est égale à l'énergie absorbée dans la réaction, y compris l'énergie perdue par le système et de l'énergie obtenu à travers la compression à partir de son environnement.

Bien que l'enthalpie soit couramment utilisée dans l'ingénierie et la science, il est impossible de la mesurer directement, comme l'enthalpie à aucun point de référence. Par conséquent, l'enthalpie peut être utilisée seulement avec précision dans un système fermé. [3]

I.2.4 Enthalpie de transformations physiques

L'enthalpie de transformations physiques ou chaleur latente d'un corps pur est défini par la variation d'enthalpie $\Delta H_{1,2} = H_2 - H_1$ lors du passage du système de l'état 1 à l'état 2.

Admettons qu'un corps de masse m passant de l'état 1 à l'état 2, l'enthalpie associée à ce changement d'état est donnée par :

$$\Delta H_{1,2} = mL_{1,2} \quad (18)$$

Le changement d'enthalpie d'un état 1 à un état 2 est toujours l'opposé de celle du passage de l'état 2 à l'état 1 :

$$\Delta H_{1,2} = -\Delta H_{2,1} \quad (19)$$

En fonction de changement physique de la matière il existe plusieurs définitions de l'enthalpie, à savoir :

- Enthalpie de fusion ($\Delta_{fus}H$) définie comme étant la variation d'enthalpie requise pour changer complètement l'état d'une mole de substance de l'état solide vers l'état liquide.
- Enthalpie de vaporisation ($\Delta_{vap}H$), définie comme étant la variation d'enthalpie requise pour changer complètement l'état d'une mole de substance de l'état liquide vers l'état gazeux. Enthalpie de vaporisation est fonction de la température et la pression.
- Enthalpie de sublimation ($\Delta_{sub}H$), définie comme la variation d'enthalpie requise pour changer complètement l'état d'une mole de substance de l'état solide vers l'état gazeux à une température et pression données.

Le contraire de la vaporisation est la condensation et le contraire de la fusion est la solidification. Les variations d'enthalpie de congélation et de condensation sont respectivement égales mais de signe opposé aux variations d'enthalpie de fusion et de vaporisation, car la chaleur fournie pour vaporiser ou liquéfier la substance est libérée quand elle se condense ou se congèle. Dans tous les cas, la variation d'enthalpie d'une transition inverse est égale et de signe opposé à la variation d'enthalpie de la transition directe (dans les mêmes conditions de température et de pression) [4].

Le passage direct de l'état solide à l'état de vapeur est une sublimation, le processus inverse est une condensation à l'état solide. L'enthalpie étant une propriété d'état, on doit obtenir la même variation d'enthalpie lors de la conversion directe de solide en vapeur et lors de la conversion indirecte (voir Figure 1), dans laquelle le solide fond en donnant le liquide, qui se vaporise ensuite:

$$\Delta_{sub}H = \Delta_{fus}H + \Delta_{vap}H \quad (20)$$

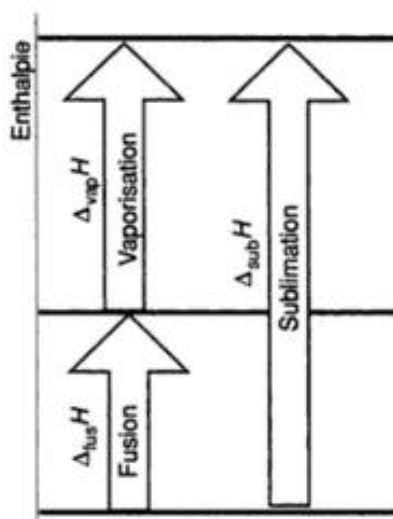
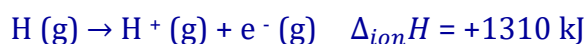


Figure 1: Enthalpie de sublimation à une température donnée est la somme des enthalpies de fusion et la vaporisation à cette température [4].

I.2.5 Transformations atomiques et moléculaires

I.2.5.a Enthalpie d'ionisation

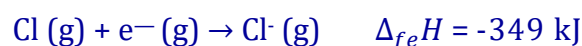
Parmi les changements des valeurs d'enthalpie sont ceux qui accompagnent les transformations affectant les molécules et les atomes individuels. L'une des plus importantes est l'enthalpie d'ionisation, $\Delta_{ion}H$, représentant la variation d'enthalpie molaire accompagnant la perte d'un électron par un atome (ou un ion) en phase gazeuse [4]. Par exemple,



L'enthalpie d'ionisation des atomes d'hydrogène est notée $+1310 \text{ kJ.mol}^{-1}$. Cette valeur signifie qu'il faut fournir 1310 kJ de chaleur pour ioniser 1 mol de H. L'ionisation des atomes neutres est dans tous les cas endothermique, si bien que toutes les enthalpies d'ionisation des atomes neutres sont positives.

I.2.5.b Enthalpie de fixation d'électrons

La fixation d'électrons est l'inverse de l'ionisation, et la variation d'enthalpie molaire correspondante est nommée enthalpie de fixation d'électrons, $\Delta_{fe}H$ [4]. Par exemple, les expériences montrant que

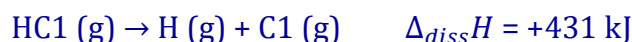


il s'ensuit que l'enthalpie de fixation d'électrons des atomes de Cl est -349 kJ.mol^{-1} . On notera que la fixation d'électrons par Cl est un processus exothermique, de sorte qu'il y a

libération de chaleur quand un atome de Cl capture un électron et forme un ion Cl^- en phase gazeuse.

1.2.5.c Enthalpie de liaison

La variation d'enthalpie qui accompagne les transformations affectant la dissociation, ou rupture d'une liaison chimique, comme dans le processus suivant, est appelée l'enthalpie de liaison $\Delta_{diss}H$.



Dans cet exemple l'enthalpie de liaison de H - Cl est de 431 kJ/mol (le signe des enthalpies de liaison est toujours positif).

1.2.6 Enthalpie des transformations chimiques

1.2.6.a Enthalpie de réaction

Pendant d'une réaction chimique, le milieu réactionnel échange de l'énergie avec le milieu extérieur sous forme de chaleur. Cette énergie Q dépend des conditions expérimentales dans lesquelles se produit la réaction. Cette grandeur, notée $\Delta_r H$, est indispensable si l'on veut garder la trace des variations d'énergie de certaines réactions, dans l'industrie ou en biologie, par exemple, et sera tout aussi indispensable pour estimer la composition à l'équilibre des réactions chimiques [4].

L'enthalpie de réaction $\Delta_r H$ correspond à la variation d'enthalpie du mélange réactionnel pour un avancement ξ de la réaction en cours égal à 1 mol. Elle s'exprime en joule par mole (J/mol). En conséquence, si nous connaissons l'avancement d'une réaction effectuée à température T et pression P constantes, nous pouvons calculer la variation d'enthalpie $\Delta_r H$ associée à cette réaction par la relation suivante :

$$\Delta_r H_{T,P} = \left(\frac{\partial H}{\partial \xi} \right)_{T,P} = \sum_i \nu_i h_i(T,P) \quad (21)$$

Avec

- $\nu_i < 0$ pour un réactif ;
- $\nu_i > 0$ pour un produit;

Ainsi, si nous connaissons l'enthalpie de réaction ($\Delta_r H_{T,P}$) nous pouvons accéder à la quantité d'énergie libérée sous forme de chaleur:

$$\Delta H_{T,P} = \int_0^{\xi} \Delta_r H_{T,P} \cdot d\xi = Q_P \quad C$$

1.1.1.1 La combinaison des enthalpies de réaction

L'enthalpie de réaction $\Delta_r H$ d'un composé pur ne peut pas être calculée d'une manière absolue car elle est en fonction de l'énergie interne qui n'est pas calculable. Néanmoins, l'enthalpie recherchée peut être estimée à partir des enthalpies de réactions connues indexées dans des tables.

1.1.1.2 Loi de Hess

Si une réaction peut être écrite sous la forme d'une combinaison linéaire de plusieurs équations-bilans de réactions, l'enthalpie standard de cette réaction à une température T s'obtient à partir de l'enthalpie standard des différentes réactions à la même température par une combinaison linéaire faisant intervenir les mêmes coefficients.

L'enthalpie de réaction d'une réaction donnée, à une température T et une pression P , peut être écrite sous la forme d'une somme des enthalpies de formation des produits à l'état final, diminuée de la somme des enthalpies de formation des réactifs à l'état initial, en prenant en considération la stœchiométrie de la réaction.

$$\Delta_r H_{T,P} = \sum_{i, \text{Produits}} \Delta_f H_i(\text{produits}) - \sum_{j, \text{Réactifs}} n \Delta_f H_j(\text{Réactifs}) \quad (22)$$

La variation d'enthalpie correspond à la différence de hauteur entre les paliers et son signe indique s'il s'agit d'une réaction endothermique ou exothermique. [5]

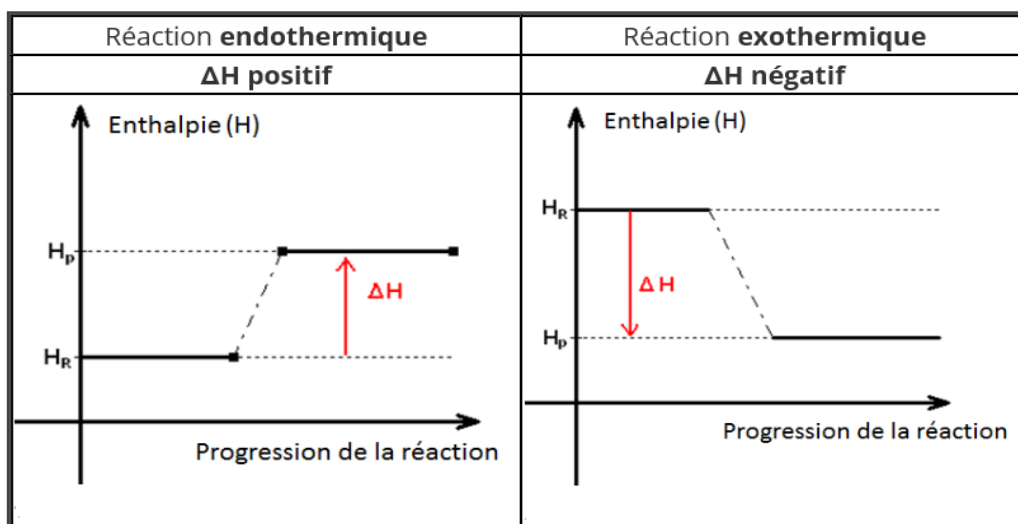


Figure 2: Enthalpie de réaction correspond à la différence d'enthalpie entre les produits de la réaction et les réactifs [5].

I.2.6.b Enthalpie de formation:

L'enthalpie de formation, $\Delta_f H(T)$, joue un rôle important dans la thermochimie et les systèmes réactionnels car elle permet de donner l'accès à l'enthalpie standard de réaction, $\Delta_r H^\circ(T)$ de n'importe quelle réaction (voir l'équation précédente). En effet, l'enthalpie de formation peut être combinée pour déterminer la variation d'enthalpie standard de n'importe quelle réaction.

Également, il a noté que l'enthalpie standard de formation, $\Delta_f H^\circ$, d'un composé est l'enthalpie standard de sa formation à partir de ses éléments dans leur état de référence¹.

L'état standard d'un composé ou d'un élément est défini comme la forme la plus stable de la matière à l'état physique qui existe sous une pression de 1 bar et à une température spécifiée. La plupart des tables rapport les enthalpies molaires standard de la formation sont à 25 ° C (298 K), [6].

I.2.7 Détermination expérimentale d'enthalpie de formation

Les méthodes d'analyse de calorimétrie sont des techniques d'essai très utilisées dans le domaine de recherche ou d'industriel. La technique d'analyse thermique de calorimétrie est largement développée durant ces dernières années grâce au développement des d'instruments mieux adaptés et au développement de l'informatique et de l'électronique [7].

I.2.8 Définition et origines de la calorimétrie

La calorimétrie a une place d'autant plus capitale dans l'étude des phénomènes chimiques, physiques ou biologiques qu'ils s'accompagnent fréquemment d'un échange de chaleur mesurable. Le terme calorimètre a été proposé pour la première fois par Antoine Lavoisier. Chez les thermiciens et les calorimétristes, la calorimétrie a toujours été la science de la mesure de la chaleur. En revanche, chez les physiciens ce n'est pas toujours le cas, où la chaleur n'est considérée comme une grandeur physique mais seulement un processus. Récemment, l'Union de Chimie Pure et Appliquée (IUPAC) a abouti à un consentement international sur la définition des grandeurs utilisées en physico-chimie. Il semble finalement que la définition la calorimétrie est comme la mesure des transferts thermiques entre le système étudié et son environnement [8].

¹ État de référence est la forme la plus stable d'un élément dans ces conditions.

I.2.9 Classification opérationnelle des calorimètres

Parmi les obstacles dans la compréhension des calorimétries vient de la multiplicité des principes de calorimètres développés. Chaque classification des différents types des calorimètres a bien sûr ses justifications, sa logique et ses critères. Pourtant, leur multiplicité montre une certaine insatisfaction. En fait, certaines font appel à des notions de modélisateur spécialisé ou de thermicien, d'autres ne sont pas exhaustives et d'autres font appel à des critères fréquemment très complexes. De ce fait, il est souhaitable d'offrir une classification qui sera à la fois :

- universelle, capable de contenir tous les calorimètres existants ou même qui vont exister;
- facile à être appliqué et qui se basant uniquement sur le principe du calorimètre et qui ne nécessitant pas des corrections expérimentales de ses paramètres ;
- respectueuse, autant que possible des différenciations les plus souvent utilisées par les expérimentateurs.

Une telle classification a finalement vu le jour dans le cadre d'une collaboration internationale. Nous en donnons ci-dessous les principaux éléments. Pour la comprendre, il nous suffit de symboliser un calorimètre par le schéma de la Figure 3.

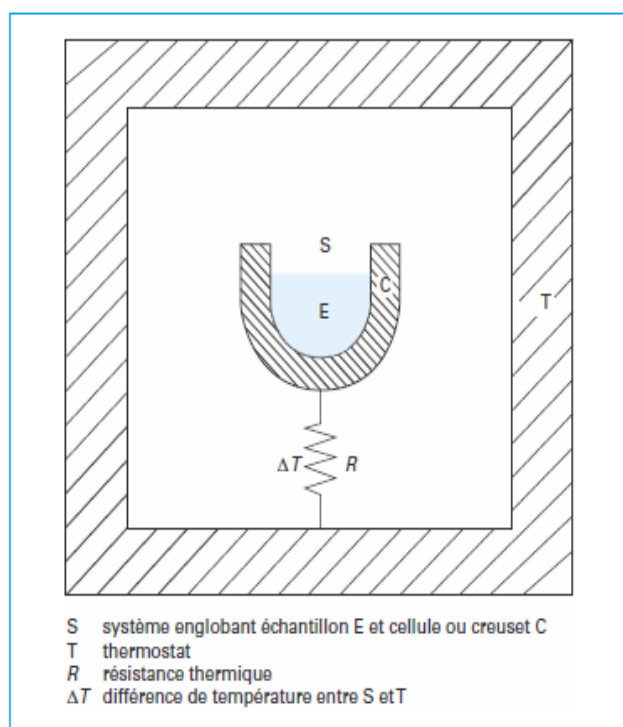


Figure 3: Représentation schématique d'un calorimètre [8]

Le système S comporte à la fois l'échantillon étudié E et la cellule C qui l'enveloppe, avec laquelle il est en bon contact thermique et qui se trouve donc à une température commune T_s . Cette cellule est aussi appelée cellule-laboratoire ou creuset. Le thermostat T est un élément indispensable à toute mesure calorimétrique ; sa température T_T est uniforme, mais, comme on le verra, elle n'est pas nécessairement constante.

Le critère utilisé dans la classification qui suit est celui de la façon dont se produisent les échanges de chaleur entre le système S et le thermostat T. Cela permet immédiatement de différencier deux grandes familles de calorimètres:

1. *Les calorimètres adiabatiques*, où l'on cherche à interdire tout échange de chaleur entre le système S et le thermostat T qui l'entoure ;

2. *les calorimètres diathermes* où, au contraire, on cherche à favoriser cet échange.

L'adjectif « adiabatique », qui provient du mot grec « *adiabatos* (ne peut être traversé) », s'applique en effet à toute paroi imperméable à la chaleur, tandis que l'adjectif « diatherme », qui vient du grec « *dia* » et « *thermos* » (« à travers » et « chaud »), s'applique au contraire à toute paroi laissant passer la chaleur.

Dans les calorimètres adiabatiques, toute chaleur produite ou absorbée par l'échantillon produit une variation de température du système S non contrôlée par l'expérimentateur et qui fait précisément l'objet de la mesure.

Dans les calorimètres diathermes, cette chaleur est rapidement échangée avec le thermostat dont le système S prend facilement la température. Cette chaleur est mesurée soit pendant ce transfert (à l'aide d'un fluxmètre thermique) soit à son arrivée sur le thermostat (à l'aide d'un changement de phase ou d'un échangeur à flux de liquide). Si l'expérimentateur contrôle la température du thermostat, il contrôle finalement aussi celle de l'échantillon.

Il en découle une subdivision de chacune des deux grandes familles citées plus haut en deux groupes, que nous pouvons appeler « *passif* » et « *actif* ». Cela nous donne finalement quatre groupes de calorimètres : [8]

1. adiabatiques passifs ;
2. adiabatiques actifs ;
3. diathermes passifs ;
4. diathermes actifs.

I.3 Méthodes de contribution de groupes

I.3.1 Introduction

Une méthode de contribution de groupe est utilisée pour prédire les propriétés des composés purs et des mélanges en utilisant les propriétés du groupe (fragment moléculaire). Il est supposé que la valeur d'une propriété d'une molécule est une fonction de la contribution de tous les groupes et une valeur d'une propriété donnée de tout groupe a la même contribution dans toutes les molécules.

Ceci réduit le nombre de données nécessaires de façon spectaculaire. Au lieu d'avoir besoin de connaître les propriétés de milliers ou des millions de composés, seules les données pour quelques dizaines ou des centaines de groupes doivent être connues.

Les méthodes de contribution de groupes ont été largement utilisées pour la prédiction des propriétés des composés purs et des mélanges. Les propriétés étudiées incluent à la fois les propriétés thermodynamiques et physico-chimiques.

I.3.2 Classes des fragments des méthodes de contribution de groupes

Les méthodes de contribution de groupes sont basées sur des schémas de fragmentation bien définis en fonction de la contribution et la manière d'influence de chaque groupe sur la propriété. Par exemple, l'évolution de l'enthalpie de formation est proportionnelle au nombre de carbone dans les composés hydrocarbonés linaires. Pour cela plusieurs modes de fragmentation sont proposés en commençant par les travaux de Benson et Buss [9], ou ils ont démontrés en 1958, que quelques propriétés peuvent être modélisées par l'intervention de découpages d'ordre deux. Les groupes sont les petits fragments aux quels la molécule est découpée, et le groupe à son tour est construit par des pseudo-éléments, qui sont les éléments constitutifs d'un groupe.

Dans la littérature il existe plus types de découpage de molécules pour estimer ses propriétés. Ces techniques de découpage sont classées suivant l'ordre de voisinage d'un groupe.

1.1.1.3 Groupe d'ordre 0 - Contribution atomique

Ce genre de découpages touche la composition élémentaire de la molécule, il consiste à citer le nombre des atomes constituant ce composé ; alors une propriété est ainsi considérée comme étant une somme de contributions atomiques.

1.1.1.4 Groupe d'ordre 1 - Contribution des liaisons entre atomes

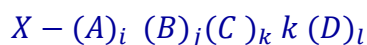
La fragmentation d'ordre un, consiste à donner le nombre de groupes qui composent la molécule, sans prendre en considération l'entourage de ce groupe. À titre d'exemple, ce groupe peut être C, CH, CH_2, CH_3 . Les contributions (valeurs des paramètres) correspondant à ces groupes sont les mêmes et ne changent pas avec le changement de leur entourage, c'est-à-dire qu'un groupe CH_2 au voisinage de la fonction alcool (OH) est similaire à celui qui est entouré par des groupes de carbone (C, CH, CH_2, CH_3).

Les méthodes utilisant les contributions de groupes de premier ordre sont assez souvent employées vu qu'ils unissent à la fois la une relative simplicité et une précision satisfaisante. Cependant, il est indispensable de souligner que certaines de ces méthodes ne sont pas fiables. En effet, l'estimation des enthalpies (grandeurs indispensables dans les études et les simulations de procédés) par des méthodes utilisant une fragmentation d'ordre 1, a souvent été remise en cause.

1.1.1.5 Groupe d'ordre 2 : contribution des groupements fonctionnels

L'aspect mathématique des méthodes de contribution de groupes consiste à comprendre la contribution de chaque groupe proposé. Généralement, les corrélations d'estimation des propriétés, les plus simples, sont exprimées par la sommation des contributions de chaque groupe multiplié par l'occurrence de ce dernier. Le groupe a pour but de fournir des informations sur la structure moléculaire, qui est traduite à la suite par des corrélations mathématiques. La méthode la plus puissante est celle qui est capable de traduire une structure moléculaire en groupes pertinents décrivant correctement sa structure moléculaire et la majorité des effets électroniques et faire différencier entre les différentes conformations moléculaires. Les méthodes de contribution de groupes basées sur l'ordre zéro et premier ordre de découpages montrent des erreurs inacceptables, et cela peut être justifié par la nature du groupe proposé. Souvent, les méthodes de contribution de groupes ne permettent pas de distinguer les différentes formes isométriques de composés similaires. Alors des scientifiques ont cherché d'autres solutions pour ce problème, par exemple ils ont introduit l'hybridation des différentes classes de découpages qui comportent l'utilisation de deux genres de groupes, le premier et le deuxième ordre de fragmentations pour but de fournir plus d'information, et par conséquence l'amélioration du pouvoir prédictif de ces méthodes.

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



Où X représente l'atome central auquel sont liés i atome(s) A, j atome(s) B, k atome(s) C et l atome(s) D. On peut prendre pour exemple l'atome de carbone, C. Si ce dernier est un atome central, il peut former plusieurs groupes, tels que



En général, les méthodes de second ordre conduisent à de bons résultats par rapport aux méthodes d'ordre zéro et du premier ordre, vu que ces méthodes (de second ordre) prennent en considération l'entourage de chaque groupe. Cette technique de second ordre permet d'augmenter la précision de la méthode grâce à la possibilité de fournir plus d'information sur les liaisons et les différentes interactions possibles.

Afin d'illustrer les différents découpages évoqués plus haut, prenons l'exemple de la molécule : 1,1'-ethenyldenebis [4-méthylbenzène]:

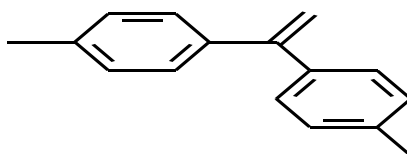


Figure 4: 1,1'-ethenyldenebis [4-méthylbenzène] (CAS : 2919-20-2).

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

Méthode	Groupe	Nombre de groupes
Méthode d'ordre 0	C	16
	H	16
Méthode d'ordre 1	- CH ₃	02
	= CH ₂	01
	= C<	01
	-CH - <i>arom</i>	08
	-C < <i>arom</i>	04
Méthode d'ordre 2	C _d - (H) ₃	01
	C _d - (C _B) ₂	01
	C - (C _B)(H) ₃	02

$C_B - (H)$	08
$C_B - (C)$	02
$C_B - (C_d)$	02

Tableau 1 : Découpage de la molécule de 1,1'-ethenylidenebis [4-methylbenzene] en groupes.

1.1.1.6 Groupe d'ordre 3

La technique de fragmentation d'ordre 3 d'une structure moléculaire est considérée comme un ensemble de trois types de groupes: les groupes de premier ordre, des groupes de second ordre et de groupes de troisième ordre.

Les groupes de premier ordre sont des groupes simples nombreux qui permettent de décrire une grande variété de composés organiques. Les groupes de second ordre sont destinés pour une meilleure description des composés multifonctionnels et de la différenciation entre les isomères. En ce qui concerne les groupes de troisième ordre, ces groupes permettent une représentation très détaillée des systèmes non cyclique multifonctionnels, des systèmes de cycles aromatiques et non aromatiques fusionnés ou non fusionnés et des systèmes d'anneaux non fusionnés reliés par des chaînes dans lesquelles peut se produire des groupes fonctionnels différents.

Afin d'illustrer les différents découpages évoqués plus haut, deux exemples illustratifs sont donnés.



Figure 5: 1,9-nonadiol

Méthode	Groupe	Nombre de
Ordre 1	OH	2
	CH_2	9
Ordre 2	Aucun groupe de second ordre	0
Ordre 3	$HO - (CH_2)_m - OH$ ($m > 2$)	1

Tableau 2 : Découpage de la molécule de 1,9-nonadiol en groupes.

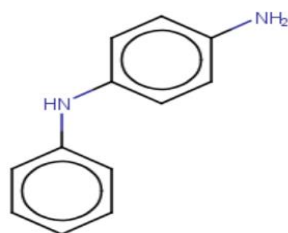


Figure 6: N-Phenyl-1,4-benzenediamine

Méthode	Groupe	Nombre	de
Ordre 1	CH_3	8	
	aC	1	
	$aC - NH_2$	1	
	aC-NH	1	
Ordre 2	AROMRINGs1s4	1	
Ordre 3	$aC - NH - aC$ (different rings)	01	

Tableau 3 : Découpage de la molécule de N-Phenyl-1,4-benzenediamine en groupes.

1.1.1.7 Groupe hybride

Ces types de méthodes utilisent principalement des groupes d'ordre un et parfois d'ordre deux suivant un schéma de découpage spécifique. Également, des corrections de cycles et des corrections d'interactions moléculaires sont ajoutées afin de pallier le manque d'information sur la molécule et ainsi diminuer les erreurs des prédictions.

I.3.3 Revue des méthodes de contribution de groupes donnant l'enthalpie de formation

Dans la littérature scientifique, plusieurs travaux de contribution de groupes estimant l'enthalpie de formation ont été proposés utilisant différents schémas de découpage et différents types de modèles (linéaire, non linéaire, réseaux de neurones, ...). Plusieurs de ces méthodes peuvent être citées néanmoins, nous allons sélectionner quelques-unes en se basant sur l'étendue de leurs domaines d'application et/ou de leurs précisions. Ces méthodes sont recensées ci-après, bien que la liste ne prétende pas d'être exhaustive.

I.3.3.a Méthode de Benson

Une des méthodes les plus couramment utilisées pour estimer les propriétés thermochimiques a été formulée par Benson et Buss en 1958 [9]. Benson et ses collègues ont développé des méthodes de contribution de groupes d'ordre 2 pour estimer principalement, et dans premier temps, l'enthalpie de formation à l'état gazeux

[8]. Ensuite ces méthodes se sont généralisées pour estimer l'entropie, la capacité calorifique, qui permettent ensuite d'obtenir l'énergie libre de formation en phase gazeuse à 298,15 K. Il y a plusieurs références aux travaux de Benson, (1968; Benson et Buss, 1969; Benson et al., 1969; O'Neal et Benson, 1970; Eigenmann et al., 1973; Stein et al., 1977) [10] [11] [7] [12] [13] [14].

Parmi les sources d'erreur dans ces méthodes d'ordre 2 il y a la présence des cycles et les interactions à longue distance. Afin de prendre en considération les effets de tension de cycle dans le cas des molécules cycliques, Benson a introduit des corrections de structure, telles que des corrections de cycle (ex : cyclohexane). Par ailleurs, des interactions à longue distance sont également prises en compte, telles que les effets de deux atomes ou groupements placés en position ortho, méta ou para sur un cycle benzénique.

La relation donnant l'enthalpie de formation standard suivant la méthode de Benson est simple, c'est la somme des paramètres correspondent aux différents groupes constituant la molécule.

$$\Delta_f H^\circ_{gaz}(KJ/mol) = \sum_{i=1}^N n_i A_i \quad (23)$$

ou :

A_i : La contribution de second ordre de type i avec l'apparition n_i fois.

Cette méthode est largement utilisée car elle traite plusieurs composés de différentes familles chimiques, qui comprennent, outre les éléments C, H, O, N, S et P, les halogènes (X), des métaux (Al, Ge, Pb,...), des métaux de transition (Ti, V, Cr, Fe,...) et des alcalins et alcalino-terreux (Na, K, Mg,...).

I.3.4 Méthode de Joback et al

La méthode de Joback utilise des groupes du premier ordre correspondant à des fragments hydrocarbonés et des groupements fonctionnels tels que : $-CH_3$, $>CH_2$, $=CH_2$, OH, Cl, etc. Elle s'applique uniquement aux molécules covalentes composées des éléments C, H, O, N, S, X, en phase gazeuse. Les contributions aux énergies de Gibbs, aux capacités calorifiques et aux enthalpies standards de formation, aux températures, pressions et volumes critiques, aux points d'ébullition et de fusion, sont disponibles.

Cette méthode est très simple et d'un usage large, mais généralement peu précise [15]. Cette méthode fut modifiée par Devotta et Pendyala [16] afin de traiter de façon plus précise le cas des températures d'ébullition des composés halogénés. Plusieurs autres grandeurs sont évaluées par la méthode de Joback et Reid [17].

Les relations donnant les propriétés traitées par la méthode sont les suivantes :

L'enthalpie de formation en phase gazeuse, à $T = 298,15$ K :

$$\Delta H_{f,g}^0 = 68,29 + \sum_k N_k(d_f h_k) \quad (24)$$

L'enthalpie libre de formation en phase gazeuse, à $T = 298,15$ K :

$$\Delta G_{f,g}^0 = 53,88 + \sum_k N_k(d_f g_k) \quad (25)$$

L'enthalpie de fusion :

$$\Delta H_{fus} = -0,88 + \sum_k N_k(dh_{fus k}) \quad (26)$$

L'enthalpie de vaporisation, à T_{eb}

$$\Delta H_{vap}(T_{eb}) = -15,30 + \sum_k N_k(dh_{vap k}) \quad (27)$$

Où $d_f h_k$, $d_f g_k$, $dh_{fus k}$, $dh_{vap k}$: sont les contributions de groupes de chaque propriété traitée.

Le nombre des composés employés afin d'établir les équations présentées ci-dessus, l'erreur absolue moyenne et la déviation standard pour chacune des propriétés estimées sont rassemblés dans le Tableau 4:

Propriété	Nombre de données	de	Erreur absolue moyenne (KJ.mol ⁻¹)	Déviation standard (KJ.mol ⁻¹)
$\Delta H_{f,g}^0$	378		8,4	18,0
$\Delta G_{f,g}^0$	328		8,4	18,3
Δh_{fus}	155		2,0	2,8
$\Delta H_{vap}(T_{eb})$	368		1,27	1,79

Tableau 4 : Erreurs absolues moyennes et déviations standard obtenues grâce à la méthode de Joback et Reid [17].

Le pouvoir prédictif de la méthode de Joback est légèrement précis pour les propriétés de formation de toutes les substances indépendamment de la taille. Les substances ayant des erreurs majeures sont des espèces halogènes, ce qui suggère que les contributions des groupes F, Cl, Br, I pourraient être révisées à la lumière de la plus grande abondance de données disponibles aujourd'hui que lorsque la corrélation a été développée. Mais, cette méthode donne des bons résultats pour l'estimation de capacités calorifiques concernant les gaz parfaits à température ambiante, et au-dessus de la température ambiante [18].

I.3.5 Méthode de Constantinou et Gani (CG)

Constantinou et Gani [19], ont proposés une méthode basée sur les groupes d'UNIFAC. Elle comporte deux niveaux de groupes ; premier et deuxième ordre. Cette méthode a pu améliorer significativement la précision des prédictions par rapport à la méthode d'ordre zéro, et de premier ordre. Cette méthode est développée pour l'estimation des différentes propriétés à savoir les enthalpies standard de formation en phase gazeuse, les enthalpies libres standard de formation en phase gazeuse et les enthalpies standard de vaporisation, à $T = 298,15$ K, ainsi que les paramètres critiques. Les relations suivantes représentent les modèles de prédictions des paramètres de formations à $T=298,15$ K :

$$\Delta H_{f,g}^0 = 10,835 + \left(\sum_k N_k(d_f h_{1k}) + \sum_k M_j(d_f h_{2j}) \right) \quad (28)$$

$$\Delta G_{f,g}^0 = 14,828 + \left(\sum_k N_k(d_f h_{1k}) + \sum_k M_j(d_f h_{2j}) \right) \quad (29)$$

$$\Delta H_{vap}^0 = 6,829 + \left(\sum_k N_k(d_f h_{1k}) + \sum_k M_j(d_f h_{2j}) \right) \quad (30)$$

Où $d_f h_{1k}$, $d_f g_{1k}$, dh_{vap1k} : sont les contributions de groupes de premier ordre.

Et $d_f h_{2j}$, $d_f g_{2j}$, dh_{vap2j} : sont les contributions de groupes de deuxième ordre.

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

Propriété	Nombre de données	Erreur absolue moyenne (kJ.mol ⁻¹)
ΔH_{fg}^0	373	3,71
ΔG_{fg}^0	333	3,24
ΔH_{vap}^0	225	1,11

Tableau 5 : Erreurs absolues moyennes obtenues grâce à la méthode de Constantinou et Gani [19].

I.3.6 Méthode de Domaliski et Hearing

Domaliski et Hearing [20] ont développé une méthode d'additivité de groupes basée sur la technique de Benson pour la prédiction de l'enthalpie de formation d'hydrocarbures. En 1993, Domaliski et ses collègues [21] ont amélioré l'applicabilité de leur méthode d'estimation par élargissement la base de données des molécules traitées, à savoir 1 512 molécules comportent le carbone, l'hydrogène, l'oxygène, l'azote, le soufre, et les halogènes dont uniquement 344 molécules à l'état solide principalement contenant les atomes C-H-O-N.

Les auteurs ont introduit une nouvelle technique pour prendre en compte des interactions répulsives générées par les atomes d'hydrogène des groupes méthyles liés à des carbones tertiaires ou quaternaires.

Malheureusement, la méthode de Domaliski et Hearing a affiché des erreurs élevées dépassant 8 KJ/mol pour plus de 258 molécules traitées soit 17% de la base de données. Également, la méthode présente un inconvénient majeur qui réside dans le fait qu'un nombre important de groupes leurs contributions sont évaluées uniquement à partir d'une seule, deux ou trois molécules, en particulier pour les groupes contenant de l'azote. Un autre inconvénient a souligné est que cette méthode ne fait pas de différence entre les trois phases en se contentant d'un traitement global.

I.3.7 Méthode de Cohen

Cohen 1996, [22] a introduit une méthode de prédiction de l'enthalpie de formation spécialement pour les molécules organiques hydrocarbonées et oxygénées dans les trois états solide, liquide et gaz. Cette méthode est considérée comme une extension de la méthode de Domaliski et Hearing, étant donné qu'elle est basée sur le même ordre de découpage. Cohen n'a pas suivi les mêmes techniques recommandées par Domaliski concernant des interactions répulsives générées par les atomes d'hydrogène des groupes méthyl. La méthode proposée a affiché des erreurs absolues moyennes de l'ordre de 5.5 KJ/mol , 5.6 KJ/mol et 9.1 KJ/mol à l'état gaz, liquide et solide, respectivement.

I.3.8 Méthodes de Salmon et Dalmazzone

En 2006, Salamon et Dalmazzone [23] [24] ont proposé deux méthodes de contribution de groupes pour la prédiction des enthalpies de formation à l'état solide pour les composés de type CH et CHO et des composés énergétiques de type CH , CHO , $CHON$. Les deux méthodes proposées ont été inspirées des travaux de Benson, basés sur un schéma de découpage d'ordre deux.

Dans la première méthode une base de données de 398 composés de type *CH* et *CHO* à l'état solide a été utilisée pour générer 165 groupes. Cette méthode a affiché une erreur absolue moyenne de 12.71 *KJ/mol* et un écart type de 25.16 *KJ/mol*.

La deuxième méthode représente une mise à jour de la première méthode étant donné que les auteurs ont élargi leur base de données couvrant à la fois les composés de type *CH* et *CHO* et ceux du type *CHON*. Cette méthode a proposé 480 groupes pour la prédiction de l'enthalpie de formation d'un ensemble de 1017 molécules à l'état solide comprenant 145 *CH*, 256 *CHO*, 482 *CHN* et *CHON*. Malheureusement, cette méthode intègre plusieurs corrections (115 groupes); à savoir les corrections cycliques (81 groupes), les interactions à longue distance (34 groupes), et parmi ces 480 groupes et corrections, 39.37% (189) d'entre eux sont générés par un seul composé. Ceci revient à dire que le pouvoir de prédiction de cette méthode est très limité avec des incertitudes élevées.

$$\Delta_f H_{gaz}^{\circ} (KJ/mol) = \sum_{i=1}^N n_i A_i + \sum_j M_j D_j \quad (31)$$

Avec

$\Delta H_{f,g}^0$ est la propriété de enthalpie de formation a estimée

A_i, M_j : la contribution du ième groupe et du jème groupe, respectivement.

n_i : l'occurrence du ième groupe et du jème groupe dans la molécule, respectivement.

Le tableau suivant présente les résultats trouvés.

Unité	Ecart moyen	Ecart type
$KJ.mol^{-1}$	17,9	38,9
$J.g^{-1}$	105,5	263,5

Tableau 6 : Erreurs absolues moyennes et écart type a obtenues grâce à la méthode d'Anna Salmon [24]

I.3.9 Méthode de Marrero et Gani

L'un des meilleurs schémas de découpage des structures moléculaires a été développé par Marrero et Gani [25] pour estimer les propriétés physico-chimiques et thermodynamiques avec une large gamme d'applications afin de traiter à la fois des simples molécules et des grandes molécules multifonctionnelles voire même complexes.

Ce schéma de découpage peut fournir un ensemble de fragments moléculaires (groupes) qui permet de capturer tous les effets significatifs sur la propriété, et donc une grande variété de composés organiques peut être décrite correctement tout en distinguant entre les isomères. Les groupes de Marrero-Gani sont divisés en trois types de groupes: premier ordre, de second ordre et des groupes de troisième ordre. Les groupes de premier ordre se composent d'un grand nombre de groupes simples qui permettent de décrire une grande variété de composés organiques. Cependant, ces groupes captent incomplètement les effets de proximité et les différences entre les isomères. Pour cette raison, Marrero et Gani [25] ont mis en place des groupes de deuxième ordre. Bien que ces groupes de second ordre permettent une amélioration très significative de la description de la structure moléculaire de certaines classes de composés, ils sont incapables de décrire des composés aromatiques, cyclo-aliphatiques avec plusieurs noyaux hétérocyclique ou/et de grands composés acycliques polyfonctionnels. Pour tenir compte de ces classes de composés et d'affiner la précision des valeurs estimées, Marrero et Gani [25] ont mis en place des groupes de troisième ordre.

Pour la détermination des paramètres de contribution de groupes, Marrero et Gani proposent d'utiliser trois étapes consécutives. Dans la première étape, seuls les groupes de premier ordre sont pris en compte. Cependant, la deuxième étape de la régression est réalisée à l'aide des groupes du premier ordre et ceux du second ordre, mais les paramètres des groupes du premier ordre sont maintenus fixés. Dans l'étape 3, les contributions des groupes du premier ordre et ceux du second ordre sont maintenus fixés pour déterminer les contributions des groupes de troisième ordre.

Récemment, l'équipe du professeur Gani [26] a développé un modèle précis pour l'estimation des enthalpies de formation des composés organiques à l'état gaz tout en basant sur un schéma de découpage d'ordre trois. La fonction donnant l'enthalpie de formation à l'état gaz est la suivante :

$$\Delta H_{f,g}^0 = \sum_i N_i C_i + \sum_j M_j D_j + \sum_k E_k O_k \quad (32)$$

Avec :

$\Delta H_{f,g}^0$ Est la propriété d'enthalpie de formation à estimer

N_i, M_j, E_k : Sont l'occurrence de chacun groupe dans la molécule.

C_i, D_j, O_k : Contribution de premier, second et troisième ordre de découpage.

Pour le développement de cette méthode les auteurs ont utilisé un ensemble de données contenant uniquement 861 valeurs expérimentales. Ces valeurs expérimentales de $\Delta H_{f,g}^0$ ont été prises à partir d'une base de données étendue CAPEC [27]. A noté que la plupart de ces composés sont des petites molécules simples. Le Tableau 7 affiche plus de détail sur la base de données utilisée par Marrero et Gani.

<i>Classe</i>	<i>CH</i>	<i>O</i>	<i>N</i>	<i>S</i>	<i>Cl</i>	<i>F</i>	<i>Br</i>	<i>I</i>	<i>P</i>	<i>Multi</i>
<i>Nombre</i>	264	257	160	27	30	5	9	5	1	103

Tableau 7 : Description d'ensemble des données expérimentales - Méthode de Marrero et Gani

Pour contourner l'absence de données expérimentales nécessaires à l'étape d'estimation des paramètres, les auteurs ont utilisé la méthode de l'indice de connectivité atomique (CI) pour créer les groupes disparus et de prédire leurs contributions. Cette approche combinée est connu comme « méthode de contribution groupe + » (CG +). Une procédure détaillée a été donnée par Gani et al. [25].

La méthode proposée a affiché des résultats encourageants et ceci après avoir ajouté un autre ensemble de corrections d'ordre trois. Les paramètres statistiques montrant les performances de la méthode sont présentés dans le Tableau 8.

<i>Base de donné</i>	<i>R²</i>	<i>EAM (KJ/mol)</i>	<i>ET (KJ/mol)</i>	<i>D_{max}</i>
861	0.9999	1.75	2.61	9.82

Tableau 8 : Paramètres statistiques décrivant le modèle de perdition de l'enthalpie de formation à l'état de gaz, développé par Marrero et Gani [26]

I.3.10 Méthode de S.P. Verevkin

S. P. Verevkin et al [28] ont introduit une nouvelle méthode de contribution de groupes pour l'estimation de plusieurs propriétés, y compris l'enthalpie de formation dans la phase liquide. Pour le développement de ce modèle uniquement 377 composés ont été utilisés, à savoir des composés organiques hydrocarbonés (165 composés) et oxygénés (212 composés). La méthode proposée a été basée sur la méthode Benson, impliquant des corrections systématiques pour les interactions, 1-4 carbone-carbone non liés (et/ou carbone-oxygène).

Verevkin et al. ont proposé des techniques spécifiques telles que l'évaluation critique des données expérimentales à travers le concept de l'évaluation dynamique des données mises en jeu en utilisant la base de données NIST. Le procédé traite plusieurs substances chimiques telles que des alcanes, des alcènes, des alcynes, des alkyl-benzènes, des

alcools, des éthers, des cétones et des aldéhydes, des acides carboxyliques, des esters et des carbonates.

Dans cette méthode, cinquante-deux paramètres et leurs variances ont été évalués pour le schéma proposé. Pour la précision de cette méthode, les indicateurs statistiques affichés par cette méthode sont les suivants : EAM, ET, EQM, et EMR(%) 4.05; 9.81; 9.80; 2.68% KJ/mol, respectivement.

I.3.11 Méthodes de Mohammad Hossein Keshavarz

Plusieurs fonctions ont été proposées par l'auteur Keshavarz [29] [30] [31] [32] pour estimer l'enthalpie de formation de quelques classes de composés énergétiques utilisant la contribution de certains groupes polaires, qui sont simples et des fragments moléculaires spécifiques basés sur les groupes additifs et non-additifs.

Keshavarz et al. [33] ont récemment proposés une méthode de prédiction d'enthalpie de formation de certains composés énergétiques dans la phase condensée (solide ou liquide). Ils suggèrent que les paramètres de contribution du groupe peuvent être divisés en groupes d'additifs et non additifs. La partie d'additif contient la composition élémentaire comme le nombre de carbone, d'hydrogène, d'azote et d'oxygène, en plus des groupes fonctionnels polaires spécifiques comme l'acide, alcool, carboxyle et amine. Pour la deuxième partie, les groupes non-additifs représentent des fragments moléculaires et certains groupes fonctionnels tels NO₂, ONO₂, NNO₂0. Les valeurs prédites de l'enthalpie de formation sont les sommes des valeurs de contribution de groupes additifs et non-additifs.

L'auteur a employé uniquement 299 composés dans ce travail dont 222 molécules ont été utilisées comme un ensemble impliqué dans la mise en place du modèle et uniquement 23 molécules pour tester et montrer le pouvoir prédictif de la méthode proposée. Pour les paramètres statistiques affichés par cette méthode en utilisant les 299 molécules sont; EAM, ET, EQM, et EMR 25.70, 32.69, 32.64 *kJ/mol*; 44.75%, respectivement.

I.3.12 Estimation des propriétés des mélanges

Depuis l'apparition des méthodes de contribution de groupes est celles-ci ne cessent d'élargir leur gamme d'application. Ce genre de méthodes est proposé d'utiliser le concept d'additivité de contributions de groupes afin d'estimer des propriétés de mélanges [34] [35] [36] [37]. En effet, le nombre de fluides purs utilisés dans le génie

chimique est déjà très important, et le nombre de mélanges différents qui peuvent être formés à partir de corps purs est donc considérable.

Quelques méthodes ont été développées afin d'évaluer des enthalpies de mélanges et des coefficients d'activité. À titre d'exemples la méthode de ASOG et celle de UNIFAC sont l'une des méthodes les plus utilisées.

1.3.12.a Méthode de ASOG

Le modèle (ASOG) « The Analytical Solution of Groups » a été développé par plusieurs auteurs. Cette méthode est basée sur le principe que le coefficient d'activité γ_i du composant i dans un mélange liquide. Le coefficient d'activité γ_i d'un composé i dans un mélange est donné par l'équation ci-après [36].

$$\text{Ln}\gamma_i = \text{Ln}\gamma_i^C + \text{Ln}\gamma_i^R \quad (33)$$

Où les exposants C et R représentent les contributions combinatoires et résiduelles, respectivement. Les coefficients activités γ_i^C et γ_i^R sont donnés par :

$$\text{Ln}\gamma_i^C = 1 - R_i + \text{Ln}R_i \quad (34)$$

$$\text{Ln}\gamma_i^R = \sum_k \gamma_{ki} (\text{Ln}\Gamma_k - \text{Ln}\Gamma_{ki}^*) \quad (35)$$

Avec :

$$R_i = (s_i / \sum_j s_j x_j)$$

x_j : Fraction molaire du composé j dans le mélange ;

s_j : Nombre de groupe fonctionnel dans la molécule j

v_{kj} : Nombre des interactions de groupe k dans la molécule j ;

Γ_k : Coefficient d'activité du groupe k dans le mélange ;

Γ_k^* : Coefficient d'activité du groupe k dans l'état standard ;

Le coefficient d'activité Γ_k est calculé en utilisant l'équation de Wilson donnée par :

$$\text{Ln}\Gamma_k = -\text{Ln} \sum_l X_l A_{kl} + \left(1 - \sum_l \frac{X_l A_{lk}}{\sum_m X_m A_{lm}}\right) \quad (36)$$

Où les sommations, développées sur tous les groupes présents dans les mélanges

$$X_k = \frac{\sum_j x_j v_{kj}}{\sum_i x_i \sum_k v_{ki}} : \text{Fraction molaire de groupe } k \text{ dans la molécule } j$$

A_{kl}, A_{lk} : Sont des paramètres binaires d'interaction entre les groupes k et l .

I.3.12.b Méthode UNIFAC

Le modèle UNIFAC (UNIQUAC Functional-group Activity Coefficients) est inspiré à partir de la méthode de ASOG développé par Derr et Deal [38], et de l'équation UNIQUAC (UNIversal QUAsi-Chemical) [39]. Le modèle UNIQUAC permettait d'obtenir une bonne description des équilibres liquide-liquide et vapeur-liquide pour les mélanges binaires et multi-composés ne contenant pas d'électrolytes [40].

Les contributions combinatoire et résiduelle de l'équation UNIQUAC pour le coefficient d'activité d'une molécule i sont respectivement exprimées de la manière suivante [40]:

$$\text{Ln}\gamma_{i,\text{combinatoire}} = \text{Ln} \frac{\Phi_i}{x_i} + \frac{z}{2} q_i \text{Ln} \frac{\theta_i}{\Phi_i} + l_i - \frac{\Phi_i}{x_i} \sum_j x_j l_j \quad (37)$$

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

$$l_i = \frac{z}{2} (r_i - q_i) - (r_i - 1); z = 10; \theta_i = \frac{q_i x_i}{\sum_j q_j x_j}; \Phi_i = \frac{r_i x_i}{\sum_j r_j x_j}; \tau_{ji} = \exp - \left(\frac{u_{ji} - u_{ji}}{RT} \right) \quad (39)$$

Où

x_i : fraction molaire du composé i

θ_i : fraction surfacique

Φ_i : fraction volumique

r_i : volume moléculaire de Van der Waals

q_i : surface moléculaire

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

La partie combinatoire de l'équation UNIQUAC fait intervenir uniquement les propriétés de corps purs. La connaissance des paramètres moléculaires r_i et q_i permet d'évaluer les fractions surfacique θ_i et volumique Φ_i . Ces paramètres moléculaires sont obtenus à l'aide des paramètres de volume et de surface de chaque groupe, R_k et Q_k , selon :

$$r_i = \sum_k v_{ki} R_k \text{ et } q_i = \sum_k v_{ki} Q_k \text{ avec:} \quad (40)$$

$$R_k = \frac{V_{\omega K}}{15.17} \text{ et } Q_k = \frac{A_{\omega K}}{2,5.10^9} \quad (41)$$

Où

v_{ki} : Nombre de groupes de type k dans la molécule i

R_k : contribution de groupe au volume

Q_k : contribution de groupe à la surface

$V_{\omega K}$ et $A_{\omega K}$ sont respectivement des groupes de volume et de surface publiés par Bondi [41].

En ce qui concerne la partie résiduelle de la méthode UNIFAC elle s'écrit selon l'équation suivante :

$$\text{Ln}\gamma_{i,\text{résiduel}} = \sum_k v_{ki} \text{Ln}\Gamma_k - \sum_k v_{ki} \text{Ln}\Gamma_{ki}$$

Et le coefficient d'activité Γ_k est donné par l'équation suivante :

$$\text{Ln}\Gamma_k = Q_k \left[1 - \text{Ln} \left(\sum_m \theta_m \Psi_{mk} \right) - \sum_m \left(\frac{\theta_m \Psi_{km}}{\sum_n \theta_n \Psi_{nm}} \right) \right] \quad (42)$$

$$\theta_m = \frac{Q_m X_m}{\sum_n Q_n X_n} \text{ et } \Psi_{mn} = \exp - \left(\frac{U_{mn} - U_{nn}}{RT} \right) = \exp - \left(\frac{a_{mn}}{T} \right) \quad (43)$$

Où

θ_m : fraction surfacique du groupe m

X_m : fraction molaire du groupe m dans le mélange

U_{mn} : mesure de l'énergie d'interaction entre les groupes m et n

a_{mn} : contribution de groupe-interaction (doit être évaluée à partir de données expérimentales d'équilibre de phase)

I.4 Calculs *ab initio*

Aujourd'hui, les chimistes quanticiens sont capables de calculer de façon très précise les énergies et les géométries de molécules de moins de dix atomes dans leur état fondamental, sans introduire d'autres informations empiriques que la forme analytique des orbitales atomiques utilisées. C'est ce qu'on appelle la méthodologie *ab initio*, pour l'opposer aux simplifications semi-empiriques utilisées auparavant. Cette approche est aujourd'hui battue en brèche, parce qu'une alternative beaucoup moins coûteuse a été proposée.

Les calculs *ab initio* nécessitent en effet un temps de calcul qui croît comme une puissance du nombre N d'électrons : la puissance quatrième (N^4) dans la méthode de champ moyen, une puissance sixième (N^6) ou septième (N^7) si on traite la corrélation entre électrons. L'étude de grosses molécules qui intéressent les expérimentateurs, les biochimistes, les inventeurs de matériaux nouveaux, les spécialistes de la catalyse, semblait impossible. Ce coût prohibitif tient en principe à ce que la fonction d'onde manipule les trois coordonnées des N électrons et travaille dans un espace de dimension $3N$.

Or, un théorème, dû à Hohenberg et Kohn, établit qu'il doit exister une correspondance biunivoque entre la densité électronique dans l'espace physique, de dimension 3, et la fonction d'onde, donc l'énergie. Correspondance qu'on ne connaît que dans le cas idéal du gaz homogène d'électrons. D'où le rêve d'un formalisme qui travaillerait avec la seule densité électronique. Partant donc du cas idéal et de quelques sophistications destinées à tenir compte de l'inhomogénéité de densité, une " Théorie Fonctionnelle de la Densité " (DFT) a été proposée, beaucoup plus économique que les méthodes principales. Les fonctionnelles utilisées aujourd'hui ont des formes complexes, elles introduisent de nombreux paramètres, et donnent des résultats comparables à ceux des meilleurs calculs *ab initio*, à bien moindre coût. Bien sûr, les valeurs données à ces paramètres ne découlent pas des principes, elles ont été ajustées par approximation successives sur un ensemble d'expériences numériques. Si bien que la méthode DFT est encore à ce jour une méthode semi-empirique.

Avec le développement massif des ordinateurs et les méthodes numériques le calcul *ab initio* et la DFT ont vu se généraliser leurs domaines d'application vers des molécules

de plus en plus importantes. Leurs avantages attendus sont nombreux vu qu'ils ont un pouvoir prédictif très important et une précision extrême des calculs.

I.4.1 L'équation de Schrödinger

Le calcul de mécanique quantique repose sur la résolution de l'équation de Schrödinger. Cette résolution permet de décrire de manière détaillée les degrés de liberté des noyaux atomiques et électroniques et ainsi obtenir un certain nombre d'informations sur les propriétés physiques et chimiques (mécaniques, énergétiques, de structure, etc), ceci pour une large gamme de matériaux. L'équation de Schrödinger pour un système multi-atomique à l'état stationnaire se présente sous la forme suivante : [42]

$$H\psi = E\psi \quad (44)$$

$$H\psi(\{r_i\}, \{R_j\}) = E\psi(\{r_i\}, \{R_j\}) \quad (45)$$

H est l'opérateur hamiltonien du système, $\psi(\{r_i\}, \{R_j\})$ est la fonction d'onde à plusieurs particules, ou l'ensemble $\{r_i\}$ contient les variables décrivant les électrons et $\{R_j\}$ celles décrivant les noyaux, E est l'énergie de l'état fondamental décrit par la fonction d'onde $\psi(\{r_i\}, \{R_j\})$. L'opérateur Hamiltonien du système s'écrit : [42]

$$H = T_n + T_e + V_{nn} + V_{en} + V_{ee} \quad (46)$$

Où T_n décrit l'énergie cinétique des noyaux composant le système, T_e l'énergie cinétique des électrons du système, V_{nn} l'interaction coulombienne noyau - noyau, V_{en} l'interaction coulombienne électron - noyau et V_{ee} est pour finir l'interaction coulombienne électron - électron.

$$H = \sum_{i=1}^n \frac{-\hbar^2 \nabla_i^2}{2m} + \sum_{\alpha=1}^N \frac{-\hbar^2 \nabla_\alpha^2}{2M_\alpha} - \sum_{i=1}^n \sum_{\alpha=1}^N \frac{Z_\alpha e^2}{|r_i - R_\alpha|} + \frac{1}{2} \sum_{i,i \neq j} \frac{ke^2}{|r_i - r_j|} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} \frac{Z_\alpha Z_\beta Ke^2}{|R_\alpha - R_\beta|} \quad (47)$$

Les deux premiers termes désignent respectivement les opérateurs d'énergie cinétique des électrons et celle de noyaux et les trois termes suivants sont respectivement les opérateurs d'énergie d'interaction électrons-noyaux, l'énergie d'interaction électrons-électrons et l'énergie d'interaction noyaux-noyaux. m et M sont les masses des électrons et noyaux respectivement. Z_α et Z_β sont les charges des noyaux α et β . L'équation de Schrödinger s'écrit alors [43].

$$\left(\sum_{i=1}^n \frac{-\hbar^2 \nabla_i^2}{2m} + \sum_{\alpha=1}^N \frac{-\hbar^2 \nabla_{\alpha}^2}{2M_{\alpha}} - \sum_{i=1}^n \sum_{\alpha=1}^N \frac{Z_{\alpha} e^2}{|r_i - R_{\alpha}|} + \frac{1}{2} \sum_{i,i \neq j} \frac{ke^2}{|r_i - r_j|} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} \frac{Z_{\alpha} Z_{\beta} K e^2}{|R_{\alpha} - R_{\beta}|} \right) \psi(r_1 \dots r_n, R_1 \dots R_N) \quad (48)$$

$$= E\psi(r_1 \dots r_n, R_1 \dots R_N) \quad (49)$$

I.4.2 Approximations

La résolution analytique de l'équation de Schrödinger n'est réalisable que pour le cas extrêmement simple (H_2). Alors que pour cette équation puisse être résolue, elle passe par certaines considérations appelées « les approximations ». Parmi les approximations les plus puissantes, connues et précises, on peut citer celles de « Born-Oppenheimer » et celle de « DFT »...

La première approximation, appelée aussi approximation adiabatique, sépare les variables des particules qui évoluent rapidement (électrons) de celles qui évoluent lentement (noyaux). Les électrons ont une vitesse beaucoup plus grande que les noyaux, et une masse environ 5 ordres de grandeur plus petite. A l'état fondamental, on peut alors résoudre les équations des électrons en supposant les noyaux immobiles. De ce fait, l'hamiltonien total peut être séparé en deux parties : un hamiltonien effectif correspondant aux ions et un hamiltonien correspondant aux électrons. Les électrons interagissant fortement les uns avec les autres, leur déplacement est ainsi corrélé. Pour traiter la corrélation, d'autres approximations sont nécessaires. Deux grands types d'approches sont alors disponibles : la méthode de Hartree-Fock et la théorie de la fonctionnelle de la densité (Density Functional Theory ou DFT). La première, bien que plus précise, requiert à l'heure actuelle une puissance de calcul importante et ne peut être utilisée que pour décrire des systèmes contenant au plus quelques atomes voire quelques dizaines d'atomes seulement. Pour pouvoir étudier des systèmes métalliques de taille raisonnable, de quelques centaines d'atomes, on utilise la DFT [42].

I.4.2.a Approximation de Born-Oppenheimer

L'équation 48 peut être simplifiée du fait que la masse des électrons est trop faible (négligeable) devant celle des noyaux. Les électrons se déplacent ainsi beaucoup plus rapidement que les noyaux, ils sont considérés comme se déplaçant dans un potentiel

créé par des noyaux fixes. Par conséquent il est possible de considérer les noyaux comme ponctuels et les traiter de manière classique, c'est l'approximation adiabatique dite de Born Oppenheimer [44]. L'Hamiltonien décrit dans l'équation 48 peut être simplifié, puisque l'énergie cinétique des noyaux devient nulle, l'énergie d'interaction des noyaux devient constante mais qu'on peut la rendre nulle par un choix convenable de l'origine [45]. L'Hamiltonien électronique H_{elc} s'écrit de la forme:

$$H_{\acute{e}l} = \sum_{i=1}^n \frac{-\hbar^2 \nabla_i^2}{2m} - \sum_{i=1}^n \sum_{\alpha=1}^N \frac{Z_{\alpha} k e^2}{|r_i - R_{\alpha}|} + \frac{1}{2} \sum_{i,i \neq 1} \frac{k e^2}{|r_i - r_j|} \quad (50)$$

La fonction d'onde s'écrit de la forme suivante :

$$\psi(\{r_i\}, \{R_j\}) = \chi(R) \phi(\{r, R\}) \quad (51)$$

Où $\chi(R)$ est la fonction d'onde nucléaire et $\phi(r, R)$ la fonction d'onde électronique correspondant aux positions $\{R_j\}$ des noyaux fixes, ou les positions R sont des paramètres fixés. Si on remplace les équations 49 et 50 dans l'équation 48, on obtient:

$$H_{el} \phi(r, R) = E_{\acute{e}l}(R) \phi(r, R) \quad (52)$$

L'énergie totale du système sera donc la somme de l'énergie électronique et l'énergie des noyaux:

$$E = E_{el}(R) + E_{nucl} \quad (53)$$

L'approximation adiabatique est le premier pas vers la résolution de l'équation de Schrödinger, elle découple le mouvement des électrons de celles des noyaux. Le problème de la résolution de l'équation de Schrödinger se réduit à celui du comportement des électrons, mais il reste encore très complexe car l'équation de Schrödinger n'admet pas de solution analytique sauf dans des cas très simple comme celui de l'atome d'hydrogène. Par conséquent, des approximations supplémentaires sont nécessaires.

1.4.2.b Approximation de Hartree

La complexité de résoudre l'équation 52 est due aux interactions électron-électron qui empêche la séparation de cette équation en n équations électroniques. Dans l'approximation de Hartree [46], on considère les électrons comme indépendants, ou chaque électron se déplace dans un champ moyen créé par les noyaux et les autres

électrons; désignant par Ω_i l'énergie potentielle de l'électron dans ce champ, à chaque électron correspond une orbitale et la fonction d'onde totale s'écrit comme un produit de fonction d'onde mono-électronique, de sorte que [45] :

$$\Phi(r_1, r_2, \dots, r_n) = \Phi_1(r_1)\Phi_2(r_2) \dots \Phi_n(r_n) \quad (54)$$

L'énergie d'interaction de toutes ces paires d'électrons peut être mise sous la forme d'une somme des termes d'énergie Ω_i .

$$\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{ke^2}{|r_i - r_j|} \rightarrow \sum_{i=1}^n \Omega_i(r_i) \quad (55)$$

L'Hamiltonien électronique s'écrit de la forme suivante :

$$\begin{aligned} H_{\text{él}} &= \sum_{i=1}^n \frac{-\hbar^2 \nabla_i^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{i, i \neq j} \frac{ke^2}{|r_i - r_j|} - \sum_{i=1}^n \sum_{\alpha=1}^N \frac{Z_\alpha Ke^2}{|r_i - r_\alpha|} \\ &= \sum_{i=1}^n \frac{-\hbar^2 \nabla_i^2}{2m} + \sum_{i=1}^n \Omega_i(r_i) + \sum_{i=1}^n \sum_{\alpha=1}^N \frac{Z_\alpha Ke^2}{|r_i - r_\alpha|} = \sum_{i=1}^n H_i \end{aligned} \quad (56)$$

L'énergie potentielle $\Omega_i(r_i)$ d'un électron i dépend non seulement des mouvements de tous les autres électrons, mais aussi indirectement de son propre mouvement. L'équation de Schrödinger à un électron s'écrit de la forme suivante:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \phi_i(r) + \left[\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} |\phi_j(r_j)| \frac{ke^2}{r_{i,j}} \right] \phi_i(r) + \left(\sum_{\alpha=1}^N \frac{Z_\alpha Ke^2}{|r_i - r_\alpha|} \right) \phi_i(r) = \varepsilon_i \phi_i(r) \quad (57)$$

Le premier terme correspond à l'énergie cinétique de l'électron et le second représente le potentiel que subit l'électron (potentiel de Hartree), le troisième terme est le potentiel créé par les noyaux.

1.4.2.c Approximation de Hartree-Fock

Le système électronique dans l'approximation de Hartree est non complètement décrit. En 1930, Fock a montré que la fonction d'onde de Hartree (cf. équation 54) viole le principe d'exclusion de Pauli parce qu'elle n'est pas antisymétrique par rapport à l'échange de deux électrons. Il a remplacé la fonction d'onde $\Phi_i(r_1, r_2, r_3 \dots r_n)$ par un déterminant de Slater [44].

$$\Phi(r_1, r_2, \dots, r_n) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \begin{vmatrix} \phi_1(r_1) & \phi_2(r_1) & \cdot & \phi_n(r_1) \\ \phi_1(r_2) & \phi_2(r_2) & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \phi_1(r_n) & \cdot & \cdot & \phi_n(r_n) \end{vmatrix} \quad (58)$$

Ce déterminant comprend des fonctions d'onde mono électronique comme combinaison linéaire de toutes les fonctions de Hartree, qui sont antisymétrique par rapport à l'échange. En utilisant ce déterminant, nous trouvons l'expression de l'énergie suivante :

$$E = \int \Phi^*(r_1, r_2, \dots) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + U_i(r_i, \dots, R_i, \dots) \right] \Phi(r_1, r_2, \dots) dr + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \int \Phi^*(r_1, r_2, \dots) \frac{e^2}{r_{ij}} \Phi(r_1, r_2, \dots) dr \quad (59)$$

Notons que la première intégrale de cette équation est identique au terme correspondant de l'équation de Hartree, le deuxième terme contient des intégrales d'échange qui n'existent pas dans l'équation de Hartree.

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \int \Phi^*(r_1, r_2, \dots) \frac{e^2}{r_{ij}} \Phi(r_1, r_2, \dots) dr & (60) \\ & = \frac{1}{2} \sum_{ij} \sum_{kl} (-1)^{k+l} \int \phi_k^*(r_i) \phi_l^*(r_j) \frac{e^2}{r_{ij}} \phi_k(r_j) \phi_l(r_i) dr_i dr_j \end{aligned}$$

Lorsque $k = l$ nous retrouvons l'énergie d'interaction électrostatique moyenne de Hartree E_H , et lorsque $k \neq l$ nous obtenons l'énergie d'échange E_X .

$$E_H = \frac{1}{2} \sum_{k,l} \int \frac{\phi_k^*(r_i) \phi_l^*(r_j) \phi_k(r_j) \phi_l(r_i)}{|r_i - r_j|} dr_i dr_j \quad (61)$$

$$E_X = \frac{1}{2} \sum_{k,l} \int \frac{\phi_k^*(r_i) \phi_l^*(r_j) \phi_k(r_j) \phi_l(r_i)}{|r - r'|} dr_i dr_j \quad (62)$$

On voit donc que l'Hamiltonien mono-électronique contient un terme qui décrit l'interaction coulombienne classique entre électrons (terme de Hartree) et un terme purement quantique (terme d'échange) qui résulte de l'application du principe de Pauli. Ce terme, qui est attractif, atténue le caractère répulsif des interactions coulombiennes

entre électrons. Il traduit le fait que deux électrons de même spin ne peuvent occuper la même position. Ainsi chaque électron est entouré d'un trou d'échange qui maintient les autres électrons à une certaine distance, ce qui diminue la répulsion coulombienne qui est une fonction décroissante de la distance entre particules ayant une charge de même signe. L'approximation d'Hartree-Fock permet donc d'aborder le problème à N corps comme un problème à un seul corps, dans lequel chaque électron est soumis à un potentiel effectif qui est en partie généré par les autres électrons. C'est pourquoi il faut résoudre l'Hamiltonien mono-électronique de façon auto cohérente: à partir d'un ensemble d'états initiaux. Pour cela on procède de la façon suivante:

1. On suppose une distribution spatiale des noyaux, ce qui détermine l'énergie d'interaction entre noyaux ainsi que le potentiel de Hartree en tout point de l'espace.

2. On résout de façon cohérente les équations mono électroniques [52].

Pour cela on choisit une base initiale d'orbitales, généralement des orbitales atomiques ou ondes planes. À l'aide de cette base, on calcule les potentiels d'interactions $V_H(r)$ et $V_x(r)$ que l'on introduit dans les équations mono électroniques. On réitère la procédure jusqu'à ce que l'on obtienne un jeu de fonctions monoélectroniques ainsi que les valeurs propres qui n'évoluent plus (valeurs stationnaires).

3. On calcule alors l'énergie totale du système d'atomes et l'on ajuste la distribution spatiale des noyaux de façon à minimiser cette énergie totale.

Cette méthode, qui est assez lourde, n'est pas pour autant exacte. En effet l'état fondamental correspond à un minimum global sur un ensemble de fonctions beaucoup plus étendues que celui couvert par un déterminant de Slater. [43]

1.4.2.d Théorie fonctionnelle de la densité

Cette méthode réduit l'étude d'un système multi électronique à celui d'un système composé d'électrons individuels en interaction avec le champ moyen généré par les autres électrons. De plus, on décrit le système à l'état fondamental à l'aide de la densité électronique et non plus grâce à une fonction d'onde.

La DFT est basée sur deux théorèmes démontrés par Walter Kohn, prix Nobel de physique en 1998 pour ses travaux [47]. Le premier théorème affirme que l'énergie E à l'état fondamental d'un système d'électrons en interaction dans un potentiel externe (V_{ext}) est une fonction unique de la densité électronique ρ . On passe ainsi d'un problème à N électrons (décrits à l'aide d'une fonction d'onde multiélectronique) repérés par $3N$

coordonnées d'espace, à un problème faisant intervenir des fonctionnelles de la charge électronique $\rho(\vec{r})$, elle-même fonction des trois coordonnées spatiales.

Le deuxième théorème décrit une telle fonctionnelle et prouve que la densité électronique à l'état fondamental minimise cette fonctionnelle de l'énergie [48]. Dans ce cadre, l'énergie s'écrit sous la forme :

$$E(\rho) = \int V_{ext}(r)\rho(r)d^3r + F(\rho) \quad (63)$$

Où V_{ext} décrit le potentiel coulombien extérieur dû aux noyaux de charge positive et $F(\rho)$ décrit l'énergie cinétique des électrons et l'énergie d'interaction coulombienne. $F(\rho)$ peut-être décomposée sous la forme suivante :

$$F(\rho) = \int \int \frac{\rho(r)\rho(r')}{|r - r'|} d^3r. d^3r' + T(\rho) + E_{xc}(\rho) \quad (64)$$

Le premier terme d'énergie coulombienne décrit l'interaction entre électrons (terme de Hartree), $T(\rho)$ est un terme d'énergie cinétique et $E_{xc}(\rho)$ est le terme d'échange et corrélation. Le terme d'échange et corrélation ne peut pas être déterminé directement. Pour pallier ce manque, on doit faire appel à des approximations [57].

1.4.2.e Fonctionnelle d'échange et corrélation

Pour pouvoir faire le calcul il nous faut maintenant une approximation pour le terme d'échange et corrélation, qui est le dernier terme pour lequel nous ne connaissons pas d'expression en fonction de la densité ou des orbitales. La recherche d'approximation précise pour l'échange et corrélation est toujours d'actualité et nous ne présentons ici que les fonctionnels standards, qui ont déjà été largement utilisés.

1.4.2.f Approximation de la densité locale (LDA)

L'approximation la plus répandue pour calculer le terme d'échange et corrélation est la *Local Density Approximation*, ou LDA. Cette approximation fait l'hypothèse que la densité fluctue assez lentement. Elle remplace donc le potentiel d'échange et corrélation en chaque point de l'espace par celui d'un gaz uniforme d'électrons qui interagissent. Le gaz d'électrons est pris de la même densité que la densité au point calculé. Ceci permet d'en donner une expression exacte en interpolant des calculs Monte-Carlo. Ceci a été fait au début des années 80 [49]. La LDA est souvent une approximation efficace, même quand la densité fluctue de manière non négligeable. Cependant, elle a certains désavantages, comme une sous-estimation systématique de l'énergie de cohésion des

solides et des paramètres de maille [50] [51]. L'erreur sur les paramètres structuraux est souvent faible (de l'ordre de 1 à 2 %), mais peut devenir importante quand des liaisons de types Van der Waals sont en jeu.

I.4.2.g Approximation du gradient généralisé (GGA)

La manière la plus naturelle d'améliorer la LDA est de tenir compte de l'inhomogénéité de la densité électronique en introduisant dans l'énergie d'échange et de corrélation des termes dépendant du gradient de la densité.

La GGA (generalized gradient approximation) [52] permet d'introduire une combinaison entre les termes locaux et des termes dépendant du gradient. Elle donne de bons résultats et permet d'améliorer les énergies de cohésion et les paramètres de maille. Cependant, l'amélioration par rapport à la LDA n'est pas toujours systématique car la GGA sur corrige parfois la LDA. [53]

I.4.3 Méthodes *ab initio* pour calculer l'enthalpie de formation standard

Dans la littérature, plusieurs méthodes basées sur des calculs *ab initio* ont été proposées afin de prédire l'enthalpie de formation dans les trois états. Dans cette partie nous allons citer quelques travaux de référence afin d'illustrer des notions de base de ces techniques. En effet, les méthodes de mécanique quantiques et, en général, les méthodes *ab initio* offrent des prédictions généralement fiables pour les très petites molécules. Cependant, ces méthodes nécessitent un haut niveau de calculs théoriques et une puissance de calcul importante. En utilisant l'approche de la mécanique quantique, plusieurs auteurs ont proposé d'estimer l'enthalpie de formation dans les trois états notamment à l'état gaz.

À l'état de gaz, le calcul de l'enthalpie de formation passe par deux étapes essentielles, la première consiste à calculer l'énergie moléculaire à la température T à partir de l'énergie de configuration électronique au zéro absolu E^0 . Pour cela, les valeurs des fréquences ν_i des différents modes de vibrations sont calculées afin de donner l'énergie au point zéro ZPE (l'énergie de vibration), ensuite la détermination du degré de liberté de la molécule et l'évaluation de l'énergie thermique à la température T .

La deuxième étape est le passage de l'état de référence *ab-initio* à l'état de référence thermochimique. Cette étape consiste à faire la soustraction entre la valeur d'enthalpie de formation obtenue par le calcul *ab-initio* et la somme des enthalpies des constituants élémentaires de la molécule étudiée. Dans la phase gaz, plusieurs travaux sont publiés, à

titre d'exemple on peut citer ceux de Mark Saeys et al, Vladimir N et al, Tim P.W. Jungkamp et al, Mohammad M. Ghahremanpour et al [54] [55] [56] [57]

Le calcul ab-initio permet de donner l'enthalpie de formation à l'état gaz des composés purs, alors le passage de l'état gaz aux états condensés est basé sur des corrélations entre l'enthalpie de vaporisation ou de sublimation et les variances du potentiel électrostatique de surface des molécules. Dans la littérature, beaucoup de travaux sont publiés, ces travaux reposent sur le calcul d'enthalpie de formation à l'état condensé sors ceux de A.K. Sikder et al, M.H. Keshavarz et al, B.M. Rice et al [58] [59] [3]

À l'état solide, plusieurs auteurs ont proposé d'estimer l'enthalpie de formation à partir de la différence entre les enthalpies de formation en phase gazeuse calculées et les enthalpies de sublimation [60] [61] [62]. Leurs méthodes ont montré un faible écart par rapport à des données expérimentales seulement pour un petit ensemble de composés organiques. Ils ont estimé les enthalpies de formation dans la phase gazeuse en utilisant les techniques de la théorie fonctionnelle de densité différente. Pour le calcul des enthalpies de sublimation, plusieurs chercheurs ont proposé d'utiliser la surface moléculaire, le total des potentiels moyens et la variance positive et négative du potentiel électrostatique de surface. En ce qui concerne d'autres auteurs, ils ont modifié les forces de van der Waals et les interactions électrostatiques entre des surfaces des molécules individuelles pour le calcul de l'enthalpie de sublimation.

I.5 Conclusion

Cette synthèse bibliographique, à ce jour, relative aux notions fondamentales d'enthalpie de formation et aux différentes approches pour la prédiction des enthalpies de formation ne prétend pas être exhaustive. Elle a cependant le mérite d'orienter ce travail.

À travers cette analyse bibliographique, il apparait qu'on peut remarquer clairement que l'estimation d'enthalpie de formation des matériaux comprend deux méthodes principales, l'une basée sur le calcul quantique ab initio et la seconde est plus empirique basée sur l'établissement des relations entre les propriétés moléculaires et la structure chimique. La première classe de méthodes a l'avantage d'être plus précise et fondée sur des bases théoriques mais malgré que leur succès reste limité par la taille des molécules à traiter, la nécessité d'une puissance de calcul et le temps nécessaire pour la résolution des équations. La seconde catégorie de méthodes (contribution de groupes) malgré qu'elle reste limitée à quelques cas spécifiques de molécules, elle est très connue chez

les scientifiques et les industriels, largement utilisée dans l'industrie chimique avec un large intervalle d'application et un pouvoir prédictif élevé.

Chapitre II: Prédiction des enthalpies de formation à l'état solide

II.1 Introduction

Étant donné que la grande majorité des molécules présentant un intérêt industriel sont à l'état solides, l'objectif essentiel de cette étude est d'estimer le plus précisément possible les enthalpies standards de formation en phase solide de composés organiques purs. Également, la revue bibliographique présentée précédemment a montré que les méthodes quantiques de type *ab initio* permettaient d'effectuer des prévisions d'enthalpies sur un nombre limité de composés moins complexes. De plus, ces méthodes présentent des inconvénients tels que l'avancement important d'hypothèses simplificatrices et notamment le long temps de calcul nécessaire à l'évaluation des enthalpies recherchées. Il est donc proposé dans cette étude de développer une méthode de prédiction des enthalpies de formation à l'état solide en se basant uniquement sur les techniques de contribution de groupes d'ordre trois. Ceci permet d'étendre le domaine d'application de la technique de découpage d'ordre trois connu pour sa précision et son large domaine d'application, conçue à l'origine pour le calcul des propriétés physico-chimiques à l'état de gaz. Cette technique aux d'après le chapitre précédent, a montré des résultats encourageants à l'état gaz. Alors notre second objectif sera de démontrer la possibilité d'application de cette technique pour estimer l'enthalpie de formation standard à l'état solide utilisant une large gamme de composés organiques.

Il est important de souligner que les propriétés des molécules à l'état solide sont très différentes de celles des molécules en phase gazeuse. En effet, les molécules solides peuvent exister sous trois formes : cristalline, amorphe et semi-cristalline. Lorsque les molécules sont des solides cristallins, on remarque que la structure tridimensionnelle périodique des cristaux résulte d'interactions très spécifiques entre atomes, et également de contraintes liées à la taille de ces espèces. Les interactions intermoléculaires présentes dans les molécules à l'état condensé sont plus importantes que celles intervenant dans les molécules en phase gazeuse. D'autre part, la densité des composés solides est plus élevée que la densité de molécules à l'état gazeux. Il est donc tout à fait essentiel d'étudier la mise au point de la méthode envisagée.

L'un des objectifs majeurs de ce travail est de développer une méthode prédictive simple à utiliser. En effet, seule la connaissance de la formule développée d'un composé donné et la maîtrise de la méthode de découpage de la structure moléculaire sont essentiels à l'évaluation de l'enthalpie de formation recherchée.

Avant d'entamer le développement des méthodes proposées, il sera judicieux de décrire les outils numériques développés dans le cadre de cette thèse.

II.2 Outils de calculs des enthalpies de formation

Les outils informatiques jouent un rôle important dans le génie chimique allant d'un simple calcul de la pression de vapeur en utilisant par exemple l'équation d'Antoine à la simulation dynamique des usines de produits chimiques. Dans le cadre de ce travail, nous avons développé nos propres outils de calculs afin d'aboutir à nos fins. Ces outils représentent une pièce maîtresse pour notre travail.

Les programmes développés dans le cadre de ce travail sont divisés en trois types d'ensembles. Le premier concerne les programmes permettant le découpage automatique des molécules à partir de leurs codes SMILES², c'est de fournir d'une manière automatique les corrections proposées. Le deuxième programme est développé sur Excel et consiste à trouver la structure moléculaire (codes SMILES) d'une molécule à partir de sa nomenclature, en

²Simplified Molecular Input Line Entry Specification.

utilisant une connexion par internet à un serveur de molécules³. Également, les bases de données expérimentales établie dans le cadre de cette thèse sont présentées et discutées. Le troisième programme développé permet de rechercher les paramètres d'une fonction mathématique en utilisant le principe de régression et l'optimisation.

II.2.1 Programme de découpage automatique

Les méthodes de contributions de groupes sont basées sur la fiabilité du découpage suivant une règle bien déterminée. Cette partie peut être fastidieuse et source d'erreurs notamment dans le cas de bases de données importantes (plus de 1000 molécules) ou la présence des molécules complexes ou des macromolécules dont la structure est très complexe.

Dans le cadre de ce travail, nous avons développé un programme de découpage automatique, sous Matlab de Mathworks®, permettant d'assurer l'obtention des groupes d'ordre trois selon la méthode de Marrero et Gani. Le programme de découpage automatique utilise uniquement le code SMILES (*Simplified Molecular Input Line Entry Specification*) comme information d'entrée. Ce code est une description symbolique standardisée de la structure des molécules chimiques sous forme de chaînes de caractères ASCII (alphanumériques) [19]. Les chaînes SMILES peuvent être importées de la plupart des éditeurs de structures moléculaires pour être reconverties en représentation 2D ou en modèle 3D.

La Figure 7 illustre la représentation du code Smiles de la molécule ; acide 1-cyclopropyl-6-fluoro-4-oxo-7-piperazin-1-yl-quinoline-3-carboxylique.

³ <https://cactus.nci.nih.gov/chemical/structure>

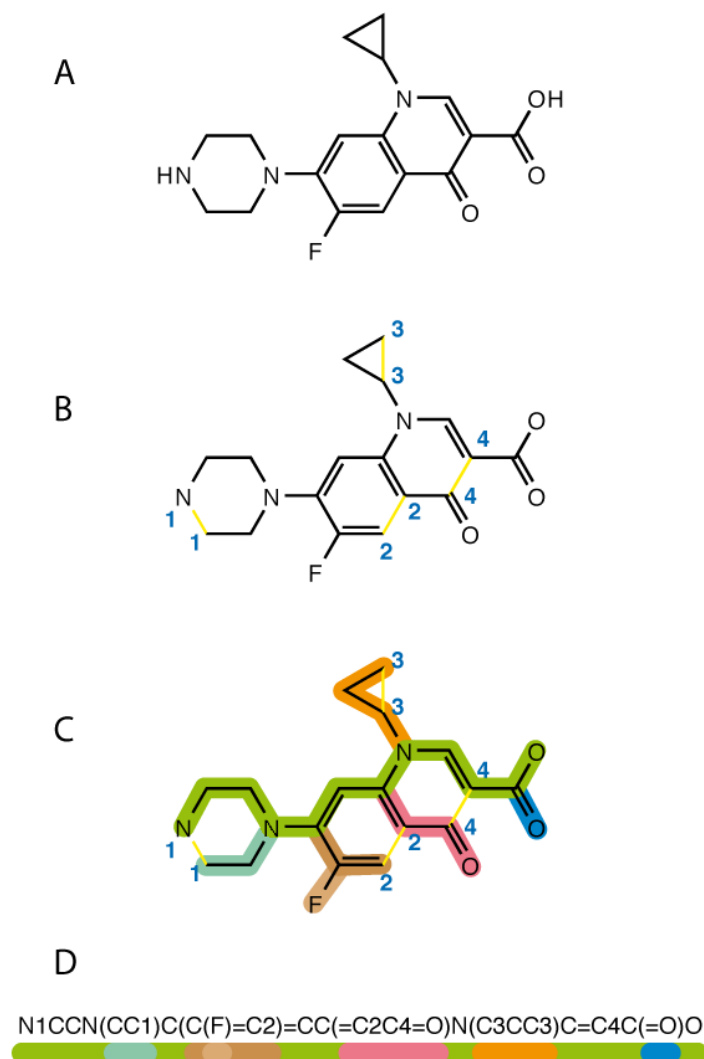


Figure 7: Génération de SMILES : molécule de Ciprofloxacin

Le principe du programme développé est de parcourir toute les chaînes de caractères du code SMILES en commençant par le premier caractère jusqu'au dernier. Le balayage des caractères se fait par un programme appelé *Parser_Smiles*. Ce dernier permet de définir la table de connexion de la molécule. Dans le cas des molécules ramifiées, le programme *Parser* appelle un autre sous-programme pour faire la correspondance des connexions entre les atomes. Nous avons également développé un autre sous-programme appelé *Ring_Arom* permettant de reconnaître les atomes appartenant à un cycle ou plusieurs cycles toute en déterminant la nature des cycles : Aromatiques ou non. Dans le cas des atomes aromatiques polycycliques (exemple : Naphtalène, Pyrène, Coronène) le programme *Ring_Arom* permet de détecter avec succès les cycles aromatiques et les atomes situés entre plusieurs cycles aromatiques. Ce succès n'est pas le

même pour les deux logiciels commerciaux à savoir CHETAH V.9 et Artist 2011. Ce programme permet aussi de définir à la fois les corrections de cycliques à utiliser (Cyclohexane, Cyclopentane, Cyclopropane...), les corrections répulsives engendrées par les atomes d'hydrogène des groupes méthyles et les corrections concernant les interactions entre les groupes fonctionnels dans le cas des composés multifonctionnels.

Par conséquent, notre programme de découpage automatique explore la chaîne de caractère du code SMILES de la molécule en question afin de déterminer la nature de chaque atome de la molécule ainsi que ses connexions avec son environnement (les liaisons et les atomes voisins). A ce stade, le programme principal détermine la nature de chaque groupe suivant le type de méthode considérée (1 ordre, 2ordre, hybride ...).

La Figure 8 schématise le programme de découpage automatique des molécules suivant trois blocs principaux.

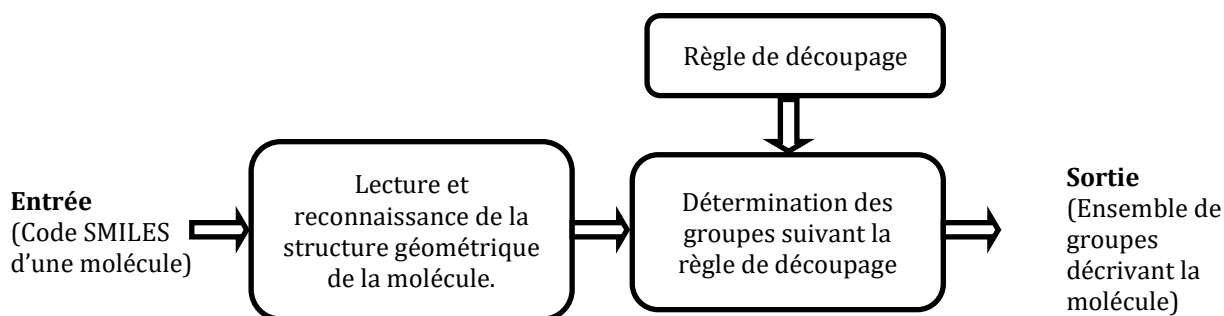


Figure 8 : Programme de recherche automatisée des groupes.

II.2.2 Programme d'estimation des contributions

Dans le cadre de notre travail, nous avons développé un programme permettant de faciliter la recherche d'une fonction prédictive pour l'estimation des enthalpies de formation en utilisant des contributions de groupes selon la méthode de découpage choisie.

L'ensemble des équations et leur optimisation ont été programmés sous Matlab en mettant à profit des avantages de cet outil de programmation⁴. Pour l'optimisation de la fonction prédictive, la méthode LSQNONLIN (least-squares non linear solve) fournie par Matlab de Mathworks© a été utilisée. Ce type de

⁴ Rapidité, stabilité ainsi que la disponibilité d'un panel de programmes (bibliothèque) mathématiques de prédéfinies (Toolbox)

méthode permet de résoudre un système d'équations non linéaires destiné à l'optimisation avec des contraintes en utilisant l'algorithme de Levenberg-Marquardt.

La recherche des valeurs de paramètres⁵ de la fonction de prédiction consiste à minimiser une fonction objective. Dans notre cas, la fonction objective du problème est définie par les sommes des carrés des erreurs entre les valeurs prédites et expérimentales. Elle est donnée comme suit :

$$J = \frac{1}{N} \sum_n^N \left(\widehat{\Delta H_{f_n}^\circ} - \Delta H_{f_n(exp)}^\circ \right)^2 \quad (65)$$

$\widehat{\Delta H_{f_n}^\circ}$: Prédiction de l'enthalpie de formation de la nième molécule.

$\Delta H_{f_n(exp)}^\circ$: Valeur expérimentale de l'enthalpie de formation de la nième molécule.

N : Nombre total de molécules utilisées dans la recherche des valeurs de contribution de groupes.

L'étape de recherche des paramètres de la fonction de prédiction consiste à effectuer plusieurs tests de minimisation de la fonction objective, où dans chaque test, l'algorithme d'optimisation réinitialise aléatoirement les paramètres initiaux de la fonction de prédiction. Ceci permet à l'algorithme d'optimisation d'éviter d'être bloqué dans un optimum local au lieu de chercher un optimum global.

II.3 Développement de la méthode de prédiction des enthalpies de formation à l'état solide

Le développement de la méthode de contribution de groupes pour la prédiction des propriétés physico-chimiques passe par des étapes principales ; la première étape consiste à construire la base de données expérimentale contenant les composés organiques ainsi que les mesures de la propriété $\Delta H_{f,s}$ pour chaque composé. Ensuite une étape de traitement et de validation des données expérimentales permet de vérifier les données et écarter les valeurs aberrantes et incohérentes. La troisième étape a pour but de réaliser la

⁵ Valeurs numériques des contributions de groupes

fragmentation en groupes des structures moléculaires en utilisant un schéma d'ordre trois. Après avoir découpé la base de données, l'étape suivante est la définition d'une relation mathématique (modèle) liant les contributions de groupes et les valeurs de $\Delta H_{f,S}$. Dans cette étape, il s'agit de chercher l'influence des contributions de quelques groupes simples sur la valeur de $\Delta H_{f,S}$. Par exemple, l'influence de la contribution du groupe CH_2 sur les valeurs de $\Delta H_{f,S}$ de quelques familles de molécules (n-alcanes, n-alcanes cycliques, n-alcène...) permet de donner une idée sur la relation mathématique liant les contributions de groupes et les valeurs de $\Delta H_{f,S}$. La cinquième étape consiste à rechercher les paramètres du modèle par optimisation paramétrique (cf. paragraphe II.2.2). La sixième étape consiste à analyser les résultats de prédiction issus du nouveau modèle et calculer ses performances statistiques. Cette étape est décisive, soit le modèle est accepté, soit il est rejeté. Si le modèle est rejeté, l'étape de la définition de la fonction du modèle est revue, sinon on passe à l'étape suivante. Cette dernière étape consiste à faire une comparaison critique du modèle proposé avec les modèles concurrents de la littérature.

Les différentes étapes du développement de la méthode de prédiction des enthalpies de formation sont résumées dans l'organigramme suivant.

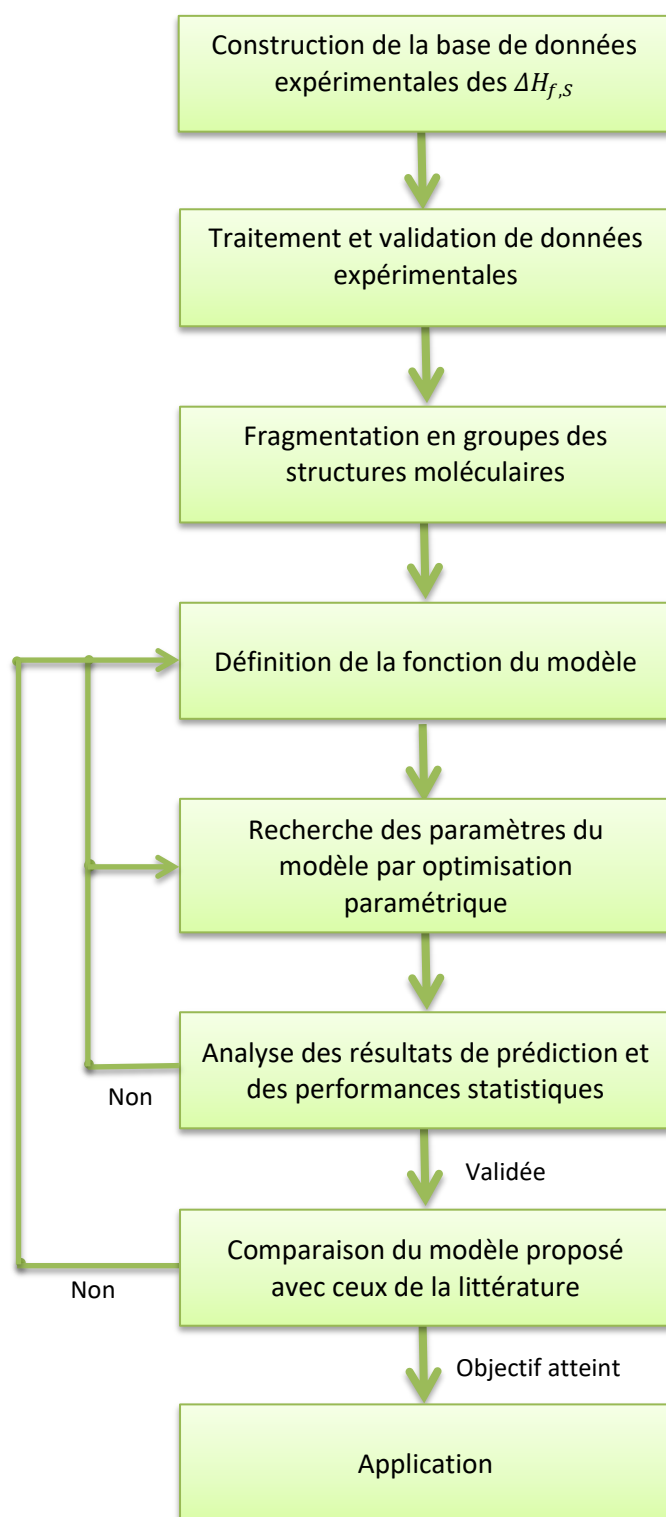


Figure 9 : Étapes du développement de la méthode de prédiction des enthalpies de formation à l'état solide, liquide et gazeuse.

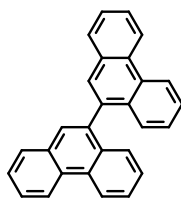
II.3.1 Banque d'enthalpies et types de composés étudiés

Les méthodes de contribution de groupe sont basées sur les corrélations entre les structures moléculaires et les valeurs expérimentales. Cependant, il est nécessaire d'établir une banque de données tout à fait fiable pour lesquelles les valeurs expérimentales des enthalpies de formation à l'état solide sont connues avec la meilleure précision possible.

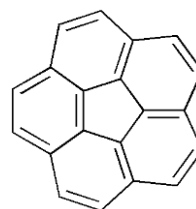
Afin d'aboutir à nos fins, un recueil conséquent de valeurs expérimentales d'enthalpies issues de plusieurs sources bibliographique [23] [24] [30] [31] a été effectué et mis à jour. Ceci permet d'étendre le champ d'application de notre méthode à un nombre important de matériaux. Il est à noter qu'un travail laborieux a été réalisé afin de vérifier chaque molécule de la base de données et ses données expérimentales.

La banque de données établie dans le cadre de ce travail englobe des molécules de différentes familles chimiques telles que les Alcanes, les Alcènes, les Aromatiques, les Acides, Cétones et autre familles qui peuvent être utiles dans plusieurs domaines industriels comme la synthèse des molécules pharmaceutiques et énergétiques, comme le montrent les exemples suivants.

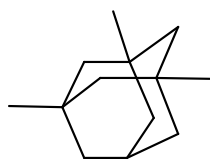
Notre liste complète, ainsi créée, contient 1222 molécules organiques dont l'enthalpie de formation à l'état solide est affichée. Elle se divise principalement en quatre grandes classes, à savoir, les composés hydrocarbonés C_xH_y , oxygénés $C_xH_yO_z$, azotés $C_xH_yN_w$ et finalement les composés $C_xH_yN_wO_f$. A titre d'exemple, nous affichons dans les figures suivantes quelques échantillons de notre banque de données.



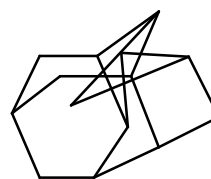
9,9'-biphenanthryl



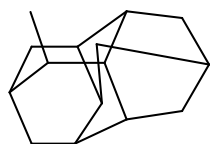
Corannulene



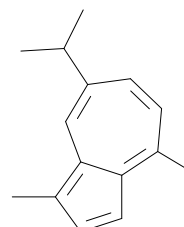
1,3,5,7-tetramethyladamantane



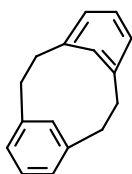
Diadamantane



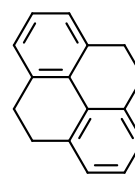
3-methyldiadamantane



1,4-dimethyl-7-(propan-2-yl)azulene

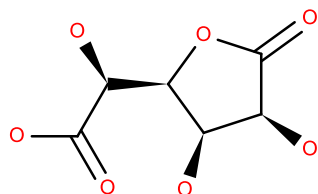


[2.2]metacyclophane

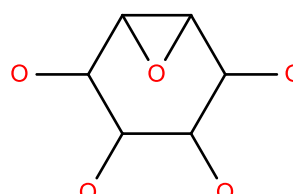


Pyrene, 4,5,9,10-tetrahydro-

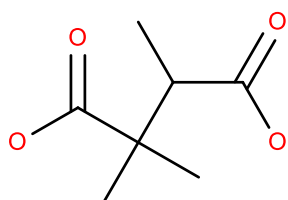
Tableau 9 : Exemple de quelques composés hydrocarbonés.



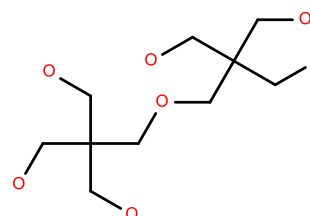
D-glucaric acid 3,6-lactone



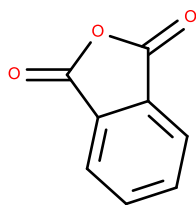
1,2-anhydro-3,4,5,6-alloinositol



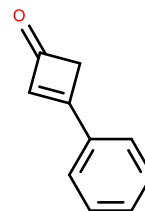
Trimethylbutanedioic acid



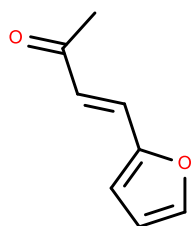
2,2'-(oxybis(methylene)) bis(2-(hydroxymethyl))-1,3-propanediol



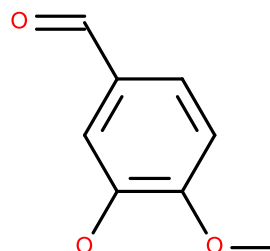
Phthalic anhydride



3-Phenylcyclobutenone

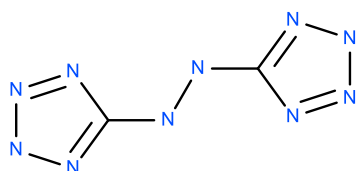


3-Buten-2-one, 4-(2-furanyl)-

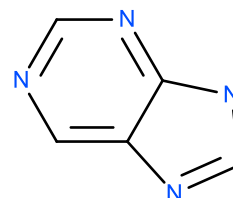


3-hydroxy-4-methoxybenzaldehyde

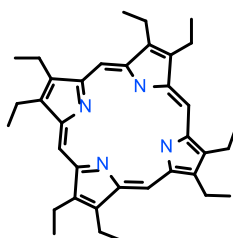
Tableau 10 : Exemple de quelques composés oxygénés.



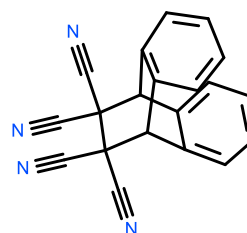
5,5'-hydrazotetrazole



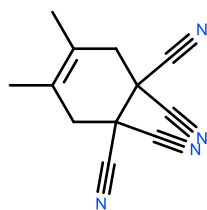
1H-Purine



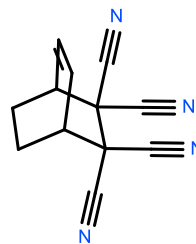
2,3,7,8,12,13,17,18-octaethyl-21H,23H-porphin



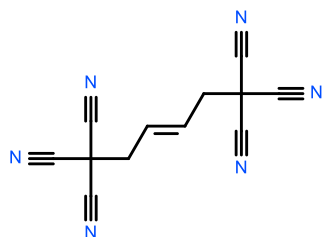
9,10-dihydro-9,10-ethanoanthracene-11,11,12,12-tetracarbonitrile



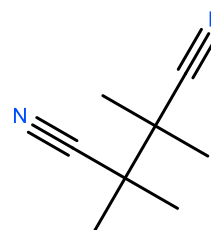
4,5-dimethyl-4-cyclohexene-1,1,2,2-tetracarbonitrile



Bicyclo[2,2,2]oct-5-ene-2,2,3,3-tetracarbonitrile

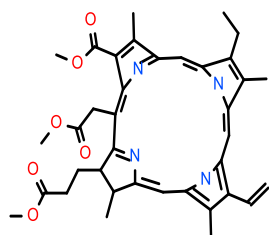


3-hexene-1,1,1,6,6,6-hexacarbonitrile

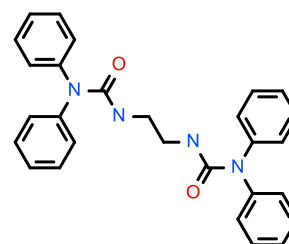


Tetramethylbutanedinitrile

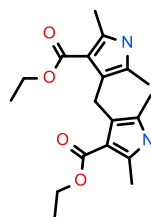
Tableau 11 : Exemple explicatif des composés azotés.



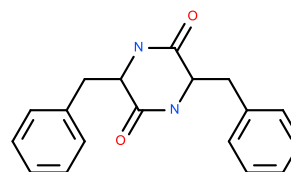
Chlorin-e6-trimethyl ester



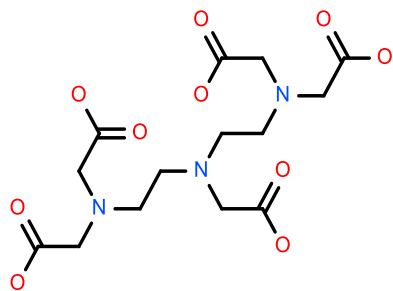
Ethylene-bis-diphenylurea



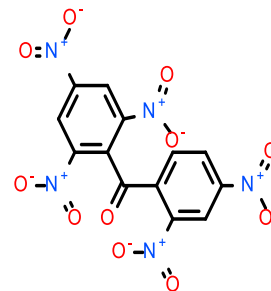
4,4'-methylenebis(2,5-dimethyl-1H-pyrrole-3-carboxylic acid)diethyl ester



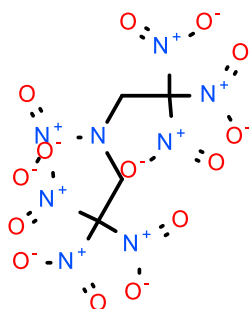
3,6-dibenzyl-2,5-piperazinedione



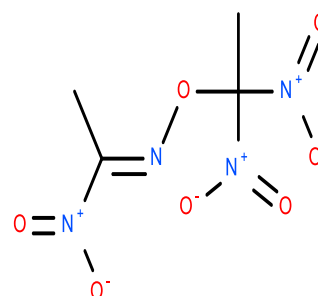
N,N-bis(2
(bis(carboxymethyl)amino)ethyl)glycine



2,2',4,4',6-
pentanitrobenzophenone



N-nitrobis(2,2,2-trinitroethyl)amine



1-nitroacetaldeheo-(1,1-
dinitroethyl)oxime

Tableau 12 : Exemple explicatif des composés contenant les éléments C, H, N, O.

Pour plus de détail sur notre base de données nous l'avons reporté intégralement dans l'annexe, où pour chaque molécule nous avons affiché son code Smiles, ça valeur expérimentale, son nom, ça formule brute, et son numéro de CAS.

II.3.2 Les différents types de corrections

Les méthodes de contributions de groupes font appel, en plus des groupes proprement dits, à plusieurs contributions liées à la structure géométrique moléculaire, appelés « corrections ». Ces corrections sont prises en considération afin de rendre compte des phénomènes à longue distance ayant un effet non négligeable sur les énergies internes des molécules telles que les énergies de répulsion engendrées par les atomes d'hydrogène des groupes méthyles, les énergies de répulsion-attraction entre groupements au travers d'un cycle ou plusieurs cycles aromatiques, ou encore les énergies de tension des cycles...

En conséquence, ces corrections permettent une meilleure description des composés complexes (tels que les hydrocarbures polycycliques et aromatiques) et de la différenciation entre les isomères. Ces corrections sont destinées à décrire que des fragments moléculaires qui ne sont pas décrits correctement par les groupes proprement dits notamment les groupes de premier ordre. Donc, les corrections impliquent des contributions qui permettent une meilleure description des composés complexes. En revanche, ces corrections devraient être utilisées de manière économique et seulement dans les cas où un effet évident sur une propriété thermodynamique, qui ne pouvait être décrite par les contributions individuelles du groupe.

Dans le cadre de ce travail de thèse, nous avons ajouté des corrections à la méthode de Marrero et Gani [26] sous forme de nouveaux groupes (cf. Tableau 21) et ceci suivant trois types de corrections à savoir les corrections de structure, les corrections interactions à longue distance et les corrections d'interaction entre groupes fonctionnels. En effet, il a été constaté qu'un nombre conséquent de groupes manque dans la méthode de Marrero et Gani [26] ce qui empêche son application pour un nombre considérable de molécules, et en particulier de molécules énergétiques contenant de l'azote, carbone, hydrogène et oxygène. Le Tableau 21 donne un aperçu sur les nouveaux groupes.

II.3.2.a Corrections de structure

Les corrections de structure concernent les corrections de cycle (ex : cyclopentane, cyclohexane, cubane...). En effet, des forces dues à la tension des cycles sont susceptibles d'intervenir dans le calcul des enthalpies de formation. La présence d'un cycle dans une molécule induit la prise en compte d'une énergie supplémentaire. On notera que plus les angles formés par les atomes de carbone dans un cycle plan sont aigus, plus le cycle considéré est tendu et plus la contribution de ce cycle à l'enthalpie de formation est élevée. Également, il a été constaté que la tension de cyclique des composés polycycliques vaut, en première approximation, la somme des tensions des petits cycles qui les composent. Par exemple, pour le cubane on calcule:



Figure 10: Structure du cubane

le calcul de l'enthalpie de formation pour cette molécule, consiste à faire une sommation du contribution des 8 groupes de C-(C)₃(H), avec 6 groupe du tension des cycle de quatre carbones.

- 08 groupes de C-(C)₃(H) donnent : $8 \times (-1.75) = -14$ Kcal/mol
- 06 cycles de 4 carbones donnent : $6 \times (26.5) = 159$ Kcal/mol ;

$$\text{Alors } \Delta H_f^\circ(\text{predite}) = -14 + 159 = 145 \text{ Kcal/mol}$$

Ou ΔH_f° expérimentale est **148.7 Kcal/mol**, ce qui est très proche de la valeur prédite [63].

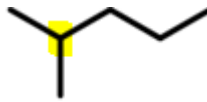
II.3.2.b Corrections des interactions à longue distance

Les corrections des interactions à longue distance, s'appliquent principalement à des effets de proximité. Par exemple, deux groupes présentent un comportement significatif étant situés dans une certaine position l'un par rapport à l'autre et qu'ils affectent une propriété thermodynamique. Dans ce cas où la position relative est un souci, l'effet peut être décrit en utilisant des corrections de type d'interactions à longue distance. De nombreux exemples existent pour ces types d'effets tels que les effets de deux atomes ou groupements placés en position ortho, méta ou para sur un cycle benzénique.

Dans le cadre de ce travail, plusieurs types de corrections d'interactions à longue distance sont proposés afin de mieux décrire des molécules complexes. Ces corrections sont décrites dans les paragraphes suivants.

Interactions répulsives des groupes méthyles

Durant l'établissement de la banque de données des enthalpies de formation, il a été constaté que plus il y a de groupes méthyles branchés ou liés à des atomes de carbone tertiaires ou quaternaires dans un isomère, plus son enthalpie de formation est négative. De ce fait, cinq corrections sont considérées. Le tableau suivant illustre ces corrections.

Groupe	Description	Exemple
$CH-(CH_3)_2$	Deux groupes méthyles liés à un atome de carbone tertiaire	2-Methylpentane 

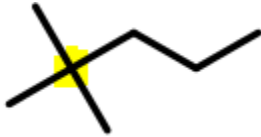
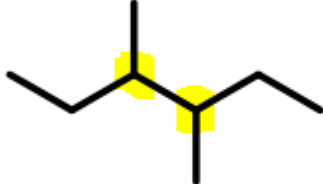
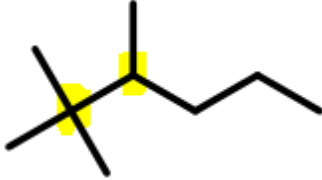

$C-(CH_3)_3$	Trois groupes méthyles liés à un atome de carbone quaternaire.	2,2-Dimethyl-Pentane 
$CH(CH_3)-CH(CH_3)$	Un atome de carbone tertiaire liés à un groupe méthyle et adjacent à un autre atome de carbone tertiaire liés lui-même à un groupe méthyle.	3,4-Dimethyl-hexane 
$CH(CH_3)-(CH_3)_2$	Un atome de carbone quaternaire liés à trois groupes méthyles et adjacent à un autre atome de carbone tertiaire liés lui-même à un groupe méthyle.	2,2,3-trimethyl-Hexane 
$C(CH_3)_2-C(CH_3)_2$	Un atome de carbone quaternaire liés à deux groupes méthyles et adjacent à un autre atome de carbone quaternaire liés lui-même à deux groupes méthyles.	3,3,4,4-Tetramethyl-hexane 

Tableau 13 : Description des corrections d'interactions répulsives engendrées par les atomes d'hydrogène.

Interactions entre les substitutions dans un cycle aromatique

En présence des composés ayant un ou plusieurs cycles aromatiques (benzénique, Pyrrole, Pyridine, ...) plusieurs corrections sont proposées pour décrire les effets de deux ou plusieurs atomes ou groupements branchés.

À titre d'exemple, en présence des composés ayant des cycles aromatiques de type Pyrrole ou Pyridine, les corrections suivantes peuvent s'appliquer (voir tableau suivant).

Groupe	Description	Exemple
Pyrrole S_2	Le numéro suivant la lettre S désigne la position des substituants autres que l'hydrogène sur la molécule de pyrrole ou de pyridine.	Di-2-pyrrolylmethane
Pyrrole S_2S_5		2,2',5,5'-tetramethyl-1,1'-bipyrrole
Pyridine S_3		3-pyridinecarbonitrile
Pyridine S_2S_6		2,6-pyridinediamine

Tableau 14 : Interactions entre les substitutions sur un cycle aromatique autre que benzénique

Interactions entre des cycles aromatiques fusionnés

Les molécules aromatiques polycycliques imposent des effets électroniques importants. Afin d'écrire l'avantage les composés aromatiques polycycliques et distinguer leurs isomères, plusieurs corrections peuvent être proposées à savoir les interactions entre des cycles benzéniques fusionnés et les interactions entre des cycles autres que benzéniques fusionnés. Le premier type de corrections est présenté en détail dans le Tableau 15 avec des exemples. En revanche, vu la diversité des corrections du deuxième type nous allons présenter que quelques exemples concernant le Pyridine et le Pyrrole dans le Tableau 16.

Groupe	Description	Exemple
AromFused[2]	C'est un cycle aromatique de six atomes, fusionné en deux points. La lettre S montre la position de la substitution sur ce cycle fusionné.	Biphenylene
AromFused[2]s ₁		1,8-dimethylnaphthalene
AromFused[2]s ₂		2,6-dimethylnaphthalene
AromFused[2]s ₂ s ₃		2,3-dimethylnaphthalene
AromFused[2]s ₁ s ₄		1,4,5,8-tetramethylnaphthalene
AromFused[2]s ₁ s ₂		3,4,5,6-tetramethylphenanthrene
AromFused[2]s ₁ s ₃		2,4,5,7-tetramethylphenanthrene
AromFused[2]s ₁ s ₈		1,8-dimethylnaphthalene
AromFused[3]	C'est un cycle aromatique de six atomes, fusionné en trois points	Acenaphthylene
AromFused[4p]	C'est un cycle aromatique de six atomes, fusionné en quatre points. La lettre S montre la position de la substitution sur ce cycle fusionné.	2,7-dimethylphenanthrene
AromFused[4p]s ₃		5,8-dimethylbenzo[c]phenanthrene
AromFused[4p]s ₃ s ₄		4,5-dimethylphenanthrene
AromFused[4a]		3,9-dimethylbenz[a]anthracene
AromFused[4a]s ₁		9,9'-bianthracene
AromFused[4a]s ₁ s ₄		5,6,11,12-tetraphenylnaphthacene

Tableau 15 : Description des corrections concernant les molécules benzéniques fusionnées.

Groupe	Description	Exemple
Pyridine fused [2]	Cette correction montre le cas d'un cycle de cinq ou six atomes, contient un atome d'azote fusionné en deux ou quatre points.	Benzo[f]quinoline
Pyridine fused [4a]		5-methyl-5H-indeno[2,1-b]quinoline
Pyridine fused [4p]		6,7-benzoquinoline
Pyrole fused [2]		2,3-dimethyl-1H-indole
Pyrole fused [4]		9-methyl-9H-carbazole

Tableau 16 : Description des corrections concernant les molécules autres que benzéniques fusionnées.

Interactions entre un ou plusieurs cycles aromatiques fusionnés à un cycle non aromatique

En présence de molécules ayant un ou plusieurs cycles aromatiques fusionnés à un cycle non aromatique (voir figure suivante) des corrections s'imposent afin de tenir compte les effets de tensions des cycles. Ces derniers prennent en considération le nombre d'atomes non aromatiques situés entre deux atomes aromatiques.

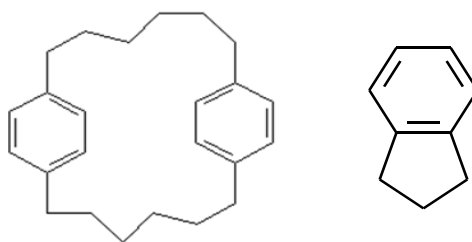


Figure 11 : Exemple de deux molécules ayant un ou plusieurs cycles aromatiques fusionnés à un cycle non aromatique.

À titre d'exemple, le tableau suivant présente quelques corrections avec des exemples illustratifs.

Groupe	Description	Exemple
$(\text{CH}_n)_0-(\text{CB})_2$	Nombre des atomes de carbones appartenant à un cycle nom aromatique et se trouvant entre deux atomes benzéniques appartiennent à un ou deux cycles benzéniques différents.	Biphenylene
$(\text{CH}_n)_1-(\text{CB})_2$		9,10-dihydro-anthracene
$(\text{CH}_n)_2-(\text{CB})_2$		Acenaphthene
$(\text{CH}_n)_3-(\text{CB})_2$		1,1,4,6,7-pentamethylindan
$(\text{CH}_n)_4-(\text{CB})_2$		1,2,3,4,5,6,7,8-octahydro-anthracene
$(\text{CH}_n)_6-(\text{CB})_2$		[6.6]paracyclophane
$(\text{CH}_n)_8-(\text{CB})_2$		[1.8]paracyclophane
$(\text{C}=\text{C})-(\text{CB})_2$		Acenaphthylene

Tableau 17 : Description des corrections concernant les molécules cycliques non aromatiques fusionnées a un cycle aromatique

II.3.2.c Interactions entre groupes fonctionnels

Dans le cas des molécules polyfonctionnelles où il y a une association de deux ou plusieurs groupes fonctionnels dans une même molécule, la règle d'additivité des groupes ne décrit pas correctement les effets des interactions entre les groupes fonctionnels.

Par conséquent, plusieurs d'interaction entre les groupes fonctionnels peuvent être définies, par ces groupes telles que $H_2N-CO-CH_n-CH_m-CO-NH_2$ (m, n in 1..2); $HOOC-CH_n-COOH$ (n in 1..2); $HOOC-CH_n-CH_m-COOH$ (n, m in 1..2); $HO-CH_n-COOH$ (n in 1..2); $NH_2-CH_n-CH_m-COOH$ (n, m in 1..2), etc...

II.4 Mise au point du modèle

Après avoir examiné la totalité de molécules (1222 molécules), chaque molécule a été découpée en fragment moléculaire (groupe) suivant un schéma de découpage d'ordre trois selon Marrero et Gani (cf paragraphes I.3.1 et II.3.2) en utilisant notre programme développé dans notre laboratoire LCOMM⁶. Ensuite les 1222 molécules sont divisées en deux ensembles d'une manière semi-aléatoire; un ensemble d'apprentissage contenant plus de 85% de la totalité des molécules (1039 composés) pour déterminer ou bâtir notre modèle et un autre ensemble de tests contenant le reste des molécules (15%, soit 183 molécules) pour évaluer correctement les performances de prédiction du modèle développé.

Dans le cas des méthodes de contribution de groupes la manière de division des données doit se faire d'une manière semi-aléatoire et pas aléatoire comme dans le cas des méthodes QSPR (Relation quantitative structure à activité). En effet, le choix aléatoire d'un ensemble de validation peut fausser les performances du modèle si une contribution d'un groupe est calculée uniquement à partir d'un ou de deux (voire trois) points de données. Une division aléatoire peut exclure certains paramètres (contributions) de l'étape d'apprentissage qui affecte directement les performances du modèle.

À cet effet, dans le cadre de cette thèse, l'ensemble des données est divisé en deux sous-ensembles (de données) en utilisant un choix semi-aléatoire. En effet, si un composé est sélectionné et si ce dernier est décrit par l'un des groupes non pertinents (Groupe ayant leur valeur de contribution générée par moins de trois

⁶ Laboratoire de chimie Organique, Macromoléculaire et des Matériaux.

composés) ce composé est éliminé de l'ensemble du test. Ceci est important pour éviter le manque de certaines données nécessaires pour l'étape d'apprentissage et pour permettre une meilleure régression de certains paramètres du modèle.

Plusieurs formes de modèle mathématique⁷ ont été testées pour prédire $\Delta H_{f,S}$. La meilleure forme mathématique trouvée était une forme linéaire simple. Le modèle obtenu est le suivant:

$$\Delta_f H_{solid}(kJ/mol) = \sum_{i=1}^N n_i \times A_i \quad (66)$$

A_i : la contribution du premier, second ou troisième ordre de type i avec l'apparition n_i fois.

Pour estimer les paramètres du modèle (contributions A_i), une régression simultanée est considérée en utilisant toutes les contributions des groupes de premier, deuxième et troisième ordre dans la phase d'apprentissage du modèle proposé. Cela évite que les termes d'ordre supérieur absorbent les erreurs des termes inférieurs. Ces paramètres sont obtenus en minimisant la somme des carrés des erreurs d'estimation en utilisant l'algorithme de Levenberg-Marquardt. La recherche des valeurs de contributions de groupes est assurée par l'utilisation du programme d'estimation des contributions groupes (cf. paragraphe II.2.2).

Après avoir estimé $\Delta_f H_{solid}$ pour tous les composés en utilisant l'équation précédente, nous avons constaté que l'erreur absolue moyen (EAM) est relativement importante; Il y a une fraction de composés qui ont de grandes erreurs d'estimation. En examinant ces derniers composés, nous avons constaté que ces derniers appartiennent aux classes chimiques suivantes: alcanes cycliques, polynitro acycliques et cycliques, nitramine acycliques et cycliques, hétéroatomes d'azote dans des cycles à six chaînes et à cinq chaînes, des quinoléines et des composés avec un certain nombre spécifique de fragments moléculaires.

Après avoir analysé les structures moléculaires de ces composés présentant de grandes erreurs d'estimation, de nouveaux groupes structuraux sont définis et inclus dans les groupes de Marrero-Gani comme nouveaux groupes ou

⁷ Liant les structures moléculaires (groupes) d'un composé à sa valeur d'enthalpie $\Delta H_{f,S}$

corrections supplémentaires de troisième ordre afin d'augmenter la précision et la fiabilité de la méthode proposée. Ces nouveaux groupes fournissent plus d'informations structurelles et permettent de distinguer entre des composés similaires ayant en commun un ou plusieurs groupes fonctionnels de premier ordre. Une liste de nouveaux groupes est présentée dans le Tableau 21.

Les contributions des groupes du premier ordre (117 groupes), du second ordre (83 groupes), du troisième ordre (47 groupes) et les nouveaux groupes (37 groupes) sont affichées ainsi que leurs fréquences d'occurrences dans Tableau 18, Tableau 19, Tableau 20 et Tableau 21, respectivement.

N°	Groupe	Contribution	Occurrence
1	CH ₃	-63,06	422
2	CH ₂	-27,8	295
3	CH	21,71	68
4	C	80,55	37
5	CH ₂ =CH	38,36	10
6	CH=CH	38,15	12
7	CH ₂ =C	23,53	1
8	CH=C	58,09	15
9	C=C	123,21	3
10	CH≡C	219,04	2
11	C≡C	229,18	10
12	aCH	5,19	628
13	aC fused with aromatic ring	16,7	96
14	aC fused with non-aromatic ring	12	69
15	aC except as above	21,52	196
16	aN in aromatic ring	55,4	43
17	aC-CH ₃	-30,78	113
18	aC-CH ₂	-0,55	50
19	aC-CH	23,23	37
20	aC-C	70,37	23
21	aC-CH=CH	67,3	17
22	aC-C=CH ₂	83,99	2
23	aC-C≡C	228,96	5
24	OH	-220,79	125
25	aC-OH	-199,46	95
26	COOH	-432,61	143
27	aC-COOH	-406,48	66
28	CH ₃ CO	-231,87	14
29	CH ₂ CO	-166,51	19
30	aC-CO	-114,41	27
31	CHO	-120,67	11
32	aC-CHO	-122,56	2
33	CH ₃ COO	-367,39	7
34	CH ₂ COO	-331,88	8
35	CHCOO	-316,22	1
36	aC-COO	-296,14	27

37	aC-OOC	-322,62	6
38	COO <small>except as above</small>	-354,25	42
39	CH ₃ O	-205,4	6
40	CH ₂ O	-184,49	16
41	CH-O	-157,08	1
42	aC-O	-97,16	20
43	CH ₂ NH ₂	-99,02	15
44	CHNH ₂	-70,88	37
45	CNH ₂	-36,46	2
46	CH ₃ NH	-57,93	5
47	CH ₂ NH	-42,63	14
48	CH ₃ N	-3,38	6
49	CH ₂ N	34,56	14
50	aC-NH ₂	-15,91	41
51	aC-NH	49,12	25
52	aC-N	110,01	16
53	NH ₂ <small>except as above</small>	-67,74	46
54	CH=N	105,61	9
55	C=N	89,74	8
56	CH ₂ CN	57,09	6
57	CHCN	120,13	1
58	CCN	148,83	10
59	aC-CN	128,87	11
60	CN <small>except as above</small>	132,6	35
61	aC-NCO	-65,85	1
62	CH ₂ NO ₂	-105,26	5
63	CHNO ₂	-45,39	4
64	CNO ₂	-27,27	35
65	aC-NO ₂	-32,13	96
66	NO ₂ <small>except as above</small>	-20,54	68
67	ONO ₂	-130	19
68	CONH ₂	-249,48	30
69	CONHCH ₃	-255,74	1
70	CONHCH ₂	-212,38	5
71	aC-CONH ₂	-226,64	5
72	aC-CONH	-185,03	6
73	aC-NHCO	-181,5	11
74	aC-(N)CO	-115,84	21
75	NHCONH	-214,95	8
76	NH ₂ CONH	-295,11	10
77	NH ₂ CON	-201,09	3
78	NHCON	-141,32	1
79	aC-NHCONH ₂	-271,99	3
80	aC-NHCONH	-95,08	1
81	NHCO <small>except as above</small>	-207,1	19
82	CHNOH	-26,48	8
83	CNOH	-23,89	13
84	aC-CHNOH	-3,85	2
85	OCH ₂ CH ₂ OH	-392,18	1
86	OCHCH ₂ OH	-428,79	6
87	OCH ₂ CHOH	-428,61	6

88	-O-OH	-369,51	7
89	CO ₃ (Carbonate)	-453,79	5
90	CH ₂ (cyclic)	-34,2	155
91	CH (cyclic)	30,23	126
92	C (cyclic)	16,07	47
93	CH=CH (cyclic)	8,01	48
94	CH=C (cyclic)	12,33	61
95	C=C (cyclic)	30,04	60
96	CH ₂ =C (cyclic)	71,21	2
97	NH (cyclic)	-39,57	142
98	N (cyclic)	47,34	53
99	CH=N (cyclic)	5,69	24
100	C=N (cyclic)	16,42	99
101	O (cyclic)	-163,73	90
102	CO (cyclic)	-194,24	75
103	>NH	3,61	13
104	-O-	-144,12	7
105	>CO	-138,25	7
106	N=N	194,69	57
107	C _{cyclic} =N-	190,89	1
108	C _{cyclic} =CH-	61,53	1
109	C _{cyclic} =NH	-29,92	1
110	N=O	54,14	10
111	C _{cyclic} =C	64,81	4
112	N=N	219,61	24
113	C=NH	26,43	9
114	aC-CON	-60,82	2
115	aN-	119,33	1
116	HCONH	-225,39	2
117	CHOCH	-62,75	1

Tableau 18 : Valeurs de contributions de groupes du premier ordre donnant l'enthalpie de formation à l'état solide.

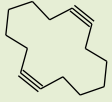

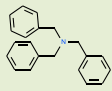

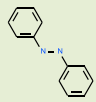
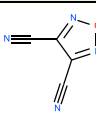
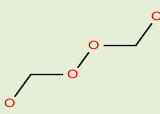
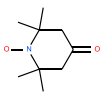
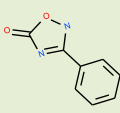
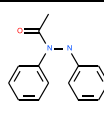
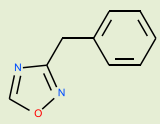
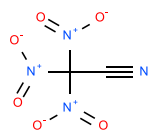
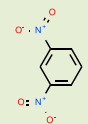
N°	Groupe	Contribution	Occurrence
1	(CH ₃) ₂ CH	-3,34	20
2	(CH ₃) ₃ C	-6,22	12
3	CH(CH ₃)CH(CH ₃)	-1,21	3
4	CH(CH ₃)C(CH ₃) ₂	-17,13	1
5	C(CH ₃) ₂ C(CH ₃) ₂	-26,67	4
6	CH _n =CH _m -CH _p =CH _k (k,m,n,p in 0..2)	9,5	4
7	CH ₃ -CH _m =CH _n (m,n in 0..2)	-15,92	3
8	CH ₂ -CH _m =CH _n (m,n in 0..2)	10,45	10
9	CH _p -CH _m =CH _n (m,n in 0..2; p in 0..1)	10,03	1
10	CHCHO or CCHO	-60,06	4
11	CH ₃ COCH ₂	58,17	2
12	CH ₃ COCH or CH ₃ COC	-5,16	2
13	CHCOOH or CCOOH	-17,03	1
14	CH ₃ COOCH or CH ₃ COOC	-57,96	5
15	CO-O-CO	-106,44	3
16	CHOH	-2,12	2
17	COH	-47,1	9
18	CH _m (OH)CH _n (OH) (m,n in 0..2)	-9,31	18
19	CH _m (OH)CH _n (NH _p) (m,n,p in 0..2)	21,86	7
20	H ₂ NCOCH _n CH _m CONH ₂ (m,n in 1..2)	-26,62	2
21	CH _m (NH _n)-COOH (m,n in 0..2)	-0,29	52
22	HOOC-CH _n -COOH (n in 1..2)	-9,49	2
23	HOOC-CH _n -CH _m -COOH (n, m in 1..2)	-31,51	23
24	HO-CH _n -COOH (n in 1..2)	-3,09	9
25	NH ₂ -CH _n -CH _m -COOH (n, m in 1..2)	17,37	2
26	NC-CH _n -CH _m -CN (n, m in 1..2)	13,34	2
27	COO-CH _n -CH _m -OOC (n, m in 1..2)	-14,73	1
28	CH _m =CH _n -CN (m,n in 0..2)	-15	7
29	CH _n =CH _m -COO-CH _p (m,n,p in 0..3)	32,33	1
30	CH _m =CH _n -CHO (m,n in 0..2)	-6,9	2
31	CH _m =CH _n -COOH (m,n in 0..2)	17,94	10
32	aC-CH _n -NH _m (n in 1..2; m in 0..2)	-12,44	4
33	aC-CH _n -O- (n in 1..2)	54,33	1
34	aC-CH _n -OH (n in 1..2)	4	11
35	aC-CH _n -COOH (n in 1..2)	20,46	9
36	aC-CH _n -CO- (n in 1..2)	27,45	2
37	aC-CH _m -NO ₂ (n in 1..2)	-24,54	1
38	aC-CH _n -CONH ₂ (n in 1..2)	0,1	1
39	aC-CH(CH ₃) ₂	26,76	16
40	aC-C(CH ₃) ₃	25,34	13
41	(CH _n =C) _(cyc) -CHO (n in 0..2)	-53,19	5
42	(CH _n =C) _(cyc) -COO-CH _m (n,m in 0..3)	10,92	38
43	(CH _n =C) _(cyc) -CO- (n in 0..2)	17,98	7
44	(CH _n =C) _(cyc) -CH ₃ (n in 0..2)	10,48	57
45	(CH _n =C) _(cyc) -CH ₂ (n in 0..2)	14,02	28
46	CH _(cyc) -CH ₃	-46,66	14
47	CH _(cyc) -CH ₂	-62,34	25
48	CH _(cyc) -CH	-66,71	7
49	CH _(cyc) -C	-56,5	3

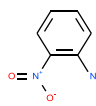
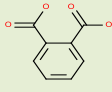
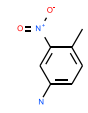
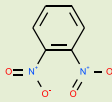
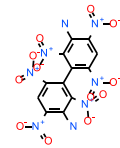

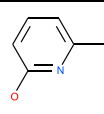
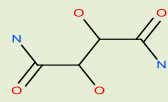
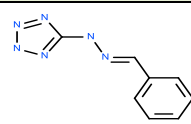
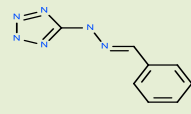
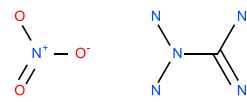
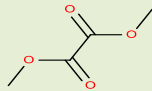

50	CH _{cyc} -CH=CH _n (n in 1..2)	32,53	1
51	CH _{cyc} -OH	-31,32	27
52	CH _{cyc} -NH-CH _n (n in 0..3)	-53,47	1
53	CH _{cyc} -N-CH _n (n in 0..3)	-27,32	1
54	CH _{cyc} -CN	-80	1
55	CH _{cyc} -COOH	-44,66	5
56	CH _{cyc} -CO	-62,47	1
57	CH _{cyc} -NO ₂	-94,51	3
58	CH _{cyc} -O-	-6,06	11
59	CH _{cyc} -OOC	-88,52	5
60	C _{cyc} -CH ₃	1,75	19
61	C _{cyc} -CH ₂	21,25	4
62	C _{cyc} -OH	16,49	2
63	>N _{cyc} -CH ₃	6,74	15
64	>N _{cyc} -CH ₂	-12,29	4
65	AROMRINGS ¹ s ²	1,77	45
66	AROMRINGS ¹ s ³	-3,84	28
67	AROMRINGS ¹ s ⁴	-1,38	85
68	AROMRINGS ¹ s ² s ³	13,8	15
69	AROMRINGS ¹ s ² s ⁴	-4,43	33
70	AROMRINGS ¹ s ³ s ⁵	-13,33	15
71	AROMRINGS ¹ s ² s ³ s ⁴	3,86	6
72	AROMRINGS ¹ s ² s ³ s ⁵	5,54	34
73	AROMRINGS ¹ s ² s ⁴ s ⁵	-5,48	14
74	PYRIDINES ²	3,39	3
75	PYRIDINES ³	-11,66	3
76	PYRIDINES ⁴	-21,3	2
77	PYRIDINES ² s ³	-14,33	1
78	PYRIDINES ² s ⁴	-10,79	2
79	PYRIDINES ² s ⁵	-6,73	1
80	PYRIDINES ² s ⁶	-26,95	2
81	(CH ⁿ =CH ^m) ^{cyc} -COOH	9,75	3
82	AROMRINGS ¹ s ² s ³ s ⁴ s ⁵	6,01	15
83	(N=C) _{cyc} -CH ₃	-0,15	19

Tableau 19 : Valeurs de contributions de groupes du second ordre donnant l'enthalpie de formation à l'état solide.

N°	Groupe	Contribution	Occurrence
1	HOOC-(CH _n) _m -COOH (m>2, n in 0..2)	-9,2	5
2	NH _n -(CH _n) _m -COOH (m>2, n in 0..2)	5,82	3
3	OH-(CH _n) _m -OH (m>2, n in 0..2)	32,58	3
4	NH ₂ -(CH _n) _m -NH ₂ (m>2; n in 0..2))	104,26	1
5	aC-(CH _n =CH _m) _{cyc} (fused rings) (n,m in 0..1)	12,98	8
6	aC-aC (different rings)	0,44	48
7	aC-CH _{ncyc} (different rings) (n in 0..1)	-21,78	4
8	aC-CH _{ncyc} (fused rings) (n in 0..1)	0,68	32
9	aC-(CH _n) _m -aC (different rings) (m>1; n in 0..2)	-14,13	3
10	aC-(CH _n) _m -CH _{cyc} (different rings) (m>0; n in 0..2)	19,89	7
11	CH _{cyc} -CH _{cyc} (different rings)	-174,49	1
12	CH multiring	-61,51	61
13	C multiring	-31,29	16
14	aC-CH _m -aC (different rings) (m in 0..2)	18,99	22
15	aC-(CH _m =CH _n)-aC (different rings) (m,n in 0..2)	2,47	20
16	(CH _m =C) _{cyc} -CH _p -(C=CH _n) _{cyc} (different rings)	33,98	4
17	aC-CO-aC (different rings)	3,95	4
18	aC-CH _m -CO-aC (different rings) (m in 0..2)	-19,26	5
19	aC-CO-CO-aC (different rings)	22,93	1
20	aC-CO _{cyc} (fused rings)	11,28	7
21	aC-CO-CH _{ncyc} (different rings) (n in 0..1)	-62,98	1
22	aC-CO-NH _n -aC (different rings) (n in 0..1)	21,51	3
23	aC-NH _n CONH _m -aC (different rings) (n,m in 0..1)	-95,12	1
24	aC-NH _{ncyc} (fused rings) (n in 0..1)	-14,11	19
25	aC-NH-aC (different rings)	-19,31	9
26	aC-(C=N) _{cyc} (different rings)	-1,6	19
27	aC-(N=CH _n) _{cyc} (fused rings) (n in 0..1)	-4,8	10
28	aC-(CH _n =N) _{cyc} (fused rings) (n in 0..1)	119,18	2
29	aC-O-aC (different rings)	-8,35	1
30	aC-O _{cyc} (fused rings)	9,45	9
31	AROM.FUSED[2]	-1,99	103
32	AROM.FUSED[2]s ¹	14,28	20
33	AROM.FUSED[2]s ²	1,64	18
34	AROM.FUSED[2]s ² s ³	6,92	4
35	AROM.FUSED[2]s ¹ s ⁴	27,94	7
36	AROM.FUSED[2]s ¹ s ²	20,46	4
37	AROM.FUSED[2]s ¹ s ³	11,44	6
38	AROM.FUSED[3]	-9,58	7
39	AROM.FUSED[4a]	-9,17	13
40	AROM.FUSED[4a]s ¹	33,63	2
41	AROM.FUSED[4a]s ¹ s ⁴	65,51	3
42	AROM.FUSED[4p]	-4,65	23
43	AROM.FUSED[4p]s ³ s ⁴	27,71	2
44	AROM.FUSED[4a]s ¹	-14,12	5
45	PYRIDINE.FUSED[4]	10,21	3
46	aC-N-CH _{cyc} (different rings)	-26,65	1
47	N multiring	-2,13	5

Tableau 20 : Valeurs de contributions de groupes du troisième ordre donnant l'enthalpie de formation à l'état solide.

N°	nouveaux groupes	exemple	Contribution	Occurrence	Structure moléculaire
1	$(-C\equiv C-)_{cyc}$	(1540-80-3) 1,8-cyclotetradecadiène (02)	-148,60	1	
2	$O-(H)_2$	water (01)	-265,18	7	
3	$>N-$	(620-40-6) Tribenzylamine (01)	102,16	1	
4	$(CH_n=N-O)_{cyc}-O$ (n in 0,1)	(3470-17-5) Benzotrifuroxan (03)	-40,67	5	
5	NH_n-NH_m (n,m in 0,1,2)	(122-66-7) 1,2-diphénylhydrazine (01)	81,18	24	
6	$(-CH_n=N-O-)_{cyc}$ (n in 0,1)	(55644-07-0) 3,4-dicyano-1,2,4-oxadiazole (02)	144,82	26	
7	OH_n-OH_m (n,m in 0,1)	(17088-73-2) Dioxybisméthanol (01)	158,79	15	
8	$(N)_{cyc}-OH$	(2896-70-0) 2,2,6,6-tétraméthyl-4-oxo-1-piperidinyloxy (01)	199,91	2	
9	$(-O-NH_n-)_{cyc}$ (n, in 0,1)	(1456-22-0) 3-phényl-1,2,4-oxadiazol-5(4H)-one (01)	19,47	11	
10	$-H_nCO-N_m-N_k$ (n,m, in 0,1) (k in 0,1,2)	(22293-38-5) Acetic acid 1,2-diphénylhydrazide (01)	20,08	8	
11	$(-N=CH_n-O-)_{cyc}$ (n in 0,1)	(56092-91-2) 3-cyano-5-(cyanofurazanyl)-1,2,4-oxadiazole N-oxide (01)	48,19	16	
12	$(NO_2)_3-C-$	(630-72-8) Trinitroacetonitrile (01)	24,92	61	
13	$NO_2-(aC-aCH_n-aC)-NO_2$ (n in 0,1)	(99-65-0) 1,3-dinitrobenzène (01)	-9,98	16	

14	$\text{NO}_2\text{-(aC)}_2\text{-NH}_n$ (n in 0,1,2)	(88-74-4) 2-nitroaniline (01)	22,42	8	
15	$\text{HOOC-(aC)}_2\text{-COOH}$	(88-99-3) 1,2-benzenedicarboxylic acid (01)	-2,93	9	
16	$\text{NO}_2\text{-(aC)}_2\text{-(CH)}_m$ (n in 0,1,2,3) (m in 1,.....m)	(119-32-4) 4-methyl-3-nitroaniline (01)	44,27	3	
17	$\text{NO}_2\text{-(aC)}_2\text{-NO}_2$	(528-29-0) 1,2-dinitrobenzene (01)	10,83	7	
18	$\text{NO}_2\text{-(aC)}_2\text{-aC}$	(17215-44-0) 3,3'-diamino-2,2',4,4',6,6'-hexanitrobiphenyl (04)	-47,30	3	
19	$\text{-(CH)}_m\text{-(N-CO)}$ cyc (n in 0,1,2,3) (m in 1,.....m)	(5840-76-6) 3-methyl-2,5-oxazolidine-dione (01)	-44,79	7	
20	(aN-aC)-OH	(3279-76-3) 2-methyl-6-hydroxypyridine (01)	-130,22	2	
21	$\text{NH}_2\text{-CO-CH}_n\text{-OH}$ (n in 0,1,2)	(634-63-9) N-Tartramide (02)	68,60	4	
22	$\text{aC-CH}_n\text{=N-N}_m$ (n in 0,1) (m in 0,1,2)	(10444-59-4) Benzaldehyde(5-tetrazolyl)hydrazone (01)	-4,83	7	
23	$\text{CH}_n\text{=N-N}_m$ (n in 0,1,2) (m in 0,1,2)	(10444-59-4) Benzaldehyde(5-tetrazolyl)hydrazone (01)	-14,14	15	
24	$\text{N=CH}_n\text{-N}_m$ (n in 0,1) (m in 0,1,2)	(37160-07-9) Diaminoguanidine nitrate (02)	55,85	3	
25	$\text{-OH}_n\text{-CO-CO-OH}_m$ (n,m in 0,1)	(553-90-2) Ethanedioic acid dimethyl ester (01)	256,22	2	
26	-N=N=N^-	(62154-79-4) Nitroguanylazide (01)	43,51	3	

27	(-CO-CH _n -CO-) cyc (n in 0,1,2)	(562-46-9) 1,3-Cyclohexanedione, 4,4-dimethyl- (01)	19,83	22	
28	NH _n -NO ₂ (n in 0,1,2)	(27256-18-4) Aminonitroguanidine (01)	99,96	10	
29	(-CH _n -CO-NH _k -CH _m -CO-NH _p) (n,m in 0,1,2) (k,p in 0,1)	(106-57-0) 2,5-piperazinedione (01)	59,15	3	
30	(-CH _n =CH _m -CH _k =CH _p -CH _t =CH _f -CO-) cyc (n,m,k,p,t,f in 0,1)	(33504-43-7) 2-amino-2,4,6-cycloheptatrien-1-one (01)	50,05	11	
31	aC-(N=N)-aC	(103-33-3) Azobenzene (01)	120,77	5	
32	3 member ring	(27729-95-9) Propiophenone, 2,3-epoxy-3-(p-methoxyphenyl)-, trans- (01)	160,87	9	
33	4 member ring	(38425-47-7) 3-Phenylcyclobutenone (01)	68,41	256	
34	5 member ring	635-90-5) 1-phenyl-1H-pyrrole (01)	47,71	137	
35	6 member ring	(100-64-1) Cyclohexanone, oxime (01)	107,25	16	
36	7-8-9 member ring	(105-60-2) ε-caprolactam (01)	142,57	28	
37	> 10 member ring	(295-37-4) 1,4,8,11-tetraazacyclotetradecane (01)	142,57	28	

Tableau 21 : Valeurs de contributions des nouveaux groupes proposés.

II.5 Résultats et discussions

II.5.1 Résultats obtenus

La performance du modèle proposé pour la prédiction des valeurs d'enthalpies de formation à l'état solide a été évaluée, analysée et interprétée. Dans le cas d'un grand ensemble de données, il est nécessaire d'examiner en détail les résultats du modèle proposé. Les indicateurs de performances statistiques utilisés dans ce travail, à savoir le coefficient de corrélation (R^2), l'écart-Type (ET) et l'erreur moyenne absolue (EMA) sont définis dans l'annexe A. Les erreurs moyennes relatives ne sont pas considérées ici car les données de l'enthalpie de formation ne sont pas homogènes. Ils existent parfois des molécules ayant des valeurs d'enthalpies très proche de zéro ce qui peut conduire à des erreurs relativement importantes et donc à des conclusions inexactes. Dans ce travail, les écarts types des erreurs de prédiction sont considérés car un faible écart type indique que les erreurs ont une tendance à être très proche à des erreurs moyennes (théoriquement censées se situer autour de la moyenne) et un écart-type élevé indique que les erreurs sont dispersées sur une large gamme de valeurs.

Tous les indicateurs de performances statistiques du modèle développé sont donnés dans le Tableau 22.

Base de données	Base de données	R^2	ET (kJ/mol)	EMA (kJ/mol)
Apprentissage	1039	0.99736	17.45	17.50
Test	183	0.99634	20.25	18.53
Base de données totale	1222	0.99722	17.89	17.65

Tableau 22 : Résultats de prédiction d'enthalpie standard de formation en phase solide.

L'erreur moyenne absolue et l'écart type de l'ensemble de molécules de la base d'apprentissage et celui de test sont 17.50, 18.53, 17.45 et 20,25 kJ/mol, respectivement. L'analyse de ces résultats montre l'efficacité de notre modèle à la prédiction des $\Delta_f H_{\text{solide}}$ aussi bien pour les composés utilisés durant son développement que pour les composés de test (183 composés qui sont nouveaux par rapport au modèle proposé). Les erreurs moyennes absolues pour les composés de test (18.53 KJ/mol) sont légèrement supérieures par rapport à celles des composés d'apprentissage (17.50 KJ/mol). Ceci confirme le pouvoir

prédictif de notre nouveau modèle. Cette constatation est réaffirmée en examinant les écarts types des deux ensembles.

Comme le montre le Tableau 22, les coefficients de corrélation pour l'ensemble des molécules de la base d'apprentissage et ceux de l'ensemble de test sont 0,99736 et 0,99634, respectivement, démontrant ainsi la fiabilité du modèle proposé pour prédire l'enthalpie standard de formation à l'état solide.

La Figure 12 montre la qualité du régression entre les $\Delta_f H_{solid}$ issues du modèle et ceux d'expérimentation pour les 1222 molécules.

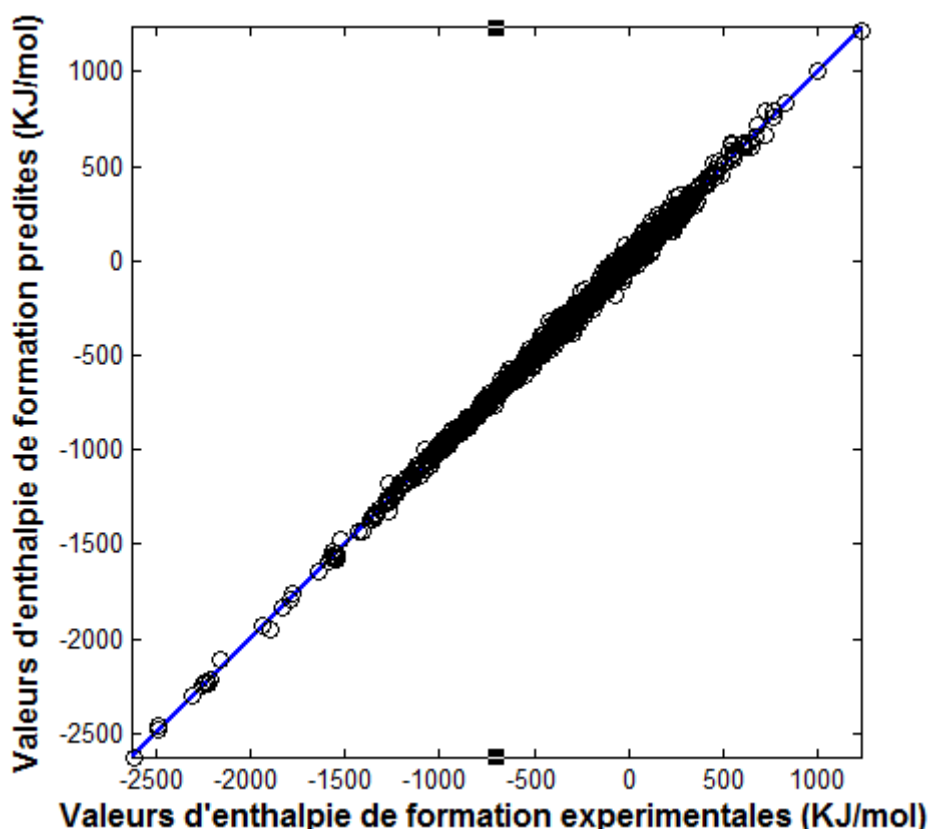


Figure 12 : Relation entre les valeurs expérimentales et prédites de $\Delta_f H_{solid}$ pour les 1222 molécules à l'état solide.

Sur cette figure, nous constatons une régression entre les valeurs expérimentales et les valeurs prédites quasi parfaite, ce qui revient à dire que la prédiction est fortement liée à la valeur expérimentale. En effet nous avons obtenu un coefficient de corrélation linéaire $R = 0.99722$ pour la base de données totale (1222 molécules) qui confirme la robustesse de notre méthode.

La visualisation des valeurs prédites par le modèle proposé par rapport aux valeurs expérimentales sont présentés sur la Figure 13. Cette figure donne un

aperçu global comparatif entre les valeurs prédites et expérimentales des enthalpies de formation pour l'ensemble de molécules et ceci en fonction des valeurs expérimentales.

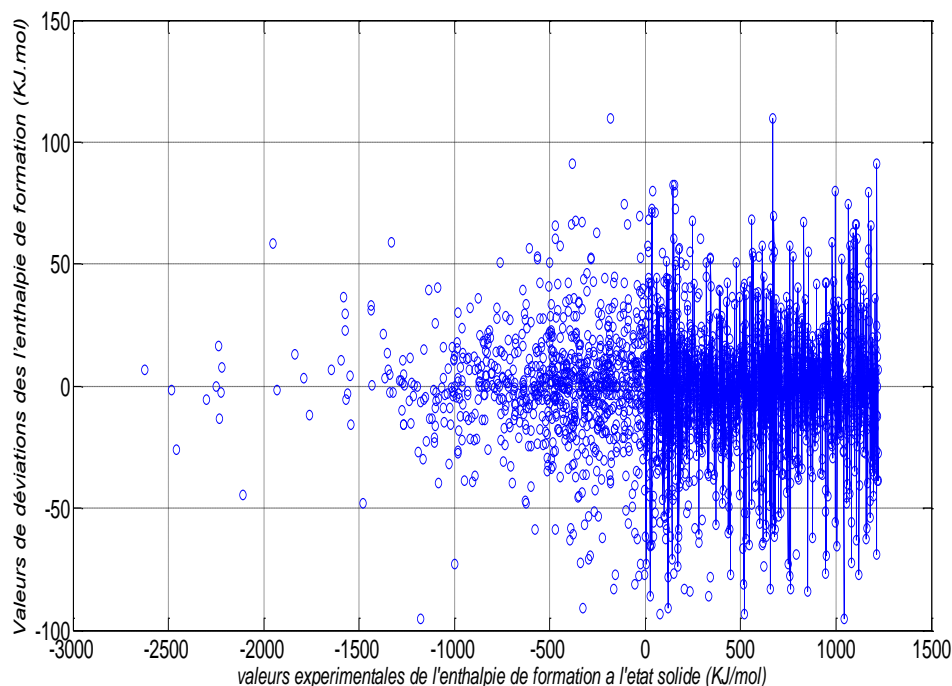
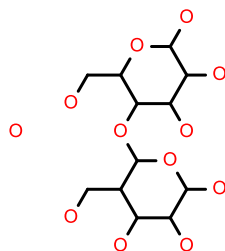


Figure 13 : Évaluation globale des résultats de prévision de l'enthalpie standard de formation en phase solide de 1222 composés étudiés.

Nous pouvons constater que les déviations maximales pour l'ensemble molécules de la base d'apprentissage et celle de l'ensemble de test sont -93,59 kJ/mol (1H-1,2,4-triazole-3-amine) et 109,84 kJ/mol (2,3,7,8,12,13,17 , 18-octaethyl-21H, 23H-porphine) respectivement. Également, nous constatons sur cette figure que les erreurs de prédiction sont centrées autour de l'axe des zéros et homogènes sur l'intervalle [-500, 1250] des valeurs expérimentales et leurs valeurs diminuent d'une façon notable dans l'intervalle [-1500, 2575].

II.5.2 Exemples d'applications illustratifs

Exemple1: Calcul de l'enthalpie de formation de la molécule de α -lactose monohydrate, $C_{12}H_{24}O_{12}$, (CAS: 10639-26-6)

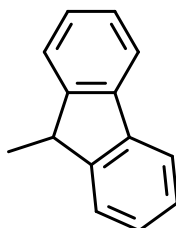


La valeur expérimentale de l'enthalpie de formation est : $-2484,1 \text{ KJ/mol}$. La décomposition en groupes est donnée dans le tableau suivant :

Groupes du premier ordre	N_i	$A_i(\text{KJ/mol})$
CH ₂	2	-27.80×2
OH	8	-220.79×8
CH (cyclic)	10	30.23×10
O (cyclic)	2	-163.72×2
-O-	1	-144.12×1
Groupes du second ordre	N_i	$A_i(\text{KJ/mol})$
CHcyc CH ₂	2	-62.34×2
CHcyc OH	6	-31.32×6
CHcyc- O-	2	-6.06×2
Groupes du troisième ordre	N_i	$A_i(\text{KJ/mol})$
-	-	-
Nouveaux groupes	N_i	$A_i(\text{KJ/mol})$
O (H) ₂	1	-265.18×1
6 Member ring	2	47.71×2

$\Delta_f H_{\text{solide}}^\circ$ est prédite en utilisant l'équation 65, $\Delta_f H_{\text{solide}}^\circ = -2485.59 \text{ KJ/mol}$; alors EAM= 1.49 KJ/mol.

Exemple 2: Calcul de l'enthalpie de formation de la molécule de 9H-fluorene, 9-methyl-, C₁₄H₁₂, (CAS no. 2523-37-7).

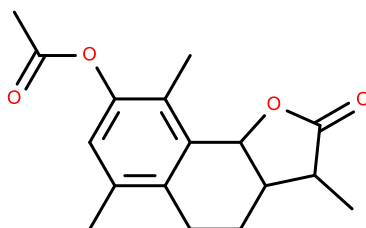


La valeur expérimentale de l'enthalpie de formation est : 65.3 KJ/mol . La décomposition en groupes est donnée dans le tableau suivant :

Groupes de premier ordre	N _i	A _i (KJ/mol)
CH ₃	1	-63.06 × 1
aCH	8	5.19 × 8
aC fused with non-aromatic ring	4	12 × 4
CH (cyclic)	1	30.23 × 1
Groupes de second ordre	N _i	A _i (KJ/mol)
CHcyc CH ₃	1	-46.66 × 1
Groupes de troisième ordre	N _i	A _i (KJ/mol)
aC aC (different rings)	1	0.44 × 1
aC CHncyc (fused rings) (n in 0.1)	2	0.68 × 2
AROM.FUSED [2]	2	-1.99 × 2
Les nouveaux groupes	N _i	A _i (KJ/mol)
5 Member ring	1	68.41 × 1

$\Delta_f H_{\text{solide}}^\circ$ est prédite en utilisant l'équation 65, $\Delta_f H_{\text{solide}}^\circ = 76.28$ KJ/mol; alors EAM= 10.98 KJ/mol.

Exemple 3: Calcul de l'enthalpie de formation de la molécule de (-) α -(-) α -motroposantonin acetate, C₁₇H₂₀O₄ (CAS no. 14794-71-9).



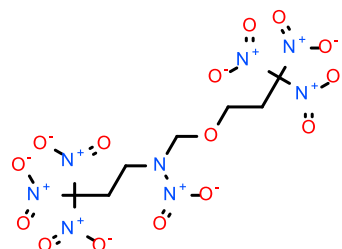
La valeur expérimentale de l'enthalpie de formation est : -870.6 KJ.mol⁻¹. La décomposition en groupes est donnée dans le tableau suivant :

Groupes de premier ordre	N _i	A _i (KJ.mol ⁻¹)
CH ₃	2	-63.06 × 2
aCH	2	5.19 × 1
aC fused with non-aromatic ring	2	12 × 2
aC CH ₃	1	-30.78 × 2
aC OOC	1	-322.62 × 1
CH ₂ (cyclic)	2	-34.20 × 2
CH (cyclic)	3	30.23 × 3
O (cyclic)	1	-163.73 × 1
CO (cyclic)	1	-194.24 × 1
Groupes de second ordre	N _i	A _i (KJ.mol ⁻¹)

CHcyc CH ₃	1	-46.66 × 1
Groupes de troisième ordre	N_i	A_i (KJ.mol⁻¹)
aC CH _n cyc (fused rings) (n in 0.1)	2	0.68 × 2
CH multiring	2	-61.51 × 2
Les nouveaux groupes	N_i	A_i (KJ.mol⁻¹)
5 Member ring	1	68.41 × 1
6 Member ring	1	47.71 × 1

$\Delta_f H_{\text{solide}}^\circ$ est prédite en utilisant l'équation 65, $\Delta_f H_{\text{solide}}^\circ = -868.98$ KJ/mol; alors EAM= 1.62 KJ/mol.

Exemple 4: Calcul de l'enthalpie de formation de la molécule de 1,1,1,4,9,9,9-heptanitro-4-aza-6-oxanonane. C₇H₁₀N₈O₁₅.



La valeur expérimentale de l'enthalpie de formation est : -303,7 KJ.mol⁻¹. La décomposition en groupes est donnée dans le tableau suivant :

Groupes de premier ordre	N_i	A_i (KJ.mol⁻¹)
CH ₂	3	-27.80
CH ₂ O	1	-184.49
CH ₂ N	1	34.56 × 1
CNO ₂	2	-27.27 ×
NO ₂ except as above	5	-20.54 ×
Groupes de second ordre	N_i	A_i (KJ.mol⁻¹)
-	-	-
Groupes de troisième ordre	N_i	A_i (KJ.mol⁻¹)
-	-	-
Les nouveaux groupes	N_i	A_i (KJ.mol⁻¹)
(NO ₂) ₃ -C -	2	48.19 × 2

$\Delta_f H_{\text{solide}}^\circ$ est prédite en utilisant l'équation 65, $\Delta_f H_{\text{solide}}^\circ = -294,24$ KJ/mol; alors EAM= 9,46 KJ/mol.

II.6 Étude comparative

Les performances de la nouvelle méthode sont comparées à celles des meilleures méthodes existantes pour l'estimation de $\Delta_f H_{solide}^\circ$ disponibles dans la littérature, à savoir la méthode de Salamon et Dalmazzone [24] et celle du Domaliski et al [21]. Tous les résultats obtenus, par la méthode proposée, pour l'ensemble de données, y compris l'ensemble des composés de la base d'apprentissage et de l'ensemble de test, sont utilisés dans cette comparaison.

À partir du Tableau 23 nous pouvons constater que le modèle proposé affiche un faible écart type par rapport à ceux des autres méthodes utilisées, et ce résultat est confirmé par la comparaison des valeurs de EAM_{MAX} (écart absolu maximal) affiché par le modèle proposé (109.84 kJ/mol) avec ceux des autres méthodes (393.9 kJ/mol et 395.9 kJ/mol). Tous les indicateurs statistiques (EAM , ET et EAM_{MAX}) du nouveau modèle sont tous nettement inférieurs à ceux des autres méthodes et ceci est valable dans toutes les classes des composés. Ainsi, la méthode proposée est plus précise que les méthodes précédentes pour tous les types de composés présents dans la base de données.

Classes des composés	Base de données			ET (kJ/mol)			EAM (kJ/mol)			DMAX (kJ/mol)		
	Ce travail	Sal ¹	Dom ²	Ce travail	Sal ¹	Dom ²	Ce travail	Sal ¹	Dom ²	Ce travail	Sal ¹	Dom ²
C-H	170	145	57	20.25	38.44	43.93	19.15	20.24	26.15	91	237.60	267
C-H-O	341	256	140	13.66	49.57	29.46	13.85	22.23	21.12	77.53	384.50	212,30
C-H-N	158	134	22	20.61	61.33	54.03	21.29	27.96	34.34	109.84	388.60	272,10
C-H-O-N	553	482	127	18.24	43.47	55.45	18.50	21.30	34.63	95.15	393.90	395.90
Total	1222	1017	344	17.89	47.10	45,93	17.65	22.26	28,29	109.84	393.90	395,9

¹Salmon and Dalmazzone method [24], ²Domalski and Hearing method [21].

Tableau 23 : Comparaison des performances de prédiction entre notre modèle et les autres modèles de la littérature.

Classes des composés	Data-points			0-5 (kJ/mol)			5-10 (kJ/mol)			10-20 (kJ/mol)			20-100 (kJ/mol)			>100 (kJ/mol)		
	Ce travail	Sal ¹	Dom ²	Ce travail	Sal ¹	Dom ²	Ce travail	Sal ¹	Dom ²	Ce travail	Sal ¹	Dom ²	Ce travail	Sal ¹	Dom ²	Ce travail	Sal ¹	Dom ²
C-H	170	145	142	27,06	42,07	41,55	15,29	19,31	13,38	24,12	15,86	12,68	33,53	17,24	26,76	0,00	5,52	5,63
C-H-O	341	256	217	30,21	40,63	32,26	19,65	20,31	19,82	26,98	16,02	13,36	23,17	19,14	31,34	0,00	3,91	3,23
C-H-N	158	134	42	19,62	55,22	35,71	18,35	6,72	14,29	23,42	9,70	7,14	37,97	17,91	35,71	0,63	10,45	7,14
C-H-O-N	553	482	253	25,50	38,80	28,85	16,46	11,20	13,44	24,23	23,86	14,62	33,82	21,37	34,39	0,00	4,77	8,70
Total	1222	1017	654	26,27	41,89	33,18	17,43	14,06	15,60	24,88	18,88	13,30	31,34	19,76	31,80	0,08	5,41	6,12

¹Salmon and Dalmazzone method [24], ²Domalski and Hearing method [21].

Tableau 24 : Comparaison de l'écart absolu moyen entre ce modèle et les autres modèles.

Afin d'avoir plus d'informations sur la fiabilité du nouveau modèle par rapport aux autres modèles, tous les composés sont classés en fonction de cinq intervalles de déviation absolue des erreurs d'estimation issues du modèle proposé et des autres modèles. Les cinq intervalles proposés sont; 0-5 ; de 5-10 ; de 10-20 de 20-100 et > 100 KJ/mol. Les résultats sont présentés sur la Figure 14.

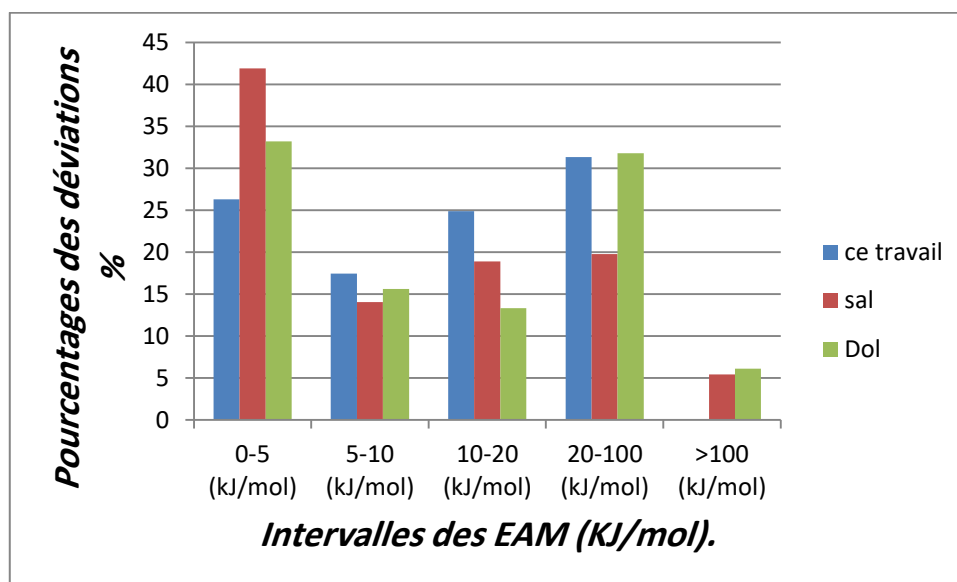


Figure 14: Classification des valeurs des EAM fournies par la nouvelle méthode et les deux autres méthodes concurrentes (1222 molécules).

Comme il peut être constaté dans l'intervalle $<100 \text{ kJ/mol}$, il n'y a qu'un seul composé qui correspond au 2,3,7,8,12,13,17,18-octaethyl-21H, 23H-porphine (voir figure ci-dessous) pour lequel l'écart est plus grand que 100 kJ/mol , par rapport aux 51 composés (5.41%) pour la méthode de Salamon et al [24] et 39 composés (6.12%) pour la méthode Domaliski et al [21]. Ces résultats confirment que la méthode proposée est plus efficace que les autres méthodes d'estimation de $\Delta_f H_{solide}^\circ$.

En revanche, dans le deuxième et troisième intervalle ($5 - 10$ et $10 - 20 \text{ kJ/mol}$) le modèle développé fournit de bien meilleurs résultats que les deux autres méthodes. En effet, il y a 17,34% et 24,88% des composés pour lesquels les écarts sont présentés dans le deuxième intervalle ($5-10 \text{ kJ/mol}$) et le troisième intervalle ($10-20 \text{ kJ/mol}$), respectivement, contre 14,06% et 18,88% par rapport à la méthode de Salmon et al [24] et 15.6% et 13.3% pour la méthode de Domaliski et al [21].

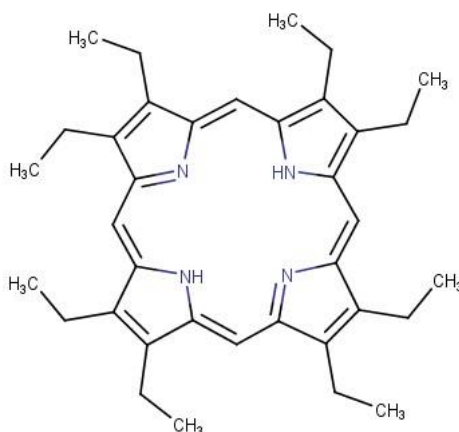


Figure 15: Exemples de molécules à écart massif (2,3,7,8,12,13,17,18-octaethyl-21H, 23H-porphine)

Comme il peut être constaté, il y a seulement 26,27% de composés qui ont leurs $\Delta_f H_{solide}^\circ$ estimées avec des écarts inférieurs à 5 kJ/mol , par rapport à 41,89% et 33,18% pour la méthode de Salamon et Dalmazzone [24] et celle de Domaliski et al [21]. Cette constatation induit à l'erreur; en effet, les autres méthodes introduisent un nombre important de groupes (inconvenient des techniques d'ordre deux); Salamon et Dalmazzone ont introduit 480 groupes (et corrections) pour le développement de leur modèle, dont 39,37% des groupes (soit 189 groupes) sont générés par un seul composé, ce qui fait compenser numériquement les erreurs de prédictions en détriment de la diminution de la précision de la méthode et ainsi « fausser » et influencer aussi sur l'évaluation de la méthode par exclusion des déviations de ces composées (189 composés) de l'ensemble des déviations de la base de données car l'erreur absolue moyenne de ces composés est égale à zéro. Ceci explique pourquoi des pourcentages importants des déviations appartiennent à la gamme 0 – 5 KJ/mol dans le cas de la méthode de Salamon et Dalmazzone [24] ainsi que celle de Domaliski et al [21].

Dans l'intervalle de 20 à 100 $kJ/mole$, le pourcentage des composés est inférieur à celui de la Domaliski et al [21], mais supérieur à celui du Salamon et al [24]. Pour ce dernier pourcentage (31.34%) qui représente une fraction de 382 composés, les écarts ont une EAM de 38,7 KJ/mol . Après avoir examiné les structures moléculaires de ces composés, il a été constaté qu'ils appartiennent aux quatre classes⁸ et il n'y a aucune relation entre leurs structures chimiques. Plusieurs raisons peuvent expliquer ces écarts importants. Les explications possibles comprennent; le phénomène de polymorphisme au niveau d'un composé organique solide, si non la fiabilité de données expérimentales peut être remise en cause. En effet, au cours de la construction et l'analyse de la base de

⁸ CH, CHO, CHN, CHNO

données des $\Delta_f H_{solide}^\circ$ nous avons constaté, d'une part, que pour certains composés on peut trouver plusieurs valeurs expérimentales différentes pour la même molécule, et d'autre part que parfois il n'y a pas suffisamment de valeurs expérimentales de $\Delta_f H_{solide}^\circ$ pour certains composés qui ont été publiés une seule fois.

Il est à noter que cette comparaison entre notre méthode et celles des autres méthodes est déséquilibrée en faveur des méthodes concurrentes car plusieurs points peuvent être considérés ici :

- le nombre de composés dans notre ensemble de données est plus grand que celui des autres méthodes.
- les autres méthodes prennent tous les composés pour l'établissement de leur modèle dans l'étape de régression des paramètres, alors que dans notre travail, l'ensemble de données a été divisé en deux ensembles, un ensemble d'apprentissage et un autre de test.
- le nombre de groupes ou de paramètres d'entrée de la méthode proposée est nettement plus faible que celui des autres méthodes : dans notre cas le nombre est de 284 groupes fonctionnels différents pour plus de 1222 composés, contre 319 groupes fonctionnels pour uniquement 344 composés dans le cas de la méthode de Domalski et al. et 480 groupes fonctionnels pour uniquement 1017 composés dans le cas de la méthode de Salamon et Dalmazzone.

II.7 Conclusion

Une méthode de contribution de groupe pour la prédiction de l'enthalpie standard de formation à l'état solide de composés organiques a été développée. La prédiction est basée uniquement sur la structure moléculaire (code SMILES) du composé. L'ensemble de données utilisé dans ce travail est composé de 1222 molécules organiques contenant les éléments carbone, hydrogène, oxygène et d'azote. Le modèle a été bâti en utilisant un ensemble de données de 1039 valeurs expérimentales de différents composés autant que base d'apprentissage pour la régression et la définition des paramètres de ce modèle ; avec des indicateurs statistiques acceptables ; EAM et ET de 17,5 kJ / mol et 17,45 kJ/mol respectivement. Ensuite, la méthode proposée a été testée sur 183 nouvelles molécules autres que celles déjà utilisées pour le développement ou la construction du modèle (ensemble de test) afin de valider et vérifier la méthode proposée et montrer son pouvoir prédictif. Les résultats de ce test affichent un EAM de

18,53 kJ/mol et ET de 20,25 kJ/mol, sont très acceptables répondant aux objectifs attendus.

La méthode proposée, est plus précise que les méthodes compétitives existantes, à savoir celle de Salamon et Dalmazzone et de Domalski et al. Contrairement à la plus part des méthodes de prédiction de l'enthalpie à l'état solide qui sont basées sur les contributions du deuxième ordre, la méthode proposée est basée sur des groupes d'ordre trois.

Chapitre III: Nouvelle méthode de prédiction des enthalpies de formation à l'état liquide

III.1 Introduction

Dans la littérature, plusieurs méthodes performantes de prédiction des enthalpies de formation des composés organiques en phase gazeuse ont été proposées contrairement à ce qui concerne les états condensés (liquide et solide). Dans l'industrie chimique, les procédés et les installations font intervenir de plus en plus les fluides à des degrés divers : produit, ingrédients, fluides caloporteurs. De ce fait, il a été proposé dans ce chapitre de développer une nouvelle méthode permettant de prédire des enthalpies de formation en phase liquide de composés organiques purs. Cette méthode est basée uniquement sur la technique de contribution de groupes d'ordre trois sans faire recours à d'autres propriétés physico-chimiques en utilisant un très grand ensemble de données de molécules, contenant les éléments C, H, O, N, S et les halogènes, y compris plusieurs types de fonctions chimiques.

III.2 Développement de la méthode de prédiction des enthalpies de formation à l'état liquide

La construction d'un modèle fiable de prédiction de l'enthalpie de formation à l'état liquide, passe par les sept grandes étapes décrites dans le chapitre précédent (cf. Section II.3 et Figure 9). Les étapes à suivre sont les même que pour la phase solide.

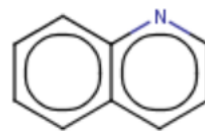
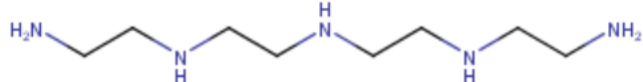
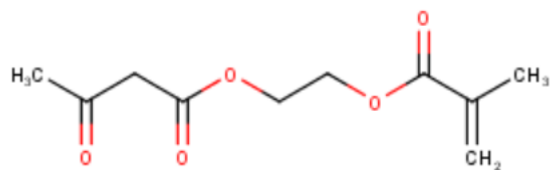
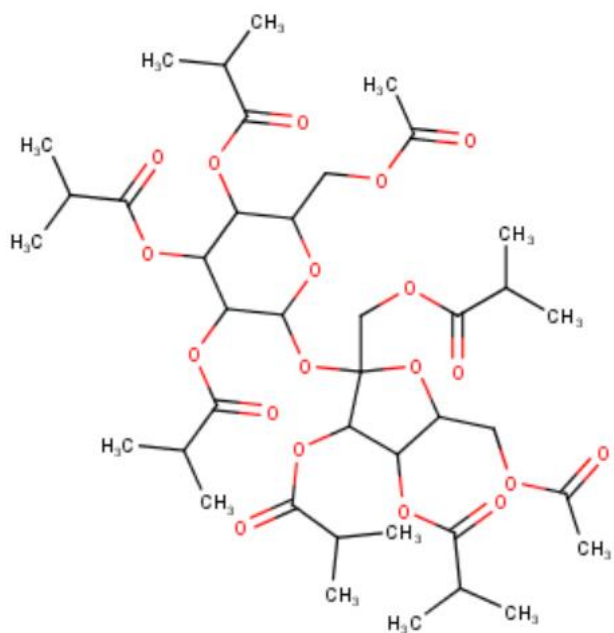
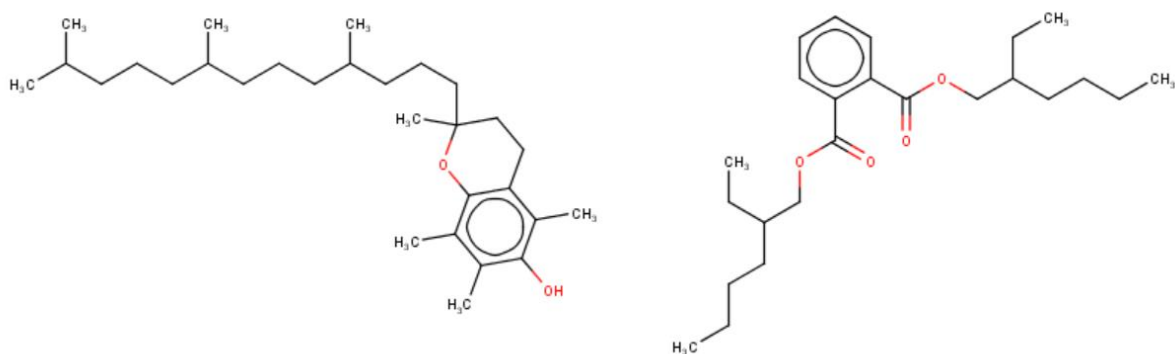
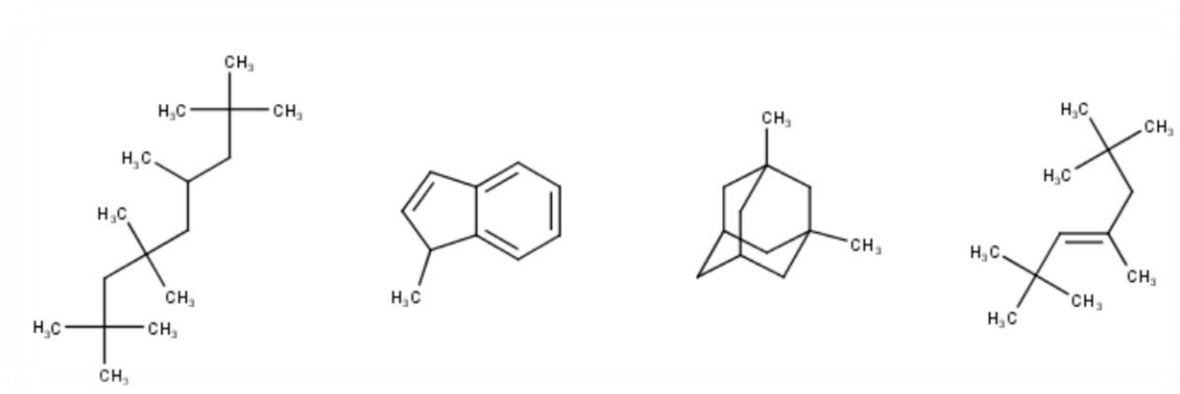
En effet, la première étape est la construction de la base de données expérimentales des $\Delta H_{f,l}$, suivie de l'étape de traitement et validation de données expérimentales.

III.2.1 Banque d'enthalpies et types de composés étudiés

Pour développer et tester des modèles prédictifs fiables, la taille et la précision de l'ensemble de données sont d'une importance cruciale. Dans ce travail, nous avons utilisé une base de données expérimentale de plus de 900 molécules contenant différentes substances chimiques. La majorité des données sont prises à partir de la base de données du projet DIPPR® 801 de l'Institut Américain des Ingénieurs Chimistes (AIChE). Le DIPPR® 801 est l'une des bases de données les plus utilisées à cet effet. Les données expérimentales pertinentes pour la génération des paramètres des contributions de groupes, ont été évaluées en fonction des incertitudes des valeurs expérimentales. Pour toutes les données définies dans cette base, les valeurs d'incertitudes sont inférieures à 5%.

Tout d'abord, l'ensemble des données est divisé en deux parties, base d'apprentissage et un ensemble de test. La base d'apprentissage contient 720 composés (80%) utilisés pour le développement ou la construction du modèle et d'autre part 20% de l'ensemble de données (180 molécules) sont utilisées comme un ensemble de test pour montrer la crédibilité du modèle et son pouvoir de prédiction. Cette partition est effectuée en utilisant un choix semi-aléatoire. Comme discuter précédemment dans la Section II.4, une division aléatoire peut exclure certaines contributions de l'étape d'apprentissage car, des contributions de groupes ne peuvent être calculées qu'à partir d'un ou deux (ou même trois) points de données seulement, qui affecte directement les performances du modèle

La base de données, comportant les structures géométriques de composées, leurs valeurs expérimentales, leurs valeurs prédites et les erreurs, est présentée dans l'Annexe B.



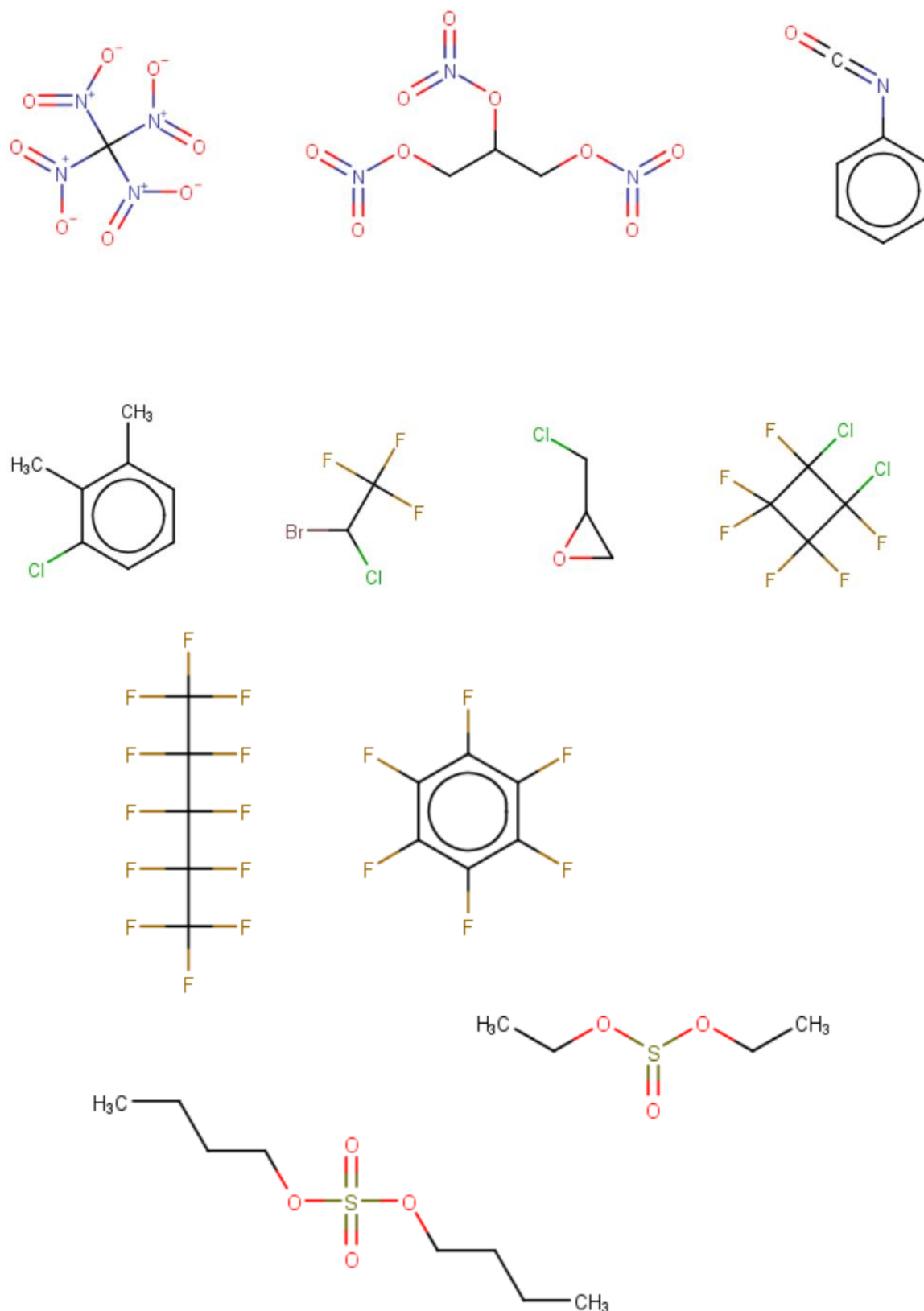


Figure 16 : Exemple de quelques composés en phase liquide utilisés pour le développement de la méthode.

III.3 Mise au point du modèle

Après avoir traité et validé la base des données expérimentales, l'étape suivante consiste à fragmenter en groupes fonctionnels les 900 structures moléculaires de la base de données en utilisant un schéma de découpage d'ordre trois.

L'étape suivante est la définition de la fonction mathématique du modèle. En effet, comme dans la phase solide, après plusieurs formes mathématiques testées il a été constaté que la meilleure forme était une forme linéaire multi-variable simple pour prédire les valeurs d'enthalpie de formation à l'état liquide. Pour estimer les paramètres du modèle (contributions A_i), une régression simultanée est considérée en utilisant toutes les contributions des groupes du premier ordre, du second ordre et du troisième ordre. La recherche des valeurs de contributions A_i est basée sur la minimisation de la somme des carrés des écarts entre les valeurs estimées et les valeurs expérimentales en utilisant l'algorithme de Levenberg-Marquardt. Le modèle obtenu est le suivant:

$$\Delta_f H^\circ_{Liq}(KJ/mol) = \sum_{i=1}^N n_i A_i \quad (67)$$

A_i : Contribution du groupe de type i qui apparaît n_i fois.

Les contributions des trois types de groupes du modèle développé sont présentées dans le tableau suivant. Le nombre total de ces paramètres est 229 contributions. Pour le premier niveau, 134 groupes sont proposés et pour le second et le troisième ordre, 77 et 18 groupes sont proposés, respectivement. Dans cette méthode, aucune correction n'est utilisée pour maintenir la méthode aussi simple, basée sur les trois niveaux de fragmentations seulement. Les groupes correspondant aux trois niveaux sont présentés dans les tableaux 25, 26 et 27.

N°	Groupe	Occurrence	Contribution
1	CH ₃	704	-48,29
2	CH ₂	556	-25,26
3	CH	195	-5,20
4	C	54	11,09
5	CH ₂ =CH	55	45,72
6	CH=CH	40	55,04
7	CH ₂ =C	25	52,91
8	CH=C	9	63,59
9	C=C	2	85,05
10	CH ₂ =C=CH	2	186,97

11	CH ₂ =C=C	1	197,57
12	CH≡C	6	214,33
13	C≡C	2	217,70
14	aCH	150	4,24
15	aC fused with aromatic ring	9	-119,99
16	aC fused with non-aromatic ring	11	-7,33
17	aC except as above	3	31,42
18	aN in aromatic ring	7	67,37
19	aC-CH ₃	41	-10,51
20	aC-CH ₂	62	14,06
21	aC-CH	14	28,04
22	aC-C	6	66,80
23	aC-CH=CH ₂	6	81,94
24	aC-CH=CH	1	55,06
25	aC-C=CH ₂	1	94,43
26	aC-C≡CH	1	261,79
27	OH	91	-199,59
28	aC-OH	7	-171,16
29	COOH	23	-433,29
30	CH ₃ CO	21	-208,39
31	CH ₂ CO	16	-176,43
32	CHCO	3	-134,29
33	CCO	1	-70,57
34	aC-CO	3	-120,11
35	CHO	29	-141,89
36	aC-CHO	5	-103,71
37	CH ₃ COO	31	-403,86
38	CH ₂ COO	33	-379,65
39	CHCOO	9	-362,55
40	CCOO	1	-342,01
41	HCOO	15	-345,00
42	aC-COO	13	-317,96
43	aC-OOC	1	-325,92
44	COO except as above	12	-325,32
45	CH ₃ O	20	-171,78
46	CH ₂ O	49	-157,15
47	CH-O	4	-154,88
48	C-O	1	-39,06
49	aC-O	4	-96,45
50	CH ₂ NH ₂	21	-30,84
51	CHNH ₂	4	-13,40
52	CNH ₂	2	-0,22
53	CH ₂ NH	11	13,57
54	CHNH	1	25,48
55	CH ₃ N	4	44,51
56	CH ₂ N	6	63,56

57	aC-NH ₂	3	10,73
58	aC-NH	1	228,90
59	aC-N	1	106,28
60	NH ₂ except as above	3	-109,11
61	CH ₂ CN	8	61,87
62	CHCN	1	47,35
63	aC-CN	1	141,79
64	CN except as above	5	88,89
65	CH ₂ NCO	1	-112,99
66	aC-NCO	1	-82,31
67	CH ₂ NO ₂	3	-94,46
68	CHNO ₂	1	-80,36
69	CNO ₂	1	232,44
70	aC-NO ₂	1	-8,71
71	NO ₂ except as above	2	-64,71
72	ONO ₂	1	-105,10
73	CON(CH ₃) ₂	1	-229,71
74	CH ₂ Cl	23	-86,29
75	CHCl	8	-65,60
76	CCl	1	-59,56
77	CHCl ₂	6	-101,54
78	CCl ₃	3	-94,30
79	CH ₂ F	1	-83,72
80	CHF ₂	1	-83,44
81	CF ₂	8	-423,85
82	CF ₃	10	-657,71
83	CCl ₂ F	2	-335,58
84	HCClF	1	-283,46
85	CClF ₂	3	-452,54
86	aC-Cl	5	-12,25
87	aC-F	2	-165,36
88	aC-I	1	95,79
89	-I except as above	5	33,12
90	-Br except as above	11	-12,37
91	-F except as above	1	-217,71
92	-Cl except as above	15	-52,61
93	CNOH	1	118,63
94	OCH ₂ CH ₂ OH	24	-376,78
95	OCHCH ₂ OH	4	-369,13
96	OCH ₂ CHOH	13	-363,64
97	-O-OH	7	-152,78
98	CH ₂ SH	14	-25,35
99	CHSH	3	-6,82
100	CSH	3	10,92
101	aC-SH	1	42,49
102	-SH except as above	2	-9,58

103	CH ₃ S	11	-23,49
104	CH ₂ S	13	-6,68
105	CHS	1	22,48
106	CS	1	21,42
107	aC-S-	1	70,38
108	SO	1	-107,43
109	SO ₂	1	-810,59
110	SO ₃ (sulfite)	1	-452,91
111	SO ₃ (Sulfonate)	1	-537,35
112	SO ₄ (Sulfate)	3	-654,08
113	CO ₃ (Carbonate)	2	-523,17
114	C ₂ H ₃ O	6	-55,14
115	C ₂ H ₂ O	1	394,05
116	CH ₂ (cyclic)	95	-22,29
117	CH (cyclic)	63	-0,68
118	C (cyclic)	8	483,66
119	CH=CH (cyclic)	17	61,33
120	CH=C (cyclic)	9	2,43
121	C=C (cyclic)	1	26,56
122	CH ₂ =C (cyclic)	1	90,39
123	NH (cyclic)	5	36,62
124	N (cyclic)	10	8,13
125	O (cyclic)	24	-144,06
126	CO (cyclic)	7	-157,04
127	S (cyclic)	10	22,99
128	-O-	4	-132,70
129	-S-	1	-3,02
130	>CO	3	-182,63
131	C _{cyclic} =CH-	1	211,76
132	CH=C=CH	1	200,57
133	CF _{2cyclic}	2	-428,30
134	CF _{cyclic}	2	-159,09

Tableau 25 : Valeurs de contributions de groupes de premier ordre d'enthalpie de formation à l'état liquide.

N°	Groupe	Occurrence	Contribution
1	(CH ₃) ₂ CH	102	-3,07
2	(CH ₃) ₃ C	44	-6,58
3	CH(CH ₃)CH(CH ₃)	9	2,68
4	CH(CH ₃)C(CH ₃) ₂	5	10,10
5	C(CH ₃) ₂ C(CH ₃) ₂	2	21,51
6	CH _n =CH _m -CH _p =CH _k (k,m,n,p in 0..2)	7	-6,00
7	CH ₃ -CH _m =CH _n (m,n in 0..2)	56	3,15
8	CH ₂ -CH _m =CH _n (m,n in 0..2)	80	5,93
9	CH _p -CH _m =CH _n (m,n in 0..2; p in 0..1)	15	7,08
10	CHCHO or CCHO	8	-1,40

11	CH ₃ COCH ₂	14	9,32
12	CH ₃ COCH or CH ₃ COC	3	14,80
13	CHCOOH or CCOOH	9	5,59
14	CH ₃ COOCH or CH ₃ COOC	8	-8,51
15	CO-O-CO	3	-17,99
16	CHOH	32	-12,14
17	COH	3	-22,99
18	NCCHOH or NCCOH	1	48,15
19	OH-CH _n -COO (<i>n</i> in 0..2)	3	18,74
20	CH _m (OH)CH _n (OH) (<i>m,n</i> in 0..2)	5	-11,66
21	CH _m (NH ₂)CH _n (NH ₂) (<i>m,n</i> in 0..2)	2	-3,30
22	CH _m (NH)CH _n (NH ₂) (<i>m,n</i> in 1..2)	4	0,66
23	HS-CH _n -CH _m -SH (<i>n, m</i> in 1..2)	1	-3,71
24	COO-CH _n -CH _m -OOC (<i>n, m</i> in 1..2)	3	-22,99
25	OOC-CH _m -CH _m -COO (<i>n, m</i> in 1..2)	2	2,14
26	COCH _n COO (<i>n</i> in 1..2)	4	2,41
27	CH _m -O-CH _n =CH _p (<i>m,n,p</i> in 0..3)	2	-8,03
28	CH _m =CH _n -Cl (<i>m,n</i> in 0..2)	4	16,80
29	CH _m =CH _n -CN (<i>m,n</i> in 0..2)	3	3,64
30	CH _n =CH _m -COO-CH _p (<i>m,n,p</i> in 0..3)	12	-25,48
31	CH _m =CH _n -CHO (<i>m,n</i> in 0..2)	2	-7,11
32	aC-CH _n -X (<i>n</i> in 1..2) X: Halogen	2	4,54
33	aC-CH _n -O- (<i>n</i> in 1..2)	4	6,62
34	aC-CH _n -OH (<i>n</i> in 1..2)	4	-2,44
35	aC-CH _n -SH (<i>n</i> in 1..2)	1	10,51
36	aC-CH _n -OOC-H (<i>n</i> in 1..2)	2	0,88
37	aC-CH _n -OOC (<i>n</i> in 1..2)	1	-11,52
38	aC-CH _n -COO (<i>n</i> in 1..2)	1	-34,41
39	aC-CH(CH ₃) ₂	5	6,29
40	aC-C(CH ₃) ₃	3	-12,75
41	aC-CF ₃	1	-71,87
42	(CH _n =C) _(cyc) -CHO (<i>n</i> in 0..2)	1	20,19
43	(CH _n =C) _(cyc) -CH ₃ (<i>n</i> in 0..2)	6	4,18
44	(CH _n =C) _(cyc) -CH ₂ (<i>n</i> in 0..2)	3	30,02
45	CH _(cyc) -CH ₃	28	-11,44
46	CH _(cyc) -CH ₂	21	-12,90
47	CH _(cyc) -CH	3	-13,71
48	CH _(cyc) -C	1	-9,50
49	CH _(cyc) -CH=CH _n (<i>n</i> in 1..2)	1	-12,69
50	CH _(cyc) -C=CH _n (<i>n</i> in 1..2)	1	46,97
51	CH _(cyc) -OH	5	-55,95
52	CH _(cyc) -NH ₂	1	103,87
53	CH _(cyc) -SH	1	-19,27
54	CH _(cyc) -CN	1	97,38
55	CH _(cyc) -COOH	1	81,56
56	CH _(cyc) -S-	1	-7,34

57	CH _{cyc} -CHO	1	-21,96
58	CH _{cyc} -O-	4	-18,38
59	CH _{cyc} -OOCH	1	-38,86
60	CH _{cyc} -OOC	3	-37,61
61	C _{cyc} -CH ₃	6	-228,24
62	C _{cyc} -CH ₂	4	-248,52
63	>N _{cyc} -CH ₃	2	-9,01
64	>N _{cyc} -CH ₂	7	76,18
65	AROMRINGS ¹ s ²	22	-17,55
66	AROMRINGS ¹ s ³	11	-24,32
67	AROMRINGS ¹ s ⁴	9	-23,21
68	AROMRINGS ¹ s ² s ³	5	-38,75
69	AROMRINGS ¹ s ² s ⁴	9	-43,39
70	AROMRINGS ¹ s ³ s ⁵	4	-44,98
71	AROMRINGS ¹ s ² s ³ s ⁴	2	-108,73
72	AROMRINGS ¹ s ² s ³ s ⁵	2	-65,22
73	AROMRINGS ¹ s ² s ⁴ s ⁵	1	-111,73
74	PYRIDINES ²	1	-17,13
75	PYRIDINES ³	1	-11,93
76	PYRIDINES ⁴	1	-14,63
77	AROMRINGS ¹ s ² s ³ s ⁴ s ⁵	1	-91,13

Tableau 26 : Valeurs de contributions de groupes de deuxième ordre d'enthalpie de formation à l'état liquide.

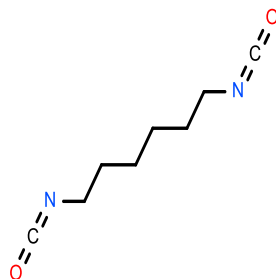
N°	Groupe	Occurrence	Contribution
1	OH-(CH _n) _m -OH (m>2, n in 0..2)	3	-4,79
2	NH ₂ -(CH _n) _m -NH ₂ (m>2; n in 0..2))	2	-1,16
3	NC-(CH _n) _m -CN (m>2)	2	9,20
4	aC-(CH _n =CH _m) _{cyc} (fused rings) (n,m in 0..1)	5	-16,89
5	aC-CH _{ncyc} (different rings) (n in 0..1)	1	-17,08
6	aC-CH _{ncyc} (fused rings) (n in 0..1)	7	-40,98
7	CH _{cyc} -CH _{cyc} (different rings)	1	-31,96
8	CH _{multiring}	2	-38,42
9	C _{multiring}	1	-460,88
10	aC-CH _m -aC (different rings) (m in 0..2)	1	-4,89
11	aC-(CH _m =CH _n)-aC (different rings) (m,n in 0..2)	1	55,10
12	aC-S _{cyc} (fused rings)	5	-2,36
13	aC-CH _n -O-CH _m -aC (different rings) (n,m in 0..2)	1	-7,89
14	aC-O _{cyc} (fused rings)	2	54,49
15	AROM.FUSED[2]	16	148,60
16	AROM.FUSED[2]s ¹	7	130,93
17	AROM.FUSED[2]s ²	3	132,39
18	AROM.FUSED[4a]s15	2	132,52

Tableau 27 : Valeurs de contributions de groupes de troisième ordre d'enthalpie de formation à l'état liquide.

III.3.1 Exemples d'applications illustratifs

Dans ce qui suit des exemples illustratifs pour l'application de la méthode proposée sont donnés.

Exemple 1 : Prédiction de l'enthalpie de formation de 1,6-hexaméthylène diisocyanate (CAS N°: 822-06-0).

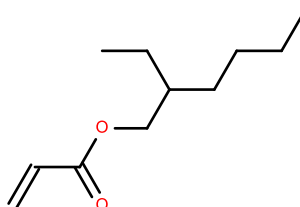


La valeur expérimentale de l'enthalpie de formation est : -327 KJ/mol . La décomposition en groupes est donnée dans le tableau suivant :

Groupes du premier ordre	N_i	$A_i(\text{KJ/mol})$
CH2	04	$-25,26 \times 4$
CH2NCO	02	$-112,99 \times 2$
Second ordre de fragmentation	N_i	$A_i(\text{KJ/mol})$
-	-	-
troisième ordre de fragmentation	N_i	$A_i(\text{KJ/mol})$
-	-	-

$\Delta_f H_{liq}^\circ$ est prédite en utilisant l'équation 67, $\Delta_f H_{liq}^\circ = -327 \text{ KJ/mol}$; alors $EAM = 0 \text{ KJ/mol}$.

Exemple 02 : Prédiction de l'enthalpie de formation de 2-ethylhexyl acrylate (CAS N°: 103-11-7).

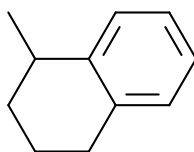


La valeur expérimentale de l'enthalpie de formation est : -526 KJ.mol^{-1} . La décomposition en groupes est donnée dans le tableau suivant :

premier ordre de fragmentation	N_i	A_i(KJ/mol)
CH3	02	-48,29×2
CH2	05	-25,26×5
CH	01	-5,20×1
CH2=CH	01	45,72×1
COO except as above	01	-325,32×1
Second ordre de fragmentation	N_i	A_i(KJ/mol)
CH _n =CH _m -COO-CH _p (m,n,p in 0..3)	01	-25,48×1
troisième ordre de fragmentation	N_i	A_i(KJ/mol)
-	-	-

$\Delta_f H_{liq}^\circ$ est prédite en utilisant l'équation 67, $\Delta_f H_{liq}^\circ = 533,14 \text{ KJ/mol}$; alors EAM = $-7,14 \text{ KJ/mol}$.

Exemple 03 : Prédiction de l'enthalpie de formation de *1-methyltetralin* (CAS N°: 1559-81-5)

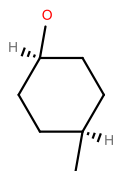


La valeur expérimentale de l'enthalpie de formation est: $-59,1 \text{ KJ.mol}^{-1}$. La décomposition en groupes est donnée dans le tableau suivant :

Ordre de fragmentation	Occurrences	Contribution
premier ordre de fragmentation	-	-
CH3	01	-48,29×1
aCH	04	4,24×4
aC fused with non-aromatic ring	02	-7,33×2
CH2 (cyclic)	03	-22,29×3
CH (cyclic)	01	-0,68×1
Second ordre de fragmentation	Occurrences	Contribution
CHcyc-CH3	01	-11,44×1
troisième ordre de fragmentation	Occurrences	Contribution
aC-CHncyc (fused rings) (n in 0..1)	02	-40,98×2
AROM.FUSED[2]	01	148,60×1

$\Delta_f H_{liq}^\circ$ est prédite en utilisant l'équation 67, $\Delta_f H_{liq}^\circ = -58,33 \text{ KJ/mol}$; alors EAM = $0,77 \text{ KJ/mol}$.

Exemple 04 : Prédiction de l'enthalpie de formation de *cis-4-methylcyclohexanol* (CAS N°:7731-28-4).



La valeur expérimentale de l'enthalpie de formation est : -413 KJ.mol^{-1} . La décomposition en groupes est donnée dans le tableau suivant :

Ordre de fragmentation	Occurrences	Contribution
premier ordre de fragmentation	-	-
CH3	01	$-48,29 \times 1$
OH	01	$-199,59 \times 1$
CH2 (cyclic)	04	$-22,29 \times 4$
CH (cyclic)	02	$-0,68 \times 2$
Second ordre de fragmentation	Occurrences	Contribution
CHcyc-CH3	01	$-11,44 \times 1$
CHcyc-OH	01	$-55,95 \times 1$
troisième ordre de fragmentation	Occurrences	Contribution
-	-	-

$\Delta_f H_{liq}^\circ$ est prédite en utilisant l'équation 67, $\Delta_f H_{liq}^\circ = -405,80 \text{ KJ/mol}$; alors EAM = $7,20 \text{ KJ/mol}$.

III.4 Résultat et discussion

La vérification et validation du modèle proposé est une phase nécessaire durant le développement du modèle. Cette étape a pour but d'évaluer, analyser et interpréter les résultats de prédiction des valeurs d'enthalpies de formation en phase liquide. Également, le pouvoir prédictif du modèle et sa faiblesse fait l'objet de cette partie.

Nous avons appliqué cette méthode dans un premier temps sur l'ensemble de molécules d'apprentissage ayant servi au le développement du modèle, en suite sur l'ensemble de molécules de test; de nouvelles molécules autres que celles déjà utilisées pour le développement ou la construction du modèle. Le second ensemble de molécules permet évaluer correctement les performances de prédiction du modèle développé.

La méthode développée montre des prédictions précises expliquées par les paramètres statistiques tels EAM, EQM, ET et R^2 comme il est présenté sur le tableau suivant. Nous pouvons constater que le coefficient de régression linéaire, est très proche de 1. Les erreurs des prédictions maximales ($DA_{MAX} \text{ kJ/mol}$) restent modérées dans les deux bases de données d'apprentissage et de test ; 19.69 et 23.55 KJ/mol , respectivement .

	Base de données	KJ/mol				
		EAM	ET	EQM	R ²	D _{max}
Ensemble d'apprentissage	720	4,34	4,40	6,18	0,99978	19,69
Ensemble de test	180	4,77	5,08	6,96	0,99898	23,55
Ensemble totale	900	4,43	4,54	6,34	0,99973	23,55

Tableau 28 : indicateurs statistiques d'évaluation des performances du modèle développé pour l'estimation d'enthalpies de formation en phase liquide.

Le pouvoir prédictif d'un modèle peut se déterminer par la différence entre les déviations des deux ensembles. Si la différence est large, cela montre que la méthode n'est pas performante pour la prédiction des enthalpies de formation des nouvelles molécules (molécules n'ayant pas été utilisées dans la construction du modèle). EAM de l'ensemble d'apprentissage est de 4.34 KJ/mol et pour l'ensemble de test est 4.77 KJ/mol. Ce résultat montre que la méthode a un pouvoir prédictif très satisfaisant.

Afin de mieux percevoir la distribution des erreurs de prédiction sur l'ensemble de molécules étudiées, nous affichons dans le tableau suivant des intervalles des erreurs absolues moyennes classifiant ces erreurs en 4 intervalles, et ceci pour les deux ensembles à savoir l'ensemble d'apprentissage et celui du test.

Ensemble des données	Intervalles des erreurs (KJ/mol)			
	0-10	10-15	15-20	20-24
Ensemble d'apprentissage	86,81	10,14	3,06	0,00
Ensemble du test	84,44	10,00	3,89	1,67
Ensemble total	86,33	10,11	3,22	0,33

Tableau 29 : Intervalles limitant les erreurs absolues moyennes de modèle développé

Le tableau 30 donne des détails sur les indicateurs statistiques des erreurs de prédiction en fonction des différentes classes chimiques étudiées. Également, le tableau affiche les déviations maximales de prédiction pour chaque famille chimique.

Classe des molécules		(KJ/mol)				
		EAM	ET	EQM	R ²	D _{max}
CH	279	3,53	4,41	5,65	0,99832	23,55
CHO	378	5,06	4,59	6,83	0,99951	22,3
CHN	65	3,26	3,18	4,54	0,99907	11,56
CHNO	31	2,63	3,29	4,17	0,99935	11,09

CHNOSX	82	6,12	5,12	7,96	0,99991	19,19
CHS et CHSO	65	4,50	4,48	6,32	0,99907	15,61
TOTALE	900	4,43	4,54	6.34	0,99973	23,55

Tableau 30 : Indicateurs statistiques correspond aux différentes classes de la base des données introduites

La figure 26 donne une visualisation de la bonne régression du modèle et l'affinité entre les valeurs des enthalpies de formations expérimentales et celles prédites par le modèle.

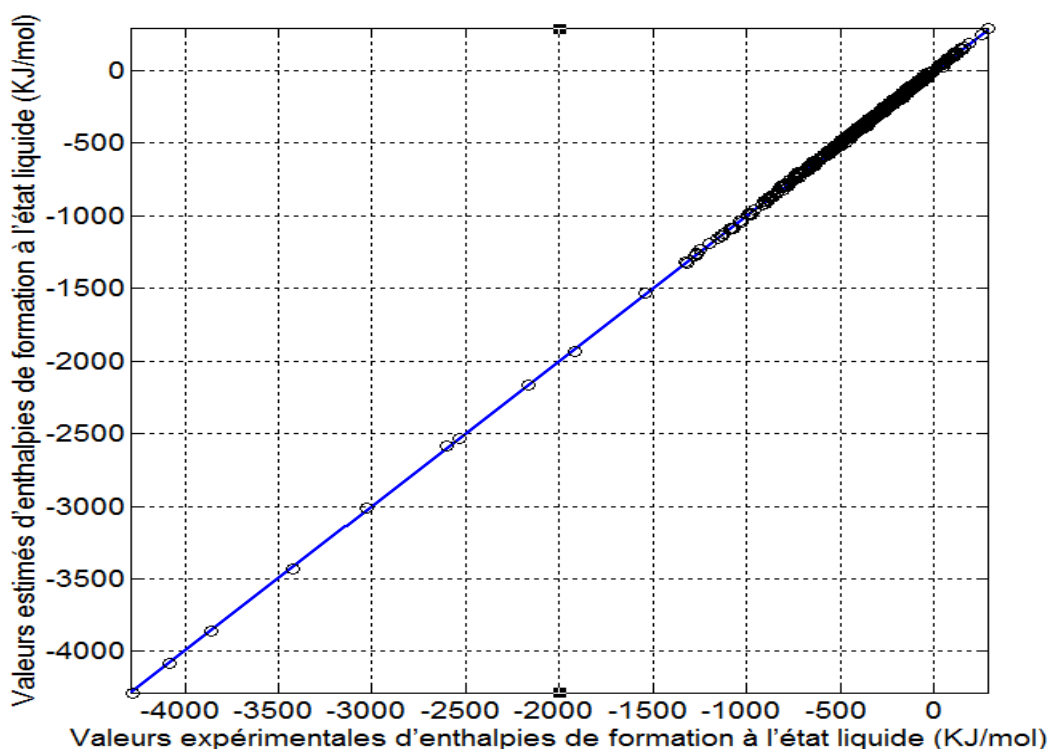


Figure 17 : Relation entre les valeurs expérimentales et prédites de l'enthalpie de formation de 900 molécules étudiées à l'état liquide.

Comme il apparaît dans la figure 17, les valeurs des erreurs absolues sont comprises entre 0 KJ/mol et -22 KJ/mol. Effectivement, elles sont comprises entre 0 KJ/mol et 19 KJ/mol, à l'exception de trois molécules, qui montrent des erreurs comprises entre 21 et 23 KJ/mol.

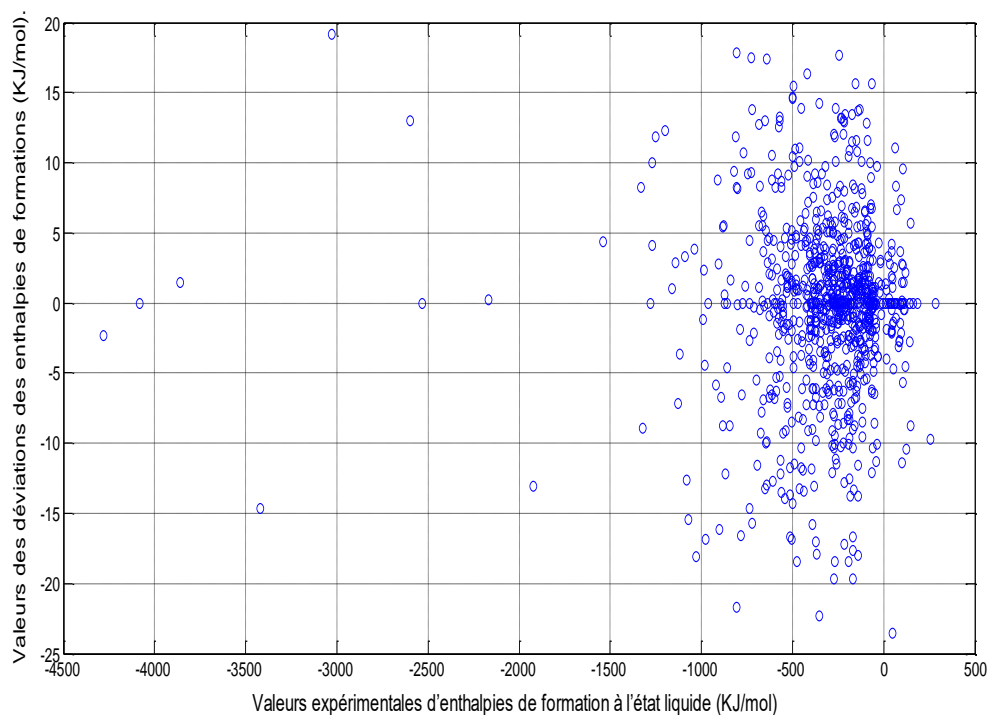


Figure 18 : Dispersion des erreurs absolue des 900 molécules à l'état liquide.

III.5 Étude comparative

Pour montrer la crédibilité de notre méthode, nous avons choisi de comparer les résultats de prédictions issues de notre méthode avec ceux de la littérature les plus récentes et les plus précises. Parmi ces méthodes, on peut citer la méthode de Keshavarz et al [32]. et celle de Verevkin et al. [28]

Verevkin et al. ont introduit une nouvelle méthode de contributions de groupes pour la prédiction des enthalpies de formation et de vaporisation des composés organiques de type hydrocarbures (165 composés) et oxygénés (212 composés). Leur méthode est basée sur la technique de découpage de Benson d'ordre 2, impliquant des corrections systématiques d'interactions de type 1,4- carbone-carbone non lié (et / ou carbone-oxygène). Verevkin et al. proposent des techniques spécifiques telles que l'évaluation critique des données expérimentales à travers le concept de l'évaluation dynamique des données mises en œuvre dans le logiciel NIST ThermoData. Le procédé traite plusieurs substances chimiques telles que des alcanes, des alcènes, des alcynes, des alkylbenzènes, des alcools, des éthers, des cétones et des aldéhydes, des acides carboxyliques, des esters et des carbonates. Dans cette méthode, cinquante-deux paramètres de contributions de groupes et leurs variances ont été évalués. Les paramètres statistiques affichés par cette

méthode sont EAM, ET, EQM et EMR % ; 4.05, 9.81, 9.80, 2.68% KJ/mol , respectivement.

Keshavarz et al. ont récemment proposé une méthode de prédiction de l'enthalpie de formation de certains composés énergétiques dans la phase condensée (solide ou liquide). Ils suggèrent que les paramètres de contribution du groupe peuvent être divisés en groupes additifs et non additifs. La partie d'additif contient la composition élémentaire comme le nombre de carbone, d'hydrogène, d'azote et d'oxygène, en plus des groupes fonctionnels polaires spécifiques comme l'acide, alcool, acide carboxylique, et des fonctions amines. Pour la deuxième partie, il s'agit des groupes non-additifs qui sont tributaires de la présence de certains fragments moléculaires et groupes fonctionnels tels que le NO_2 , ONO_2 , NNO_2 . L'auteur a employé 299 composés dans son travail, 222 molécules utilisées comme un ensemble impliqué dans la mise en place du modèle et 23 molécules comme ensemble de test. Pour les paramètres statistiques, l'EAM, ET, EQM et EMR % des 299 molécules sont: 25,70; 32.69; 32.64; 44.75% KJ/mol , respectivement.

Les deux tableaux 31 et 32 montrent plus d'informations sur la comparaison entre la méthode développée et les deux autres méthodes concurrentes. À partir de ces tableaux, il peut être facilement constaté que notre méthode est plus performante que les méthodes rivales. La valeur de déviation maximale D_{max} pour l'ensemble de molécules utilisant notre méthode est de 23.55 KJ/mol contre 100 et 39.2 KJ/mol en utilisant la méthode Verevkin et al. et celle de Keshavarz et al., respectivement. Notre méthode affiche des meilleurs indicateurs statistiques par rapport aux ceux affichés par les méthodes rivales notamment en terme d'écart type des erreurs (dispersion des erreurs autour de l'axe des zéros).

En termes d'intervalle d'application, notre méthode est plus générale que celles des autres méthodes concurrentes. La méthode de Verevkin et al. s'applique uniquement aux composés CH et CHO ; de plus, elle exclut certaines molécules comme les composés hautement ramifiés comme l'atome de C tertiaire et quaternaire à la proximité étroite dans la chaîne alkyle, des structures aromatiques contenant deux groupes Ortho par rapport à l'autre sur le noyau benzène, et des composés comportant plus d'une interaction 1-5, supposant que les propriétés de ces composés présentent souvent un comportement non-additif. De même, la méthode de Keshavarz et al. ne peut être appliquée que pour les composés énergétiques CHNO.

Méthodes	KJ/mol											
	Base des données			EAM			ET			D _{MAX}		
	NM	S.p.v	kash	NM	S.p.v	kash	NM	S.p.v	kash	NM	S.p.v	kash
CH	279	220	-	3,53	4.22	-	4,41	11.77	-	23,55	100.60	-
CHO	378	157	-	5,06	3.82	-	4,59	6.07	-	22,30	39.20	-
CHN	65	-	-	3,26	-	-	3,18	-	-	11,56	-	-
CHNO	31	-	299	2,63	-	25.70	3,29	-	32.69	11,09	-	87.10
CHNOSX	82	-	-	6,12	-	-	5,12	-	-	19,19	-	-
CHS et CHSO	65	-	-	4,50	-	-	4,48	-	-	15,61	-	-

Kash: Méthode de Mohammed Houssine Keshavarz **NM:** notre Médèle **S.P.V:** Méthode de S. P Verevkin

Tableau 31 : Comparaison détaillée de EAM, ET et de D_{MAX} entre le modèle développé et les deux méthodes compétitives pour la prédiction de $\Delta_f H_{liq}^\circ$ en phase liquide

Le tableau 31 permet de voir plus de détails sur l'EAM pour chaque classe dans le cas de la nouvelle et les autres méthodes. Nous constatons qu'EAM est compris entre 3 et 4 KJ/mol pour toutes les classes de molécules quant à lui un très grand ensemble de données est employé (900 molécules).

Le tableau 32 permet de détailler les résultats en affichant le pourcentage des composés en fonction de l'erreur de prédiction suivant les quatre intervalles d'erreurs. Le pourcentage des composés est affiché suivant la formule brute des composés. Pour toutes les classes de molécules (900 molécules), l'EAM de 777 molécules se situe entre 0-10 KJ/mol représentant la plus grande proportion de molécules, comparé avec les autres intervalles d'erreurs, soit 86,333% de la totalité de la base de données.

Il est a noté que cette comparaison est déséquilibrée en faveur des méthodes concurrentes car d'un côté notre base de données contient deux fois plus de molécules que les autres bases de données, et d'un autre coté notre méthode est testée l'avantage sur un nombre important de 123 molécules, qui n'ont pas été utilisées dans l'étape de régression de paramètres, par rapport aux méthodes concurrentes utilisant la totalité des composés pour la construction de leurs modèles .

méthodes	Ensemble de molécules			KJ/mol (%)											
	NM	S.p.v	kash	0 - 10			10 -15			15 - 20			20 - >20		
	NM	S.p.v	kash	NM	S.p.v	kash	NM	S.p.v	Kash	NM	S.p.v	kash	NM	S.p.v	kash
CH	279	220	_	90,68	92,73	_	5,38	1,82	_	3,23	1,36	_	0,72	4,09	_
CHO	378	157	_	84,13	92,99	_	12,43	2,55	_	3,17	3,82	_	0,26	0,64	_
CHN	65	_	_	92,31	_	_	7,69	_	_	0,00	_	_	0,00	_	_
CHNO	31	_	299	96,77	_	25,42	3,23	_	11,4	0,00	_	11,71	0,00	_	51,51
CHNOSX	82			75,61			15,85			8,54			0,00		
CHS et CHSO	65	_	_	83,08	_	_	15,38	_	_	1,54	_	_	0,00	_	_
Total	900	377	299	86,33	92,84	25,42	10,11	2,12	11,4	3,22	2,39	11,71	0,33	2,65	51,51

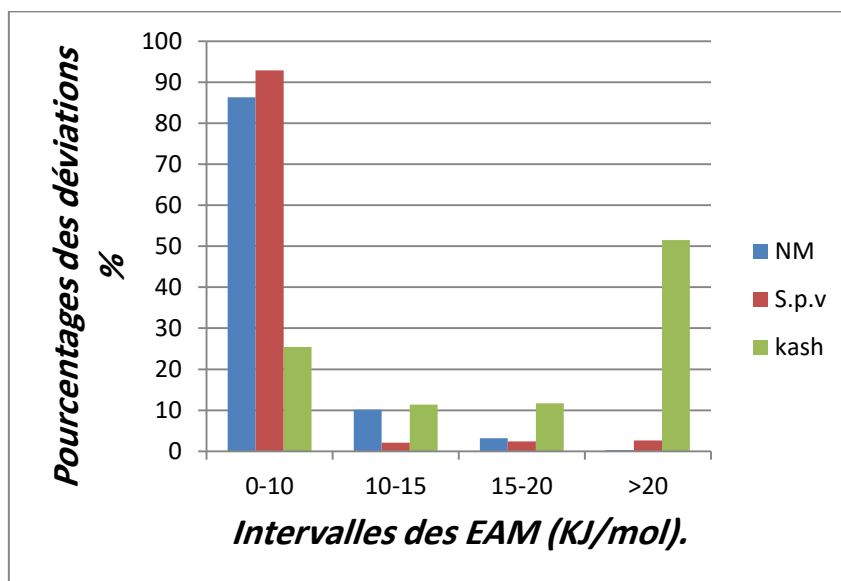
Kash: Méthode de Mohammed Houssine Keshavarz

NM: nouvelle Méthode

S.P.V: Méthode de S. P Verevkin

Tableau 32 : Comparaison détaillée d'EAM, entre le modèle développé et les deux méthodes compétitives pour la prédiction de $\Delta_f H_{liq}^\circ$ en phase liquide.

Pour mieux visualiser cette comparaison des données affichées dans les deux tableaux précédents, la figure 19 indique la classification des quatre intervalles d'erreurs pour les différentes classes de molécules.



Kash: Méthode de Mohammed Houssine Keshavarz. **NM:** nouvelle Méthode. **S.P.V:** Méthode de S. P Verevkin

Figure 19 : Classification des valeurs des EAM de la méthode proposée et celles des méthodes concurrentes pour la prédiction de $\Delta_f H_{liq}^\circ$ en phase liquide.

III.6 Conclusion

Une méthode très précise est développée afin de résoudre le manque de méthodes de prédiction des enthalpies de formation à l'état liquide. En effet étant donné que la plupart des méthodes pour la prédiction des enthalpies de formation sont destinées à la phase condensée, en traitant des gammes de molécules spécifiques avec des listes limitées de molécules à l'état liquide, le développement d'une méthode de prédiction de $\Delta_f H_{liq}^\circ$ dans la phase liquide est nécessaire et justifié. La présente méthode donne des résultats prometteur mise en évidence EAM, ET et EQM qui sont respectivement de 4.43, 4.54, 6.34 KJ/mol. De même, pour le coefficient de régression linéaire, il présente une bonne capacité de prédiction, il est égal à 0,99973. L'avantage de cette méthode se détermine dans un pouvoir de prédiction élevé et une capacité de prédire $\Delta_f H_{liq}^\circ$ de plusieurs classes de molécules telles que CH, CHO, CHN, CHS, CHSO, CHNO, CHNOX. La méthode présente un caractère prédictif très stable pour toute la classe de molécules, ce qui peut expliquer l'absence de valeurs aberrantes.

Chapitre IV: Nouvelle méthode de prédiction des enthalpies de formation à l'état gazeux

IV.1 Introduction

Les composés à l'état gazeux représentent la base pour une grande variété de procédés industriels tels que l'industrie pétrolière et gazière (procédé de synthèse du méthanol, de l'ammoniac et la liquéfaction de gaz naturel...) pharmaceutiques, cosmétique...

La revue bibliographique présentée dans le chapitre I a montré que plusieurs méthodes ont été proposées. Pour la plupart de ces méthodes ont été développées en utilisant des ensembles de molécules réduits. Il a été constaté que très peu de méthodes peuvent traiter les composés énergétiques qui font partie des classes de types *CH*, *CHO*, *CHN* et *CHON*.

L'objectif de ce travail est de développer une méthode prédictive de l'enthalpie de formation à l'état gazeux $\Delta_f H_{gaz}^\circ$ des composés énergétiques simples à mettre en œuvre sans faire recours à d'autres propriétés physico-chimiques. En effet, seule la connaissance de la formule développée d'un composé donné et la maîtrise de la méthode de découpage de la structure moléculaire sont essentielles à l'évaluation de l'enthalpie de formation à l'état gazeux.

IV.2 Élaboration d'une nouvelle méthode de prédiction des enthalpies de formation à l'état gazeux

Les différentes étapes pour l'élaboration d'un modèle fiable de prédiction de l'enthalpie de formation à l'état gazeux sont les mêmes que celles décrites dans la Section II.3. La première étape est la mise en place d'une base de données expérimentales des $\Delta H_{f,g}$, suivie de l'étape de traitement et de validation des données expérimentales.

IV.2.1 Banque d'enthalpies et types de composés étudiés

En pratique, la mise en place d'un modèle commence par la collecte de données expérimentales crédibles et en nombre conséquent. Le choix de la base de données expérimentales des $\Delta H_{f,g}$ est capital et décisif pour le développement d'une méthode de contribution de groupes. Elle devrait être composée de données expérimentales justes obtenues en suivant un protocole expérimental unique. En effet, la robustesse d'une méthode empirique pour la prédiction telle qu'une méthode de contribution de groupes dépend fortement de la qualité et la taille de la base sur lequel elle se fonde.

Dans ce chapitre, afin d'aboutir à nos fins une liste de 750 molécules organiques avec leurs enthalpies de formation à l'état gazeux est collectée de différentes sources bibliographiques et principalement de NIST (Institut National des Normes et de la Technologie). Elle se divise principalement en quatre grandes classes, à savoir, les composés hydrocarbonés C_xH_y , oxygénés $C_xH_yO_z$, azotés $C_xH_yN_w$ et finalement les composés $C_xH_yN_wO_f$. À titre d'exemple, nous affichons dans les Tableaux suivants quelques échantillons de molécules de notre banque de données à l'état gazeux.

La méthode proposée est développée en utilisant 80% des molécules de la base données soit 600 molécules (ensemble d'apprentissage) et le reste des molécules est utilisé pour tester et valider judicieusement la méthode (ensemble de test). Cette division se fait d'une manière semi-aléatoire afin d'augmenter le pouvoir prédictif de la méthode, comme discuté précédemment dans la Section II.4.

Nous détaillons dans l'Annexe C les différentes parties de la base de données des enthalpies de formations des molécules à l'état gazeux.

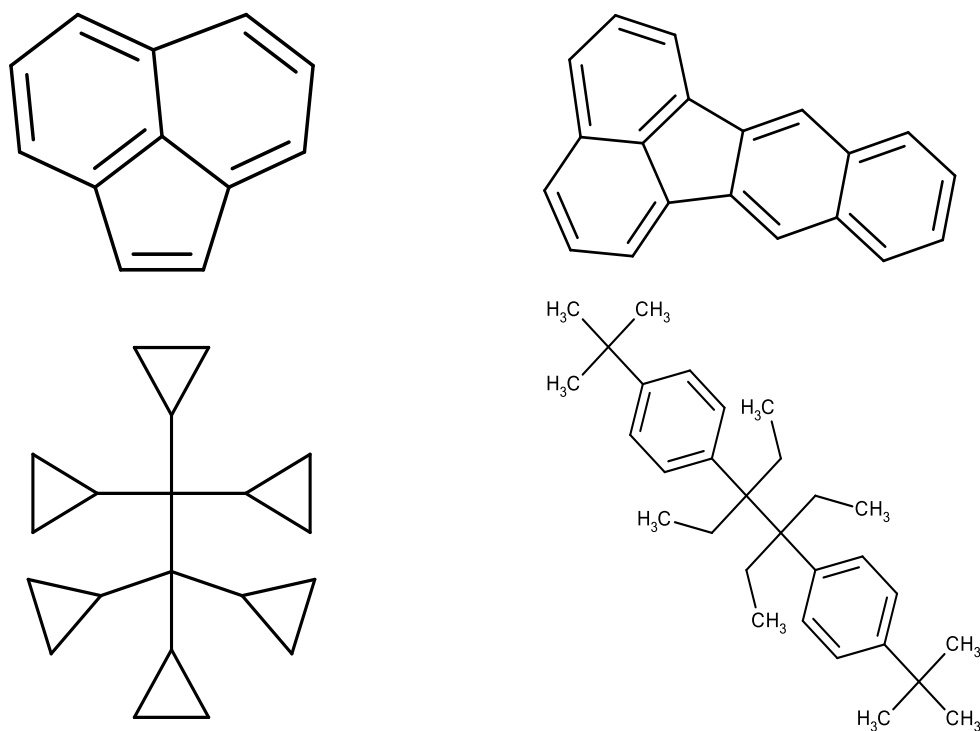


Tableau 33 : Exemple de quelques composés hydrocarbonés en phase gazeux.

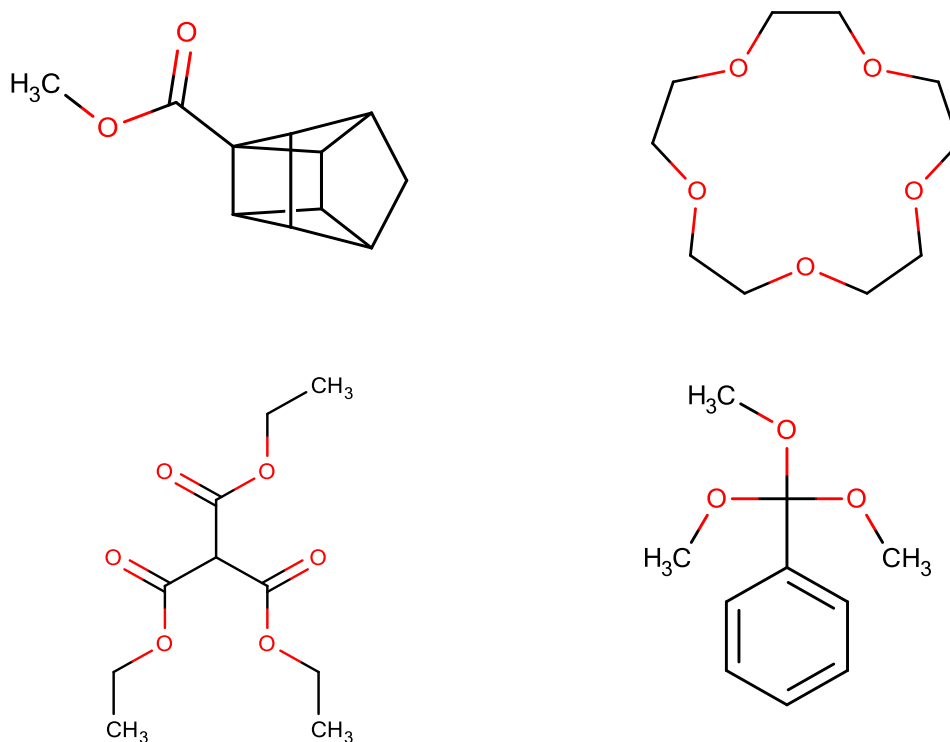


Tableau 34 : Exemple de quelques composés oxygénés en phase gazeux.

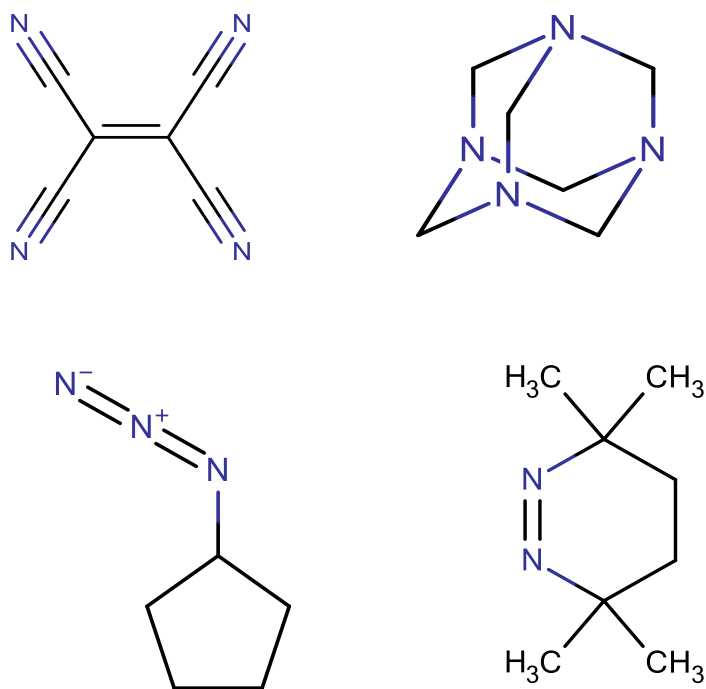


Tableau 35 : Exemple de quelques composés azotés en phase gazeux.

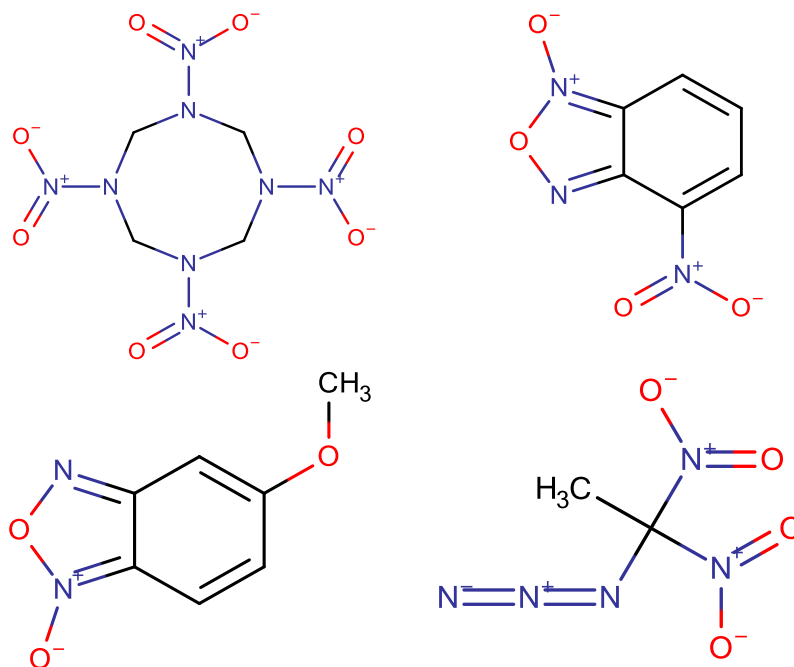


Tableau 36 : Exemple de quelques composés de type CHNO en phase gazeux.

IV.2.2 Nouveaux groupes en phase gazeux

La méthode utilisée pour réaliser la fragmentation en groupe est la même que celle introduit lors l'établissement des méthodes précédentes. Il a été constaté que la méthode de fragmentation d'ordre trois manque de quelques groupes décrivant correctement les composés azotés $C_xH_yN_w$ et ceux de type $C_xH_yO_zN_w$. Après avoir analysé les structures moléculaires de ces composés de nouveaux groupes structuraux sont définis et inclus dans les groupes de Marrero-Gani comme des nouveaux groupes ou des corrections supplémentaires de troisième ordre afin d'augmenter la précision et la fiabilité de la méthode proposée.

Une liste de nouveaux groupes est présentée dans le Tableau 21 et des exemples illustratifs pour chaque nouveau group sont reportés en Annexe C.

IV.3 Mise au point du modèle

Une fois que l'étape de collection des données expérimentales fiables, sûres et en nombre conséquent est achevée, l'étape de génération des groupes (fragments moléculaires) est entamée suivant un schéma de découpage d'ordre trois de Marrero et Gani (cf. paragraphes 1.1.1.6 et I.3.9) en utilisant notre programme développé dans notre laboratoire LCOMM. À cette série de groupes d'ordre trois s'ajoute la liste des nouveaux groupes développés dans le cadre de cette thèse (cf. section précédente IV.2.2).

À ce stade, l'étape de définition de la fonction mathématique du modèle est procédée. Après avoir analysé les structures des molécules et leurs données d'enthalpies de formation associées et essayé plusieurs fonctions mathématiques reliant les groupes moléculaires à l'effet d'enthalpie de formation, une fonction linéaire est proposée. En effet, il a été constaté que la contribution d'un groupe dans une molécule est toujours linéaire par rapport à sa valeur enthalpie de formation.

Comme dans la phase solide, pour estimer les paramètres du modèle (contributions A_i), une régression simultanée est considérée en utilisant toutes les contributions des groupes du premier ordre, du second ordre et du troisième ordre. La recherche des valeurs de contributions A_i est basée sur la minimisation de la somme des carrés des écarts entres les valeurs estimées et les valeurs expérimentales en utilisant l'algorithme de Levenberg-Marquardt. Le modèle obtenu est le suivant:

$$\Delta_f H^\circ_{gaz} (KJ/mol) = \sum_{i=1}^N n_i A_i \quad (68)$$

A_i : Contribution du groupe de type i qui apparaît n_i fois.

Le nombre total des contributions de groupes est de 314. Les contributions des groupes du premier ordre (115 groupes), du second ordre (77 groupes), du troisième ordre (36 groupes) et les nouveaux groupes (86 groupes) sont affichées ainsi que leurs fréquences d'occurrences dans Tableau 18, Tableau 19, Tableau 20 et Tableau 21, respectivement.

N	Groupes	Occurrences	Paramètres
1	CH3	406	-41,41
2	CH ₂	207	-20,84
3	CH	50	-9,49
4	C	26	-1,24
5	CH ₂ =CH	32	38,5
6	CH=CH	28	15,06
7	CH ₂ =C	13	14,61
8	CH=C	6	-13,99
9	C=C	3	86,81
10	CH ₂ =C=CH	2	203,24
11	CH ₂ =C=C	1	211,9
12	CH≡C	10	230,95
13	C≡C	10	229,11
14	aCH	263	15,22
15	aC fused with aromatic ring	47	26,86
16	aC fused with non-aromatic ring	36	4,72
17	aC except as above	35	2,9
18	aN in aromatic ring	40	66,25
19	aC-CH ₃	76	-23,99
20	aC-CH ₂	11	-4,87
21	aC-CH	23	16,43
22	aC-C	15	68,06
23	aC-CH=CH	2	43,19
24	aC-C=CH ₂	2	59,37
25	aC-C≡C	2	232,33
26	OH	54	-173,18

27	aC-OH	31	-172,71
28	COOH	20	-389,91
29	aC-COOH	20	-360,66
30	CH ₃ CO	10	-167,39
31	CH ₂ CO	2	-151,43
32	CCO	1	-146,67
33	aC-CO	12	-118,89
34	CHO	10	-129,22
35	CH ₃ COO	5	-360,89
36	CH ₂ COO	6	-355,71
37	CHCOO	2	-341,67
38	HCOO	2	-297,46
39	aC-COO	4	-300,85
40	COO except as above	8	-317,37
41	CH ₃ O	17	-150,11
42	CH ₂ O	7	-143,7
43	C-O	1	-87,16
44	aC-O	9	-108,89
45	CH ₂ NH ₂	17	-12,52
46	CHNH ₂	7	-3,53
47	CNH ₂	2	-0,01
48	CH ₃ NH	3	21,03
49	CH ₂ NH	6	20,51
50	CHNH	2	36,33
51	CH ₃ N	10	61,7
52	CH ₂ N	10	69,27
53	aC-NH ₂	15	5,61
54	aC-NH	6	44,58
55	aC-N	7	96,33
56	NH ₂ except as above	13	-48,79
57	CH=N	2	108,31
58	C=N	1	73,64
59	CH ₂ CN	16	97,25
60	CHCN	6	102,98
61	CCN	3	102,25
62	aC-CN	9	150,11
63	CN except as above	16	153,08
64	aC-NCO	2	-85,45

65	CH ₂ NO ₂	2	-51,4
66	CHNO ₂	1	-55,78
67	CNO ₂	7	-58,21
68	aC-NO ₂	22	-5,27
69	NO ₂ except as above	20	52,27
70	ONO	8	-42,24
71	ONO ₂	4	-75,31
72	CONH ₂	10	-194,66
73	CONHCH ₃	1	-206,59
74	CON(CH ₃) ₂	3	-187,48
75	CON(CH ₂) ₂	1	-162,96
76	CONCO	1	-299,88
77	aC-CONH ₂	3	-176,96
78	aC-N(CO)H	1	-110,28
79	aC-CONH	3	-55,01
80	NHCONH	2	-160,06
81	NH ₂ CONH	5	-194,66
82	NH ₂ CON	2	-142,48
83	NCON	1	-39,94
84	CHNOH	2	17,96
85	CNOH	3	8,8
86	aC-CHNOH	2	173,39
87	OCH ₂ CH ₂ OH	2	-345,91
88	OCH ₂ CHOH	3	-358,88
89	-O-OH	2	-109,08
90	C ₂ H ₃ O	1	-156,75
91	CH ₂ (cyclic)	176	-23,16
92	CH (cyclic)	93	-18,2
93	C (cyclic)	42	20,12
94	CH=CH (cyclic)	41	58,89
95	CH=C (cyclic)	21	49,6
96	C=C (cyclic)	5	125,59
97	CH ₂ =C (cyclic)	5	55,77
98	NH (cyclic)	31	31,77
99	N (cyclic)	27	-1,25
100	CH=N (cyclic)	13	-6,59
101	C=N (cyclic)	24	-27,17
102	O (cyclic)	53	-144,48

103	CO (cyclic)	23	-159,86
104	>NH	1	-232,97
105	-O-	1	-89,7
106	N=N	13	180,29
107	C _{cyclic} =N-	1	171,26
108	C _{cyclic} =CH-	1	96,74
109	N=O	7	112,75
110	C _{cyclic} =C	2	59,4
111	N=N2	5	225,31
112	aC-CON	3	-60,25
113	aC=O	1	-147,75
114	aN-	7	220,93
115	CH=C=CH	1	215,83

Tableau 37 : Valeurs de contributions de groupes du premier ordre donnant l'enthalpie de formation à l'état gazeux.

N°	Groupes	Occurrences	Paramètres
1	(CH ₃) ₂ CH	34	-0,29
2	(CH ₃) ₃ C	28	4,25
3	C(CH ₃) ₂ C(CH ₃) ₂	2	53,64
4	CH _n =CH _m -CH _p =CH _k (k,m,n,p in 0..2)	14	35,16
5	CH ₃ -CH _m =CH _n (m,n in 0..2)	33	29,09
6	CH ₂ -CH _m =CH _n (m,n in 0..2)	27	26,58
7	CH _p -CH _m =CH _n (m,n in 0..2; p in 0..1)	5	28,98
8	CHCHO or CCHO	1	6,13
9	CH ₃ COCH ₂	4	-11,22
10	CH ₃ COCH or CH ₃ COC	1	-2,58
11	CH ₃ COOCH or CH ₃ COOC	3	-42,75
12	CHOH	6	-3,43
13	COH	1	-18,18
14	OH-CH _n -COO (n in 0..2)	1	13,41
15	CH _m (OH)CH _n (OH) (m,n in 0..2)	3	-5,41
16	CH _m (OH)CH _n (NH _p) (m,n,p in 0..2)	2	-4,48
17	CH _m (NH ₂)CH _n (NH ₂) (m,n in 0..2)	5	5,11
18	CH _m (NH _n)-COOH (m,n in 0..2)	6	18,17
19	HOOC-CH _n -COOH (n in 1..2)	1	1,91
20	HO-CH _n -COOH (n in 1..2)	1	4,29
21	NH ₂ -CH _n -CH _m -COOH (n, m in 1..2)	1	-0,73
22	NC-CH _n -CH _m -CN (n, m in 1..2)	3	12,31
23	NC-CH _n -COO (n in 1..2)	2	12,17
24	CH _m -O-CH _n =CH _p (m,n,p in 0..3)	3	2,57

25	$\text{CH}_m=\text{CH}_n\text{-CN}$ (m,n in 0..2)	1	1,47
26	$\text{CH}_n=\text{CH}_m\text{-COO-CH}_p$ (m,n,p in 0..3)	1	-12,71
27	$\text{CH}_m=\text{CH}_n\text{-CHO}$ (m,n in 0..2)	3	14,28
28	$\text{CH}_m=\text{CH}_n\text{-COOH}$ (m,n in 0..2)	3	19,9
29	aC- $\text{CH}_n\text{-NH}_m$ (n in 1..2; m in 0..2))	2	65,36
30	aC- $\text{CH}_n\text{-O-}$ (n in 1..2)	5	-43,35
31	aC- $\text{CH}_n\text{-CN}$ (n in 1..2)	2	-23,08
32	aC- $\text{CH}_n\text{-COOH}$ (n in 1..2)	1	-17,87
33	aC- $\text{CH}_m\text{-NO}_2$ (n in 1..2)	2	-83,39
34	aC- $\text{CH}_n\text{-OOC}$ (n in 1..2)	1	18,95
35	aC- $\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	14	0,3
36	aC- $\text{C}(\text{CH}_3)_3$	12	-39,97
37	$(\text{CH}_n=\text{C})_{\text{cyc}}\text{-CHO}$ (n in 0..2)	1	-61,44
38	$(\text{CH}_n=\text{C})_{\text{cyc}}\text{-COO-CH}_m$ (n,m in 0..3)	2	-54,58
39	$(\text{CH}_n=\text{C})_{\text{cyc}}\text{-CH}_3$ (n in 0..2)	10	-28,08
40	$(\text{CH}_n=\text{C})_{\text{cyc}}\text{-CN}$ (n in 0..2)	2	-38,55
41	$\text{CH}_{\text{cyc}}\text{-CH}_3$	8	10,14
42	$\text{CH}_{\text{cyc}}\text{-CH}_2$	27	-2,69
43	$\text{CH}_{\text{cyc}}\text{-CH}$	4	57,26
44	$\text{CH}_{\text{cyc}}\text{-C}$	1	25,51
45	$\text{CH}_{\text{cyc}}\text{-CH=CH}_n$ (n in 1..2)	2	37,01
46	$\text{CH}_{\text{cyc}}\text{-OH}$	5	-5,9
47	$\text{CH}_{\text{cyc}}\text{-NH}_2$	2	63,8
48	$\text{CH}_{\text{cyc}}\text{-CN}$	4	-47,35
49	$\text{CH}_{\text{cyc}}\text{-COOH}$	1	42,94
50	$\text{CH}_{\text{cyc}}\text{-NO}_2$	2	-111,53
51	$\text{CH}_{\text{cyc}}\text{-O-}$	1	-11,13
52	$\text{CH}_{\text{cyc}}\text{-OOC}$	1	-20,55
53	$\text{C}_{\text{cyc}}\text{-CH}_3$	22	-6,98
54	$\text{C}_{\text{cyc}}\text{-OH}$	3	-21,14
55	$>\text{N}_{\text{cyc}}\text{-CH}_3$	12	-2,19
56	$>\text{N}_{\text{cyc}}\text{-CH}_2$	1	66,12
57	AROMRINGS ¹ s ²	13	11,47
58	AROMRINGS ¹ s ³	13	-0,8
59	AROMRINGS ¹ s ⁴	31	0,85
60	AROMRINGS ¹ s ² s ³	5	33,96
61	AROMRINGS ¹ s ² s ⁴	8	24,71
62	AROMRINGS ¹ s ³ s ⁵	2	10,33
63	AROMRINGS ¹ s ² s ³ s ⁴	5	28,96
64	AROMRINGS ¹ s ² s ³ s ⁵	10	22,84
65	AROMRINGS ¹ s ² s ⁴ s ⁵	4	12,89
66	PYRIDINES ²	3	-5,12

67	PYRIDINES ³	5	5,3
68	PYRIDINES ⁴	4	4,84
69	PYRIDINES ² S ³	2	2,33
70	PYRIDINES ² S ⁴	2	6,53
71	PYRIDINES ² S ⁵	3	3,58
72	PYRIDINES ² S ⁶	1	-5,23
73	PYRIDINES ³ S ⁴	1	6,07
74	PYRIDINES ³ S ⁵	1	8,87
75	(CH ⁿ =CH ^m) ^{cyc} -COOH	1	28,32
76	AROMRINGS ¹ s ² s ³ s ⁴ s ⁵	4	41,2
77	(N=C) _{cyc} -CH ₃	10	4,6

Tableau 38 : Valeurs de contributions de groupes du second ordre donnant l'enthalpie de formation à l'état gazeux.

N°	Groupes	Occurrences	Paramètres
1	NH _n -(CH _n) _m -COOH (m>2, n in 0..2)	2	3,93
2	OH-(CH _n) _m -OH (m>2, n in 0..2)	2	2,1
3	NC-(CH _n) _m -CN (m>2)	1	-3,81
4	aC-(CH _n =CH _m) _{cyc} (fused rings) (n,m in 0..1)	2	20,24
5	aC-aC (different rings)	12	22,53
6	aC-CH _{ncyc} (different rings) (n in 0..1)	5	-5,62
7	aC-CH _{ncyc} (fused rings) (n in 0..1)	20	14,07
8	aC-(CH _n) _m -aC (different rings) (m>1; n in 0..2)	1	-6,85
9	CH _{cyc} -CH _{cyc} (different rings)	6	29,66
10	CH _{multiring}	36	1,17
11	C _{multiring}	20	-34,73
12	aC-CH _m -aC (different rings) (m in 0..2)	3	8,52
13	aC-(CH _m =CH _n)-aC (different rings) (m,n in 0..2)	1	21,31
14	aC-CO _{cyc} (fused rings)	3	38,03
15	aC-CO-NH _n -aC (different rings) (n in 0..1)	3	-54,84
16	aC-NH _{ncyc} (fused rings) (n in 0..1)	12	-0,37
17	aC-(C=N) _{cyc} (different rings)	2	-39,19
18	aC-(N=CH _n) _{cyc} (fused rings) (n in 0..1)	2	12,93
19	aC-(CH _n =N) _{cyc} (fused rings) (n in 0..1)	1	39,23
20	aC-O _{cyc} (fused rings)	3	27,12
21	AROM.FUSED[2]	48	-23,1
22	AROM.FUSED[2]s ¹	8	6,58
23	AROM.FUSED[2]s ²	9	-12,35
24	AROM.FUSED[2]s ² s ³	3	-0,88
25	AROM.FUSED[2]s ¹ s ⁴	4	-9,86
26	AROM.FUSED[2]s ¹ s ²	2	31,81
27	AROM.FUSED[2]s ¹ s ³	2	17,67
28	AROM.FUSED[3]	4	-19,55

29	AROM.FUSED[4a]	8	-34,96
30	AROM.FUSED[4a]s ¹	1	25,11
31	AROM.FUSED[4a]s ¹ s ⁴	1	68,67
32	AROM.FUSED[4p]	12	-10,86
33	AROM.FUSED[4p]s ³ s ⁴	2	42,83
34	AROM.FUSED[4a]s15	5	-7,36
35	PYRIDINE.FUSED[2-iso]	1	1,2
36	N multiring	2	41,26

Tableau 39 : Valeurs de contributions de groupes du troisième ordre donnant l'enthalpie de formation à l'état gazeux.

N°	Groupes	Occurrences	Paramètres
1	NH=CH	1	65,41
2	N=CH ₂	1	85,41
3	OH=C=CH	3	-53,08
4	>N-	2	86,25
5	(-N=C=O)	1	-40,17
6	O=C=C=C=O	1	-93,64
7	aC-C=[N+][O-]	3	75,41
8	-C≡C-cyc	1	233,58
9	aC-N=[N+][O-]	2	182,71
10	N=[N+][O-]	3	134,98
11	(N=[N+])cycl [O-]	4	98,36
12	aC-[O-][N+]=[N+][O-]	2	174,42
13	[O-][N+]=[N+][O-]	1	148,73
14	(aC=[N+]-[O])aromatic	5	-7,58
15	aFC=[N+]-[O]	1	35,27
16	aC-C#[N+]-[O-]	1	155,69
17	(C=[N+][O-])cyc	4	85,74
18	([C-]-[N+2]-[O-])cyc	1	28
19	(C=[N+])cyc-[O-]	4	86,22
20	(C=[N+])cyc-[O-] _c -CH ₃	1	-26,4
21	aC-NNN	1	333,24
22	NNN	2	290,81
23	(-[N+]#[C-])	3	204,73
24	(C=C=C)	1	192,14
25	N#C-[C]-C#N	1	225,97
26	O-O-	2	175,72
27	(-O-CH ₂ -O-)cyc	3	-7,5
28	(-O-CH _n -O-)cyc n=0,1	3	-5,17
29	(O-CO-O-)cyc	2	-54,95
30	(O-CO-C-)cyc	2	-10,87
31	(CO-O-CO-)cyc	2	-49,11
32	(C-CO-C-)cyc	1	105,01

33	(-CO-CO-)	1	-137,29
34	(-C=C-O-)	2	22,98
35	(-C=C-O-C=C-)	1	-83,64
36	N-N ALIPHATIC	2	129,79
37	(N-N)cycl	3	81,68
38	(N-N-N)cycl	3	40,87
39	(C=N-N-C=N	1	137,44
40	(N=N-N-C=N)	6	157,26
41	(N=N-N-N=C)	1	162,88
42	(N=C-C=N)	1	132,56
43	(C=N-N)	4	55,6
44	(N=C-N)	6	27,7
45	NHn-(C=N)	5	53,87
46	(C=N-C)	1	102,39
47	(N=N-N)	1	19,68
48	(-AC-N=C-N-AC)	1	32,38
49	(-AC-N=N-N-AC)	1	20,25
50	(N-C=N-N)	2	30,54
51	(ac-C=N-N-ac-)	1	39,48
52	C-(NO ₂) ₂	3	-70,42
53	C-(NO ₂) ₃	3	-52,57
54	(C=N-O)	12	169,64
55	(N=C-O)	3	91,13
56	(-C=N-O-N=O-)	1	3,51
57	(C-CO-)cyc	1	-47,27
58	(-N-CO-)n cycl	8	-28,21
59	(N-O-)cyc	8	149,22
60	(N-)cyc-O	5	212,98
61	(-N-O-N-)	6	-12,81
62	(aC-N-O-N-aC)	4	9,04
63	N-OH	1	85,81
64	(-N=N-O-)	1	77,11
65	(aC-N=N-O-aC)	1	76,78
66	(AC-N=C-O-AC)	1	-18,86
67	(aC=[N+]-[O])aromatic	4	24,01
68	Carboaliphatic 3	20	117,17
69	Carboaliphatic 4	12	162,78
70	Carboaliphatic 5	48	50,36
71	Carboaliphatic 6	60	26,82
72	Carboaliphatic 7	4	37,65
73	Carboaliphatic 8	6	78,13
74	Carboaliphatic 10	3	64,47
75	Carboaliphatic 11	2	109,76
76	Carboaliphatic 12	3	138,27

77	Carboaliphatic 14	3	78,25
78	Carboaliphatic 18	1	-249,97
79	Carboaliphatic 17	1	40,54
80	Hetero ring 3	4	137,26
81	Hetero ring 4	6	125,68
82	Hetero ring 5	68	36,68
83	Hetero ring 6	22	58,81
84	Hetero ring 7	2	33,95
85	Hetero ring 8	2	78,39
86	Hetero ring 15	1	154,5

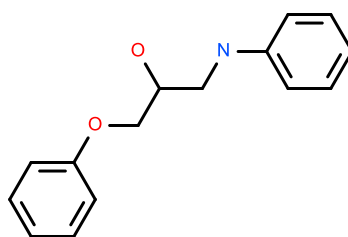
Tableau 40 : Valeurs de contributions des nouveaux groupes proposés à l'état gazeux.

En examinant les valeurs des contributions de groupes à l'état gazeux et en les comparant à ceux des autres états, nous constatons que la plupart des contributions à l'état gazeux changent de valeurs mis à part quelques groupes qui n'ont pas changé de contribution tel que le groupe $\text{CH}_2=\text{CH}-$.

IV.3.1 Exemples d'applications illustratifs

Dans ce qui suit des exemples illustratifs sont avancés afin de présenter l'application de la méthode proposée pour la prédiction des enthalpies de formation en phase gaz.

Exemple 01 : Prédiction de l'enthalpie de formation de : **2-Propanol, 1-phenoxy-3 (phenylamino)-** (CAS N°: 16112-55-3).



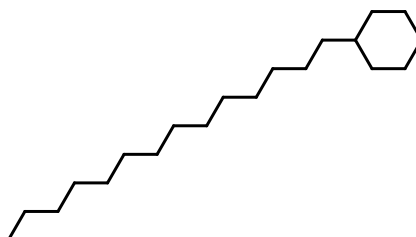
La valeur expérimentale de l'enthalpie de formation est : -185,00 KJ/mol. La décomposition en groupes est donnée dans le tableau suivant :

Ordre de fragmentation	Occurrences	Contribution
Premier ordre de fragmentation	-	-
CH2	01	-20,84
aCH	10	15,22
aC except as above	01	2,90
aC-NH	01	44,58
OCH2CHOH	01	-358,88
Second ordre de fragmentation	Occurrences	Contribution
CHm(OH)CHn(NHp) (m,n,p in 0..2)	01	-4,48

Troisième ordre de fragmentation	Occurrences	Contribution
-	-	-

La prédiction de $\Delta_f H_{gaz}^\circ$ en utilisant l'équation citée précédemment donne, $\Delta_f H_{gaz}^\circ = -184,52 \text{ KJ/mol}$; alors EAM = $0,48 \text{ KJ/mol}$.

Exemple 02 : Prédiction de l'enthalpie de formation de : *Cyclohexane, tetradecyl-* (CAS N°: 1795-18-2).

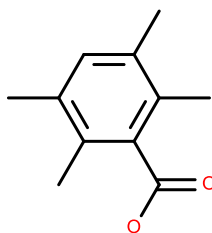


La valeur expérimentale de l'enthalpie de formation est : $-419,30 \text{ KJ.mol}^{-1}$. La décomposition en groupes est donnée dans le tableau suivant :

Ordre de fragmentation	Occurrences	Contribution
Premier ordre de fragmentation	-	-
CH3	1	-41,41
CH2	13	-20,84
CH2 (cyclic)	05	-23,16
CH (cyclic)	01	-18,20
Second ordre de fragmentation	Occurrences	Contribution
CHcyc-CH2	01	-2,69
Troisième ordre de fragmentation	Occurrences	Contribution
Carboaliphatic 6	01	26,82

La prédiction de $\Delta_f H_{gaz}^\circ$ en utilisant l'équation citée précédemment donne, $\Delta_f H_{gaz}^\circ = -422,21 \text{ KJ/mol}$; alors EAM = $2,91 \text{ KJ/mol}$.

Exemple 03 : Prédiction de l'enthalpie de formation de : 2,3,5,6-Tetraméthylbenzoïque acid (CAS N°: 2604-45-7).

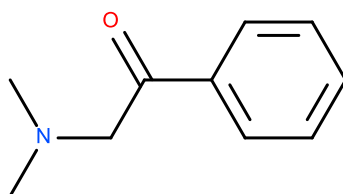


La valeur expérimentale de l'enthalpie de formation est : $-400,1 \text{ KJ.mol}^{-1}$. La décomposition en groupes est donnée dans le tableau suivant :

Ordre de fragmentation	Occurrences	Contribution
Premier ordre de fragmentation	-	-
aCH	01	15,22
aC-CH3	04	-23,99
aC-COOH	01	-360,66
Second ordre de fragmentation	Occurrences	Contribution
AROMRINGS1s2s3s4s5	01	41,20
Troisième ordre de fragmentation	Occurrences	Contribution
-	-	-

La prédiction de $\Delta_f H_{gaz}^\circ$ en utilisant l'équation citée précédemment donne, $\Delta_f H_{gaz}^\circ = -400,19 \text{ KJ/mol}$; alors EAM = $0,09 \text{ KJ/mol}$.

Exemple 04 : Prédiction de l'enthalpie de formation de : Ethanone, 2-(diméthylamino)-1-phenyl- (CAS N°: 3319-03-7).



La valeur expérimentale de l'enthalpie de formation est : $-46.30 \text{ KJ.mol}^{-1}$. La décomposition en groupes est donnée dans le tableau suivant :

Ordre de fragmentation	Occurrences	Contribution
Premier ordre de fragmentation	-	-
CH3	1	-41,41
CH2	13	-20,84
aCH	05	15,22
aC-CO	01	-118,89
CH3N	01	61,70
Second ordre de fragmentation	Occurrences	Contribution
-	-	-
Troisième ordre de fragmentation	Occurrences	Contribution
-	-	-

La prédiction de $\Delta_f H_{gaz}^\circ$ en utilisant l'équation citée précédemment donne, $\Delta_f H_{gaz}^\circ = -43.35 \text{ KJ/mol}$; alors EAM = 2.95 KJ/mol .

IV.4 Résultat et discussion

Après avoir mis au point une nouvelle méthode de prédiction des enthalpies de formation à l'état gazeux, notre modèle doit ensuite être validé et testé, et sa robustesse et son pouvoir prédictif sur un jeu de nouvelles molécules existantes physiquement ou non, doit ensuite être discuté.

Dans un premier temps, le modèle proposé est appliqué pour l'estimation des enthalpies de formation des molécules ayant servi dans la mise au point du modèle, c'est-à-dire les molécules de l'ensemble d'apprentissage. Ensuite le modèle proposé est appliqué sur des nouvelles molécules qui n'ont pas servi dans sa mise en place afin de tester correctement son pouvoir prédictif et sa robustesse.

Les différents indicateurs statistiques à savoir EAM, ET, EQM et R^2 sont affichés comme suit ; 3,33, 3,06, 4,52 et 0,9997 respectivement dans le cas de l'ensemble des données d'apprentissage et 4,50, 4,04, 6,04 et 0,9992 respectivement dans le cas de l'ensemble de test. Le Tableau 41 affiche les déviations maximales dans les deux ensembles d'apprentissage et de test ainsi que pour la totalité des données en plus des indicateurs statistiques cités précédemment. Les déviations maximales restent raisonnables pour les deux ensembles.

Base de données	Nombre de molécules	(KJ/mol)				D_{\max}
		EAM	ET	EQM	R^2	
Base d'apprentissage	600	3,33	3,06	4,52	0,9997	12,72
Base de teste	150	4,50	4,04	6,04	0,9992	18,53
Base totale	750	3,57	3,31	4,86	0,9996	18,53

Tableau 41 : Différents indicateurs statistiques du molecules à l'état gazeux.

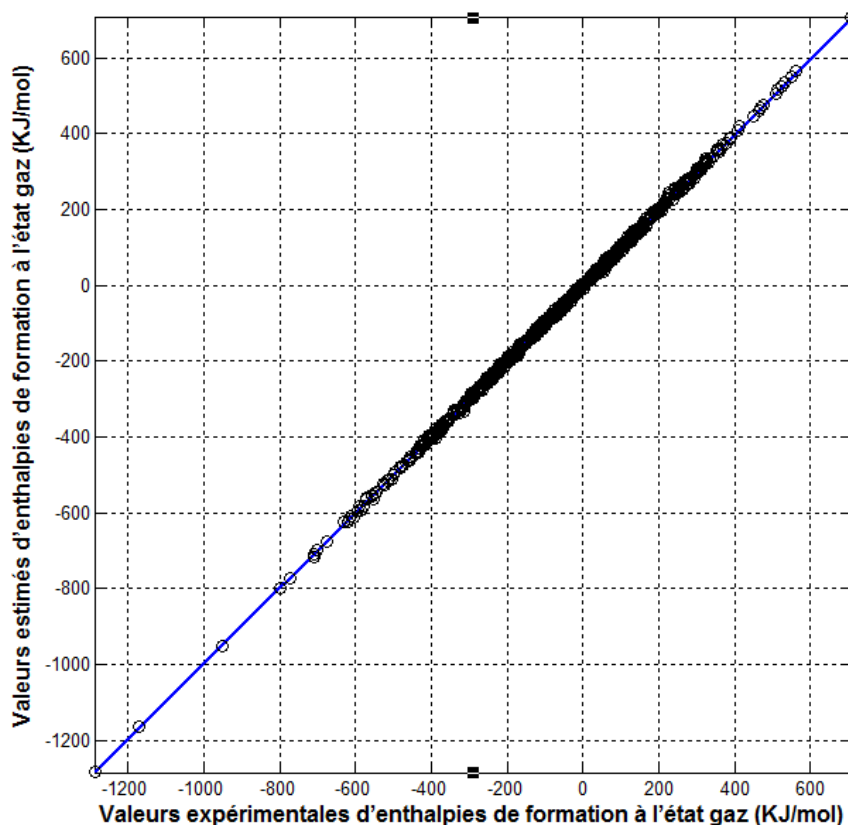
Afin de mieux mettre en évidence les performances du modèle proposé, les erreurs de prédiction des $\Delta_f H_{gaz}^\circ$ des molécules de deux bases de données sont classées en fonction de quatre intervalles d'erreurs à savoir 0-5 KJ/mol, 5-10 KJ/mol, 10-15 KJ/mol et >15 KJ/mol, dans le Tableau 42. En examinant ce dernier tableau nous constatons qu'une grande proportion (72,40%) des molécules présentent des erreurs de prédiction comprises entre 0 et 5 KJ/mol.

	EAM (KJ/mol)			
	0-5	5-10	10-15	>15
base d'apprentissage	74,33	21,83	3,83	0,00
base de teste	64,67	22,00	11,33	2,00

base totale	72,40	21,87	5,33	0,40
--------------------	-------	-------	------	------

Tableau 42 : Classification des erreurs absolues de prédiction de $\Delta_f H_{gaz}^\circ$

La Figure 20 donne un aperçu sur la corrélation entre les valeurs expérimentales et prédites des enthalpies de formation pour les 750 molécules à l'état gazeux. Elle montre l'affinité entre les valeurs expérimentales et estimés. Le coefficient de corrélation linéaire affiche une valeur de 0,9992.

Figure 20 : Corrélation entre les valeurs expérimentales et prédites de $\Delta_f H_{gaz}^\circ$

Nous présentons dans la Figure 21 la dispersion des erreurs de prédiction des $\Delta_f H_{gaz}^\circ$ pour les 750 molécules à l'état gazeux. D'après cette figure les déviations sont comprises entre 0 et ± 18 KJ/mol. À noter que la majorité des erreurs des prédictions des enthalpies de formation pour les 750 molécules sont inférieures à 10 KJ/mol.

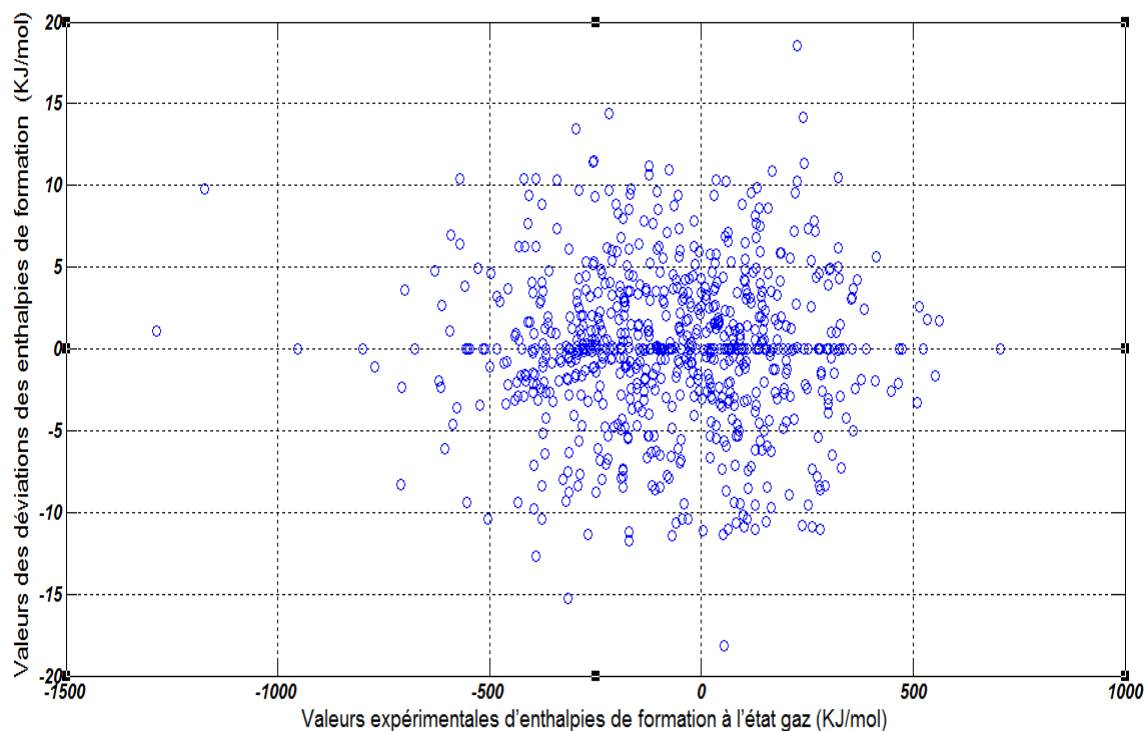


Figure 21 : Dispersion des erreurs de prédiction des $\Delta_f H_{gaz}^\circ$ pour 750 molécules à l'état gazeux.

Le Tableau 43 permet de détailler plus les résultats en affichant le pourcentage des composés en fonction de leurs erreurs de prédiction des $\Delta_f H_{gaz}^\circ$ suivant quatre intervalles d'erreurs. Le pourcentage des composés est affiché suivant la formule brute des composés.

	EAM KJ/mol			
	0-5	5-10	10-15	>15 <18,53
CH	74,79	18,49	6,72	0,00
CHO	67,74	25,16	6,45	0,65
CHN	75,36	19,57	3,62	1,45
CHNO	71,23	24,66	4,11	0,00
Base totale	72,40	21,87	5,33	0,40

Tableau 43 : Pourcentage des composés en fonction de leurs erreurs de prédiction des $\Delta_f H_{gaz}^\circ$

IV.5 Étude comparative

Pour montrer les performances de la méthode développée, nous avons choisi de comparer les résultats trouvés avec ceux de la méthode de Benson et al. [64] En effet, cette dernière méthode est la plus recommandée dans la littérature pour l'estimation des $\Delta_f H_{gaz}^\circ$. Dans cette comparaison, les indicateurs statistiques de la méthode de Benson et al. sont calculés.

D'après le Tableau 44, nous remarquons que les deux indicateurs statistiques EAM et ET affichés par la méthode développée sont bien meilleurs que ceux obtenus par Benson.

Méthodes	Base de données	KJ/mol		
		EAM	ET	D _{MAX}
NMCG	750	3,57	3,31	18,53
M. Benson	799	4.10	7.76	56.60

NMCG : nouvelle méthode de contribution de groupe ; M. Benson : méthode de Besson et al [64].

Tableau 44 : Comparaison entre la méthode proposée et celle de Benson et al.

De même, la méthode concurrente affiche des déviations énormes par rapport à la méthode développée dépassant les 56KJ/mol.

Le Tableau 45 affiche une classification des composés en fonction de leurs erreurs de prédiction des $\Delta_f H_{gaz}^\circ$ suivant quatre intervalles d'erreurs en utilisant notre méthode et celle de Besson et al.. Pour chaque intervalle d'erreur un pourcentage des composés est donné.

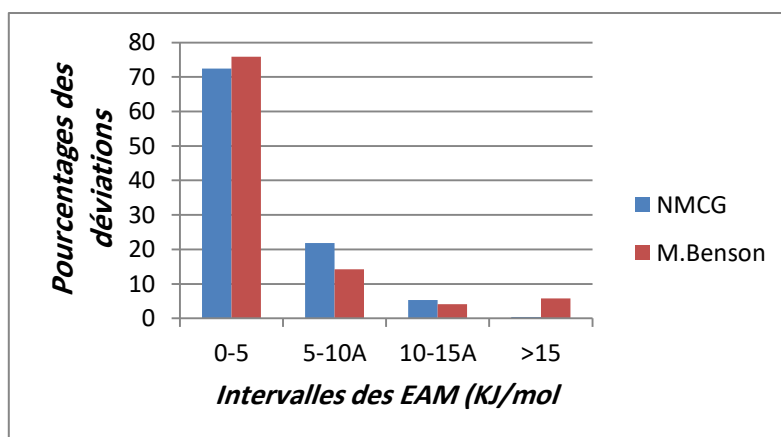
Méthodes	KJ/mol			
	0-5	5-10	10-15	>15
NMCG	72,4	21,87	5,33	0,4
M. Benson	75,84	14,27	4,13	5,75

NMCG : la nouvelle méthode développée M. Benson : méthode de Besson et al [64].

Tableau 45 : Intervalles limitant les erreurs absolues moyennes de prédiction de $\Delta_f H_{gaz}^\circ$.

En examinant ce tableau, nous constatons qu'une grande proportion de molécules appartient au premier intervalle avec un pourcentage de 72.4% et 75.8% pour la méthode proposée et celle de Benson et al., respectivement. Notre méthode affiche plus de molécules que la méthode concurrente dans le deuxième et le troisième intervalles, et moins de molécules dans le dernier intervalle (> 15 KJ/mol), ce qui justifie que la méthode proposée dépasse la méthode de Benson et al.

Pour visualiser les données de ce tableau, nous présentons les résultats sur la figure suivante.



NMCG : nouvelle méthode développée M. Benson : méthode de Benson et al [64].

Figure 22 : Intervalles limitant les erreurs absolues moyennes de prédiction de $\Delta_f H_{\text{gaz}}^\circ$.

IV.6 Conclusion

Une nouvelle méthode de contributions de groupes d'ordre trois a été développée pour la prédiction de l'enthalpie de formation des composés organiques, à l'état gazeux, contenant les éléments C, H, N et O. La méthode proposée est simple à mettre en œuvre, elle nécessite uniquement que la connaissance de la formule développée d'un composé donné pour l'appliquer sans faire recours à d'autres propriétés thermodynamiques.

Une base de données de plus de 750 molécules a été utilisée lors du développement de la méthode. Un ensemble d'apprentissage de 80 % de cette base a été utilisée pour la mise en place du modèle et le reste des molécules (ensemble de test) sont utilisées pour tester et valider la modèle proposé. Le modèle proposé affiche des indicateurs statistiques acceptables à savoir ; EAM et ET de 3.33 kJ/mol et 3.06 kJ/mol , respectivement, en présence de l'ensemble d'apprentissage, et 4.50 kJ/mol et 4.04 kJ/mol , respectivement, en présence de l'ensemble de test.

D'après l'étude comparative il a été constaté que la méthode développée est plus précise que la méthode de Benson et al.

Chapitre V: Réseaux de neurones pour la prédiction des enthalpies de formation

V.1 Introduction

Depuis quelques années, les réseaux de neurones connaissent un succès croissant dans divers domaines scientifiques et technologiques. L'étude des relations structure-propriétés des molécules (QSPR pour Quantitative Structure-Activity Relations) est un domaine en plein essor notamment en utilisant les réseaux de neurones artificiels, en raison des progrès très rapides des calculateurs numériques et de la simulation moléculaire.

Ce chapitre est consacré à l'approche neuronale de la prédiction des propriétés thermodynamiques. Pour chaque état de la matière ; solide, liquide et gaz, un modèle de contributions de groupes d'ordre 3 de type réseaux de neurones est proposé, ensuite validé et testé. Les mêmes ensembles de molécules utilisées dans les chapitres précédents sont utilisées pour le développement des modèles.

Après une description générale des stratégies existantes, nous présentons la procédure de mise en place des trois modèles neuronales pour la prédiction des enthalpies de formation pour les composés organiques purs à partir de leurs structures moléculaires. Finalement, les résultats trouvés sont discutés et comparés correctement avec des méthodes concurrentes trouvées dans la littérature et avec des valeurs expérimentales existantes.

V.2 Principes des réseaux de neurones artificiels

Les réseaux de neurones artificiels ne sont autres qu'une inspiration des réseaux de neurones biologiques et sont un paradigme de calcul numérique. Ils servent aujourd'hui à toutes sortes d'applications dans divers domaines tels que la commande et la surveillance des procédés industriels [65]. Ils peuvent générer une application non-linéaire complexe entre des données d'entrée et des sorties d'un système. Un réseau de neurones est constitué d'un ensemble d'éléments de base appelés neurones (formels) regroupés en couches et reliés entre eux par des connections pondérées.

Dans la littérature, il existe plusieurs types de modèles de réseaux de neurones tels que le Perceptron Multi Couches (PMC), les Réseaux à Fonctions de base Radiales (RFR), le réseau de Kohonen... Les réseaux de neurones se caractérisent principalement par le type de neurones utilisés, par leurs topologies et par la méthode d'estimation de leurs paramètres connue sous le nom de méthode d'apprentissage.

V.2.1 Neurone formel

La première caractéristique des réseaux de neurones stipule l'existence d'entités élémentaires qui se trouvent à la base même d'un réseau de neurones : le neurone formel. Il s'agit d'une fonction algébrique simple, paramétrée, non linéaire et à valeur bornée. Chaque neurone fait la somme pondérée des potentiels d'action qui lui parviennent (chacun de ces potentiels est une valeur numérique qui représente l'état du neurone qui l'a émis), puis s'active suivant la valeur de cette sommation pondérée. D'une autre manière, il est décrit comme un automate possédant plusieurs entrées $\{x_i\}$ pondérées par des paramètres⁹ $\{w_i\}$, un biais w_0 , une sortie y et une fonction f appelée *fonction d'activation*. Cette description du neurone formel est donnée par la figure suivante.

⁹ Souvent désignés sous le nom de poids en raison de l'inspiration neurobiologie, « poids synoptiques ».

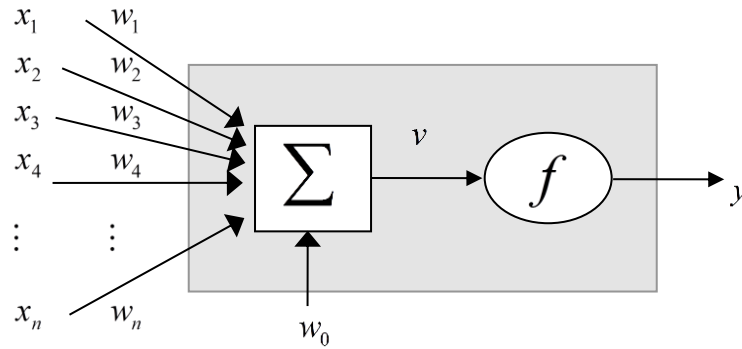


Figure 23: Neurone formel

Le signal v sera, conformément à l'usage inspiré par la biologie, appelé *potentiel*, il est donné par l'équation suivante :

$$v = w_0 + \sum_{i=1}^{n-1} w_i x_i \quad (69)$$

La fonction d'activation utilisée pour les neurones peut être n'importe quelle fonction croissante, dérivable et symétrique par rapport à zéro, telle que la fonction sigmoïde qui est souvent utilisée, ou tangente, hyperbolique ou encore Arctangente.

Ainsi, la sortie du neurone a pour expression :

$$y = f\left(w_0 + \sum_{i=1}^{n-1} w_i x_i\right) \quad (70)$$

V.2.2 Réseau de neurones multicouches (MPC)

Un réseau de neurones est un maillage de neurones organisé suivant plusieurs ($n \geq 3$) couches (*cf. figure 24*). Il n'y a pas de connexion entre neurones d'une même couche et les connexions ne se font qu'avec les neurones de la couche aval. Habituellement, chaque neurone d'une couche est connecté à tous les neurones de la couche suivante et à celle-ci seulement. Ceci permet d'introduire la notion de sens du parcours de l'information (de l'activation) au sein d'un réseau et, donc, de définir les concepts de neurone d'entrée et de neurone de sortie. Par extension, on appelle couche d'entrée l'ensemble des neurones d'entrée, couche de sortie l'ensemble des neurones de sortie. Les couches intermédiaires n'ayant aucun contact avec l'extérieur sont appelées couches cachées.

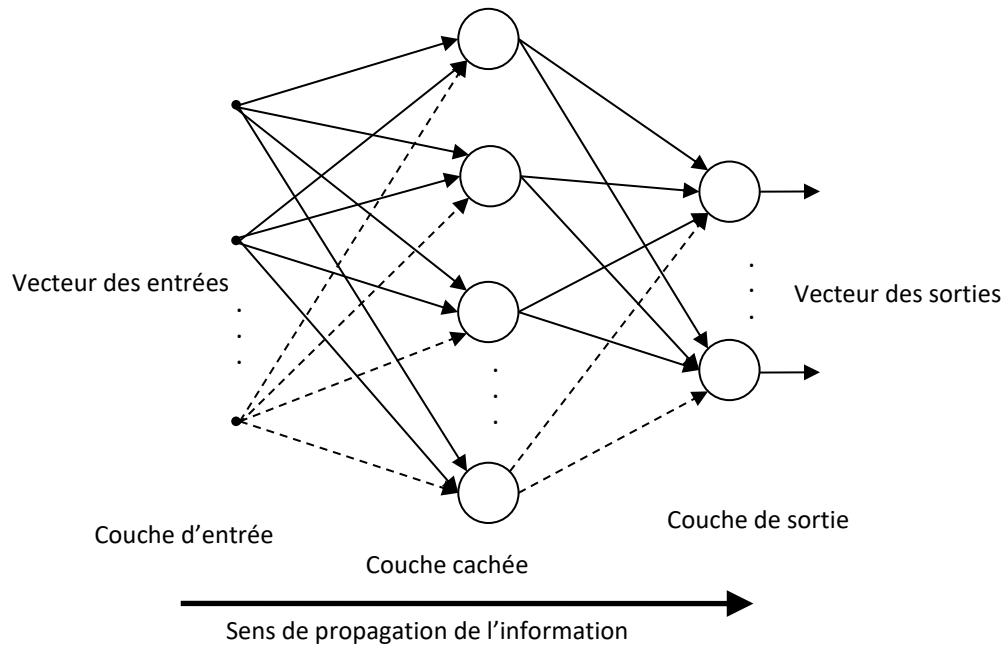


Figure 24: Réseau multicouches (MCP) comportant une seule couche cachée

V.2.3 Apprentissage des réseaux de neurones

Une fois définie la structure du réseau de neurones, la phase d'apprentissage du réseau est enclenchée. Celle-ci permet d'identifier les paramètres des différentes couches et constitue une phase clef. Cet apprentissage peut se faire de deux manières : *supervisé* ou *non supervisé*. Dans la première, le réseau est informé de la réponse désirée, c'est-à-dire des valeurs que doivent avoir les sorties du réseau en fonction des entrées correspondantes, ce qui n'est pas le cas dans la deuxième.

L'apprentissage consiste donc à minimiser une fonction de coût¹⁰ en utilisant des techniques numériques itératives classiques telles que le gradient conjugué ou les méthodes d'ordre 2 (Levenberg-Marquardt, Gauss-Newton, ...). Ces méthodes nécessitent l'évaluation du gradient de la fonction de coût qui est calculé en utilisant l'*algorithme de rétropropagation* (Rumelhart et al., 1986).

V.2.4 Les réseaux non bouclés et les réseaux bouclés

Il existe principalement deux topologies de réseaux de neurones : les réseaux bouclés et les réseaux non bouclés.

¹⁰ Tel que la fonction de coût des moindres carrés

Dans les réseaux non bouclés n'y a aucune connexion "vers l'arrière" et l'information circule des neurones entrée vers les neurones de sortie sans retour en arrière : et le temps n'intervient pas comme une variable fonctionnelle.

En revanche, les réseaux bouclés ont un graphe de connexions cycliques, c'est-à-dire une sortie d'un neurone peut donc être fonction d'elle-même. En conséquence, le facteur temps est primordial pour la définition de chaque sortie de neurone.

V.3 Mise en œuvre des modèles neuronaux

L'objectif de ce travail est de développer des relations mathématiques, non-linéaires entre les groupes qui sont considérés comme des entrées du modèle et les valeurs expérimentales de l'enthalpie de formation de l'ensemble de molécules.



Réseau de neurones

Figure 25: Prédiction des enthalpies de formation en utilisant les réseaux de neurones

La construction d'un modèle neuronale fiable pour la prédiction de l'enthalpie de formation passe par les sept grandes étapes décrites dans le chapitre II (cf. Section II.3 et Figure 9). Les étapes à suivre sont les mêmes que celles des modèles de contributions de groupes linéaires réalisées dans les chapitres II exception faite pour la quatrième étape « Définition de la fonction du modèle » et la cinquième étape « Recherche des paramètres du modèle par optimisation paramétrique ».

Pour chaque état de la matière (solide, liquide et gaz) un ensemble de molécules avec ses valeurs expérimentales d'enthalpie est mis en œuvre. Les mêmes bases de données décrites dans les chapitres précédents (cf. Section II.3.1.a, Section III.2.1, Section VI.2.1) sont utilisées pour l'élaboration des réseaux de neurones. Pour chaque état de la matière, l'ensemble des données est divisé en deux sous-ensembles de données ; ensemble d'apprentissage et un autre de test, en utilisant un choix semi-aléatoire. En effet, une division aléatoire peut exclure certains

paramètres (contributions) de l'étape d'apprentissage qui affecte directement les performances du modèle.

Dans la troisième étape, les mêmes fragments moléculaires (Groupes d'ordre trois) des structures moléculaires des bases de données réalisés dans les chapitres précédents sont exploités.

L'étape suivante consiste à définir un modèle (réseau) neuronal pour chaque état de la matière. En effet, nous avons choisi d'utiliser les réseaux de neurones de type perceptron multicouche (PMC) avec une architecture neuronale non bouclés puisque plusieurs travaux (Picton, 1994) ont montré expérimentalement qu'un réseau multicouches non bouclées permet d'approximer, avec une grande précision, n'importe quelle fonction sous réserve d'avoir au moins trois couches et suffisamment de neurones dans la couche cachée. Le nombre de nœuds d'entrée a été fixé par le nombre de groupes structuraux, et le nombre de nœuds de sortie a été fixé à 1 nœud puisque il y a une seule propriété à prédire. En ce qui concerne la détermination du nombre de nœuds cachés, elle présente un défi. En effet, il convient de noter que trop peu de nœuds cachés peuvent conduire à des sous-ajustements et un trop grand nombre des nœuds cachés peuvent contribuer à un sur-ajustement. Pour déterminer le nombre optimal de neurones cachés dans un ANN il n'y a pas de règle claire et efficace. Deux approches expérimentales différentes ont été développées pour résoudre ce problème [66] [67]. La première approche commence par un réseau avec un minimum de neurones cachés, et ajouter des nœuds cachés jusqu'à ce que le but soit atteint. Contrairement à la première approche, la seconde commence avec un réseau surdimensionné puis réduit le nombre de nœuds cachés. Dans notre cas, la première approche est choisie depuis que le réseau neurones avec peu de nœuds (nombre optimal de nœuds cachés) est souhaité. Cette approche nous a conduits vers un nombre de nœuds cachés de trois.

Dans ce travail, pour chaque état de la matière ; solide, liquide et gaz, un réseau de neurones non bouclés à trois couches cachées, avec une fonction de transfert symétrique sigmoïde et une fonction de transfert linéaire dans la couche de sortie, a été construit en utilisant la boîte à outils de réseau neuronal du logiciel MATLAB (Mathworks Inc). La taille des neurones de la couche d'entrée est fonction du nombre de groupes structuraux (cf. Figure 26, Figure 27 et Figure 28).

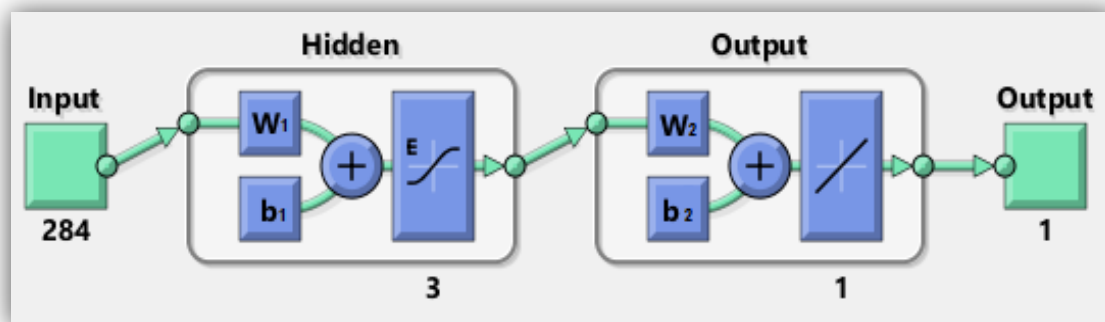


Figure 26: Présentation du réseau de neurones pour la prédiction des $\Delta H_{f,s}$ à l'état solide

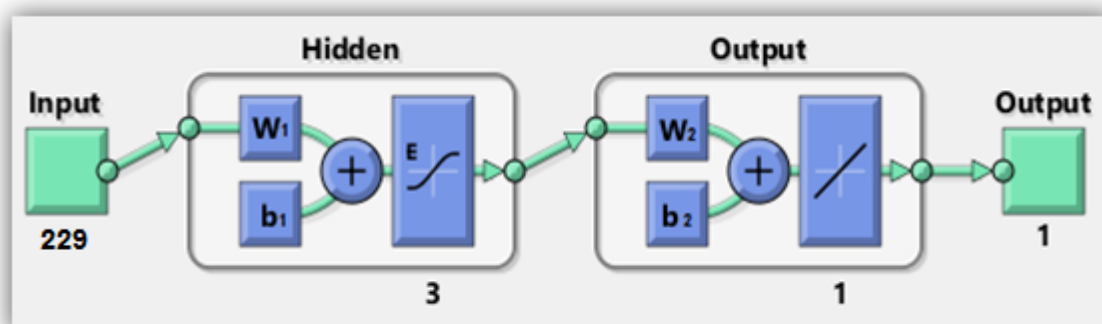


Figure 27: Présentation du réseau de neurones pour la prédiction des $\Delta H_{f,L}$ à l'état liquide

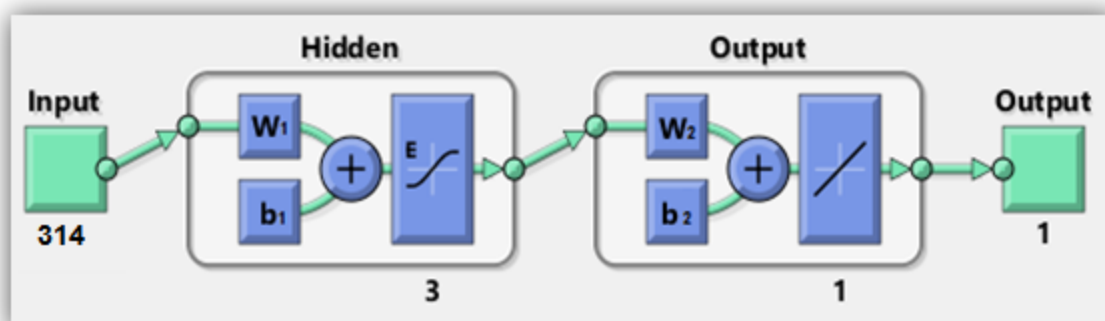


Figure 28: Présentation du réseau de neurones pour la prédiction des $\Delta H_{f,G}$ à l'état gazeux

Une fois l'architecture et la taille du réseau de neurones est définie, l'étape de recherche de ses paramètres (les valeurs des poids et des biais) s'impose. La phase d'apprentissage des réseaux de neurones est réalisée sur les ensembles des molécules d'apprentissage en utilisant la technique de rétro-propagation de Levenberg-Marquardt. Cette technique est l'une des plus rapides des algorithmes de rétro-propagation, qui est fortement recommandée dans l'apprentissage supervision, bien qu'elle nécessite plus de mémoire que les autres algorithmes.

Les valeurs des paramètres (poids et biais de chaque couche) des trois réseaux de neurones identifiées dans la phase d'apprentissage sont données dans l'Annexe A, B, et C. Ces valeurs sont reportées dans l'Annexe afin d'alléger la lisibilité du document.

Chaque réseau de neurones est propre à un état de la matière. Les trois réseaux de neurones mis en place sont testés pour prédire des enthalpies de formation de nouvelles molécules appartenant à des ensembles de test.

V.4 Résultats, discussion et comparaison

Dans ce qui suit, nous présentons, pour chaque état de la matière, une étude statistique détaillée sur les performances prédictives du modèle neuronal développé en fait une comparaison directe entre les valeurs expérimentales et celles issues de notre modèle neuronal. Pour cela, pour chaque modèle neuronal proposé les indicateurs statistiques à savoir ; le coefficient de détermination (R^2), Écart-Type (ET), et Erreur moyenne absolue (EMA) sont évalués, analysés et interprétés.

V.4.1 Résultats, discussion et comparaison à l'état solide

Le Tableau 46 affiche l'EAM et l'ET et les erreurs absolues maximales EA_{\max} du modèle développé pour les trois ensembles de données; d'apprentissage, de test et les deux à la fois (total).

Ensemble	Nombre de données	(kJ/mol)		
		ET	EMA	D_{\max}
Apprentissage	1039	10.78	9.23	80.7
Test	183	8.43	9.89	54.82
Total	1222	10.46	9.33	80.7

Tableau 46 : Performances statistiques du modèle neuronal pour la prédiction des $\Delta_f H_{\text{solid}}^\circ$.

Ce tableau affiche une bonne précision du modèle neuronal proposé pour la prédiction des $\Delta_f H_{\text{solid}}^\circ$. Les écarts types ne dépassent pas les 10.78 kJ/mol avec une erreur absolue maximale de 80.7 kJ/mol en présence de l'ensemble d'apprentissage (Tricyclo[3.3.1.1(3,7)]decane, 1-nitro-) et 54.82 kJ/mol en présence de l'ensemble de test (4-methylbenzoic acid anhydride).

D'après ce tableau, nous remarquons que les valeurs d'écart-type et d'erreur absolue maximale correspondant à l'ensemble de test sont inférieures à celles d'apprentissage, bien que la méthode ait été construite sur l'ensemble d'apprentissage. D'après cette remarque, le modèle proposé a un pouvoir prédictif très élevé.

La corrélation entre les valeurs prédites et expérimentales est représentée graphiquement sur la Figure 29 en présence de l'ensemble de molécules d'apprentissage et du test.

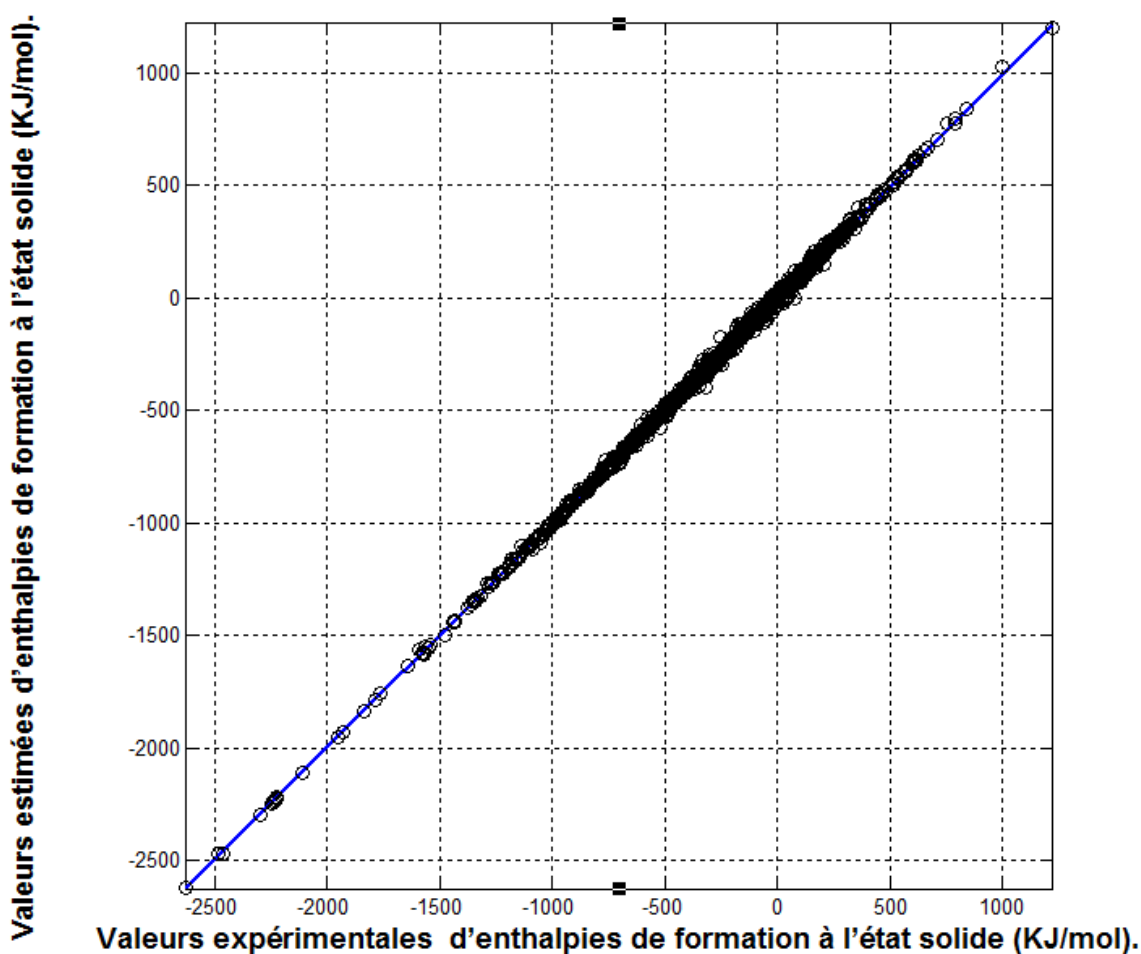


Figure 29: Corrélation entre les valeurs expérimentales et prédites par le réseau de neurones à l'état solide

Le modèle proposé affiche un très bon coefficient de détermination, $R^2 = 0,99914$ pour la totalité des molécules. Il est à noter que, sauf pour quelques valeurs prédites, la plupart des données ont un bon degré de précision, sur la large gamme des valeurs d'enthalpie de formation (comprises entre $-2624 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ et $1218.6 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$) à l'état solide.

Les performances du modèle neuronal sont comparées avec celles de la méthode développée précédemment dans le chapitre II et avec celles des différentes méthodes trouvées dans la littérature. Parmi les meilleures méthodes et les plus robustes trouvées dans la littérature pour la prédiction des $\Delta_f H_{solid}^\circ$ sont celles de Domaliski et al [21], Anna Salamon et al [24], Keshavarz et al [32].

Classes des composés	Nombre de données					EAM (kJ/mol)					ET (kJ/mol)					D _{max} (kJ/mol)				
	Ce travail	MCG ¹	SI ²	Dm ³	Ks ⁴	Ce travail	MCG ¹	SI ²	Dm ³	Ks ⁴	Ce travail	MCG ¹	SI ²	Dm ³	Ks ⁴	Ce travail	MCG ¹	SI ²	Dm ³	Ks ⁴
C-H	170	170	145	142	-	12.53	19.15	20.24	26.15	-	11.65	20.25	38.44	43.93	-	57.24	91	237.6	267	-
C-H-O	341	341	256	217	-	8.59	13.85	22.23	21.12	-	9.94	13.66	49.57	29.46	-	76.45	77.53	384.5	212.3	-
C-H-N	158	158	134	42	-	10.05	21.29	27.96	34.34	-	11.27	20.61	61.33	54.03	-	74.94	109.84	388.6	272.1	-
C-H-O-N	553	553	482	253	192	8.59	18.50	21.3	34.63	20.29	9.96	18.24	48.37	55.45	15.4	80.7	95.15	393.9	395.9	85.9
Total	1222	1222	1017	654	192	9.33	17.65	22.26	28.29	20.29	10.46	17.89	50.87	45.93	15.4	80.7	109.84	393.9	395.9	85.9

Tableau 47 : Classification des erreurs absolues moyennes issues du modèle neuronal proposé et les des modèles concurrents à l'état solide.

Classes des composés	Nombre de données					0-5 (kJ/mol)					5-10 (kJ/mol)					10-20 (kJ/mol)					>20 (kJ/mol)				
	Ce travail	MCG ¹	SI ²	Dm ³	Ks ⁴	Ce travail (%)	MCG ¹ (%)	SI ² (%)	Dm ³ (%)	Ks ⁴ (%)	Ce travail (%)	MCG ¹ (%)	SI ² (%)	Dm ³ (%)	Ks ⁴ (%)	Ce travail (%)	MCG ¹ (%)	SI ² (%)	Dm ³ (%)	Ks ⁴ (%)	Ce travail (%)	MCG ¹ (%)	SI ² (%)	Dm ³ (%)	Ks ⁴ (%)
C-H	170	170	145	142	-	28.82	27.06	42.07	41.55	-	20.59	15.29	19.31	13.38	-	32.94	24.12	15.86	12.68	-	17.65	33.53	22.76	32.39	-
C-H-O	341	341	256	217	-	48.68	30.21	40.63	32.26	-	20.53	19.65	20.31	19.82	-	20.53	26.98	16.02	13.36	-	10.26	23.17	23.05	34.56	-
C-H-N	158	158	134	42	-	41.77	19.62	55.22	35.71	-	24.05	18.35	6.72	14.29	-	19.62	23.42	9.70	7.14	-	14.56	37.97	28.36	42.86	-
C-H-O-N	553	553	482	253	192	47.92	25.5	38.80	28.85	15.00	18.63	16.46	11.20	13.44	15.00	23.51	24.23	23.86	14.62	27.6	9.95	33.82	26.14	43.08	42.3
Total	1222	1222	1017	654	192	44.68	26.27	41.89	33.18	15.00	20.13	17.43	14.06	15.60	15.00	23.49	24.88	18.88	13.30	27.6	11.70	31.34	25.17	37.92	42.3

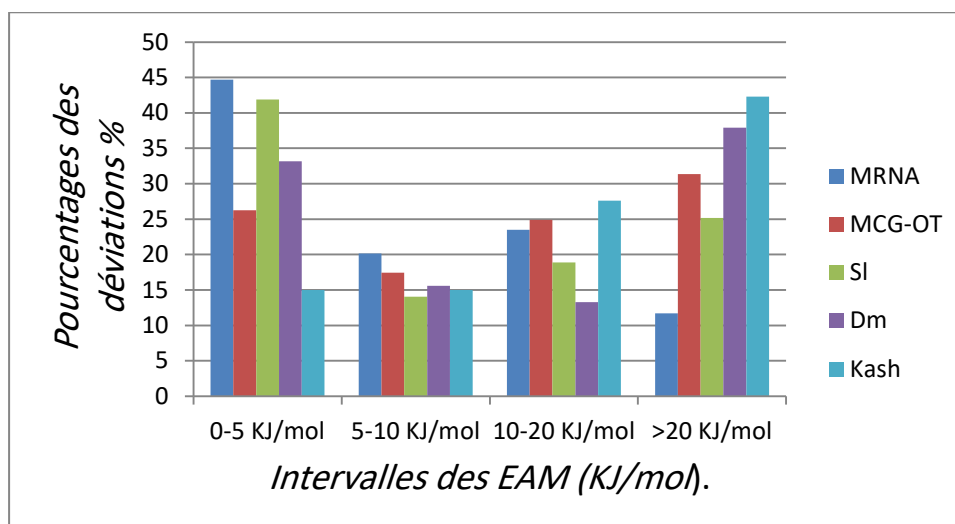
¹ méthode de contribution de groupe. ² méthode de Salmon and Dalmazzone [24]. ³ méthode de Domalski and Hearing [21]. ⁴ méthode de Keshavarz [32]

Tableau 48 : Comparaison entre le modèle neuronal proposé et les modèles concurrents en utilisant l'erreur absolue moyenne à l'état solide.

À partir du Tableau 47 il peut être facilement constaté que le modèle neuronal proposé est plus performant que celui proposé dans le chapitre II ainsi que les autres modèles concurrentes. Tous les indicateurs statistiques (EAM, ET et EAM_{MAX}) du nouveau modèle sont tous nettement inférieurs à ceux des autres méthodes concurrentes, et ceci est valable dans toutes les classes des composés. Ainsi, le modèle neuronal proposé est plus précis que les autres modèles de la littérature, et ceci est valable pour tous les types de composés présents dans la base de données étudiée.

Le Tableau 48 affiche le pourcentage des composés en fonction de la formule brute des composés et leurs erreurs absolues moyennes de prédiction suivant quatre intervalles d'erreurs à savoir ; 0 – 5 kJ/mol, de 5 à 10 kJ/mol, de 10 à 20 kJ/mol et > 20 kJ/mol. Ce dernier tableau confirme la robustesse et la précision du modèle neuronal pour toutes les classes des composés par rapport aux modèles rivaux.

Afin de mieux interpréter les résultats du Tableau 48, nous affichons dans la Figure 30, pour la totalité des molécules, les erreurs absolues moyennes de prédiction suivant les quatre intervalles d'erreurs. Sur cette figure, nous constatons que pour les deux premiers intervalles ; 0-5 et 5-10 kJ/mol , le modèle proposé affiche le plus grand pourcentage de molécules avec des erreurs de prédiction faibles par rapport aux autres modèles et un pourcentage le plus faible de molécules dans l'intervalle 20 kJ/mol .



MRNA : méthode de réseaux de neurones artificiels. **MCG** : méthode de contribution de groupes développée précédemment. **SI** : méthode d'Anna Salamon et al. **Dm** : méthode de Domaliski et al. **Kash** : méthode de Mohammed Hossein Keshavarz et al.

Figure 30: Classification des valeurs des EAM correspond au modèle neuronal à l'état solide.

V.4.2 Résultats, discussion et comparaison à l'état liquide

Le modèle neuronal a été développé en utilisant un total de 900 molécules à l'état liquide de différentes familles chimiques, dont 180 molécules sont dédiées pour la phase de test du modèle. Les indicateurs statistiques sont évalués dans le cas des deux ensembles d'apprentissage et de test. Tous les indicateurs de performance statistique du modèle développé sont donnés dans le Tableau 49.

Base des données	KJ/mol					R ²
	Nombre	EAM	ET	ERM	D _{max}	
Apprentissage	720	3,58	3,99	5,36	19,99	0,99984
Test	180	4,17	4,11	5,85	20,44	0,99928
Totale	900	3,70	4,02	5,46	20,44	0,99980

Tableau 49 : Performances statistiques du modèle neuronal pour la prédiction des $\Delta_f H_{Liq}^\circ$.

L'analyse de ces résultats montre l'efficacité du modèle neuronal à la prédiction des $\Delta_f H_{Liq}^\circ$ aussi bien pour les composés utilisés durant son développement que pour les composés de test. L'erreur moyenne absolue et l'écart type de l'ensemble d'apprentissage et celui du test sont proches les unes des autres ; 3.58, 3.99, 4.17 et 4.11 kJ/mol, respectivement. Ce résultat montre que le modèle neuronal proposé a un pouvoir prédictif très correct.

En général, les composés à l'état liquide présentent plus de facilité pour prédire leurs $\Delta_f H_{Liq}^\circ$ par rapport à celle de la phase solide. Les déviations arrivent jusqu'à 90kJ/mol, dans la phase solide tandis que dans la phase liquide, l'erreur maximale est de 20kJ/mol.

La figure suivante montre la relation entre les valeurs prédites et les valeurs expérimentales. La relation est visualisée à travers une droite avec un coefficient de corrélation linéaire tendant vers 1. La régression entre les valeurs expérimentales et les valeurs prédites est quasi parfaite, ce qui revient à dire que la prédiction est fortement liée à la valeur expérimentale.

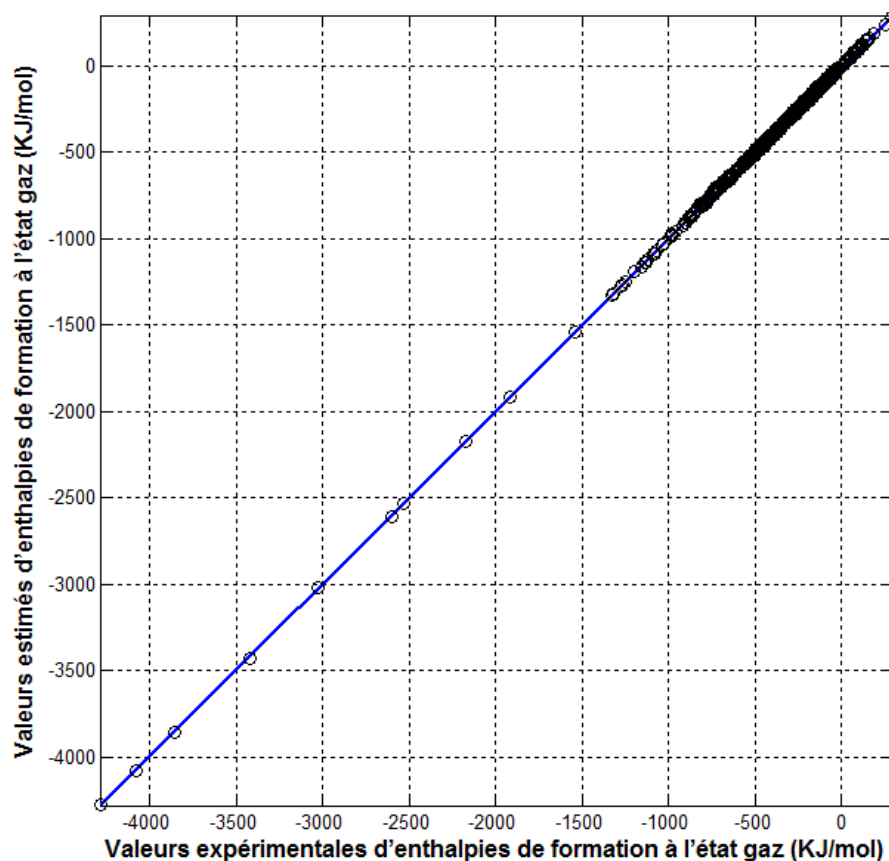


Figure 31: Corrélation entre les valeurs expérimentales et prédites par le réseau de neurones à l'état liquide

La Figure 32 montre la dispersion des erreurs autour de l'axe des zéro en fonction des valeurs des $\Delta_f H_{\text{Liq}}^\circ$ expérimentales. Les erreurs concernent les deux ensembles d'apprentissage et de test. La dispersion des déviations (EAM) sont compris entre 17 et 25 kJ/mol. D'après cette figure, nous constatons que plus de 97% de l'ensemble des molécules sont compris entre 10 et -10 kJ/mol. Pour les molécules ayant des enthalpies très fortement négatives (< -1000 kJ/mol) leurs déviations est comprises entre -11 et +14 kJ/mol.

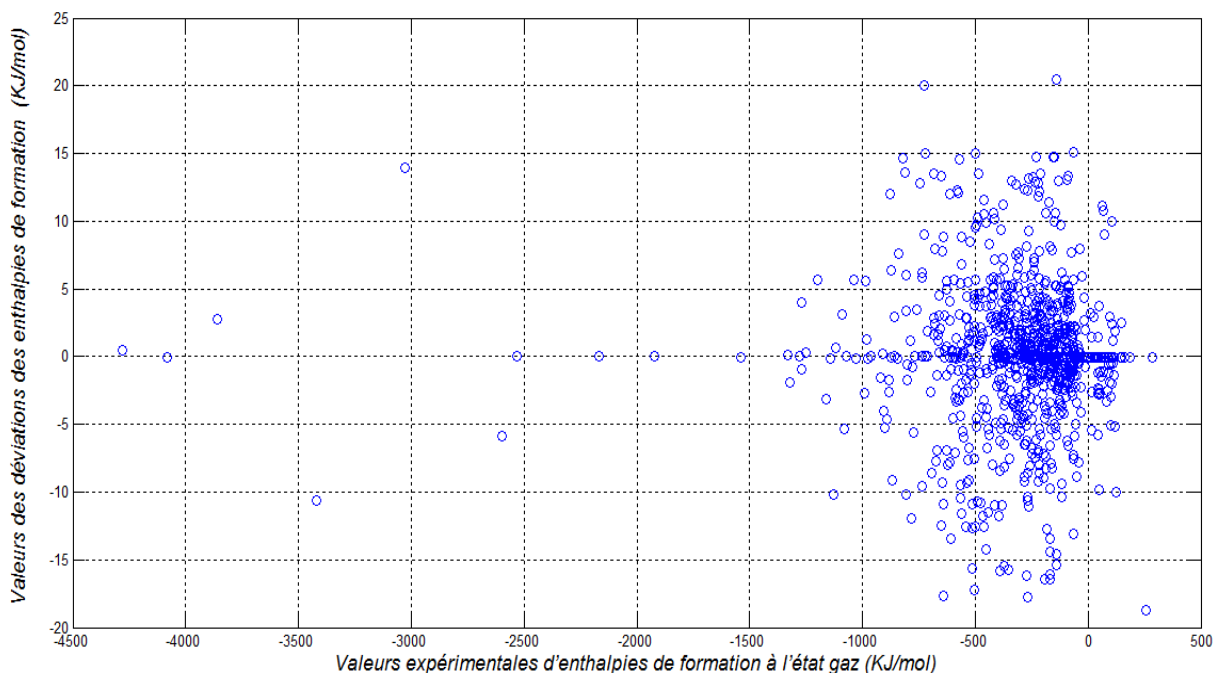


Figure 32 : Dispersion des erreurs absolues des 900 molécules à l'état liquide.

Afin d'afficher plus de détails sur les erreurs de prédiction $\Delta_f H_{\text{Liq}}^\circ$ à l'état liquide du modèle neuronal, le Tableau 50 est donné. Ce dernier affiche les différents indicateurs statistiques en fonction des classes des composés étudiés.

Classes des composés	kJ/mol					
	Nombre	EAM	ET	ERM	D_{max}	R^2
CH	279	3,01	3,75	4,81	18,74	0.99878
CHO	378	4,47	4,24	6,15	20,44	0.99961
CHN	65	2,34	2,7	3,56	13,33	0.99943
CHNO	31	2,54	3,2	4,05	11,06	0.99939
CHNOSX	82	3,58	3,91	5,28	14,78	0.99996
CHS et CHSO	65	4,22	4,47	6,12	15,06	0.99913

Tableau 50 : Résultats de prédiction d'enthalpie standard de formation en phase liquide.

Il a été constaté qu'il est difficile d'évaluer l'enthalpie standard de formation en phase liquide d'un certain nombre de composés comme les Hydrocarbures Aromatiques et Polycycliques. Des études sont réalisées pour comprendre ce problème. Il a été constaté que la méthode ne détecte pas correctement l'aromaticité des composés hétérocycliques et ne distingue pas entre les différents types de cycle. Ces constatations peuvent être la source majeure des erreurs détectées. En parallèle de cette analyse, il serait fort intéressant d'analyser de nouveau les valeurs expérimentales $\Delta_f H_{\text{Liq}}^\circ$ des molécules de la base de données

afin d'être tout à fait sûr de la justesse des valeurs expérimentales d'enthalpies standard de formation publiées.

Pour bien mettre en évidence les erreurs de prédiction des $\Delta_f H_{Liq}^\circ$, nous avançons le tableau suivant donnant les pourcentages des molécules ayant des erreurs de prédiction dans un des quatre intervalles affichés dans le tableau. Les résultats de ce tableau confirment les constatations et les remarques avancées précédemment.

Classes des composés	EAM kJ/mol (%)			
	0-10	10-15	15-20	>20
CH	92,11	5,38	2,51	0
CHO	86,77	11,11	1,85	0,26
CHN	96,92	3,08	0	0
CHNO	96,77	3,23	0	0
CHNOSX	90,24	9,76	0	0
CHSO	86,15	12,31	1,54	0
base totale	89,78	8,44	1,67	0,11

Tableau 51 : Classification des valeurs des EAM correspond au modèle neuronal à l'état liquide

Les performances du modèle neuronal proposé sont comparées à la fois avec celles de la méthode développée précédemment dans le chapitre II et avec celles des différentes méthodes trouvées dans la littérature. Parmi les meilleures méthodes et les plus robustes trouvées dans la littérature pour la prédiction des $\Delta_f H_{solid}^\circ$ sont celles de Verevkin et al. et de Keshavarz et al.

Les Tableau 52 et Tableau 53 résument les détails de cette comparaison dont tous les indicateurs statistiques sont affichés aussi bien dans le cas du modèle neuronal proposé que dans le cas des méthodes concurrentes et ceci pour chaque classe de famille chimique. De même, les erreurs de prédiction sont classées en quatre intervalles affichés dans le Tableau 53 où dans chaque intervalle nous affichons les pourcentages des molécules.

En examinant les Tableau 52 et Tableau 53, le lecteur peut aisément constater que le modèle neuronal proposé est plus performant que les méthodes concurrentes y compris la méthode proposée dans le chapitre III.

Classes des composés	Nombre de données				EAM KJ/mol				ET KJ/mol				D _{max} KJ/mol			
	MRNA	MCG	S.p.v	kash	MRNA	MCG	S.p.v	kash	MRNA	MCG	S.p.v	kash	MRNA	MCG	S.p.v	kash
CH	279	279	220	_	3.01	3.53	4.22	_	3.75	4.41	11.77	_	18,74	23,55	100.60	_
CHO	378	378	157	_	4.47	5.06	3.82	_	4.24	4.59	6.07	_	20,44	22,3	39.20	_
CHN	65	65	_	_	2.34	3.26	_	_	2.70	3.18	_	_	13,33	11,56	_	_
CHNO	31	31	_	299	2.54	2.63	_	25.70	3.20	3.29	_	32.69	11,06	11,09	_	87.10
CHNOSX	82	82	_	_	3.58	6.12	_	_	3.91	5.12	_	_	14,78	19,19	_	_
CHS et CHSO	65	65	_	_	4.22	4.50	_	_	4.47	4.48	_	_	15,06	15,61	_	_

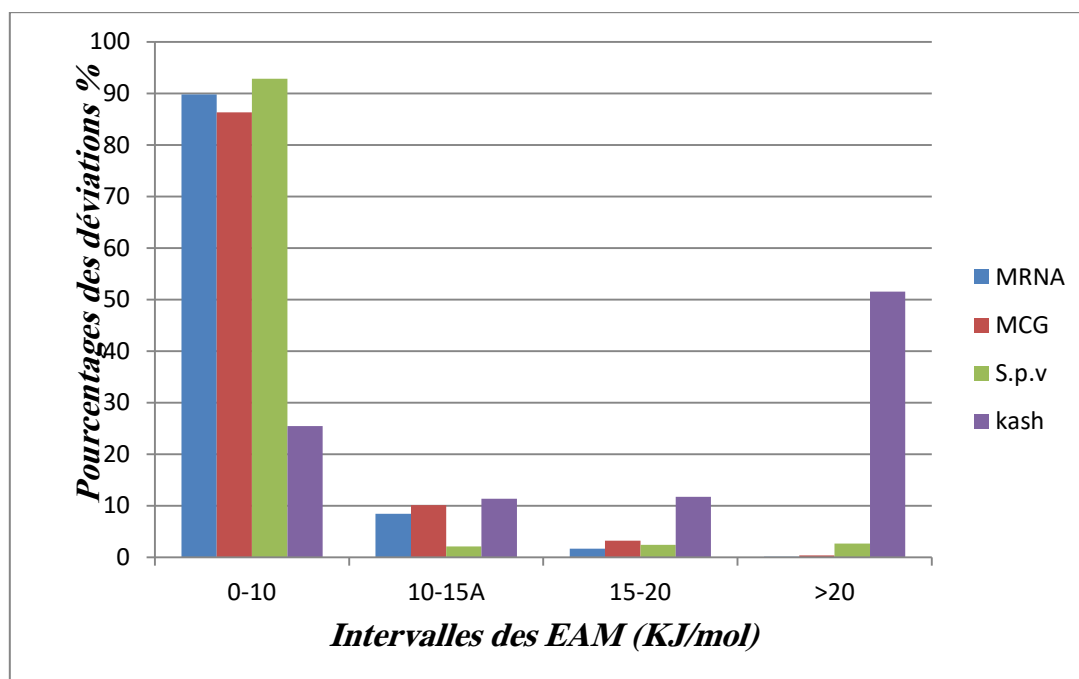
Tableau 52 : indicateurs statistiques d'évaluations des performances de modèle développé pour l'estimation d'enthalpie de formation en phase liquide pour les différentes classes des molécules étudiées

Classes des composés	EAM KJ/mol (%)																			
	Nombre de données				0 - 10				10 - 15				15 - 20				20 - >20			
	MRNA	MCG	S.p.v	kash	MRNA	MCG	S.p.v	kash	MRNA	MCG	S.p.v	Kash	MRNA	MCG	S.p.v	kash	MRNA	MCG	S.p.v	kash
CH	378	378	220	_	92,11	90,68	92,73	_	5,38	5,38	1,82	_	2,51	3,23	1,36	_	0	0,72	4,09	_
CHO	65	65	157	_	86,77	84,13	92,99	_	11,11	12,43	2,55	_	1,85	3,17	3,82	_	0,26	0,26	0,64	_
CHN	31	31	_	_	96,92	92,31	_	_	3,08	7,69	_	_	0	0	_	_	0	0	_	_
CHNO	82	82	_	299	96,77	96,77	_	25,42	3,23	3,23	_	11,37	0	0	_	11,71	0	0	_	51,51
CHNOSX	65	65	_	_	90,24	75,61	_	_	9,76	15,85	_	_	0	8,54	_	_	0	0	_	_
CHS et CHSO	900	900	_	_	86,15	83,08	_	_	12,31	15,38	_	_	1,54	1,54	_	_	0	0	_	_
Totale	900	900	377	299	89,78	86,33	92,84	25,42	8,44	10,11	2,12	11,37	1,67	3,22	2,39	11,71	0,11	0,33	2,65	51,51

MRNA : méthode des réseaux de neurones artificiels. MCG : méthode de contribution de groupe développée précédemment. S.P.V : méthode de S.P.Vervkin. Kash : méthode de M.H.Keshavarz.

Tableau 53 : Intervalles limitant les erreurs absolues moyennes de modèle développé

La figure suivante donne une représentation globale du Tableau 53. Sur cette figure nous constatons que pour le premiers intervalles ; 0-5 KJ/mol , le modèle proposé affiche le plus de pourcentage de molécules avec les erreurs de prédiction faibles par rapport aux autres modèles ce qui confirme les constatations avancées précédemment .



MRNA : méthode des réseaux de neurones artificiels. **MCG** : méthode de contribution de groupe développée précédemment. **S.P.V** : méthode de S.P.Vervkin. **Kash** : méthode de M.H.Keshavarz.

Figure 33: Classification des valeurs des EAM correspond aut modèle neuronal à l'état liquide.

V.4.3 Résultats, discussion et comparaison à l'état gazeux

Les enthalpies de formation des molécules à l'état gazeux des deux ensembles d'apprentissage et de test sont prédites en utilisant le modèle neuronal développé précédemment dans la Section V.3 . Tous les indicateurs des performances statistiques du modèle développé sont donnés dans le tableau suivant.

Base des données	Nombre	KJ/mol				
		EAM	ET	ERM	D _{max}	R ²
Apprentissage	600	2.55	2.62	3.6528	12.5	0.99980
Test	150	3.66	3.88	5.3256	25.2	0.99937
Totale	750	2.77	2.94	4.0431	25.2	0.99974

Tableau 54 : Performances statistiques du modèle neuronal pour la prédiction des $\Delta_f H_{gaz}^\circ$.

Le Tableau 54 affiche des résultats très satisfaisants et encourageants avec des indicateurs statistiques très faibles. L'erreur absolue moyenne ne dépasse pas les 2.77 *kJ/mol* avec un faible écart-type de 2.94 *kJ/mol*.

Ces résultats sont confirmés par le Tableau 55 dont les performances statistiques du modèle neuronal suivant les classes chimiques sont données. Nous constatons que les résultats sont toujours très satisfaisants pour les quatre classes chimiques.

	base de données	KJ/mol				
		EAM	ET	RQM	R ²	D _{max}
CH	238	2.55	2.49	3.5569	0.99976	12.5000
CHO	155	3.10	3.42	4.6083	0.99942	25.2000
CHN	138	3.48	3.40	4.8562	0.99902	17.6200
CHNO	219	2.33	2.63	3.5129	0.99975	11.9300

Tableau 55 : Performances statistiques du modèle neuronal pour la prédiction des $\Delta_f H_{gaz}^\circ$ suivant les classes chimiques.

La Figure 34 donne une visualisation de la bonne régression du modèle et l'affinité entre les valeurs des enthalpies de formations expérimentales et celles prédites par le modèle.

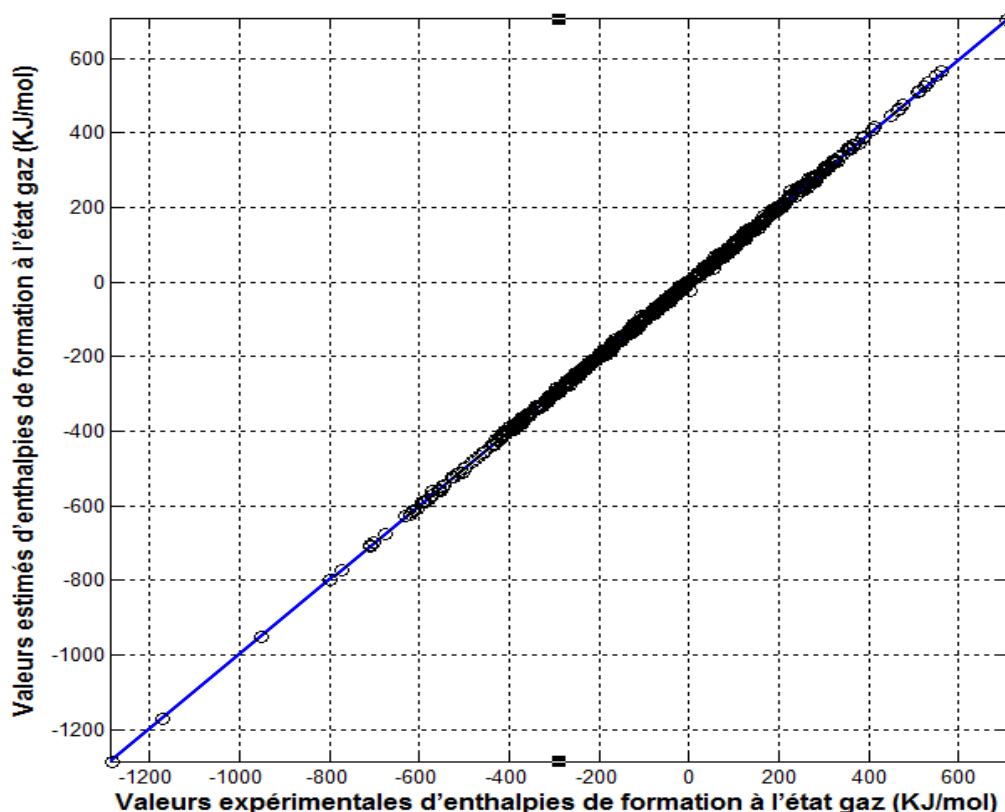


Figure 34: Corrélation entre les valeurs expérimentales et prédites par le réseau de neurones à l'état gazeux

Un très bon coefficient de détermination de $R^2 = 0,99914$ est affiché par le modèle neuronal pour la totalité des molécules. Il est à noter que, sauf pour quelques valeurs prédites, la plupart des données ont un bon degré de précision.

La figure suivante donne une présentation des erreurs de prédiction en fonction de leurs valeurs expérimentales. Sur cette figure nous constatons que les erreurs sont comprises entre 10 et -10 kJ/mol, excepté pour quelques molécules ou leurs déviations ne dépassent pas 15 kJ/mol et avec trois valeurs aberrantes entre 15 et 25 kJ/mol.

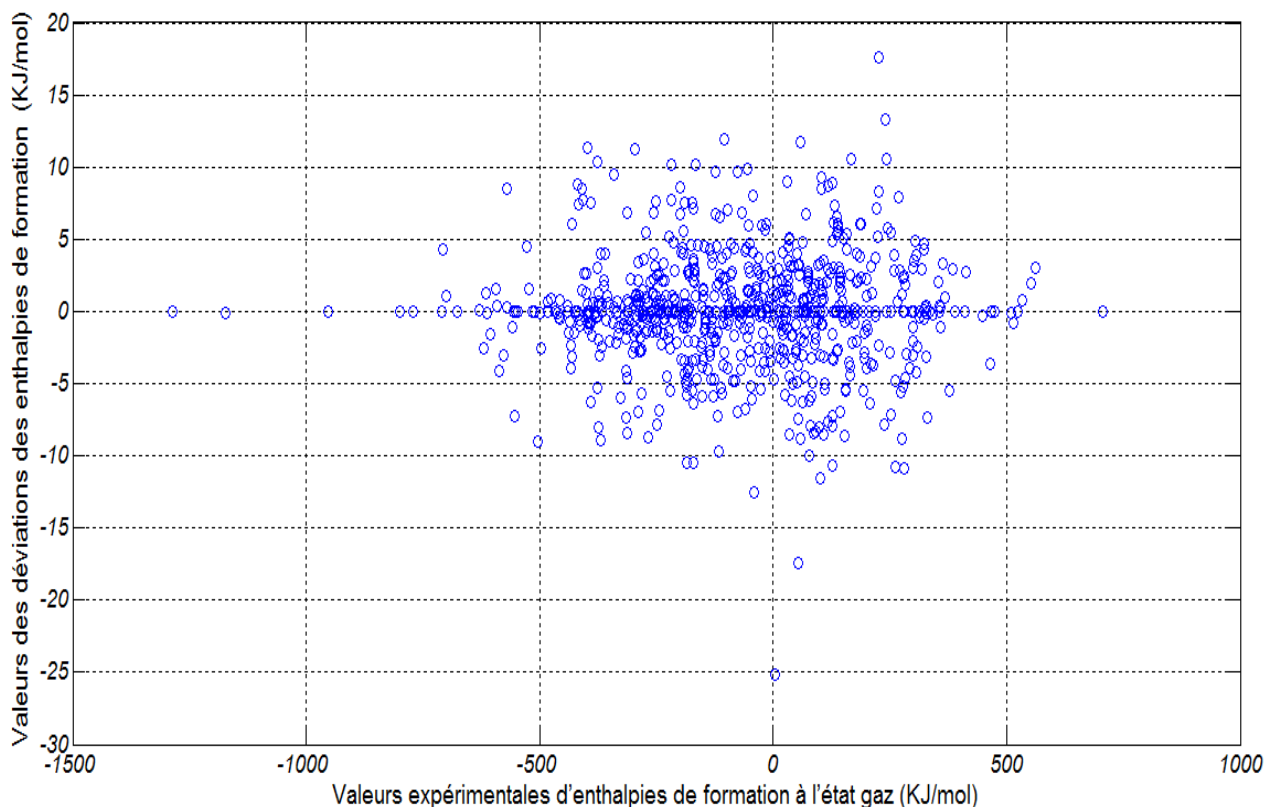


Figure 35 : Dispersion d'erreur absolue des 750 molécules à l'état gazeux.

Pour plus de détail sur les résultats des prédictions, le tableau suivant affiche le pourcentage des composés en fonction de leur erreur de prédiction de $\Delta_f H_{gaz}^\circ$ suivant quatre intervalles d'erreurs. Nous constatons que pour plus de 82.83% des molécules de la base d'apprentissage leur enthalpie de formation est prédite avec moins de 5 kJ/mol et 76.66% des molécules pour de la base de test.

	EAM KJ/mol (%)			
	0-5	5-10	10-15	>15
base d'apprentissage	82.83	16.00	1.16	0.00
base de teste	76.66	14.66	6.66	5.32
base totale	81.60	15.73	2.26	0.40

Tableau 56 : Classification des valeurs des EAM correspond au modèle neuronal à l'état gaz

Les résultats du Tableau 56 sont détaillés en fonction des familles chimiques étudiées dans le Tableau 57.

	EAM KJ/mol (%)			
	0-5	5-10	10-15	>15
CH	83,61	14,71	1,68	0,00
CHO	78,71	18,06	2,58	0,65
CHN	78,26	15,94	4,35	1,45
CHNO	83,56	15,07	1,37	0,00
base totale	81,60	15,73	2,27	0,40

Tableau 57 : Classification des erreurs de prédiction des $\Delta_f H_{gaz}^\circ$ en fonction des familles chimiques.

Dans le but de valider correctement le modèle neuronal proposé, ce dernier est comparé à la fois au modèle linéaire proposé dans le chapitre IV et au modèle de Benson qui est considéré comme un modèle très robuste et très utilisé dans la littérature pour la prédiction des $\Delta_f H_{gaz}^\circ$ à l'état gazeux.

Les résultats de comparaison sont affichés dans le tableau ci-dessous.

Méthodes	Base de données	EAM	ET	D _{max}
MRNA	750	2.77	2.94	25.2000
NMCG	750	3,57	3,31	18,53
M. Benson	799	4.10	7.76	56.60

MRNA : méthode de réseaux de neurones artificiels. **NMCG** : méthode de contribution de groupe développée précédemment. **Benson**: méthode de Benson.

Tableau 58 : Performances statistiques du modèle neuronal pour la prédiction des $\Delta_f H_{Gaz}^\circ$

En examinant ce tableau, nous constatons que le réseau de neurones proposé est plus performant que celui proposé dans le chapitre IV et du modèle de Benson. Tous les indicateurs statistiques (EAM, ET et EAM_{max}) du nouveau modèle sont tous nettement inférieurs à ceux des autres méthodes, exception faite pour la déviation maximale (EAM_{max}). En effet, la EAM_{max} la déviation maximale du modèle neuronal est supérieur à la méthode proposée dans le chapitre IV. Après avoir réexaminé les valeurs expérimentales de la base de données nous avons constaté que cela peut être une valeur aberrante.

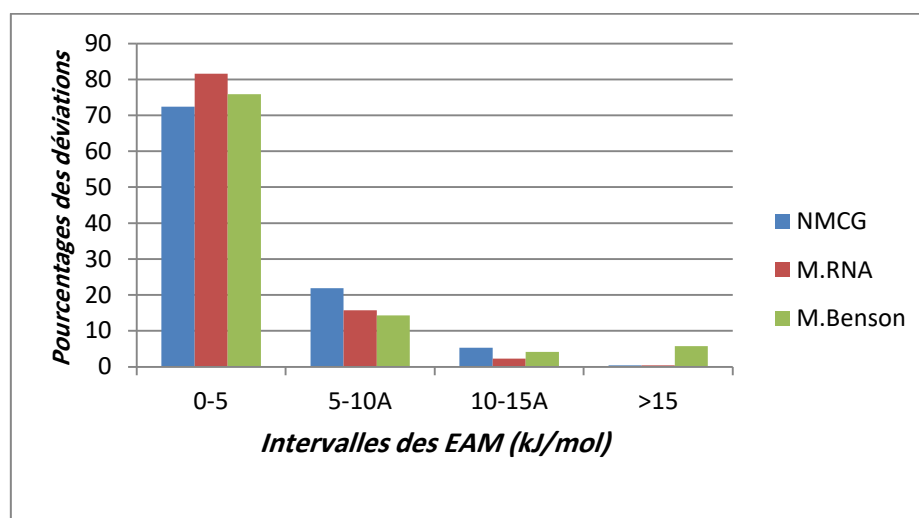
Dans le Tableau 59, les déviations (EAM) des trois méthodes sont regroupées dans quatre intervalles, entre 0-5, 5-10, 10-15 et plus de 15 kJ/mol. Cette étude est faite pour comparer les performances de prédictions des trois méthodes. En effet, la méthode la plus précise est celle où la majorité de ses déviations appartiennent aux deux premiers intervalles (faibles déviations).

Méthode	EAM KJ/mol (%)			
	0-5	5-10A	10-15A	>15
M.RNA	81,60	15,73	2,27	0,40
NMCG	72,40	21,87	5,33	0,40
M. Benson	75,84	14,27	4,13	5,76

MRNA : méthode de réseaux de neurones artificiels. **MCG** : méthode de contribution de groupe développée précédemment. **Benson**: méthode de Benson

Tableau 59 : Intervalles limitant les erreurs absolues moyennes de prédiction de l'enthalpie de formation à l'état gaz à base des réseaux de neurones artificiel.

La figure suivante donne une représentation des valeurs de ce dernier tableau. Cette figure montre que pour plus de 80% des composés étudiés l'enthalpie de formation est prédite avec une erreur entre 0 et 5 kJ/mol. Le pourcentage affiché par le réseau de neurone est le meilleur comparant aux autres méthodes.



MRNA : méthode de réseaux de neurones artificiels. **MCG** : méthode de contribution de groupe développée précédemment. **Benson**: méthode de Benson

Figure 36: Classification des valeurs des EAM correspond aut modèle neuronal à l'état gaz

V.5 Conclusion

Les réseaux de neurone artificiels sont des techniques très puissantes pour la prédiction des propriétés physico-chimiques des composés organiques. Dans ce chapitre et pour chaque état de la matière, solide, liquide ou gaz, un réseau de neurones basé sur la technique de contributions de groupes d'ordre trois est développé. Ces réseaux sont de type perceptron multicouche (PMC) avec une architecture neuronale non bouclés dotés de trois couches cachées, avec des fonctions de transfert symétrique sigmoïde.

La prédiction des enthalpies de formation à été réalisée en utilisant uniquement la structure moléculaire d'un composé en question sans faire recours à d'autres propriétés physico-chimiques. L'ensemble de données est divisé en sous-ensemble d'apprentissage et de test en utilisant une nouvelle technique de division semi-aléatoire.

Les modèles proposés sont correctement testés, validés et comparés avec d'autres modèles concurrents, et affichent des meilleurs résultats par rapport à ceux affichés par les méthodes concurrentes.

Chapitre VI: Calcul ab-initio des enthalpies de formation à l'état gazeu

VI.1 Introduction

Aujourd'hui, avec le développement des calculateurs et outils numériques, des calculs quantiques permettant d'explorer les propriétés électroniques, structurales et dynamiques de la matière sans faire recours à la connaissance expérimentale ont vu un développement croissant. Ainsi, il est possible de réaliser des calculs ab initio avec des précisions grandissantes et pour des systèmes de plus en plus larges. Dans la littérature scientifique, les travaux utilisant le calcul quantique ab initio pour la prédiction des enthalpies de formation sont de plus en plus nombreux.

En parallèle des méthodes de contributions de groupes, ce chapitre présente une autre approche de prédiction des enthalpies de formation à l'état de gaz basée sur un calcul quantique ab initio d'énergie moléculaire. Le calcul a porté sur un échantillon plus réduit de 30 molécules comportant au moins un cycle et allant de C3 jusqu'à C13. Ces molécules ont été retenues car elles présentent quelques problèmes avec les techniques de contributions de groupes.

Ce chapitre est avancé dans un but de comparer les méthodes de contributions de groupes avec les méthodes ab initio et afin de savoir quelle sera la place des méthodes ab initio dans le développement des modèles d'ingénieur du futur pour la prédiction des enthalpies de formation.

VI.2 Mise en œuvre des calculs

La procédure des calculs ab-initio peut être divisée en quatre phases. La première consiste à construire le fichier « input » ou le fichier d'entrée, puis les paramètres d'entrée, suivie par l'étude du fichier « output » ou fichier de sortie.

Gaussien 09W (G09) est un programme de chimie computationnelle qui fonctionne sur tous les Windows PC modernes. C'est un logiciel très puissant pour réaliser des calculs quantiques. Il peut être utilisé dans plusieurs domaines comme la chimie, la physique et la biologie. Le fonctionnement de ce logiciel est basé sur deux fichiers important, l'input et l'output [68].

VI.3 Les paramètres d'entrée

VI.3.1 Fichier d'entrée

Cette section se compose habituellement des atomes et des coordonnées cartésiennes ou Z-matrice. Il est possible de calculer et l'entrer les coordonnées manuellement, mais il est beaucoup plus facile de les obtenir par des logiciels tels que Avogadro ou ChemBio3D Ultra. L'intérêt d'utiliser un logiciel est de générer automatiquement des fichiers d'entrée de Gaussian.

Une autre façon pour générer le fichier d'entrée, consiste à utiliser un programme associé au le programme G09, c'est l'interface graphique GaussView. La Figure 37 donne un exemple de fichier d'entrée en utilisant le programme G09. Les fichiers d'entrée dans le programme G09 peuvent avoir les extensions suivantes:

1. Fichier d'entrée gaussien: .gjf
2. Fichier de contrôle de lot: .bcf
3. Fichier d'entrée Avogadro: .com
4. Fichier texte: .txt

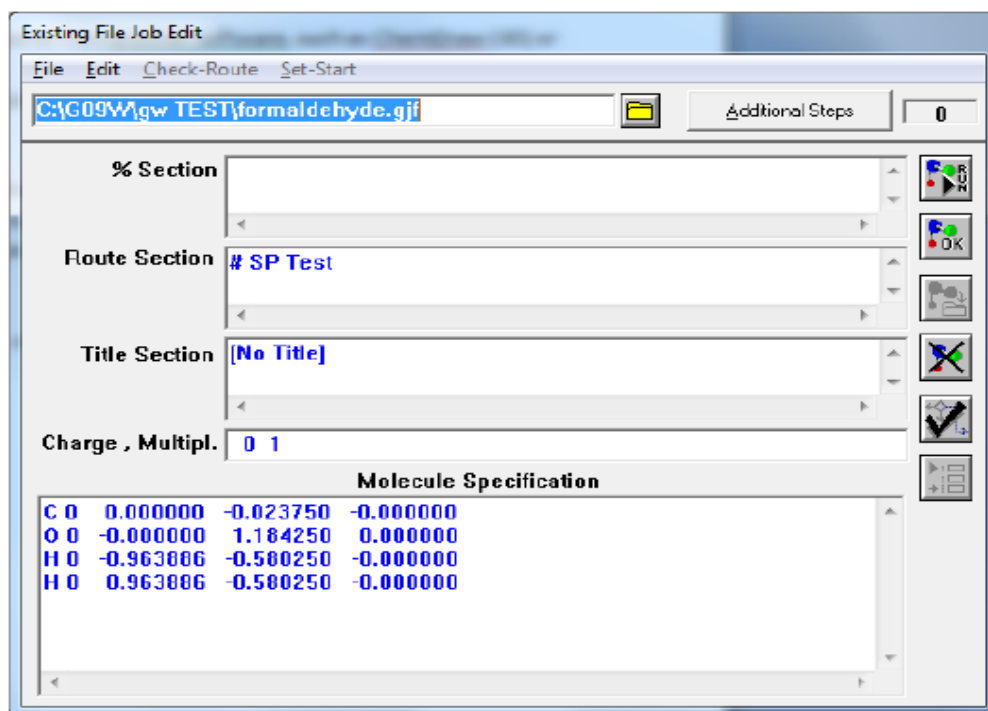


Figure 37: Fenêtre de commande pour générer des paramètres d'entrée sur le G09

Dans cette étude, nous avons introduit une autre façon pour construire le fichier d'entrée ; c'est d'utiliser un autre logiciel qui contient des extensions des autres programmes, le logiciel utilisé est Avogadro. Le fichier d'entrée contient les informations sur les tâches à effectuer et une description sous forme matricielle des molécules traitées. Le tableau 60 donne un exemple illustratif a un fichier d'entrée correspondant à la tâche à effectuer pour le calcul de l'enthalpie de formation à l'état de gaz de la molécule de « cyclopropene ».

```

Fichier  Edition  Format  Affichage  ?
# opt freq b3lyp/6-31g(d,p) maxdisk=4GB
1678-92-8
Title
O 1
C      -0.08013000   -0.38191000    0.35383000
C      1.42599000   -0.31267000    0.55877000
C      2.05186000    0.79066000   -0.29825000
C      3.58482000    0.89994000   -0.14365000
C      4.34753000   -0.33702000   -0.64913000
C      4.29144000   -0.48513000   -2.16880000
C      4.78984000    0.77372000   -2.87330000
C      4.07613000    2.03108000   -2.38430000
C      4.11925000    2.15385000   -0.86108000
H     -0.51309000   -1.16427000    0.98478000
H     -0.32037000   -0.61661000   -0.68862000
H     -0.55825000    0.56816000    0.61131000
H      1.85107000   -1.28887000    0.30802000
H      1.63885000   -0.12439000    1.61772000
H      1.60047000    1.74850000   -0.00880000
H      1.77879000    0.62811000   -1.34718000
H      3.80052000    1.01485000    0.92755000
H      3.97774000   -1.25187000   -0.17507000
H      5.39878000   -0.24749000   -0.34629000
H      4.90603000   -1.34010000   -2.47475000
H      3.26748000   -0.70748000   -2.48768000
H      5.86713000    0.88055000   -2.70042000
H      4.65139000    0.66912000   -3.95592000
H      4.54566000    2.91398000   -2.83428000
H      3.03655000    2.02162000   -2.72934000
H      5.15835000    2.32255000   -0.55112000
H      3.55564000    3.04097000   -0.54766000

```

Tableau 60 : Exemple de fichier d'entrée Gaussian

VI.3.2 Les modèles de calcul

Les modèles mathématiques utilisés pour faire les calculs sont appelés FEM (Finite Element Method) et la méthode Simplex. Par l'utilisation des matrices, cette méthode découpe l'espace de dimension N en petits sous-systèmes qui peuvent être décrits par N équations linéaires. Ces équations peuvent être résolues dès que l'une d'entre eux est résolue. Donc, il faut faire une supposition de la solution par une équation et ensuite, résoudre de manière récursive toutes les autres. Une fois que toutes les solutions sont obtenues, l'estimation initiale peut être modifiée et les calculs répétés. Ce processus est exécuté jusqu'à ce que la nouvelle solution génère le même résultat comme dans l'itération précédente. On appelle cela la convergence.

Puisque l'estimation initiale peut être très loin de la valeur réelle, plusieurs milliers d'itérations sont souvent nécessaires, et cela peut justifier énormément de temps nécessaire pour réaliser le calcul ainsi que la nécessité d'avoir des machines puissantes. Le jeu de base du modèle théorique sélectionné influe aussi sur les calculs.

Le calcul s'arrête dès que le résultat converge, mais la convergence ne signifie pas que le système a atteint son minimum. Il est très probable que le minimum fourni en sortie est en fait seulement un point sur la surface de potentiel. Mais le programme ne sera pas au courant de cela. L'utilisateur doit être prudent avec cela, et toujours effectuer un contrôle

de la stabilité du système en perturbant le système «stable» et recalculant le minimum. Si la sortie est la même, on peut supposer que l'énergie obtenue est le minimum global [68].

VI.3.3 Choix de modèle chimique

VI.3.3.a Niveau de théorie

Dans la littérature scientifique, il existe plusieurs niveaux de théorie permettant une application numérique des calculs, et qui correspond à différents niveaux d'approximation des interactions entre particules. Principalement, trois niveaux de théorie d'approximation sont distingués à savoir : Théorie de Hartree-Fock [46], Théorie de corrélation d'interaction électronique [69], Théorie de fonctionnelle de la densité (Density Functional Theory, DFT) [70].

Les méthodes de DFT font actuellement l'objet de nombreux développements, et ils sont de plus en plus populaires vu que les résultats obtenus sont comparables à ceux obtenus en utilisant d'autres méthodes, où le temps de calcul est énormément réduit. Nous citons quelques exemples de méthodes de DFT les plus populaires telles que B3LYP, LSDA, BPV86. Parmi ces méthodes, le modèle B3LYP représente 80 % d'utilisation sur la période 1990-2006 [70]. Dans notre travail nous avons choisi d'utiliser le modèle B3LYP vu son degré de précision.

VI.3.3.b Jeu de fonction de base

Un jeu de base est un ensemble de fonctions d'onde qui décrit la forme des orbitales atomiques (AOS). Les orbitales moléculaires (OM) sont calculés en utilisant le modèle théorique chois en combinant linéairement les AOS (CLOA). Ce n'est pas une nécessité pour tous les modèles d'introduire un jeu de base dans le calcul. Par exemple, les modèles PMn (n = 3, ..., 6) utilisent un ensemble de base interne, tandis que ab initio ou la théorie fonctionnelle de la densité nécessitent une spécification de jeu de base. Le niveau d'approximation de calcul est directement lié à l'ensemble de la base utilisée. Le choix à faire est un compromis entre la précision des résultats et le temps de calcul.

VI.3.4 Type de calculs

Gaussian 09 est un logiciel puissant qui peut effectuer une multitude de calculs sur une molécule donnée. Voici une courte liste des types les plus utiles d'emplois.

VI.3.4.a Optimisation de la géométrie

L'optimisation de la géométrie est la procédure qui tente de trouver la configuration d'énergie minimale de la molécule. Elle consiste à calculer la fonction d'onde et l'énergie correspond à une géométrie de départ et qui procède ensuite à la recherche d'une nouvelle géométrie avec une énergie plus faible. Cette opération est répétée jusqu'à ce que la géométrie de l'énergie la plus basse soit trouvée. Pendant l'optimisation, les forces exercées sur chaque atome sont définies, par l'évaluation des gradients (première dérivée) de l'énergie par rapport aux positions des atomes.

Des algorithmes sophistiqués sont ensuite utilisés à chaque étape pour sélectionner une nouvelle géométrie, visant à la convergence rapide de la géométrie avec l'énergie la plus basse. Dans la géométrie finale correspondant à l'énergie minimale, la force sur chaque atome est égale à zéro.

Il est important de reconnaître que cette procédure ne trouvera pas nécessairement le minimum global, à savoir la géométrie de l'énergie la plus basse. Naturellement, une recherche successive pour un minimum trouve un minimum local, mais pas nécessairement le plus bas. En fait, la procédure d'optimisation s'arrête quand elle trouve un point fixe, à savoir un point où les forces sur les atomes sont nulles, et cela peut être aussi un point (à savoir une structure de transition) selle.

Malheureusement, l'optimisation géométrique d'Avogadro, ne peut pas être faite entièrement en confiance, donc pour tout travail à faire, nous devons optimiser notre molécule avant d'effectuer tout calcul. Il est important d'optimiser la géométrie du logiciel de dessin aussi dans Avogadro, avant de générer les coordonnées d'entrée G09.

VI.3.4.b Fréquences et thermochimie

Pour effectuer l'opération « fréquence » dans le logiciel G09, on introduit le mot-clé « Freq » pour calculer les vibrations de la molécule en question, ainsi que d'autres paramètres à choisir de les inclure ou de les effacer de la sortie. Chaque analyse vibrationnelle comprend également une section de la thermochimie par défaut. L'affectation de l'opération « fréquence » peut donner les paramètres thermodynamiques suivants :

1. *Température*
2. *Pression*
3. *Isotopes utilisés*
4. *Masse moléculaire*

5. *Énergie thermique*
6. *Capacité thermique molaire à volume constant (CV)*
7. *Entropie (S)*
8. *Énergie libre (somme des énergies libre électroniques et thermiques)*
9. *Enthalpie (somme des enthalpies électroniques et thermiques)*

VI.3.4.c Optimisation géométrique avec calcul des fréquences

Avant d'entamer les calculs de prédiction d'enthalpie de formation des composés organiques choisis, il faut optimiser la molécule. Cette opération consiste à introduire le fichier d'entrée puis de lancer la procédure d'optimisation par choisir l'option «optimization» parmi les choix donnés dans «job type». Après avoir optimisé la structure, on doit lancer la deuxième opération pour avoir les paramètres thermodynamiques en utilisant l'option «frequency». À noter qu'il faut utiliser la même méthode et le même jeu de base pour l'optimisation et le calcul des fréquences.

Pour l'utilisation d'un logiciel de calcul quantique, deux paramètres sont pris en considération : le temps de calcul et la taille des fichiers d'entrée et de sortie. Durant l'exécution consécutive des deux étapes d'optimisation et de calcul des fréquences, l'un après l'autre des fichiers d'entée et de sortie prennent un grand espace (dans la mémoire de PC) pour chaque opération même pour le temps de calcul qui sera énorme puisque les deux opérations sont réalisées l'une après l'autre.

Pour cela dans notre travail, nous avons réalisé le choix « Optimisation +Fréquence » dans l'interface du logiciel. Ce choix consiste à réaliser en parallèle l'optimisation géométrique de la molécule en même temps que le calcul de fréquence dans une même opération. Cette technique permet d'optimiser le temps de calcul avec des fichiers occupants moins d'espace en termes de mémoire.

1. La stabilité

La stabilité de la molécule peut être facilement contrôlée en vérifiant s'il existe des fréquences imaginaires (négatives). Les fréquences imaginaires indiquent une instabilité de la géométrie moléculaire.

2. Fréquences imaginaires

Les fréquences négatives indiquent une instabilité dans la molécule. Une molécule stable ne devrait pas avoir des fréquences imaginaires, un état de transition devrait en avoir un (1er ordre point selle), alors que plus d'une fréquence imaginaire signifie qu'il y a un problème avec la géométrie de la molécule.

VI.4 Calcul de l'enthalpie de formation à 298,15°C

Après avoir introduit le fichier d'entrée dans le logiciel G09 et terminé les calculs quantiques (apparition de fichier de sortie dans G09), la première tâche consiste à confirmer que nous avons atteint la convergence par la vérification des fréquences. Si l'un des fréquences calculées est négative (fréquence imaginaire) cela signifie que nous n'avons pas trouvé l'énergie correspondant à la conformation la plus stable et que cette énergie est pour un minimum local au lieu du minimum global.

Le fichier de sortie fourni par G09 donne les valeurs de l'enthalpie de formation des composés par rapport à l'état de référence ab-initio qui est constitué de noyaux atomiques et des électrons séparés, sous pression nulle et à la température de 0 K. Cette valeur s'exprime en Hartree par molécule (1 Hartree par molécule = 2625,50 KJ/mol). Elle est toujours négative et peut atteindre plusieurs milliers de Hartree par molécules, soit plusieurs millions de kilojoules par mole.

```

Fichier  Edition  Format  Affichage  ?
-----
- Thermochemistry -
-----
Temperature 298.150 Kelvin. Pressure 1.00000 Atm.
Atom 1 has atomic number 6 and mass 12.00000
Atom 2 has atomic number 6 and mass 12.00000
Atom 3 has atomic number 6 and mass 12.00000
Atom 4 has atomic number 1 and mass 1.00783
Atom 5 has atomic number 1 and mass 1.00783
Atom 6 has atomic number 1 and mass 1.00783
Atom 7 has atomic number 1 and mass 1.00783
Molecular mass: 40.03130 amu.
Principal axes and moments of inertia in atomic units:
      1          2          3
Eigenvalues -- 59.90280 82.56879 130.48536
      X          Y          Z
      1.00000 0.00000 0.00000
      0.00000 1.00000 0.00000
      0.00000 0.00000 1.00000
This molecule is an asymmetric top.
Rotational symmetry number 1.
Rotational temperatures (Kelvin)      1.44591      1.04899      0.66378
Rotational constants (GHZ):          30.12783      21.85743      13.83099
Zero-point vibrational energy        147509.2 (Joules/Mol)
                                       35.25554 (Kcal/Mol)
warning -- explicit consideration of 1 degrees of freedom as
          vibrations may cause significant error
Vibrational temperatures:      869.72 1146.07 1241.40 1346.27 1467.85
(kelvin)      1502.20 1555.43 1608.72 1688.42 2215.75
              2520.29 4383.30 4473.28 4699.04 4764.76

Zero-point correction=                0.056183 (Hartree/Particle)
Thermal correction to Energy=          0.059502
Thermal correction to Enthalpy=        0.060446
Thermal correction to Gibbs Free Energy= 0.032238
Sum of electronic and zero-point Energies= -116.569449
Sum of electronic and thermal Energies= -116.566131
Sum of electronic and thermal Enthalpies= -116.565187
Sum of electronic and thermal Free Energies= -116.593395

```

Tableau 61 : Exemple de fichier de sortie Gaussian 09

Le passage de l'état de référence ab-initio à l'état de référence thermochimique consiste de soustraire de l'enthalpie obtenue par ab initio pour la molécule étudiée l'enthalpie obtenue de manière équivalente pour ses constituants élémentaires, puis de rajouter le terme permettant de passer d'un état de référence monoatomique à un état de référence moléculaire [62]. Alors il faut calculer les paramètres atomiques C_i puis le calcul de l'enthalpie de formation à l'état standard dans la thermochimie, à la pression standard $P^\circ=101325$ Pa et la température $T= 298,15$ K. Ce calcul est donné par l'équation suivante :

$$\Delta_f H^\circ = H^{Al} - \sum v_i (H_i^{Al} - \Delta_f H_i^\circ) = H^{Al} - \sum v_i C_i \quad (71)$$

Ou

H_i^{Al} : Enthalpie ab-initio de l'élément i

$\Delta_f H_i^\circ$: Enthalpie standard de formation à l'état gaz parfait monoatomique

v_i : Coefficient stœchiométrique

C_i : Paramètre atomique

Les paramètres atomiques peuvent être définis par des calculs ab-initio ou de les déterminer en utilisant les enthalpies standard de formation à l'état de gaz (gaz parfait) monoatomique trouvées dans la littérature. Une autre technique consiste à ajuster ces paramètres sur des données expérimentales par minimisation de la fonction suivante.

$$J = \sum \left[\Delta_f H_j^\circ - \left(H_j^{Al} - \sum_i v_{ij} C_i \right) \right]^2 \quad (72)$$

le tableau suivant donne les valeurs des paramètres atomiques du carbone et de l'hydrogène déterminés par des enthalpies de formation des atomes et ceux qui sont ajustés selon la méthode des moindres carrés. [62].

A_i	Déterminés	Ajustés
C	37.773922	38.113836
H	0.4979950	0.5825820

Tableau 62 : Résultat d'optimisation des paramètres atomiques.

Dans le cadre de notre thèse, des essais ont été réalisés pour calculer l'enthalpie de formation à l'état de gaz dans les conditions standard de pression et de température, en utilisant les deux techniques de calcul des paramètres atomiques ; purement ab initio et

ajustés sur des données expérimentales. Les meilleurs résultats trouvés sont ceux par l'utilisation des paramètres ajustés.

VI.5 Résultats et discussions

Le calcul a porté sur un échantillon plus réduit de 30 molécules à l'état gazeux comportant au moins un cycle et allant de C3 jusqu'à C13. Ces molécules ont été retenues car elles présentent quelques problèmes avec les techniques de contributions de groupes.

Après avoir introduit les 30 molécules dans Gaussian 09, et l'obtention des enthalpies de formation calculées en Hartree par molécule, on change la référence pour avoir l'enthalpie de formation standard à 101325Pa et 298,15K.

Pour analyser les résultats trouvés, les différents indicateurs statistiques (erreurs moyennes absolues, les écarts types,...) sont calculés. Les résultats trouvés sont présentés dans le tableau suivant. Dans le même tableau les déviations de la prédiction d'enthalpie de formation utilisant la méthode de contributions de groupes développée dans le chapitre précédent pour la phase gaz sont ajoutées.

base de données	<i>EAM</i>	<i>ET</i>	<i>EQM</i>	<i>R</i> ²	<i>D</i> _{MAX}
DFT	14.22	12.34	19.65	0.98787	42,38
MCG	19.46	26.19	32.27	0.97519	87.04

DFT : méthode de théorie fonctionnelle de la densité ; *MCG* : méthode de contribution de groupe

Tableau 63 : Résultats de prédiction d'enthalpie standard de formation pour les 30 molécules en phase gaz suivant la DFT et MCG.

Ces indicateurs statistiques sont recalculés pour évaluer la qualité d'estimation de la méthode de contributions de groupes en phase gaz par rapport aux résultats trouvés lors de l'utilisation de la DFT. Les indicateurs statistiques à savoir *EAM*, *ET*, *EQM* et *R*² pour la DFT sont 14.22, 12.34, 19.65 kJ/mol et 0.98787 respectivement.

Pour plus de résultats, l'annexe D donne pour chaque molécule les valeurs expérimentales (kJ/mol), les valeurs calculées par Gaussian 09 en Hartree par molécule et en kJ/mol, les valeurs estimées en utilisant la méthode de contributions de groupes développée précédemment, et les différentes déviations (*EAM*).

La figure 38 affiche une affinité entre les valeurs des enthalpies de formations expérimentales et celles calculées par la méthode ab-initio. Sur cette figure, nous constatons une régression entre les valeurs expérimentales et les valeurs calculées par

la méthode ab-initio quasi parfaite, ce qui revient à dire que le calcul est fortement lié aux valeurs expérimentales. En effet, nous avons obtenu un coefficient de corrélation linéaire $R = 0.98787$.

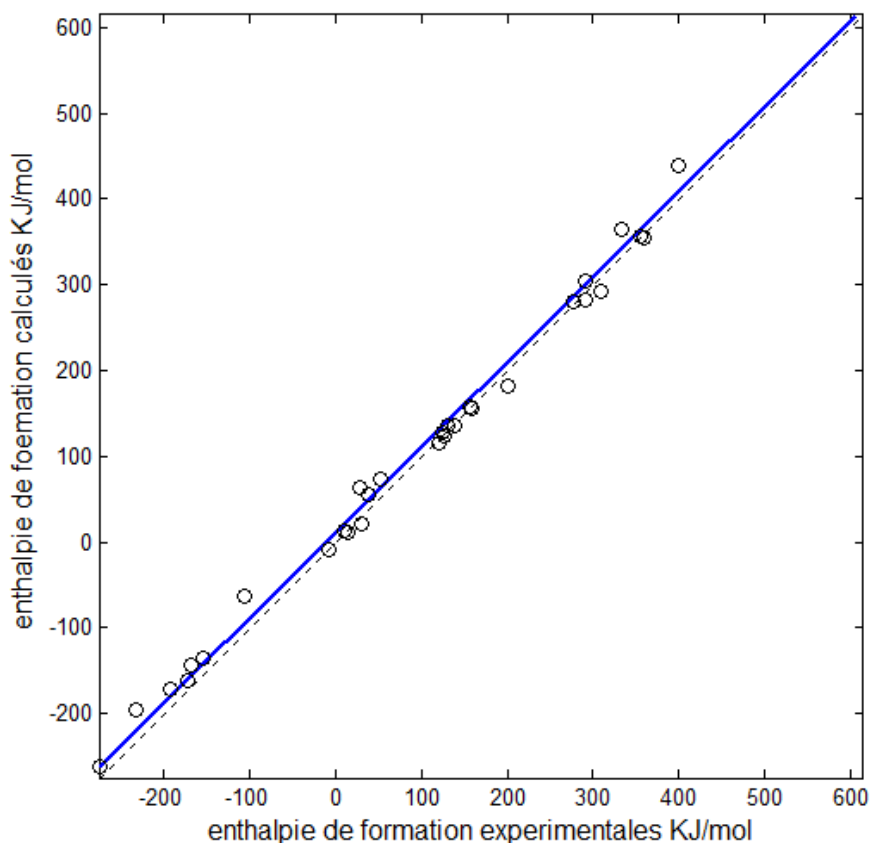


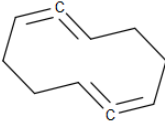

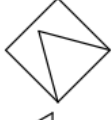

Figure 38: Relation entre les valeurs expérimentales et estimées (par la DFT) de l'enthalpie de formation de 30 molécules à l'état gaz

VI.6 Exemples illustratifs

La DFT est une bonne méthode de prédiction d'enthalpie de formation. Cette technique arrive à estimer l'enthalpie de formation avec des faibles déviations (jusqu'à 0.24 kJ/mol). Malheureusement, il a été constaté qu'une fois nous commençons la simulation des conformères des composés complexes les déviations augmentent.

En effet, les méthodes ab-initio sont basées sur des approximations, ou certaines interactions sont ignorées, et avec l'augmentation de la taille des molécules, ces approximations tendent vers des déviations énormes, en fonction de la taille de la molécule.

Le tableau suivant donne des exemples sur le calcul des enthalpies de formation en utilisant la nouvelle méthode (méthode de contribution de groupe) et la méthode de DFT. D'après cette comparaison on peut conclure que la qualité d'estimation pour les deux méthodes (méthode de contribution de groupe et méthode DFT) sont très proches, sauf quelques valeurs qui donnent des déviations entre 82 et 50 KJ/mol, et pour le reste des molécules, l'estimation de l'enthalpie de formation reste très précise.

Structures	CAS	EXP (KJ/mol)	GAUS(UA)	CAL-DFT (KJ/mol)	EAM-DFT (KJ/mol)
	3451-55-6	356,1	-387,99	355,86	0,24
	822-35-5	157	-155,89	157,44	0,44
	185-94-4	158	-195,17	156,57	1,43
	5685-46-1	130	-234,46	135,86	5,86

EXP: valeurs expérimentales, GAUSS : valeurs données par G G09 en UA, CAL-DFT : valeurs calculée par G09 en kJ/mol. EAM-DFT (KJ/mol) : erreurs absolues moyennes de la DFT

Tableau 64 : Exemples de calcul de l'enthalpie de formation des composés cycliques contenant les éléments C et H par la méthode de DFT.

VI.7 CONCLUSION

La Théorie fonctionnelle de la densité est une méthode entièrement prédictive, utilisée pour définir la conformation la plus stable. La DFT peut être utilisée aussi pour calculer les paramètres correspondant à ces conformations. Dans ce chapitre, nous avons présenté les détails de calcul de l'enthalpie de formation standard des composés cycliques, à l'état gazeux. Les résultats trouvés sont relativement précis. Les déviations trouvées à savoir EAM, ET, EQM et R^2 sont 14.22, 12.34, 19.65 kJ/mol et 0.98787, respectivement.

L'étude comparative entre la DFT et la nouvelle méthode de contribution de groupe développée au cours de ce travail montre que les résultats sont très proches. La DFT est une bonne méthode d'estimation d'enthalpie de formation, très précise pour des simples

molécules. Mais une fois la taille de la molécule augmente les déviations tendent vers des valeurs énormes et le temps de calcul devient très important.

Les calculs ab initio permettent de capitaliser les connaissances théoriques autour de la propriété à étudier et ils présentent des perspectives d'amélioration considérables par rapport aux méthodes de contributions de groupes.

Toutefois, les calculs ab initio ne peuvent pas pour le moment concurrencer les méthodes de contributions de groupes en terme de précision pour des molécules de taille moyenne et importante. Il est à noter que la mise œuvre de la DFT nécessite un « bagage » théorique lourd ce qui représente un obstacle à son expansion. Malgré le développement des logiciels des calculs DFT, cette mise en œuvre n'est pas et ne sera sans doute jamais triviale.

Conclusion générale

L'enthalpie de formation est une grandeur clé intervenant dans plusieurs domaines tels que le développement des nouveaux matériaux, la thermochimie, la simulation en génie chimique, la prévention des risques chimiques et la combustion.

Le but de cette thèse était d'élaborer de nouvelles méthodes permettant d'estimer, avec la meilleure précision possible, les enthalpies de formation de composés organiques à partir de leurs structures géométriques dans les trois états physiques : solide, liquide et gaz. Les méthodes proposées ne nécessitent pas la connaissance d'autres paramètres autres que la structure géométrique des molécules.

Une description générale des différentes notions théoriques liées aux calculs des enthalpies de formation des composés organiques purs a été effectuée dans le premier chapitre suivie par une étude bibliographique sur les méthodes de prédiction des enthalpies de formation basées sur l'additivité de contributions de groupes et sur un calcul *ab initio* d'énergie moléculaire. Cette étude nous a permis d'orienter notre travail et de bien choisir les techniques de développement des modèles prédictifs. Il a été constaté, dans la littérature, que plusieurs méthodes de prédiction des enthalpies de formation en phase gazeuse et liquide ont été développées alors que la phase solide n'a pas connu le même développement, et le peu de méthodes existantes affichent des erreurs relativement élevées notamment dans le cas des molécules énergétiques contenant des groupements carbonés, azotés et oxygénés pour lesquelles l'enthalpie de formation est relativement élevée.

Le deuxième chapitre, quant à lui, présente dans un premier temps les outils de calculs numériques développés dans le cadre de cette thèse. Ensuite, une méthode de prédiction des enthalpies de formation des composés énergétiques à l'état solide est présentée. Cette méthode est basée sur l'additivité des contributions de groupes d'ordre trois en utilisant un modèle linéaire. Afin d'augmenter les performances de notre méthode, de nouvelles contributions de groupes d'ordre trois (corrections) ont été proposées à savoir : les

interactions entre les substitutions sur un cycle aromatique, les interactions entre des cycles aromatiques fusionnés et des interactions entre groupes fonctionnels.

Un ensemble d'apprentissage de 1039 composés énergétiques, contenant des composés de types *CH*, *CHO*, *CHN* et *CHON* a permis de développer la méthode proposée. Cette méthode a été testée et validée sur un autre ensemble de molécules contenant 183 nouveaux composés énergétiques et il a été constaté que cette méthode affiche un pouvoir prédictif élevé, puisque l'erreur absolue moyenne et l'écart type des erreurs sont inférieurs à 18.53 kJ/mol et 20.25 kJ/mol , respectivement. Également, la méthode développée, comparée aux autres méthodes les plus concurrentes, a montré plus de précision, de fiabilité et de supériorité aussi bien sur l'ensemble de molécules d'apprentissage¹¹ que celui de test¹². Il est à noter que, pour certaines molécules, les enthalpies de formation sont mal prédites ; ceci peut très probablement s'expliquer par le problème du polymorphisme de ces molécules.

Pour la prédiction des enthalpies de formation des composés organiques à l'état liquide, une autre méthode de contributions de groupes a été proposée dans le troisième chapitre. Une équation linéaire permettant l'additivité de contributions de groupes a été proposée. La méthode a été développée en utilisant un ensemble de 900 molécules organiques de différentes classes chimiques. Les valeurs des contributions des groupes ont été calculées à partir d'un ensemble d'apprentissage contenant 720 molécules, et le modèle proposé a été validé et testé sur un autre ensemble de molécules constitué de 180 nouvelles molécules. Une nouvelle méthodologie de division de données en deux ensembles d'apprentissage et de test a été proposée en utilisant une division semi-aléatoire.

La méthode proposée pour la phase liquide affiche des erreurs de prédiction faibles aussi bien sur l'ensemble d'apprentissage que celui du test¹². En effet, les erreurs absolues moyennes et les écarts types affichées dans le cas de l'ensemble d'apprentissage et celui du test sont de $4.34, 4.4 \text{ kJ/mol}$ et $4.77, 5.08 \text{ kJ/mol}$ respectivement. Ces résultats affichés par la méthode proposée sont plus fiables avec une meilleure précision par rapport aux résultats affichés par les méthodes les plus concurrentes récemment publiées. Cette supériorité est constatée aussi bien globalement sur l'ensemble des molécules que pour chacune des familles chimiques étudiées.

Le quatrième chapitre fait également l'objet d'une proposition d'une nouvelle méthode de contributions de groupes pour la prédiction des enthalpies de formation des composés organiques à l'état gazeux. Il a été constaté que la contribution d'un groupe dans une molécule est toujours linéaire par rapport à sa valeur enthalpie de formation. En conséquence,

¹¹ Molécules ayant permis la détermination des contributions de groupes.

¹² Molécules qui n'ont pas été utilisées dans l'ensemble d'apprentissage ou de régression.

une équation linéaire a été utilisée pour calculer l'enthalpie de formation à l'état gazeux. Un schéma de découpage d'ordre trois a été utilisé pour l'obtention des fragments moléculaires. La méthode a été construite en utilisant 750 composés contenant les éléments C ; H ; N ; O. L'ensemble des molécules est divisé en deux sous-ensembles établis de manière semi-aléatoire : 80% pour l'estimation des paramètres du modèle (valeurs de contributions de groupes) et le reste pour tester et valider le modèle.

La méthode proposée pour la phase gazeuse affiche des résultats remarquables. Ses indicateurs statistiques à savoir les erreurs absolues moyennes et les écarts types dans le cas de l'ensemble d'apprentissage et celui du test, sont égaux à 3.33, 3.06 kJ/mol et 4.5, 4.04 kJ/mol , respectivement. Les résultats prédictifs obtenus par la méthode proposée sont comparés à ceux obtenus par une méthode concurrente. La méthode proposée dans le cadre de cette étude a montré une meilleure précision et une fiabilité plus grande.

En comparant les trois modèles proposés pour les trois états physiques, il ressort que les erreurs de prédiction en phase gazeuse sont les plus faibles contrairement à celles obtenues en phase solide. Ceci peut être attribué d'un côté à la faiblesse des interactions intermoléculaires à l'état gazeux, et d'autre côté au polymorphisme des composés solides, ce qui constitue un problème majeur pour toutes les méthodes prédictives.

Dans le cinquième chapitre, trois méthodes basées sur les réseaux de neurones sont proposées pour prédire les enthalpies de formation pour chacun des états physiques considérés tout en utilisant la technique de contributions de groupes. En effet, les réseaux de neurones peuvent réaliser des fonctions non linéaires paramétrées afin d'approcher toute fonction de régression quel que soit sa taille et sa complexité. Les modèles proposés sont développés en utilisant les mêmes ensembles de molécules pour chaque phase ainsi que les mêmes fragments moléculaires. Pour chaque phase, un petit modèle neuronale, de trois (3) neurones par couche cachée, est réalisé, et l'ensemble des données est divisé en sous-ensembles d'apprentissage et de test. Ces modèles affichent de faibles erreurs de prédiction avec un pouvoir prédictif élevé que ce soit sur l'ensemble d'apprentissage ou celui de test. Également, ces modèles de réseaux de neurones, comparés à ceux proposés dans les chapitres précédents, ont montré davantage de précision, de fiabilité et de supériorité notamment dans le cas de la phase solide où les erreurs de prédiction ont été réduites avec un rapport approximativement de deux, affichant respectivement une erreur absolue moyenne et un écart type de 9.33 et 10.46 kJ/mol contre 17.89 et 17.65 kJ/mol affichés par le précédent modèle proposé dans le chapitre II. Il est à noter que, le polymorphisme au niveau des composés à l'état solide reste toujours le problème majeur pour toutes les techniques prédictives s'appliquant à la phase solide.

Parallèlement aux méthodes de contributions de groupes, le dernier chapitre présente une autre méthode basée sur un calcul *ab initio* d'énergie moléculaire pour la prédiction des enthalpies de formation à l'état de gaz de quelques composés hydrocarbonés. La théorie fonctionnelle de la densité (DFT), avec un jeu de base de B3LYP (Becke, three-parameter, Lee-Yang-Parr), est utilisée afin d'assurer le calcul des enthalpies en utilisant le logiciel GAUSSIAN. Le calcul a porté sur un échantillon plus réduit de 30 molécules comportant au moins un cycle et allant de C₃ jusqu'à C₁₃. Ces molécules ont été choisies car elles présentent quelques difficultés avec les techniques de contributions de groupes. Les calculs ont affiché respectivement une erreur absolue moyenne et un écart type de 14.22 et 12.34 *kJ/mol* contre 19.46 et 26.19 *kJ/mol* obtenus par le précédent modèle. La présence de cycles dans une molécule influe sur les propriétés physiques et chimiques de la molécule ; pour cela, lors de l'utilisation de méthodes de contributions de groupes, il faut prendre en considération l'influence de cycles lors du développement de modèle prédictif.

Le dernier chapitre nous a permis à la fois de nous initier avec le calcul *ab initio* d'énergie moléculaire en utilisant la théorie fonctionnelle de la densité et de mieux interpréter théoriquement quelques erreurs de prédiction. Cette approche s'impose de plus en plus avec les progrès technologiques des calculateurs. Elle est basée sur une grande base théorique permettant ainsi de capitaliser les connaissances théoriques autour de la propriété à étudier. En revanche, comme toutes les méthodes d'estimation, la DFT a des points de faibles ; les inconvénients de cette méthode se situent au niveau du temps de calcul et la nécessité de faire appel à des machines de calcul très puissantes. D'après les résultats obtenus, nous avons constaté que plus la taille des molécules augmente, plus la précision de cette méthode diminue. Également, sa mise en œuvre nécessite des connaissances approfondies de la théorie de la fonctionnelle de la densité.

VI.8 Bibliographie

- [1] Clemens Jochum, Martin Hicks, Josef Sunkel. Physical Property Prediction in Organic Chemistry: Proceedings of the Beilstein Workshop. illustrée, Springer Science & Business Media, , Schloss Korb, Italy. 2012..
- [2] Eric Bellanger, Jérôme Perez, Xavier Ducros, Vincent Renvoizé. Physique MPSI-PCSI-PTSI: Programme 2013. Pearson Education France, 2013..
- [3] B.M. Rice, S.V. Pai, J. Hare, Combust. Flame 118 (1999) 445–458.
- [4] Peter William Atkins. Éléments de chimie physique.2 EME Edition. Université d'oxford.1996.
- [5] Reid, R.C.; Prausnitz, J.M. and Poling, B.E., The Properties of Gases and Liquids, McGraw-Hill, New York (1987).
- [6] Rogalski, M. and Neau, E., A Group Contribution Method for Prediction of Hydrocarbon Saturated Liquid Volumes, Fluid Phase Equil., 56:59-69 (1990)..
- [7] Benson, S. W., F. R. Cruickshank, D. M. Golden, G. R. Haugen, H. E. O'Neal, A.S. Rodgers, R. Shaw and R. Walsh: Chem. Rev., 69: 279 (1969).
- [8] Benson S.W. Thermochemical Kinetics, Second edition, 1976, Wiley, New York.
- [9] Benson S.W. et Buss J.H. Additivity Rules for the Estimation of Molecular Properties. Thermodynamic Properties, J. Chem. Phys. 1958, 29, 546.
- [10] Benson, S. W.: Thermochemical Kinetics, Wiley, New York, 1968, chap. 2.
- [11] Benson, S. W., and J. H. Buss: J. Chem. Phys., 29: 279 (1969).
- [12] O'Neal, H. E., and S. W. Benson: J. Chem. Eng. Data, 15: 266 (1970).
- [13] Eigenmann, H. K., D. M. Golden, and S. W. Benson: J. Phys. Chem., 77: 1687 (1973).
- [14] Stein, S. E., D. M. Golden, and S. W. Benson: J. Phys. Chem., 81: 314 (1977).
- [15] Joback, K. G.: A Unified Approach to Physical Property Estimation Using Multivariate Statistical Techniques, S.M. Thesis, Department of Chemical Engineering, Massachusetts Institute of Technology, Cambridge, MA, 1984.
- [16] Devotta S. et Pendyala V.R. Modified Joback Group Contribution Method for Normal Boiling Point of Aliphatic Halogenated Compounds, Ind. Eng. Chem. Res. 1992, 31, 2042.
- [17] Joback, K. G., and R. C. Reid: Chem. Eng. Comm., 57: 233–243, (1987).
- [18] Bruce E. Poling, John M. Prausnitz, John P. O'Connell. the properties of gases and liquids.5, illustrée, McGraw-Hill, fourth edition, Michigan, 2001.
- [19] Constantinou L. et Gani R. New Group Contribution Method for Estimating Properties of Pure Compounds, AIChE J. 1994, 40(10), 1697.
- [20] Domalski E.S. et Hearing E.D. Estimation of the Thermodynamic Properties of Hydrocarbons at 298.15 K, J. Phys. Chem. Ref. Data 1988, 17(4), 1637.
- [21] Domalski E.S. et Hearing E.D. Estimation of the Thermodynamic Properties of C-H-N-O-S-Halogen Compounds at 298.15 K, J. Phys. Chem. Ref. Data 1993, 22(4), 805.
- [22] Cohen N. Revised Group Additivity Values for Enthalpies of Formation (at 298 K) of Carbon-Hydrogen and Carbon-Hydrogen-Oxygen Compounds, J. Phys. Chem. Ref. Data 1996, 25(6), 1411.
- [23] A. Salmon, D. Dalmazzone, J. Phys. Chem. Ref. Data 35 (2006) 1443–1457..
- [24] A. Salmon, D. Dalmazzone, J. Phys. Chem. Ref. Data 36 (2007) 19–58.
- [25] R. Gani, P.M. Harper, M. Hostrup, Ind. Eng. Chem. Res. 44 (2005) 7262–7269.
- [26] Rafiqul Gani and all. A method to estimate the enthalpy of formation of organic compounds with chemical accuracy. Fluid Phase Equilibria. 348 (2013) 23– 32.
- [27] T. Nielsen, J. Abildskov, P. Harper, I. Papaconomou, R. Gani, J. Chem. Eng. Data 46 (2001) 1041–1044.
- [28] S. P. Verevkin and V. N. Emel'yanenko, Journal of Physical and Chemical Reference Data. New Group Contribution Approach to Thermochemical Properties of Organic Compounds: Hydrocarbons and Oxygen

- Containing Compounds, Vol. 42, No. 3, 2013.
- [29] Mohammad Hossein Keshavarz, Hossein Sadeghi. A new approach to predict the condensed phase heat of formation in acyclic and cyclic nitramines, nitrate esters and nitroaliphatic energetic compounds. *Journal of Hazardous Materials*. 171 (2009) 140–146.
- [30] Mohammad Hossein Keshavarz. Prediction of the condensed phase heat of formation of energetic compounds *Journal of Hazardous Materials* 190 (2011) 330–344.
- [31] Keshavarz and all. A simple procedure for calculating condensed phase heat of formation of nitroaromatic energetic materials. *Journal of Hazardous Materials* A136 (2006) 425–431.
- [32] Keshavarz and all. Predicting condensed phase heat of formation of nitroaromatic compounds. *Journal of Hazardous Materials* 169 (2009) 890–900.
- [33] Keshavarz and all. Reliable prediction of the condensed (solid or liquid) phase enthalpy of formation of organic energetic materials at 298 K through their molecular structures. *Fluid Phase Equilibria* 408 (2016) 248-258.
- [34] Prediction of (liquid + liquid) equilibrium for binary and ternary systems containing ionic liquids with the bis[(trifluoromethyl)sulfonyl]imide anion using the ASOG method. Robles, Pedro A. 1–7, s.l. : J. Chem. Thermodynamics , 2015, Vol. 90.
- [35] Densities, viscosities and refractive indices of binary mixtures containing methyl ethyl ketone. Friction theory. New UNIFAC-VISCO and ASOG-VISCO parameter determination. Kijevacanin, Mirjana Lj. 120-136, s.l. : Fluid Phase Equilibria , 2016, Vol. 417 ..
- [36] Y.V.C.Rao. *Chemical Engineering Thermodynamics*. Universities Press, 1997. 601 pages.
- [37] Aage Fredenslund, R.L. Jones and J.M. Prausnitz, *AIChE Journal* 21(1975)1086..
- [38] Derr E.L. et Deal C.H. Analytical Solution of Groups : Correlation of Activity Coefficients through Structural Group Parameters, *Inst. Chem. Eng. Symp. Ser.* 1969, 32(3), 40.
- [39] Abrams D.S. et Prausnitz J.M. *Statistical Thermodynamics of Liquid Mixtures. A New Expression for the Excess Gibbs Energy of Partly and Completely Miscible Systems*, *AIChE J.* 1975, 21, 116.
- [40] Anna SALMON. Développement d'une méthode prédictive de calcul des enthalpies de formation en phase solide de molécules organiques - Application aux matériaux énergétiques. Thèse de doctorat. Ecole des Mines de Paris. 2006.
- [41] Bondi A. *Physical Properties of Molecular Crystals, Liquids and Glasses*, 1968, Wiley, New York.
- [42] Petrica Gasca. Zirconium – modélisation ab initio de la diffusion des défauts ponctuels. Thèse de doctorat. Université LILLE 1 – SCIENCES ET TECHNOLOGIES 2010.
- [43] Daoud Khadîdja. Propriétés électroniques et élastiques des semi-conducteurs anorganiques. Thèse de doctorat. Université FERHAT ABBAS–SETIF-2012..
- [44] M. Born and R. Oppenheimer, *Ann. Phys.* 74. 1 (1927).
- [45] P. Kiréev. *La physique des semiconducteurs*. 2e édition, édition Mir. Moscou, (1975).
- [46] D. R. Hartree, *Proc. Cambridge Philos. Soc.* 24, 89 (1928).
- [47] Hohenberg P. et Kohn W. Inhomogeneous electron gas. *Physical Review*, 136(3B) :B864–B871, 1964.
- [48] Kohn W. et Sham L.J. Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Physical Review*, 140(4A) :A1133–A1138, 1965.
- [49] D. M. Ceperley and B. J. Adler, *Phys. Rev. Lett.* 45, 566 (1980).
- [50] R. O. Jones and O. Gunnarsson, *Reviews of Modern Physics* 61, 689 (1989).
- [51] J. Kübler and V. Eyert, *Electronic structure calculations dans : Electronic and Magnetic Properties of Metals and Ceramics* (K. H. J. Buschow (VCH Verlagsgesellschaft), Weinheim, 1992).
- [52] J.P.Perdew, K.Burke, and M.Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.* 77, 3865 (1996).
- [53] Virginie Trinite-Quequet. Etude ab initio et simulation à l'Echelle atomique des transitions de phase du titane. Thèse de doctorat. l'Ecole Polytechnique Paris 2010.
- [54] Mark Saeys et al. Ab Initio Calculations for Hydrocarbons: Enthalpy of Formation, Transition State Geometry, and Activation Energy for Radical Reactions. *J. Phys. Chem. A*, 2003, 107 (43), pp 9147–9159.
- [55] Vladimir N et al. The Gaseous Enthalpy of Formation of the Ionic Liquid 1-Butyl-3-methylimidazolium Dicyanamide from Combustion Calorimetry, Vapor Pressure Measurements, and Ab Initio Calculations. *J.*

- Am. Chem. Soc., 2007, 129 (13), pp 3930–3937.
- [56] Tim P.W. Jungkamp et al. The enthalpy of formation of trioxy radicals ROOO. *Chemical Physics Letters* 257 (1996) 15–22..
- [57] Mohammad M. Ghahremanpour et al. Large-scale calculations of gas phase thermochemistry: Enthalpy of formation, standard entropy, and heat capacity. *J. Chem. Phys.* 145, 114305 (2016).
- [58] A.K. Sikder et al. Important aspects of behavior of organic energetic compounds: a review, *J. Hazard. Mater.* 84 (2001) 1e26.
- [59] M.H. Keshavarz, Research progress on heats of formation and detonation of energetic compounds, in: S.K. Brar (Ed.), *Hazardous Materials: Types, Risks and Control* Nova Science Publishers Inc., New York, 2011, pp. 339e359.
- [60] B.M. Rice, J. Hare, Predicting heats of detonation using quantum mechanical calculations, *Thermochim. Acta* 384 (2002) 377e391.
- [61] D. Mathieu, P. Simonetti, *Thermochim. Acta* 384 (2002) 369–375..
- [62] P. Politzer, J.S. Murray, M.E. Grice, M. Desalvo, E. Miller, *Mol. Phys.* 91 (1997) 923–928.
- [63] Kybett, B. D.; Carroll, S.; Natalis, P.; Bonnell, D. W.; Margrave, J. L.; Franklin, J. L. *J. Mn. Chem. Soc.* 1966. 88, 626.
- [64] N. Cohen, S. Benson, *Chem. Rev.* 93 (1993) 2419–2438.
- [65] Daniel Gaertner and Michel Dreyfus-Leon. Analysis of non-linear relationships between catch per unit effort and abundance in a tuna purse-seine fishery simulated with artificial neural networks. *ICES Journal of Marine Science*, 61: 812e820 (2004).
- [66] A. Baghdad, B. Bouziane, *Informatica* 18, 163 (2007).
- [67] L. Hongjun, S. Rudy, L. Huan, in *Proceedings of the 21th International Conference on Very Large Data Bases* (Morgan Kaufmann Publishers Inc., Zurich, Switzerland, 1995), pp. 478–489.
- [68] Anna Tomberg. gaussian 09w tutorial an introduction to computational chemistry using g09w and avogadro software. [document électronique]. 1996.
- [69] Perdew, J. P. Unified Theory of Exchange and Correlation Beyond the Local Density Approximation. In *Electronic Structure of Solids '91*; Ziesche, P., Eschig, H., Eds.; Akademie Verlag: Berlin, Germany, 1991; pp 11–20..
- [70] Sérgio Filipe Sousa et al. General Performance of Density Functionals. *J. Phys. Chem. A* 2007, 111, 10439–10452..

Annexe A : Résultats de prédiction des enthalpies standards de formation à l'état Solide

- **Type** : Ensemble de molécules d'appartiennent ou de test
- **CAS** : Numéro d'enregistrement unique ([Chemical Abstracts Service](#)).
- **EXP** : Valeurs expérimentales d'enthalpie de formation de la littérature en *kJ/mol*.
- **CAL-MCG** : Valeurs d'enthalpie de formation issues de la méthode de contributions de groupes en *kJ/mol*.
- **CAL-MRNA** : Valeurs d'enthalpie de formation issues du réseau de neurones en *kJ/mol*.
- **EAM**: erreur de prédiction en *kJ/mol*.

Tableau 65 : Banque de données thermochimiques d'enthalpie de formation concernant les 1222 molécules à l'état solide

NO.	Nomenclature	Formule	CAS	Type	(kJ/mol)				
					Exp.	Calc.	EAM	Calc. RNA	EAM.RNA
1	2-norbornene	C7H10	498-66-8	Apprentissage	41,4	-20,32	61,72	-1,88	43,28
2	Norbornane	C7H12	279-23-2	Apprentissage	-92,1	-96,74	4,64	-96,71	4,61
3	Cubane	C8H8	277-10-1	Apprentissage	542	554,14	12,14	533,68	8,32
4	Bicyclo[2.2.2]oct-2-ene	C8H12	931-64-6	Apprentissage	-23	-95,92	72,92	-63,58	40,58
5	7-Methylenebicyclo[2.2.1]-heptane	C8H12	31463-35-1	Apprentissage	20	8,68	11,32	20,03	0,03
6	Bicyclo[2.2.2]octane	C8H14	280-33-1	Apprentissage	-147,1	-172,34	25,24	-162,39	15,29
7	2,2,3,3-tetramethylbutane	C8H18	594-82-1	Apprentissage	-268,8	-256,38	12,42	-273,95	5,15
8	7,7-dimethyl-bicyclo[2.2.1]heptane	C9H16	2034-53-9	Apprentissage	-148,3	-169,09	20,79	-160,40	12,10
9	Bicyclo[3.3.1]nonane	C9H16	280-65-9	Test	-178	-206,55	28,55	-192,87	14,87
10	Azulene	C10H8	275-51-4	Apprentissage	212	224,36	12,36	245,98	33,98
11	Naphthalene	C10H8	91-20-3	Apprentissage	72,72	70,94	1,78	56,98	15,74
12	3a,4,5,6,7,7a-hexahydro-4,7-methanoindene	C10H14	4488-57-7	Apprentissage	-23,9	-48,67	24,77	-6,01	17,89
13	1,2,4,5-tetramethylbenzene	C10H14	95-93-2	Apprentissage	-119,9	-118,23	1,67	-138,45	18,55
14	Octahydro-4,7-methano-1H-indene	C10H16	6004-38-2	Apprentissage	-113,1	-125,08	11,98	-114,06	0,96
15	Adamantane	C10H16	281-23-2	Apprentissage	-188,4	-187,18	1,22	-170,22	18,18
16	Protoadamantane	C10H16	53130-19-1	Apprentissage	-150,8	-166,48	15,68	-151,03	0,23
17	Camphene	C10H16	79-92-5	Apprentissage	-75	-63,68	11,32	-75,03	0,03
18	Perhydrotriquinacene	C10H16	17760-91-7	Apprentissage	-159	-125,08	33,92	-114,06	44,94
19	Bicyclo[3.3.2]decane	C10H18	283-50-1	Apprentissage	-164	-121,69	42,31	-129,07	34,93
20	2-methylnaphthalene	C11H10	91-57-6	Apprentissage	35	38,59	3,59	41,88	6,88
21	Pentamethylbenzene	C11H16	700-12-9	Apprentissage	-135,1	-142,71	7,61	-162,40	27,30
22	1-methyladamantane	C11H18	768-91-2	Test	-237,3	-234,19	3,11	-220,18	17,12
23	2-methyladamantane	C11H18	700-56-1	Apprentissage	-225	-232,46	7,46	-208,99	16,01
24	Bicyclo[3.3.3]undecane	C11H20	29415-95-0	Apprentissage	-152,5	-155,89	3,39	-165,85	13,35
25	Biphenylene	C12H8	259-79-0	Apprentissage	333,4	247,3	86,1	323,33	10,07
26	Acenaphthylene	C12H8	208-96-8	Apprentissage	186,7	171,76	14,94	189,90	3,20
27	Biphenyl	C12H10	92-52-4	Apprentissage	100,5	95,36	5,14	87,22	13,28
28	Acenaphthene	C12H10	83-32-9	Apprentissage	70	70,74	0,74	46,28	23,72
29	1,8-dimethylnaphthalene	C12H12	569-41-5	Apprentissage	25,9	31,53	5,63	32,93	7,03
30	2,3-dimethylnaphthalene	C12H12	581-40-8	Apprentissage	-2,3	7,9	10,2	2,06	4,36
31	2,6-dimethylnaphthalene	C12H12	581-42-0	Apprentissage	-5,7	6,25	11,95	2,15	7,85
32	2,7-dimethylnaphthalene	C12H12	582-16-1	Test	-5,4	6,25	11,65	2,15	7,55

33	Hexacyclo[6.2.1.13.6.02,7.04,10.05,9]dodecane	C12H14	704-02-9	Apprentissage	50,5	121,77	71,27	65,96	15,46
34	(E,E,E)-1,5,9-cyclododecatriene	C12H18	676-22-2	Apprentissage	26,6	-38,62	65,22	9,15	17,45
35	2,2,7,7-tetramethylocta-3,5-diyne	C12H18	6130-98-9	Apprentissage	156,1	228,65	72,55	156,00	0,10
36	Hexamethylbenzene	C12H18	87-85-4	Test	-163,3	-184,69	21,39	-178,80	15,50
37	2,2-dimethyladamantane	C12H20	19740-34-2	Apprentissage	-256	-259,53	3,53	-241,50	14,50
38	1,3-dimethyladamantane	C12H20	702-79-4	Apprentissage	-287	-281,19	5,81	-270,71	16,29
39	Cyclododecane	C12H24	294-62-2	Test	-306,6	-267,87	38,73	-275,30	31,30
40	Fluorene	C13H10	86-73-7	Apprentissage	90,2	121,56	31,36	103,57	13,37
41	4-methyl-1,1'-biphenyl	C13H12	644-08-6	Apprentissage	58	58,01	0,01	55,30	2,70
42	Diphenylmethane	C13H12	101-81-5	Apprentissage	75,1	91,83	16,73	81,84	6,74
43	1,3,5-trimethyladamantane	C13H22	707-35-7	Test	-333	-328,2	4,8	-322,59	10,41
44	Pyracylene	C14H8	187-78-0	Apprentissage	325,4	327,65	2,25	325,27	0,13
45	Diphenylethyne	C14H10	501-65-5	Apprentissage	312,4	302,36	10,04	308,61	3,79
46	Anthracene	C14H10	120-12-7	Apprentissage	107,5	105,55	1,95	100,85	6,65
47	Phenanthrene	C14H10	85-01-8	Apprentissage	113	110,07	2,93	115,66	2,66
48	9,10-dihydro-anthracene	C14H12	613-31-0	Test	66,4	67,57	1,17	58,40	8,00
49	(E)-stilbene	C14H12	103-30-0	Apprentissage	137,8	143,18	5,38	124,60	13,20
50	Phenanthrene, 9,10-dihydro-	C14H12	776-35-2	Test	66,3	66,66	0,36	58,33	7,97
51	9H-Fluorene, 9-methyl-	C14H12	2523-37-7	Apprentissage	65,3	76,28	10,98	73,43	8,13
52	Pyracene	C14H12	567-79-3	Apprentissage	84,7	95,6	10,9	79,27	5,43
53	4,4'-dimethylbiphenyl	C14H14	613-33-2	Apprentissage	16,2	20,66	4,46	22,56	6,36
54	Bibenzyl	C14H14	103-29-7	Apprentissage	44,9	36,65	8,25	45,30	0,40
55	1,4,5,8-tetramethylnaphthalene	C14H16	2717-39-7	Apprentissage	-18,2	-13,08	5,12	-23,01	4,81
56	1,2,3,4,5,6,7,8-octahydro-anthracene	C14H18	1079-71-6	Apprentissage	-119,5	-126,26	6,76	-124,29	4,79
57	Diadamantane	C14H20	2292-79-7	Apprentissage	-241,9	-216,86	25,04	-229,83	12,07
58	1,8-cyclotetradecadiyne	C14H20	1540-80-3	Apprentissage	147,7	147,7	0	147,91	0,21
59	1,1,4,6,7-pentamethylindan	C14H20	6682-67-3	Apprentissage	-175,1	-168,34	6,76	-174,05	1,05
60	Benzene, 1,4-bis(1,1-dimethylethyl)-	C14H22	1012-72-2	Apprentissage	-212	-167,57	44,43	-199,60	12,40
61	Trans-anti-trans-tetra-decahydroanthracene	C14H24	28071-99-0	Apprentissage	-293,4	-324	30,6	-299,25	5,85
62	1,3,5,7-tetramethyladamantane	C14H24	1687-36-1	Apprentissage	-379	-375,21	3,79	-376,57	2,43
63	Anthracene, tetradecahydro-, (4 α ,8 α ,9 α ,10 α)-	C14H24	1755-19-7	Apprentissage	-330,6	-324	6,6	-299,25	31,35
64	Anthracene, tetradecahydro-, (4 α ,8 α ,9 α ,10 α)-	C14H24	19128-78-0	Apprentissage	-313,9	-324	10,1	-299,25	14,65
65	Cyclotetradecane	C14H28	295-17-0	Apprentissage	-372,1	-336,28	35,82	-344,84	27,26
66	Cis-1,4-Di-tert-butyl-cyclohexane	C14H28	4789-34-8	Apprentissage	-374,1	-371,35	2,75	-387,96	13,86
67	Trans-1,4-Di-tert-butyl-cyclohexane	C14H28	4789-35-9	Apprentissage	-401,8	-371,35	30,45	-387,96	13,84
68	1,4-dimethyl-7-(1-methylethyl)-azulene	C15H18	489-84-9	Apprentissage	61,1	30,23	30,87	55,07	6,03
69	4-methyldiadamantane	C15H22	30545-28-9	Apprentissage	-261,5	-263,86	2,36	-263,89	2,39
70	3-methyldiadamantane	C15H22	28375-86-2	Apprentissage	-260,4	-262,14	1,74	-275,03	14,63

71	1-methyldiadamantane	C15H22	26460-76-4	Apprentissage	-247,4	-263,86	16,46	-263,89	16,49
72	Benzene, 1,3-bis(1,1-dimethylethyl)-5-methyl-	C15H24	15181-11-0	Test	-245,8	-215,48	30,32	-241,54	4,26
73	Cyclopentadecane	C15H30	295-48-7	Apprentissage	-376,1	-370,49	5,61	-379,47	3,37
74	1,1'-(1,3-butadiyne-1,4-diyl)bis-benzene	C16H10	886-66-8	Apprentissage	518,4	509,79	8,61	517,76	0,64
75	Fluoranthene	C16H10	206-44-0	Apprentissage	189,9	181,45	8,45	177,62	12,28
76	Pyrene	C16H10	129-00-0	Apprentissage	114,7	123,63	8,93	119,82	5,12
77	Bis-(2-methylphenyl)-acetylene	C16H14	01/03/5294	Test	234,8	233,96	0,84	246,61	11,81
78	Di-p-tolylacetylene	C16H14	2789-88-0	Apprentissage	225,8	227,65	1,85	231,28	5,48
79	Cis,cis-1,4-diphenylbutadiene	C16H14	5807-76-1	Apprentissage	198,8	195,99	2,81	188,87	9,93
80	(E,E)-1,4-diphenyl-1,3-butadiene	C16H14	538-81-8	Apprentissage	178,8	195,99	17,19	188,87	10,07
81	2,7-dimethylphenanthrene	C16H14	1576-69-8	Apprentissage	36,4	45,38	8,98	29,96	6,44
82	4,5-dimethylphenanthrene	C16H14	3674-69-9	Test	89	70,66	18,34	89,55	0,55
83	9,10-dimethylphenanthrene	C16H14	604-83-1	Apprentissage	47,6	70,48	22,88	48,81	1,21
84	Pyrene, 4,5,9,10-tetrahydro-	C16H14	781-17-9	Apprentissage	25,2	45,76	20,56	56,46	31,26
85	1,1-Di-o-tolylethylene	C16H16	2919-19-9	Apprentissage	89	89	0	89,22	0,22
86	1,1'-(1,2-ethenediyl)bis[2-methylbenzene]	C16H16	10311-74-7	Test	85,9	74,78	11,12	86,97	1,07
87	Trans-1,2-Di-o-tolylethene	C16H16	36888-18-3	Apprentissage	74,9	74,78	0,12	86,97	12,07
88	1,1'-ethenylenebis[4-methylbenzene]	C16H16	2919-20-2	Test	85,9	82,69	3,21	94,11	8,21
89	(Z)-1,2-bis(4-methylphenyl)ethene	C16H16	2510-76-1	Apprentissage	97,9	68,47	29,43	73,38	24,52
90	(E)-1,2-bis(4-methylphenyl)ethene	C16H16	18869-29-9	Apprentissage	57,9	68,47	10,57	73,38	15,48
91	[2.2]metacyclophane	C16H16	2319-97-3	Apprentissage	78,5	97,99	19,49	121,97	43,47
92	[2.2]paracyclophane	C16H16	1633-22-3	Apprentissage	144,7	97,99	46,71	121,97	22,73
93	[2.2]metaparacyclophane	C16H16	5385-36-4	Apprentissage	130,9	97,99	32,91	121,97	8,93
94	Pyrene, 1,2,3,6,7,8-hexahydro-	C16H16	1732-13-4	Apprentissage	-44,1	-14,2	29,9	-46,34	2,24
95	1,1'-(1,2-ethanediyl)bis[2-methylbenzene]	C16H18	952-80-7	Apprentissage	-40	-31,75	8,25	-40,43	0,43
96	1,1'-(1,2-ethanediyl)bis[4-methylbenzene]	C16H18	538-39-6	Test	-42,1	-38,06	4,04	-19,56	22,54
97	1,1'-(1,4-butanediyl)bis-benzene	C16H18	1083-56-3	Apprentissage	-9,9	-4,83	5,07	-34,41	24,51
98	Tricyclo[8.2.2.24,7]hexadecane	C16H28	283-68-1	Apprentissage	-244	-297,55	53,55	-299,72	55,72
99	Cyclohexadecane	C16H32	295-65-8	Apprentissage	-403,4	-404,69	1,29	-414,07	10,67
100	Cycloheptadecane	C17H34	295-97-6	Test	-430,4	-438,89	8,49	-448,69	18,29
101	Triphenylene	C18H12	217-59-4	Apprentissage	151,8	156,51	4,71	136,84	14,96
102	Chrysene	C18H12	218-01-9	Apprentissage	145,3	149,2	3,9	171,30	26,00
103	Benzo[c]phenanthrene	C18H12	195-19-7	Apprentissage	184,9	149,2	35,7	171,30	13,60
104	Benzo[a]anthracene	C18H12	56-55-3	Apprentissage	170,8	144,68	26,12	148,46	22,34
105	Naphthacene	C18H12	92-24-0	Test	158,8	140,17	18,63	145,47	13,33
106	5,12-dihydro-naphthacene	C18H14	959-02-4	Apprentissage	106,4	102,19	4,21	94,91	11,49
107	p-Terphenyl	C18H14	92-94-4	Test	163	158,22	4,78	156,22	6,78
108	o-Terphenyl	C18H14	84-15-1	Apprentissage	179,8	161,37	18,43	171,23	8,57

109	m-Terphenyl	C18H14	92-06-8	Test	161,6	155,76	5,84	160,41	1,19
110	[18]annulene	C18H18	2040-73-5	Apprentissage	163,4	214,68	51,28	163,57	0,17
111	3,4,5,6-tetramethylphenanthrene	C18H18	08/06/7343	Apprentissage	23,4	11,09	12,31	25,97	2,57
112	2,4,5,7-tetramethylphenanthrene	C18H18	7396-38-5	Apprentissage	12,2	-6,96	19,16	14,54	2,34
113	[3.3]paracyclophane	C18H20	2913-24-8	Apprentissage	26,3	29,58	3,28	43,02	16,72
114	1,2,3,4,5,6,7,8,9,10,11,12-dodecahydro-triphenylene	C18H24	1610-39-5	Apprentissage	-193,9	-191,2	2,7	-229,35	35,45
115	1,2,4-Tri-tert-butylbenzene	C18H30	1459-11-6	Apprentissage	-251,6	-269,27	17,67	-281,63	30,03
116	1,3,5-Tri-tert-butylbenzene	C18H30	1460-02-2	Apprentissage	-321,9	-278,17	43,73	-314,02	7,88
117	Octadecane	C18H38	593-45-3	Apprentissage	-567,4	-570,98	3,58	-556,50	10,90
118	Hexane, 3,4-bis(1,1-dimethylethyl)-2,2,5,5-tetramethyl-	C18H38	62850-21-9	Apprentissage	-325	-416	91	-322,85	2,15
119	Triphenylmethane	C19H16	519-73-3	Apprentissage	171,2	201,05	29,85	181,06	9,86
120	2,2',4,4',5,5'-hexamethyldiphenylmethane	C19H24	4957-16-8	Apprentissage	-154,4	-134,95	19,45	-137,98	16,42
121	Corannulene	C20H10	5821-51-2	Apprentissage	342,2	264,07	78,13	308,26	33,94
122	Perylene	C20H12	198-55-0	Apprentissage	182,8	157,55	25,25	174,55	8,25
123	Benzo[k]fluoranthene	C20H12	207-08-9	Apprentissage	172,4	216,06	43,66	181,90	9,50
124	9,10-dihydro-9,10[1',2']benzenoanthracene	C20H14	477-75-8	Apprentissage	217,1	165,27	51,83	198,12	18,98
125	1,1',1''-(1-ethenyl-2-ylidene)tris-benzene	C20H16	58-72-0	Apprentissage	233,4	205,42	27,98	226,46	6,94
126	5,8-dimethylbenzo[c]phenanthrene	C20H16	54986-63-9	Apprentissage	108,2	86,56	21,64	79,76	28,44
127	1,12-dimethylbenzo[c]phenanthrene	C20H16	4076-43-1	Apprentissage	154,5	109,79	44,71	142,81	11,69
128	3,9-dimethylbenz[a]anthracene	C20H16	316-51-8	Apprentissage	76,2	79,99	3,79	87,04	10,84
129	1,12-dimethylbenz[a]anthracene	C20H16	313-74-6	Apprentissage	139	131,8	7,2	140,02	1,02
130	9,10-dimethyl-1,2-benzanthracene	C20H16	57-97-6	Test	143,8	147,42	3,62	141,13	2,67
131	5,6-dimethylchrysene	C20H16	3697-27-6	Apprentissage	132,5	109,62	22,88	131,06	1,44
132	1,1,1-triphenylethane	C20H18	5271-39-6	Apprentissage	157,2	185,13	27,93	189,10	31,90
133	1,1,2-triphenylethane	C20H18	1520-42-9	Apprentissage	130,2	141	10,8	122,84	7,36
134	1-(2-naphthalenylmethyl)naphthalene	C21H16	611-48-3	Test	162	191,34	29,34	207,77	45,77
135	1',2',3',4'-tetrahydro-1,2-dinaphthylmethane	C21H20	56818-06-5	Apprentissage	44,1	58,48	14,38	44,16	0,06
136	[1.8]paracyclophane	C21H26	6169-94-4	Apprentissage	-81,9	-73,03	8,87	-71,12	10,78
137	Benzo[b]triphenylene	C22H14	215-58-7	Test	184,8	191,13	6,33	169,18	15,62
138	Dibenz[a,h]anthracene	C22H14	53-70-3	Apprentissage	179	183,81	4,81	193,21	14,21
139	1,2,4,5-tetra-tert-butylbenzene	C22H38	796-97-4	Apprentissage	-297,9	-368,98	71,08	-309,80	11,90
140	Meso-3,4-di-1-cyclohexen-1-yl-2,2,5,5-tetramethylhexane	C22H38	62678-54-0	Apprentissage	-361,7	-339,83	21,87	-367,94	6,24
141	Tris(2-methylphenyl)ethylene	C23H22	62155-47-9	Apprentissage	125,2	102,83	22,37	115,32	9,88
142	Tris(4-methylphenyl)ethylene	C23H22	6629-83-0	Apprentissage	121,2	93,36	27,84	134,75	13,55
143	1,1,2-Tri-o-tolyethane	C23H24		Apprentissage	24,4	38,41	14,01	43,57	19,17
144	1,1,2-Tri-p-tolyethane	C23H24	27497-47-8	Apprentissage	16,4	28,94	12,54	25,79	9,39
145	Coronene	C24H12	191-07-1	Apprentissage	152,3	234,78	82,48	186,55	34,25
146	1,3,5-triphenylbenzene	C24H18	612-71-5	Test	224,6	210,51	14,09	219,46	5,14

147	p-Quaterphenyl	C24H18	135-70-6	Apprentissage	227	221,07	5,93	220,56	6,44
148	[6.6]paracyclophane	C24H32	4384-23-0	Apprentissage	-192	-175,64	16,36	-181,92	10,08
149	Tetraphenylmethane	C25H20	630-76-2	Test	292	352,62	60,62	306,40	14,40
150	1,3,6-triphenylcycloheptatriene	C25H20	17760-68-8	Apprentissage	273,9	252,42	21,48	258,87	15,03
151	9,10-diphenylanthracene	C26H18	1499-10-1	Apprentissage	308,7	308,7	0	311,44	2,74
152	9,9'-Bifluorenyl	C26H18	1530-12-7	Apprentissage	197,5	197,5	0	197,69	0,19
153	Tetraphenylethylene	C26H20	632-51-9	Apprentissage	311,5	322,94	11,44	311,12	0,38
154	1,1,1,2-tetraphenylethane	C26H22	2294-94-2	Apprentissage	233	273,58	40,58	253,91	20,91
155	1,1,2,2-tetraphenylethane	C26H22	632-50-8	Test	220	231,22	11,22	222,68	2,68
156	3-phenyleicosane	C26H46	04/02/2400	Apprentissage	-548,8	-549,62	0,82	-544,57	4,23
157	9,9'-bianthracene	C28H18	1055-23-8	Apprentissage	326,2	329,8	3,6	325,64	0,56
158	9,9'-biphenanthryl	C28H18	20532-03-0	Apprentissage	212,8	262,54	49,74	241,40	28,60
159	1,1,4,4-tetraphenyl-1,3-butadiene	C28H22	1450-63-1	Apprentissage	329,9	315,53	14,37	329,92	0,02
160	1,2,3,4-tetraphenyl-1,3-butadiene	C28H22	806-71-3	Test	358,9	320,47	38,43	399,05	40,15
161	9,9'-Dimethyl-9,9'-bifluorenyl	C28H22	15300-82-0	Apprentissage	204,2	221,04	16,84	146,96	57,24
162	1,1,4,4-tetraphenylbutane	C28H26	1483-64-3	Apprentissage	163,3	175,62	12,32	166,83	3,53
163	Tetra-p-tolylethene	C30H28	5831-43-6	Apprentissage	171,5	173,53	2,03	172,01	0,51
164	1,1,2,2-Tetra-p-tolylethane	C30H30	40673-57-2	Apprentissage	73,6	81,82	8,22	60,81	12,79
165	Cyclotriacontane	C30H60	297-35-8	Apprentissage	-895,7	-883,54	12,16	-895,58	0,12
166	13-phenylpentacosane	C31H56	6006-90-2	Test	-687	-688,64	1,64	-692,26	5,26
167	Pentaphenylethane	C32H26	19112-42-6	Apprentissage	381,2	363,81	17,39	368,96	12,24
168	Dotriacontane	C32H66	544-85-4	Apprentissage	-967,8	-960,23	7,57	-985,85	18,05
169	Hexaphenylethane	C38H30	18909-18-7	Apprentissage	511,8	445,39	66,41	512,02	0,22
170	5,6,11,12-tetraphenyl-naphthacene	C42H28	517-51-1	Test	620,3	546,46	73,84	619,00	1,30
171	Oxalic acid	C2H2O4	144-62-7	Apprentissage	-828,93	-809,37	19,56	-828,09	0,84
172	Dioxybismethanol	C2H6O4	17088-73-2	Apprentissage	-665,8	-651,77	14,03	-662,55	3,25
173	Malonic acid	C3H4O4	141-82-2	Apprentissage	-891,1	-902,52	11,42	-896,37	5,27
174	(S)-2-hydroxypropanoic acid	C3H6O3	79-33-4	Apprentissage	-694,08	-697,84	3,76	-698,97	4,89
175	1,3,5-Trioxane	C3H6O3	110-88-3	Apprentissage	-522,3	-546,08	23,78	-534,77	12,47
176	Maleic anhydride	C4H2O3	108-31-6	Apprentissage	-470,41	-475,78	5,37	-466,90	3,51
177	2-butynedioic acid	C4H2O4	142-45-0	Apprentissage	-577,4	-636,05	58,65	-609,60	32,20
178	3,4-dihydroxy-3-cyclobutene-1,2-dione	C4H2O4	2892-51-5	Apprentissage	-598,2	-639,15	40,95	-622,18	23,98
179	3-butynoic acid	C4H4O2	2345-51-9	Apprentissage	-241,8	-241,37	0,43	-239,87	1,93
180	Succinic anhydride	C4H4O3	108-30-5	Apprentissage	-608,6	-552,2	56,4	-562,36	46,24
181	(Z)-2-butenedioic acid	C4H4O4	110-16-7	Apprentissage	-790,57	-791,19	0,62	-798,99	8,42
182	(E)-2-butenedioic acid	C4H4O4	110-17-8	Apprentissage	-810,98	-791,19	19,79	-798,99	11,99
183	1,4-Dioxane-2,5-dione	C4H4O4	502-97-6	Apprentissage	-704	-736,63	32,63	-731,74	27,74
184	Ethylene oxalate	C4H4O4	3524-70-7	Apprentissage	-697	-736,63	39,63	-731,74	34,74

185	Butanedioic acid	C4H6O4	110-15-6	Apprentissage	-940	-952,35	12,35	-942,19	2,19
186	Ethanedioic acid dimethyl ester	C4H6O4	553-90-2	Apprentissage	-756,73	-778,77	22,04	-756,80	0,07
187	(R)-hydroxybutanedioic acid	C4H6O5	636-61-3	Apprentissage	-1105,7	-1126,71	21,01	-1106,10	0,40
188	(S)-hydroxybutanedioic acid	C4H6O5	97-67-6	Test	-1103,7	-1126,71	23,01	-1106,10	2,40
189	2(R),3(S)-1,2,3,4-butanetetrol	C4H10O4	149-32-6	Apprentissage	-910,4	-923,26	12,86	-912,43	2,03
190	Furancarboxylic acid	C5H4O3	26447-28-9	Apprentissage	-498,48	-497,83	0,65	-470,32	28,16
191	3-pentynoic acid	C5H6O2	36781-65-4	Apprentissage	-292,3	-294,3	2	-264,61	27,69
192	(E)-2-methyl-2-butenedioic acid	C5H6O4	498-24-8	Apprentissage	-824,4	-850,23	25,83	-824,63	0,23
193	Methylenebutanedioic acid	C5H6O4	97-65-4	Apprentissage	-841,11	-841,11	0	-841,05	0,06
194	2-oxopentanedioic acid	C5H6O5	328-50-7	Apprentissage	-1027,89	-1059,54	31,65	-1031,66	3,77
195	Methylbutanedioic acid	C5H8O4	498-21-5	Apprentissage	-958,2	-965,9	7,7	-954,82	3,38
196	Pentanedioic acid	C5H8O4	110-94-1	Apprentissage	-960	-957,83	2,17	-963,95	3,95
197	Ethylmalonic acid	C5H8O4	601-75-2	Apprentissage	-955,3	-943,88	11,42	-950,21	5,09
198	Cis-1,2-cyclopentenediol	C5H10O2	5057-98-7	Apprentissage	-485,1	-477,94	7,16	-479,78	5,32
199	Trans-1,2-cyclopentenediol	C5H10O2	5057-99-8	Apprentissage	-490,1	-477,94	12,16	-479,78	10,32
200	Propanoic acid, 2,2-dimethyl-	C5H10O2	75-98-9	Apprentissage	-564,5	-564,5	0	-564,48	0,02
201	α -D-xylose	C5H10O5	31178-70-8	Apprentissage	-1057,8	-1041,63	16,17	-1053,54	4,26
202	D-ribose	C5H10O5	50-69-1	Apprentissage	-1050,9	-1054,47	3,57	-1054,41	3,51
203	D-arabinose	C5H10O5	10323-20-3	Apprentissage	-1057,9	-1054,47	3,43	-1054,41	3,49
204	1,3,5,7,9-Pentaoxecane	C5H10O5	16528-92-0	Apprentissage	-867,7	-847,09	20,61	-849,68	18,02
205	2,2-dimethyl-1,3-propanediol	C5H12O2	126-30-7	Apprentissage	-551	-542,76	8,24	-562,39	11,39
206	2-(hydroxymethyl)-2-methyl-1,3-propanediol	C5H12O3	77-85-0	Apprentissage	-740,78	-728,29	12,49	-732,86	7,92
207	2,2-bis(hydroxymethyl)-1,3-propanediol	C5H12O4	115-77-5	Apprentissage	-920,5	-913,82	6,68	-899,77	20,73
208	Xylitol	C5H12O5	87-99-0	Apprentissage	-1118,5	-1131,64	13,14	-1116,85	1,65
209	Phenol	C6H6O	108-95-2	Test	-165,1	-173,52	8,42	-182,62	17,52
210	Hydroquinone	C6H6O2	123-31-9	Apprentissage	-371,1	-379,54	8,44	-383,68	12,58
211	Resorcinol	C6H6O2	108-46-3	Test	-370,7	-382,01	11,31	-380,91	10,21
212	1,2-Benzenediol	C6H6O2	120-80-9	Apprentissage	-362,3	-376,39	14,09	-377,31	15,01
213	1,2,3-Benzenetriol	C6H6O3	87-66-1	Apprentissage	-551,1	-569,01	17,91	-555,67	4,57
214	1,2,4-Benzenetriol	C6H6O3	533-73-3	Test	-563,8	-587,24	23,44	-561,99	1,81
215	1,3,5-Benzenetriol	C6H6O3	108-73-6	Apprentissage	-584,6	-596,13	11,53	-589,86	5,26
216	2,5-Furandione, 3,4-dimethyl-	C6H6O3	766-39-2	Apprentissage	-574,5	-558,91	15,59	-530,96	43,54
217	(E)-1-propene-1,2,3-tricarboxylic acid	C6H6O6	4023-65-8	Apprentissage	-1233	-1221,22	11,78	-1225,49	7,51
218	(Z)-1-propene-1,2,3-tricarboxylic acid	C6H6O6	585-84-2	Apprentissage	-1217,01	-1221,22	4,21	-1225,49	8,48
219	L-ascorbic acid	C6H8O6	50-81-7	Apprentissage	-1164,6	-1194,54	29,94	-1162,33	2,27
220	Citric acid	C6H8O7	77-92-9	Apprentissage	-1543,8	-1559,81	16,01	-1540,42	3,38
221	D-glucaric acid 1,4-lactone	C6H8O7	389-36-6	Apprentissage	-1435,8	-1404,55	31,25	-1436,69	0,89
222	D-glucaric acid 3,6-lactone	C6H8O7	09/04/2782	Test	-1437,5	-1404,55	32,95	-1436,69	0,81

223	2,2-dimethylbutanedioic acid	C6H10O4	597-43-3	Apprentissage	-987,8	-970,12	17,68	-992,73	4,93
224	Meso-2,3-dimethylbutanedioic acid	C6H10O4	608-39-9	Apprentissage	-977,5	-980,65	3,15	-980,62	3,12
225	Racemic-2,3-dimethylbutanedioic acid	C6H10O4	608-40-2	Apprentissage	-983,8	-980,65	3,15	-980,62	3,18
226	(-)-2,3-dimethylbutanedioic acid	C6H10O4	57694-62-9	Test	-982,5	-980,65	1,85	-980,62	1,88
227	2-ethylbutanedioic acid	C6H10O4	636-48-6	Apprentissage	-989,2	-993,7	4,5	-980,14	9,06
228	Hexanedioic acid	C6H10O4	124-04-9	Apprentissage	-998,22	-985,64	12,58	-994,21	4,01
229	5-(1 α ,2 β ,3 β ,4 α)-1,2,3,4-cyclohexenetetrol	C6H10O4	526-87-4	Apprentissage	-836	-831,75	4,25	-840,87	4,87
230	1,2-anhydro-3,4,5,6-alloinositol	C6H10O5	23559-36-6	Apprentissage	-906	-945,27	39,27	-907,26	1,26
231	Citric acid monohydrate	C6H10O8	5949-29-1	Apprentissage	-1838	-1824,99	13,01	-1837,50	0,50
232	α -D-glucose	C6H12O6	26655-34-5	Apprentissage	-1274,5	-1284,19	9,69	-1271,07	3,43
233	L-sorbose	C6H12O6	87-79-6	Apprentissage	-1271,5	-1261,04	10,46	-1270,28	1,22
234	β -D-fructose	C6H12O6	57-48-7	Test	-1265,6	-1261,04	4,56	-1270,28	4,68
235	D-mannose	C6H12O6	3458-28-4	Apprentissage	-1263	-1262,86	0,14	-1262,98	0,02
236	α -D-galactose	C6H12O6	3646-73-9	Test	-1286,3	-1284,19	2,11	-1271,07	15,23
237	β -D-Glucopyranose	C6H12O6	28905-12-6	Test	-1268,3	-1284,19	15,89	-1271,07	2,77
238	1,6-hexanediol	C6H14O2	629-11-8	Apprentissage	-574,1	-575,82	1,72	-565,78	8,32
239	2-ethyl-2-(hydroxymethyl)-1,3-propanediol	C6H14O3	77-99-6	Apprentissage	-751	-756,09	5,09	-763,32	12,32
240	D-mannitol	C6H14O6	69-65-8	Apprentissage	-1337,5	-1340,03	2,53	-1346,37	8,87
241	Galactitol	C6H14O6	608-66-2	Apprentissage	-1346,8	-1340,03	6,77	-1346,37	0,43
242	Sorbitol	C6H14O6	50-70-4	Apprentissage	-1353,7	-1340,03	13,67	-1346,37	7,33
243	α -D-glucose hydrate	C6H14O7	16824-90-1	Apprentissage	-1572,3	-1549,38	22,92	-1578,60	6,30
244	Benzoic acid	C7H6O2	65-85-0	Apprentissage	-384,8	-380,54	4,26	-399,02	14,22
245	2-hydroxy-2,4,6-cycloheptatrien-1-one	C7H6O2	533-75-5	Apprentissage	-239	-220,27	18,73	-239,21	0,21
246	2-Propenal, 3-(2-furanyl)-	C7H6O2	623-30-3	Apprentissage	-182	-164,39	17,61	-182,58	0,58
247	Perbenzoic acid	C7H6O3	93-59-4	Apprentissage	-367	-299,18	67,82	-367,71	0,71
248	Salicylic acid	C7H6O3	69-72-7	Apprentissage	-585,3	-583,41	1,89	-587,11	1,81
249	3-(2-furanyl)-2-propenoic acid	C7H6O3	539-47-9	Apprentissage	-459	-451,49	7,51	-456,49	2,51
250	4-hydroxybenzoic acid	C7H6O3	99-96-7	Apprentissage	-594,5	-586,56	7,94	-597,14	2,64
251	2-methylphenol	C7H8O	95-48-7	Apprentissage	-204,6	-207,71	3,11	-211,55	6,95
252	4-methylphenol	C7H8O	106-44-5	Apprentissage	-199,3	-210,87	11,57	-220,03	20,73
253	Trimethylbutanedioic acid	C7H12O4	2103-16-4	Apprentissage	-1000,8	-1000,8	0	-1000,77	0,03
254	Heptanedioic acid	C7H12O4	111-16-0	Test	-1009,4	-1013,44	4,04	-1024,37	14,97
255	α -D-methylglucopyranoside	C7H14O6	97-30-3	Apprentissage	-1228,2	-1243,55	15,35	-1227,81	0,39
256	β -D-methylglucopyranoside	C7H14O6	709-50-2	Test	-1237,5	-1243,55	6,05	-1227,81	9,69
257	Phthalic anhydride	C8H4O3	85-44-9	Apprentissage	-460,37	-418,47	41,9	-463,36	2,99
258	1,2-benzenedicarboxylic acid	C8H6O4	88-99-3	Apprentissage	-781,91	-768,01	13,9	-790,76	8,85
259	1,3-benzenedicarboxylic acid	C8H6O4	121-91-5	Apprentissage	-801,5	-796,05	5,45	-803,80	2,30
260	1,4-benzenedicarboxylic acid	C8H6O4	100-21-0	Apprentissage	-816,17	-793,58	22,59	-814,66	1,51

261	1-(2-hydroxyphenyl)ethanone	C8H8O2	118-93-4	Apprentissage	-357,6	-354,4	3,2	-353,61	3,99
262	1-(3-hydroxyphenyl)ethanone	C8H8O2	121-71-1	Apprentissage	-370,6	-360,02	10,58	-369,78	0,82
263	1-(4-hydroxyphenyl)ethanone	C8H8O2	99-93-4	Test	-364,3	-357,55	6,75	-384,07	19,77
264	2-methylbenzoic acid	C8H8O2	118-90-1	Apprentissage	-416,5	-414,73	1,77	-426,93	10,43
265	3-methylbenzoic acid	C8H8O2	99-04-7	Apprentissage	-424,9	-420,35	4,55	-432,02	7,12
266	4-methylbenzoic acid	C8H8O2	99-94-5	Test	-423,3	-417,89	5,41	-437,51	14,21
267	3-Buten-2-one, 4-(2-furanyl)-	C8H8O2	623-15-4	Apprentissage	-240,3	-268,69	28,39	-249,19	8,89
268	3-hydroxy-4-methoxy-benzaldehyde	C8H8O3	621-59-0	Apprentissage	-453,4	-471,1	17,7	-453,25	0,15
269	2,4-dihydroxyacetophenone	C8H8O3	89-84-9	Apprentissage	-573,5	-565,25	8,25	-591,11	17,61
270	(R,S)- α -hydroxybenzeneacetic acid	C8H8O3	611-72-3	Apprentissage	-579,4	-582,88	3,48	-576,75	2,65
271	(S)- α -hydroxybenzeneacetic acid	C8H8O3	17199-29-0	Test	-580,6	-582,88	2,28	-576,75	3,85
272	2-methoxybenzoic acid	C8H8O3	579-75-9	Apprentissage	-538,5	-544,17	5,67	-542,71	4,21
273	3-methoxybenzoic acid	C8H8O3	586-38-9	Apprentissage	-553,5	-549,79	3,71	-543,06	10,44
274	4-methoxybenzoic acid	C8H8O3	100-09-4	Apprentissage	-561,7	-547,32	14,38	-545,06	16,64
275	4-ethylphenol	C8H10O	123-07-9	Apprentissage	-224,4	-243,7	19,3	-233,22	8,82
276	2,3-dimethylphenol	C8H10O	526-75-0	Apprentissage	-241,3	-231,66	9,64	-235,29	6,01
277	2,5-dimethylphenol	C8H10O	95-87-4	Apprentissage	-246,3	-249,89	3,59	-245,09	1,21
278	2,6-dimethylphenol	C8H10O	576-26-1	Test	-233,1	-231,66	1,44	-235,29	2,19
279	3,4-dimethylphenol	C8H10O	95-65-8	Apprentissage	-242,4	-249,89	7,49	-245,09	2,69
280	3,5-dimethylphenol	C8H10O	108-68-9	Apprentissage	-244,5	-258,78	14,28	-252,12	7,62
281	1,4-benzenedimethanol	C8H10O2	589-29-7	Apprentissage	-394	-415,32	21,32	-391,72	2,28
282	1,3-Cyclobutanedione, 2,2,4,4-tetramethyl-	C8H12O2	933-52-8	Apprentissage	-379,9	-440,72	60,82	-393,39	13,49
283	1,3-Cyclohexanedione, 5,5-dimethyl-	C8H12O2	126-81-8	Apprentissage	-483,4	-506,43	23,03	-491,53	8,13
284	1,3-Cyclohexanedione, 4,4-dimethyl-	C8H12O2	562-46-9	Apprentissage	-499,6	-506,43	6,83	-491,53	8,07
285	Cis-cyclohexane-1,2-dicarboxylic acid	C8H12O4	610-09-3	Test	-961,1	-983,17	22,07	-970,79	9,69
286	Trans-cyclohexane-1,2-dicarboxylic acid	C8H12O4	2305-32-0	Apprentissage	-970,7	-983,17	12,47	-970,79	0,09
287	2,5-dimethyl-3-hexyne-2,5-diol	C8H14O2	142-30-3	Apprentissage	-386	-397,75	11,75	-383,83	2,17
288	Tetramethylbutanedioic acid	C8H14O4	630-51-3	Apprentissage	-1012,4	-1014,56	2,16	-1010,22	2,18
289	2,2-diethylbutanedioic acid	C8H14O4	5692-97-7	Apprentissage	-1032,7	-1025,73	6,97	-1039,40	6,70
290	Meso-2,3-diethylbutanedioic acid	C8H14O4	35392-80-4	Apprentissage	-1019,2	-1035,05	15,85	-1017,09	2,11
291	Racemic-2,3-diethylbutanedioic acid	C8H14O4	35392-77-9	Apprentissage	-1026,3	-1035,05	8,75	-1017,09	9,21
292	Octanedioic acid	C8H14O4	505-48-6	Test	-1038	-1041,24	3,24	-1054,46	16,46
293	2,5-Dihydroperoxy-2,5-dimethylhex-3-yne	C8H14O4	3491-36-9	Apprentissage	-257,6	-283,4	25,8	-257,48	0,12
294	2,5-dimethyl-2,5-hexanediol	C8H18O2	110-03-2	Apprentissage	-682	-682,54	0,54	-688,21	6,21
295	1,8-Octanediol	C8H18O2	629-41-4	Apprentissage	-626,6	-631,43	4,83	-628,20	1,60
296	1,2,3-benzenetricarboxylic acid	C9H6O6	569-51-7	Apprentissage	-1160,4	-1145,22	15,18	-1157,15	3,25
297	1,2,4-benzenetricarboxylic acid	C9H6O6	528-44-9	Apprentissage	-1179,2	-1185,87	6,67	-1161,18	18,02
298	1,3,5-benzenetricarboxylic acid	C9H6O6	554-95-0	Apprentissage	-1190,1	-1217,19	27,09	-1193,53	3,43

299	(Z)-3-phenyl-2-propenoic acid	C9H8O2	102-94-3	Apprentissage	-312,1	-321,43	9,33	-313,20	1,10
300	(E)-3-phenyl-2-propenoic acid	C9H8O2	140-10-3	Test	-325,3	-321,43	3,87	-313,20	12,10
301	2-acetoxybenzoic acid	C9H8O4	50-78-2	Apprentissage	-758,1	-769,64	11,54	-765,70	7,60
302	2,3-dimethylbenzoic acid	C9H10O2	603-79-2	Apprentissage	-450,4	-438,68	11,72	-449,07	1,33
303	2,4-dimethylbenzoic acid	C9H10O2	611-01-8	Apprentissage	-458,5	-456,91	1,59	-450,97	7,53
304	2,5-dimethylbenzoic acid	C9H10O2	610-72-0	Test	-456,1	-456,91	0,81	-450,97	5,13
305	2,6-dimethylbenzoic acid	C9H10O2	632-46-2	Apprentissage	-440,7	-438,68	2,02	-449,07	8,37
306	3,4-dimethylbenzoic acid	C9H10O2	619-04-5	Apprentissage	-468,8	-456,91	11,89	-450,97	17,83
307	3,5-dimethylbenzoic acid	C9H10O2	499-06-9	Apprentissage	-466,43	-465,8	0,63	-480,35	13,92
308	2-ethylbenzoic acid	C9H10O2	612-19-1	Apprentissage	-441,4	-447,57	6,17	-422,95	18,45
309	3-ethylbenzoic acid	C9H10O2	619-20-5	Test	-445,9	-453,18	7,28	-431,23	14,67
310	4-ethylbenzoic acid	C9H10O2	619-64-7	Apprentissage	-454,5	-450,72	3,78	-440,65	13,85
311	Benzoic acid, 4-methyl-, methyl ester	C9H10O2	99-75-2	Test	-393,3	-370,61	22,69	-395,01	1,71
312	2-(diacetylmethyl)furan	C9H10O5	613-75-2	Apprentissage	-882,4	-903,96	21,56	-886,95	4,55
313	2-isopropylphenol	C9H12O	88-69-7	Apprentissage	-246,6	-253,06	6,46	-248,16	1,56
314	3-isopropylphenol	C9H12O	618-45-1	Test	-263	-258,68	4,32	-254,19	8,81
315	4-isopropylphenol	C9H12O	99-89-8	Apprentissage	-270	-256,22	13,78	-257,64	12,36
316	Phenol, 2,4,6-trimethyl-	C9H12O	527-60-6	Apprentissage	-270	-275,89	5,89	-279,53	9,53
317	Benzenemethanol, α,α -dimethyl-	C9H12O	617-94-7	Apprentissage	-250,4	-246,6	3,8	-262,13	11,73
318	Nonanedioic acid	C9H16O4	123-99-9	Apprentissage	-1054,3	-1069,05	14,75	-1084,49	30,19
319	4-hydroxy-2H-pyran-3,3,5,5,(4H,6H)-tetramethanol	C9H18O6	4744-47-2	Apprentissage	-1267,7	-1283,51	15,81	-1268,05	0,35
320	2,6-dimethyl-2,6-heptanediol	C9H20O2	6257-51-8	Apprentissage	-761,1	-710,34	50,76	-717,19	43,91
321	1,2,3,4-benzenetetracarboxylic acid	C10H6O8	476-73-3	Apprentissage	-1548,6	-1544,41	4,19	-1552,41	3,81
322	1,2,3,5-benzenetetracarboxylic acid	C10H6O8	479-47-0	Apprentissage	-1562,3	-1565,15	2,85	-1545,82	16,48
323	1,2,4,5-benzenetetracarboxylic acid	C10H6O8	89-05-4	Apprentissage	-1570,8	-1576,17	5,37	-1584,21	13,41
324	1-naphthol	C10H8O	90-15-3	Apprentissage	-121	-117,44	3,56	-129,14	8,14
325	2-naphthol	C10H8O	135-19-3	Apprentissage	-124,2	-130,08	5,88	-121,86	2,34
326	11-Oxabicyclo[4.4.1]undeca-1,3,5,7,9-pentaene	C10H8O	4759-11-9//	Apprentissage	120	99,46	20,54	99,02	20,98
327	3-Phenylcyclobutenone	C10H8O	38425-47-7	Apprentissage	27,8	-7,78	35,58	32,60	4,80
328	2,7-naphthalenediol	C10H8O2	582-17-2	Apprentissage	-326,1	-331,1	5	-323,46	2,64
329	2,3-naphthalenediol	C10H8O2	92-44-4	Test	-316,4	-329,45	13,05	-295,37	21,03
330	1,4-Naphthalenediol	C10H8O2	571-60-8	Apprentissage	-317,4	-308,42	8,98	-393,85	76,45
331	1,2-Dihydroxynaphthalene	C10H8O2	574-00-5	Apprentissage	-309,8	-315,9	6,1	-307,59	2,21
332	1,3-Naphthalenediol	C10H8O2	132-86-5	Apprentissage	-327,2	-324,93	2,27	-334,70	7,50
333	1(2H)-Naphthalenone, 3,4-dihydro-	C10H10O	529-34-0	Apprentissage	-209,6	-194,41	15,19	-182,39	27,21
334	3-Buten-2-one, 4-phenyl-	C10H10O	122-57-6	Apprentissage	-102	-138,63	36,63	-102,51	0,51
335	Phenylbutanedioic acid	C10H10O4	635-51-8	Apprentissage	-841	-854,92	13,92	-848,71	7,71
336	2,4-diacetyl-1,3-benzenediol	C10H10O4	04/12/2163	Apprentissage	-753,5	-739,61	13,89	-764,48	10,98

337	4,6-diacetyl-1,3-benzenediol	C10H10O4	2161-85-5	Apprentissage	-776,5	-748,95	27,55	-756,77	19,73
338	1,3-benzenedicarboxylic acid dimethyl ester	C10H10O4	1459-93-4	Test	-730,1	-701,5	28,6	-706,76	23,34
339	1,4-benzenedicarboxylic acid dimethyl ester	C10H10O4	120-61-6	Apprentissage	-710	-699,03	10,97	-712,87	2,87
340	Dimethyl phthalate	C10H10O4	131-11-3	Apprentissage	-683,8	-695,88	12,08	-703,90	20,10
341	1,2,3,4-tetrahydro-1-naphthol	C10H12O	529-33-9	Apprentissage	-241,4	-232,63	8,77	-245,41	4,01
342	5,6,7,8-tetrahydro-1-naphthol	C10H12O	529-35-1	Apprentissage	-285,3	-233,34	51,96	-274,86	10,44
343	1-Tetralol	C10H12O	5929-35-1	Apprentissage	-285,3	-232,63	52,67	-245,41	39,89
344	2,4-dimethylphenylacetic acid	C10H12O2	6331-04-0	Apprentissage	-504,2	-463,14	41,06	-497,97	6,23
345	2,3,4-trimethylbenzoic acid	C10H12O2	1076-47-7	Apprentissage	-486,6	-484,59	2,01	-480,65	5,95
346	2,3,5-trimethylbenzoic acid	C10H12O2	2437-66-3	Test	-488,9	-482,91	5,99	-501,01	12,11
347	2,3,6-trimethylbenzoic acid	C10H12O2	2529-36-4	Apprentissage	-475,6	-484,59	8,99	-480,65	5,05
348	2,4,5-trimethylbenzoic acid	C10H12O2	528-90-5	Apprentissage	-495,8	-493,93	1,87	-478,53	17,27
349	2,4,6-trimethylbenzoic acid	C10H12O2	480-63-7	Test	-477,8	-482,91	5,11	-501,01	23,21
350	3,4,5-trimethylbenzoic acid	C10H12O2	1076-88-6	Apprentissage	-500,8	-482,91	17,89	-501,01	0,21
351	2-hydroxy-4-isopropyl-2,4,6-cycloheptatrien-1-one	C10H12O2	499-44-5	Apprentissage	-340,6	-323,7	16,9	-340,46	0,14
352	Benzoic acid, 2-(1-methylethyl)-	C10H12O2	2438-04-2//	Apprentissage	-460,2	-460,08	0,12	-470,24	10,04
353	Benzoic acid, 3-(1-methylethyl)-	C10H12O2	5651-47-8	Apprentissage	-479,6	-465,7	13,9	-475,99	3,61
354	Benzoic acid, 4-(1-methylethyl)-	C10H12O2	536-66-3	Apprentissage	-483,8	-463,24	20,56	-482,40	1,40
355	1,3-Dioxolane, 2-methyl-2-phenyl-	C10H12O2	3674-77-9	Apprentissage	-343,8	-347,01	3,21	-352,23	8,43
356	1,2,3,4-Tetrahydro-1-hydroperoxynaphthalene	C10H12O2	26447-24-5	Apprentissage	-187,4	-197,3	9,9	-186,36	1,04
357	1-monobenzoylglycerol	C10H12O4	3376-59-8	Apprentissage	-777,4	-774,97	2,43	-778,11	0,71
358	1,2,3-propanetriol 2-benzoate	C10H12O4		Apprentissage	-772,8	-765,85	6,95	-772,94	0,14
359	2-isopropyl-5-methylphenol	C10H14O	89-83-8	Apprentissage	-280	-295,24	15,24	-282,68	2,68
360	Phenol, p-tert-butyl-	C10H14O	98-54-4	Apprentissage	-270	-273,56	3,56	-281,46	11,46
361	2-Adamantanone	C10H14O	700-58-3	Apprentissage	-311	-347,22	36,22	-344,49	33,49
362	3-Methyl-4-isopropylphenol	C10H14O	3228-02-2//	Apprentissage	-290	-295,24	5,24	-282,68	7,32
363	Phenol, m-tert-butyl-	C10H14O	585-34-2	Apprentissage	-280	-276,02	3,98	-276,34	3,66
364	5-Isopropyl-3-methylphenol	C10H14O	3228-03-3//	Apprentissage	-300	-304,13	4,13	-292,53	7,47
365	Phenol, 2-methyl-3-(1-methylethyl)-	C10H14O	4371-48-6	Test	-280	-277,01	2,99	-273,72	6,28
366	2-isopropyl-m-cresol	C10H14O	3228-01-1//	Apprentissage	-270	-277,01	7,01	-273,72	3,72
367	Phenol, 4-methyl-3-(1-methylethyl)-	C10H14O	4371-46-4	Apprentissage	-270	-295,24	25,24	-282,68	12,68
368	1-adamantanol	C10H16O	768-95-6	Test	-397	-391,92	5,08	-380,63	16,37
369	2-adamantanol	C10H16O	700-57-2	Apprentissage	-388	-374,85	13,15	-359,52	28,48
370	2H-Inden-2-one, octahydro-3a-methyl-, cis-	C10H16O	13351-29-6	Apprentissage	-347,9	-392,89	44,99	-386,90	39,00
371	Camphor	C10H16O	21368-68-3	Apprentissage	-319,4	-376,14	56,74	-345,26	25,86
372	Triethylbutanedioic acid	C10H18O4	2103-18-6	Apprentissage	-1066,3	-1067,08	0,78	-1070,09	3,79
373	Decanedioic acid	C10H18O4	111-20-6	Test	-1082,6	-1087,66	5,06	-1076,27	6,33
374	Decanoic acid	C10H20O2	334-48-5	Apprentissage	-713,7	-718,1	4,4	-723,94	10,24

375	1,10-decanediol	C10H22O2	112-47-0	Apprentissage	-693,58	-687,03	6,55	-692,01	1,57
376	2,7-dimethyl-2,7-octanediol	C10H22O2	19781-07-8	Apprentissage	-730	-738,15	8,15	-745,91	15,91
377	2,2'-(oxybis(methylene)) bis(2-(hydroxymethyl))- 1,3-propanediol	C10H22O7	126-58-9	Apprentissage	-1572,3	-1542,75	29,55	-1576,91	4,61
378	Benzenepentacarboxylic acid	C11H6O10	1585-40-6	Test	-1929,7	-1931,49	1,79	-1930,68	0,98
379	1-naphthalenecarboxylic acid	C11H8O2	86-55-5	Apprentissage	-333,5	-324,46	9,04	-355,13	21,63
380	2-naphthalenecarboxylic acid	C11H8O2	93-09-4	Apprentissage	-346,1	-337,1	9	-345,55	0,55
381	3-hydroxy-2-naphthoic acid	C11H8O3	92-70-6	Apprentissage	-522,4	-536,47	14,07	-516,80	5,60
382	2,3,4,5-tetramethylbenzoic acid	C11H14O2	2529-39-7	Apprentissage	-514,6	-518,41	3,81	-515,95	1,35
383	2,3,4,6-tetramethylbenzoic acid	C11H14O2	2408-38-0	Apprentissage	-507,8	-518,41	10,61	-515,95	8,15
384	2,3,5,6-tetramethylbenzoic acid	C11H14O2	2604-45-7	Test	-506,2	-518,41	12,21	-515,95	9,75
385	3,5-diethylbenzoic acid	C11H14O2	3854-90-8	Apprentissage	-511,9	-531,47	19,57	-525,29	13,39
386	2-tert-butylbenzoic acid	C11H14O2	1077-58-3	Apprentissage	-476,2	-477,42	1,22	-473,69	2,51
387	3-tert-butylbenzoic acid	C11H14O2	7498-54-6	Test	-504,3	-483,04	21,26	-480,80	23,50
388	4-tert-butylbenzoic acid	C11H14O2	98-73-7	Apprentissage	-502,9	-480,58	22,32	-489,32	13,58
389	Adamantane-1-carboxylic acid	C11H16O2	828-51-3	Apprentissage	-643,08	-603,74	39,34	-627,57	15,51
390	Adamantane-2-carboxylic acid	C11H16O2	15897-81-1	Apprentissage	-627,18	-600,01	27,17	-614,55	12,63
391	Undecanedioic acid	C11H20O4	1852-04-6	Apprentissage	-1099,4	-1115,46	16,06	-1101,70	2,30
392	Undecanoic acid	C11H22O2	112-37-8	Test	-735,9	-745,91	10,01	-753,49	17,59
393	Benzenhexacarboxylic acid	C12H6O12	517-60-2	Apprentissage	-2298,7	-2304,32	5,62	-2298,29	0,41
394	Dibenzofuran	C12H8O	132-64-9	Apprentissage	-29,2	9,58	38,78	-31,66	2,46
395	Diphenyl ether	C12H10O	101-84-8	Apprentissage	-32,11	-32,11	0	-32,01	0,10
396	o-Hydroxybiphenyl	C12H10O	90-43-7	Test	-88	-107,51	19,51	-88,90	0,90
397	p-Hydroxybiphenyl	C12H10O	92-69-3	Apprentissage	-84	-110,66	26,66	-99,84	15,84
398	[1,1'-Biphenyl]-3-ol	C12H10O	580-51-8	Apprentissage	-88	-113,12	25,12	-96,18	8,18
399	1-naphthylacetate	C12H10O2	830-81-9	Apprentissage	-305	-303,67	1,33	-306,39	1,39
400	2-naphthylacetate	C12H10O2	1523-11-1	Apprentissage	-309,6	-316,31	6,71	-295,28	14,32
401	1-naphthaleneacetic acid	C12H10O2	86-87-3	Apprentissage	-359,19	-330,7	28,49	-352,15	7,04
402	2-naphthaleneacetic acid	C12H10O2	581-96-4	Apprentissage	-371,95	-343,34	28,61	-388,77	16,82
403	1,2,4,5-benzenetetracarboxylic acid dimethyl ester	C12H10O8	39900-53-3	Apprentissage	-1478,6	-1526,46	47,86	-1499,52	20,92
404	1,3,5-benzenetricarboxylic acid trimethyl ester	C12H12O6	2672-58-4	Apprentissage	-1101,1	-1075,37	25,73	-1092,03	9,07
405	Pentamethylbenzoic acid	C12H16O2	2243-32-5	Apprentissage	-536,3	-560,39	24,09	-539,63	3,33
406	5,5-dimethyl-2-phenyl-1,3-dioxane	C12H16O2	776-88-5	Apprentissage	-397,02	-398,79	1,77	-391,20	5,82
407	Exo-4-hydroxy-exo-exo-tetracyclo[6.2.1.13,6.02,7]dodecane	C12H18O	74007-11-7	Test	-284,9	-306,89	21,99	-297,05	12,15
408	Exo-4-hydroxy-exo-endo-tetracyclo[6.2.1.13,6.02,7]dodecane	C12H18O	107133-43-7	Apprentissage	-294,3	-306,89	12,59	-297,05	2,75
409	Exo-4-hydroxy-endo-endo-tetracyclo[6.2.1.13,6.02,7]dodecane	C12H18O	7273-98-5	Apprentissage	-264,2	-306,89	42,69	-297,05	32,85
410	1-Adamantyl methyl ketone	C12H18O	1660-04-4	Apprentissage	-382,5	-403	20,5	-384,28	1,78
411	4-tert-butyl-2,6-xylenol	C12H18O	879-97-0	Apprentissage	-350	-338,57	11,43	-340,48	9,52
412	3,5-Diisopropylphenol	C12H18O	3374-41-2	Apprentissage	-330	-349,48	19,48	-335,30	5,30

413	Benzyl alcohol, α,α -dimethyl-p-isopropyl-	C12H18O	3445-42-9	Apprentissage	-343,7	-329,3	14,4	-337,76	5,94
414	3,6-diethyloct-4-yne-3,6-diol	C12H22O2	2044-37-3	Apprentissage	-482	-508,97	26,97	-494,08	12,08
415	Tetraethylsuccinic acid	C12H22O4	4111-60-8	Apprentissage	-1096,5	-1099,1	2,6	-1097,88	1,38
416	Dodecanedioic acid	C12H22O4	693-23-2	Apprentissage	-1130	-1143,26	13,26	-1127,11	2,89
417	D-sucrose	C12H22O11	57-50-1	Apprentissage	-2221,2	-2213,29	7,91	-2220,39	0,81
418	β -lactose	C12H22O11	5965-66-2	Apprentissage	-2236,7	-2220,41	16,29	-2239,76	3,06
419	Dodecanoic acid	C12H24O2	143-07-7	Apprentissage	-774,6	-773,71	0,89	-782,77	8,17
420	Dodecaneperoxoic acid	C12H24O3	07/12/2388	Apprentissage	-680,3	-690,52	10,22	-684,75	4,45
421	12-Hydroxydodecanoic acid	C12H24O3	505-95-3	Apprentissage	-959	-959,24	0,24	-950,12	8,88
422	β -maltose monohydrate	C12H24O12	6363-53-7	Apprentissage	-2459,6	-2485,59	25,99	-2470,89	11,29
423	α -lactose monohydrate	C12H24O12	10639-26-6	Apprentissage	-2484,1	-2485,59	1,49	-2470,89	13,21
424	2,9-dimethyl-2,9-decanediol	C12H26O2	22092-57-5	Test	-789,5	-793,75	4,25	-802,61	13,11
425	Xanthone	C13H8O2	90-47-1	Apprentissage	-191,5	-183,25	8,25	-187,43	4,07
426	Benzophenone	C13H10O	119-61-9	Apprentissage	-50,84	-56,32	5,48	-49,18	1,66
427	Phenyl ester benzoic acid	C13H10O2	93-99-2	Apprentissage	-238	-222,74	15,26	-245,28	7,28
428	2-biphenylcarboxylic acid	C13H10O2	947-84-2	Apprentissage	-349,1	-314,53	34,57	-300,05	49,05
429	Phenyl-2-hydroxybenzoate	C13H10O3	118-55-8	Apprentissage	-436,6	-425,61	10,99	-429,93	6,67
430	Carbonic acid diphenyl ester	C13H10O3	102-09-0	Apprentissage	-401,4	-358,87	42,53	-404,98	3,58
431	Methanone, (2,4-dihydroxyphenyl)phenyl-	C13H10O3	131-56-6	Apprentissage	-492,8	-470,04	22,76	-491,50	1,30
432	1,5-di-2-furylpenta-1,4-dien-3-one	C13H10O3	886-77-1	Apprentissage	-201,2	-211,89	10,69	-197,38	3,82
433	(1,1'-biphenyl)methanol	C13H12O	41376-19-6	Test	-109	-125,4	16,4	-107,59	1,41
434	Benzenemethanol, α -phenyl-	C13H12O	91-01-0	Apprentissage	-105,3	-97,18	8,12	-79,40	25,90
435	p-Benzylphenol	C13H12O	101-53-1	Apprentissage	-54	-114,19	60,19	-92,08	38,08
436	Phenol, 2-(phenylmethyl)-	C13H12O	28994-41-4	Apprentissage	-67	-111,04	44,04	-83,51	16,51
437	7H-Benzocyclohepten-7-one,6,8-dimethyl-	C13H12O	2484-16-4	Apprentissage	-80,5	-98,77	18,27	-102,47	21,97
438	3-Benzylphenol	C13H12O	22272-48-6	Apprentissage	-67	-116,66	49,66	-89,28	22,28
439	Carbonic acid dicyclohexyl ester	C13H22O3	4427-97-8	Apprentissage	-830,5	-816,96	13,54	-829,57	0,93
440	Tridecanedioic acid	C13H24O4	505-52-2	Apprentissage	-1148,3	-1171,07	22,77	-1152,51	4,21
441	Tridecanoic acid	C13H26O2	638-53-9	Apprentissage	-806,6	-801,52	5,08	-811,80	5,20
442	1,2,3-propanetriol 1-decanoate	C13H26O4	2277-23-8	Apprentissage	-1109	-1110,7	1,7	-1105,89	3,11
443	1,2,3-propanetriol 2-decanoate	C13H26O4	3376-48-5	Apprentissage	-1095,8	-1101,57	5,77	-1096,53	0,73
444	1-tridecanol	C13H28O	112-70-9	Apprentissage	-599,5	-617,49	17,99	-585,01	14,49
445	3-Pentanol, 3-(1,1-dimethylethyl)-2,2,4,4-tetramethyl-	C13H28O	41902-42-5	Test	-473,3	-531,91	58,61	-460,12	13,18
446	2,10-dimethyl-2,10-undecanediol	C13H28O2	22092-58-6	Test	-836	-821,56	14,44	-830,64	5,36
447	9,10-Anthracenedione	C14H8O2	84-65-1	Apprentissage	-188,5	-210,12	21,62	-185,54	2,96
448	9,10-Phenanthrenedione	C14H8O2	84-11-7	Test	-154,7	-232,23	77,53	-166,09	11,39
449	9,10-Anthracenedione, 1,4-dihydroxy-	C14H8O4	81-64-1	Apprentissage	-595,1	-589,48	5,62	-597,96	2,86
450	Ethanedione, diphenyl-	C14H10O2	134-81-6	Apprentissage	-154	-154	0	-153,96	0,04

451	Oxalic acid diphenyl ester	C14H10O4	3155-16-6	Apprentissage	-540	-537,51	2,49	-540,86	0,86
452	Benzoyl Peroxide	C14H10O4	94-36-0	Apprentissage	-369	-381,61	12,61	-374,02	5,02
453	Benzoylcarboxyperoxide phenyl ester	C14H10O5	962-16-3	Apprentissage	-484,9	-517,74	32,84	-483,32	1,58
454	2-hydroxy-1,2-diphenylethanone	C14H12O2	119-53-9	Apprentissage	-247,9	-247,9	0	-247,88	0,02
455	1,2,4,5-benzenetetracarboxylic acid tetramethyl ester	C14H14O8	635-10-9	Apprentissage	-1432,2	-1431,92	0,28	-1431,68	0,52
456	1,2,4,5-benzenetetracarboxylic acid diethyl ester	C14H14O8	50853-29-7	Test	-1592,6	-1582,07	10,53	-1564,90	27,70
457	Benzoyl(cyclohexyloxy)carbonylperoxide	C14H16O5	20666-86-8	Apprentissage	-741,5	-746,79	5,29	-739,17	2,33
458	1-diamantanol	C14H20O	30545-19-8	Apprentissage	-428,8	-421,59	7,21	-429,40	0,60
459	3-diamantanol	C14H20O	30545-24-5	Apprentissage	-413,8	-404,52	9,28	-423,55	9,75
460	4-diamantanol	C14H20O	30651-03-7	Apprentissage	-435	-421,59	13,41	-429,40	5,60
461	Peroxydicarbonic acid dicyclohexyl ester	C14H22O6	1561-49-5	Apprentissage	-1103	-1111,97	8,97	-1103,65	0,65
462	Tetradecanoic acid	C14H28O2	544-63-8	Test	-833,5	-829,32	4,18	-840,60	7,10
463	Tetradecaneperoxoic acid	C14H28O3	19816-73-0	Apprentissage	-749,9	-746,12	3,78	-744,11	5,79
464	1-tetradecanol	C14H30O	112-72-1	Apprentissage	-629,6	-645,3	15,7	-612,65	16,95
465	2,11-dimethyl-2,11-dodecanediol	C14H30O2	22092-59-7	Apprentissage	-846	-849,36	3,36	-858,47	12,47
466	2,2'-bis(4-hydroxyphenyl)propane	C15H16O2	80-05-7	Apprentissage	-368,6	-375,41	6,81	-364,06	4,54
467	3,5-Di-tert-butylbenzoic acid	C15H22O2	16225-26-6	Apprentissage	-624,6	-591,18	33,42	-608,31	16,29
468	Butylated Hydroxytoluene	C15H24O	128-37-0	Apprentissage	-410	-401,26	8,74	-400,16	9,84
469	Pentadecanoic acid	C15H30O2	1002-84-2	Apprentissage	-861,7	-857,12	4,58	-869,20	7,50
470	1,2,3-propanetriol 1-dodecanoate	C15H30O4	142-18-7	Apprentissage	-1160,9	-1166,3	5,4	-1163,57	2,67
471	1,2,3-propanetriol 2-dodecanoate	C15H30O4	1678-45-1	Test	-1152,6	-1157,18	4,58	-1153,11	0,51
472	1-pentadecanol	C15H32O	629-76-5	Apprentissage	-658,3	-673,1	14,8	-640,70	17,60
473	2-methylbenzoic acid anhydride	C16H14O3	607-86-3	Apprentissage	-533,5	-533,5	0	-533,60	0,10
474	4-methylbenzoic acid anhydride	C16H14O3	13222-85-0	Test	-521	-539,81	18,81	-575,82	54,82
475	Propiophenone, 2,3-epoxy-3-(p-methoxyphenyl)-, trans-	C16H14O3	27729-95-9	Apprentissage	-297	-297	0	-296,96	0,04
476	Meso-2,3-diphenylbutanedioic acid	C16H14O4	1225-13-4	Apprentissage	-733,5	-757,5	24	-734,46	0,96
477	Racemic-2,3-diphenylbutanedioic acid	C16H14O4	7584-72-7	Apprentissage	-740,1	-757,5	17,4	-734,46	5,64
478	bis(o-toluoyl) peroxide	C16H14O4	3034-79-5	Apprentissage	-500,5	-450,01	50,49	-486,92	13,58
479	Bis(4-methylbenzoyl)peroxide	C16H14O4	895-85-2	Apprentissage	-451,5	-456,32	4,82	-468,27	16,77
480	Benzenepentacarboxylic acid pentamethyl ester	C16H16O10	08/06/3327	Apprentissage	-1788,2	-1784,81	3,39	-1787,55	0,65
481	Benzenecarboperoxoic acid 1-methyl-1-phenylethyl ester	C16H16O3	7074-00-2	Apprentissage	-231	-231	0	-230,97	0,03
482	1,2,4,5-benzenetetracarboxylic acid dipropyl ester	C16H18O8	56941-72-1	Apprentissage	-1644,2	-1637,68	6,52	-1631,12	13,08
483	α -D-glucose 2,3,4,5,6-pentaacetate	C16H22O11	3891-59-6	Apprentissage	-2249,4	-2249,4	0	-2249,36	0,04
484	β -D-Glucopyranose pentaacetate	C16H22O11	604-69-3	Test	-2232,6	-2246,02	13,42	-2232,51	0,09
485	Hexadecanoic acid	C16H32O2	57-10-3	Apprentissage	-891,5	-884,93	6,57	-897,62	6,12
486	Hexadecaneperoxoic acid	C16H32O3	7311-29-7	Apprentissage	-801,9	-801,73	0,17	-802,37	0,47
487	1-hexadecanol	C16H34O	36653-82-4	Test	-687,1	-700,9	13,8	-669,16	17,94
488	2-naphthyl ester benzoic acid	C17H12O2	93-44-7	Apprentissage	-184,8	-179,31	5,49	-189,77	4,97

489	(-)- α -desmotroposantonin acetate	C17H20O4	14794-71-9	Apprentissage	-870,6	-868,98	1,62	-869,01	1,59
490	(+)- β -desmotroposantonin acetate	C17H20O4	14794-69-5	Apprentissage	-879,3	-868,98	10,32	-869,01	10,29
491	Heptadecanoic acid	C17H34O2	506-12-7	Apprentissage	-924,4	-912,73	11,67	-925,87	1,47
492	1,2,3-propanetriol 1-tetradecanoate	C17H34O4	589-68-4	Test	-1223	-1221,91	1,09	-1221,32	1,68
493	1,2,3-propanetriol 2-tetradecanoate	C17H34O4	3443-83-2	Apprentissage	-1212,9	-1212,79	0,11	-1209,73	3,17
494	3-phenyl-2-propenoic acid anhydride	C18H14O3	538-56-7	Apprentissage	-347,8	-347,8	0	-347,63	0,17
495	Benzenehexacarboxylic acid hexamethyl ester	C18H18O12	6237-59-8	Apprentissage	-2110,8	-2155,21	44,41	-2112,25	1,45
496	1,2,4,5-benzenetetracarboxylic acid tetraethyl ester	C18H22O8	01/01/6634	Apprentissage	-1579,6	-1543,13	36,47	-1576,37	3,23
497	Octadecanoic acid	C18H36O2	57-11-4	Apprentissage	-954,2	-940,53	13,67	-953,97	0,23
498	Octadecaneperoxoic acid	C18H36O3	5796-86-1	Apprentissage	-857,3	-857,34	0,04	-859,71	2,41
499	Benzenemethanol, α,α -diphenyl-	C19H16O	76-84-6	Apprentissage	35,5	39,4	3,9	29,78	5,72
500	Nonadecanoic acid	C19H38O2	646-30-0	Apprentissage	-984	-968,34	15,66	-981,95	2,05
501	1,2,3-propanetriol 1-hexadecanoyl ester	C19H38O4	542-44-9	Test	-1279,6	-1277,52	2,08	-1279,28	0,32
502	1,2,3-propanetriol 2-hexadecanoyl ester	C19H38O4	23470-00-0	Apprentissage	-1269,8	-1268,39	1,41	-1266,54	3,26
503	1,2-benzenedicarboxylic acid diphenyl ester	C20H14O4	84-62-8	Apprentissage	-489,2	-474,84	14,36	-475,05	14,15
504	Diphenyl isophthalate	C20H14O4	744-45-6	Apprentissage	-476,1	-480,45	4,35	-477,87	1,77
505	1,2-benzenedicarboxylic acid dicyclohexyl ester	C20H26O4	84-61-7	Apprentissage	-931	-932,93	1,93	-932,37	1,37
506	Eicosanoic acid	C20H40O2	506-30-9	Apprentissage	-1011,9	-996,14	15,76	-1009,82	2,08
507	1,2,3-propanetriol 1-octadecanoyl ester	C21H42O4	123-94-4	Apprentissage	-1337,8	-1333,13	4,67	-1337,59	0,21
508	1,2,3-propanetriol 2-octadecanoyl ester	C21H42O4	621-61-4	Apprentissage	-1321,3	-1324	2,7	-1323,67	2,37
509	3',5'-diisopropyl-4,4-dimethyl-3-phenyl-1, 2-benzocyclobuten-3-ol	C22H28O	33574-16-2	Apprentissage	-218,3	-213,32	4,98	-216,13	2,17
510	Methanone, phenyl[2,4,6-tris(methylethyl)phenyl]-	C22H28O	33574-11-7	Apprentissage	-304,6	-294,74	9,86	-304,59	0,01
511	(E)-13-docosenoic acid	C22H42O2	506-33-2	Apprentissage	-960,7	-937,09	23,61	-960,72	0,02
512	Cyanamide	CH2N2	420-04-2	Apprentissage	58,79	64,86	6,07	31,37	27,42
513	1H-tetrazole	CH2N4	288-94-8	Test	236	229,22	6,78	226,28	9,72
514	5-amino-1H-tetrazole	CH3N5	4418-61-5	Apprentissage	207,8	172,21	35,59	190,60	17,20
515	1-Aminotetrazole	CH3N5	5378-49-4	Apprentissage	207,8	248,4	40,6	236,94	29,14
516	Guanidine	CH5N3	113-00-8	Apprentissage	-56	-137,33	81,33	-105,68	49,68
517	5-cyano-1H-tetrazole	C2HN5	74418-40-9	Apprentissage	402	372,56	29,44	393,50	8,50
518	5,5'-bitetrazole	C2H2N8	2783-98-4	Apprentissage	531,7	479,91	51,79	537,00	5,30
519	5,5'-hydrazotetrazole	C2H4N10	74999-19-2	Apprentissage	565,4	568,3	2,9	566,50	1,10
520	Dicyandiamide	C2H4N4	461-58-5	Apprentissage	24,9	66,62	41,72	35,98	11,08
521	1H-1,2,4-triazole-3-amine	C2H4N4	61-82-5	Apprentissage	76,8	-16,79	93,59	1,86	74,94
522	1H-Tetrazole, 1-methyl-	C2H4N4	16681-77-9	Test	234,7	259,82	25,12	240,32	5,62
523	1H-Tetrazole, 5-methyl-	C2H4N4	4076-36-2	Apprentissage	184,4	176,74	7,66	195,77	11,37
524	1-methyl-5-aminotetrazole	C2H5N5	5422-44-6	Apprentissage	193	202,81	9,81	200,52	7,52
525	5-amino-2-methyl-2H-tetrazole	C2H5N5	07/04/6154	Test	206,8	202,81	3,99	200,52	6,28
526	5-methylamino-1H-tetrazole	C2H5N5	53010-03-0	Apprentissage	202,5	182,03	20,47	199,88	2,62

527	1-(1H-tetrazol-5-yl)-guanidine	C2H5N7	66591-60-4	Apprentissage	128,7	165,94	37,24	127,47	1,23
528	Malononitrile	C3H2N2	109-77-3	Apprentissage	187,9	189,69	1,79	188,18	0,28
529	1H-pyrazole	C3H4N2	288-13-1	Test	105,4	42,55	62,85	84,46	20,94
530	1H-imidazole	C3H4N2	288-32-4	Apprentissage	49,8	42,55	7,25	84,46	34,66
531	1,5-dimethyltetrazole	C3H6N4	06/11/5144	Apprentissage	188,6	207,33	18,73	198,76	10,16
532	2H-Tetrazole, 2,5-dimethyl-	C3H6N4	4135-93-7	Apprentissage	202,5	207,33	4,83	198,76	3,74
533	1-methyl-5-methylaminotetrazole	C3H7N5	17267-51-5	Apprentissage	200,1	212,62	12,52	202,97	2,87
534	5-(dimethylamino)-tetrazole	C3H7N5	5422-45-7	Apprentissage	182,8	173,51	9,29	183,03	0,23
535	(E)-butenedinitrile	C4H2N2	764-42-1	Apprentissage	268	273,36	5,36	268,22	0,22
536	Pyrazine	C4H4N2	290-37-9	Apprentissage	139,8	131,55	8,25	132,94	6,86
537	Succinonitrile	C4H4N2	110-61-2	Apprentissage	139,7	127,52	12,18	141,58	1,88
538	1,2-bis-(5-tetrazolyl)-ethane	C4H6N8	26670-16-6	Apprentissage	444,34	424,3	20,04	460,44	16,10
539	Cis-1,1'-dimethyl-5,5'-azotetrazole	C4H6N10	41463-68-7	Apprentissage	792	760,71	31,29	773,17	18,83
540	Trans-1,1'-dimethyl-5,5'-azotetrazole	C4H6N10	74999-23-8	Apprentissage	792,2	760,71	31,49	773,17	19,03
541	2,2'-dimethyl-5,5'-azotetrazole	C4H6N10	41463-69-8	Apprentissage	754,6	760,71	6,11	773,17	18,57
542	5-amino-1-(2-propenyl)-1H-tetrazole	C4H7N5	74999-22-7	Test	265,4	267,85	2,45	278,59	13,19
543	5-amino-2-(2-propenyl)-2H-tetrazole	C4H7N5	74999-26-1	Apprentissage	282,9	267,85	15,05	278,59	4,31
544	Methanetetra carbonitrile	C5N4	24331-09-7	Apprentissage	611,6	546,64	64,96	614,39	2,79
545	Ethylenetricarbonitrile	C5HN3	997-76-2	Apprentissage	439	410,9	28,1	437,48	1,52
546	1,1,1-ethanetricarbonitrile	C5H3N3	10359-20-3	Apprentissage	348,6	350,97	2,37	352,40	3,80
547	1H-Purine	C5H4N4	120-73-0	Apprentissage	169,4	160,81	8,59	138,68	30,72
548	Adenine	C5H5N5	73-24-5	Apprentissage	96,9	139,71	42,81	118,94	22,04
549	2,6-pyridinediamine	C5H7N3	141-86-6	Apprentissage	-6,5	12,21	18,71	-7,28	0,78
550	2,3-diazabicyclo[2,2,1]hept-2-ene	C5H8N2	2721-32-6	Apprentissage	152,1	166,36	14,26	148,97	3,13
551	1H-Imidazole, 2-ethyl-	C5H8N2	1072-62-4	Apprentissage	-21,3	-37,59	16,29	-22,19	0,89
552	Ethenetetra carbonitrile	C6N4	670-54-2	Apprentissage	607,1	593,62	13,48	606,98	0,12
553	3-pyridinecarbonitrile	C6H4N2	100-54-9	Apprentissage	193,3	193,36	0,06	193,12	0,18
554	2-butyne-1,4-dicarbonitrile	C6H4N2		Apprentissage	366,8	343,36	23,44	366,51	0,29
555	4-Pyridinecarbonitrile	C6H4N2	100-48-1	Test	210,3	183,72	26,58	236,33	26,03
556	2-Pyridinecarbonitrile	C6H4N2	100-70-9	Apprentissage	210	208,41	1,59	208,79	1,21
557	1H-benzotriazole	C6H5N3	95-14-7	Apprentissage	250	252,19	2,19	263,30	13,30
558	2,5,8-triamino-1,3,4,6,7,9,9b-heptaazaphenalene	C6H6N10	1502-47-2	Apprentissage	15,6	83,66	68,06	20,30	4,70
559	1,4-benzenediamine	C6H8N2	106-50-3	Apprentissage	6,3	-12,44	18,74	-5,75	12,05
560	1,2-benzenediamine	C6H8N2	95-54-5	Apprentissage	39,1	-9,29	48,39	9,38	29,72
561	1,3-benzenediamine	C6H8N2	108-45-2	Apprentissage	-7,9	-14,9	7	-1,10	6,80
562	2,2'-diethyl-5,5'-azotetrazole	C6H10N10	74999-25-0	Apprentissage	655,3	667,04	11,74	653,12	2,18
563	Triethylenediamine	C6H12N2	280-57-9	Apprentissage	-14,2	-19,37	5,17	3,02	17,22
564	Tetramethyldiazetine	C6H12N2	54166-22-2	Apprentissage	88	142,45	54,45	78,58	9,42

565	Hexamethylenetetramine	C6H12N4	100-97-0	Apprentissage	123	118,76	4,24	115,12	7,88
566	1,6-Hexanediamine	C6H16N2	124-09-4	Apprentissage	-205	-205	0	-204,87	0,13
567	1,1,2,2-cyclopropane-tetracarbonitrile	C7H2N4	2424-32-0	Apprentissage	596	649,11	53,11	598,14	2,14
568	1,1,1-tricyano-3-butyne	C7H3N3	10359-26-9	Apprentissage	605,7	605,27	0,43	603,71	1,99
569	1H-Benzimidazole	C7H6N2	51-17-2	Apprentissage	79,5	58,4	21,1	70,58	8,92
570	1H-Indazole	C7H6N2	271-44-3	Apprentissage	166,5	182,37	15,87	166,98	0,48
571	1-phenyl-1H-tetrazole	C7H6N4	5378-52-9	Apprentissage	361,8	363,6	1,8	346,49	15,31
572	5-phenyl-1H-tetrazole	C7H6N4	18039-42-4	Apprentissage	292,5	285,81	6,69	266,43	26,07
573	5-amino-1-phenyl-1H-tetrazole	C7H7N5	5467-78-7	Apprentissage	310,9	306,59	4,31	301,95	8,95
574	1-amino-5-phenyl-1H-tetrazole	C7H7N5	23579-46-6	Apprentissage	305	304,98	0,02	315,39	10,39
575	4-Methylaniline	C7H9N	106-49-0	Test	-23,5	-27,32	3,82	-30,63	7,13
576	1-(2-propenyl)-5-(2-propenylamino)tetrazole	C7H11N5	66907-70-8	Apprentissage	350,2	341,77	8,43	346,09	4,11
577	5-(di(2-propenyl)amino)-1H-tetrazole	C7H11N5	6280-33-7	Apprentissage	351,1	344,33	6,77	350,45	0,65
578	Quinuclidine	C7H13N	100-76-5	Apprentissage	-55,1	-95,86	40,76	-63,32	8,22
579	2,2-Dimethylpentanenitrile	C7H13N	20654-47-1	Apprentissage	-92,68	-95,96	3,28	-106,46	13,78
580	3,3,5,5-tetramethyl-1-pyrazoline	C7H14N2	2721-31-5	Test	-22,3	15,79	38,09	-9,45	12,85
581	Phthalonitrile	C8H4N2	91-15-6	Apprentissage	280,6	280,26	0,34	285,16	4,56
582	1,3-benzenedicarbonitrile	C8H4N2	626-17-5	Apprentissage	272,6	274,64	2,04	267,61	4,99
583	1,4-benzenedicarbonitrile	C8H4N2	623-26-7	Test	268,5	277,11	8,61	260,76	7,74
584	Pyridinium dicyanomethylide	C8H5N3	27032-01-5	Apprentissage	398	398	0	398,03	0,03
585	Indole	C8H7N	120-72-9	Apprentissage	86,65	78,49	8,16	90,30	3,65
586	1-phenyl-5-methyl-1H-tetrazole	C8H8N4	14213-16-2	Apprentissage	289,3	311,11	21,81	271,63	17,67
587	1-methyl-5-phenyl-1H-tetrazole	C8H8N4	20743-50-4	Apprentissage	292,2	316,41	24,21	291,34	0,86
588	2-phenyl-5-methyl-2H-tetrazole	C8H8N4	22706-20-3	Apprentissage	274,6	311,11	36,51	271,63	2,97
589	Benzaldehyde(5-tetrazolyl)hydrazone	C8H8N6	10444-59-4	Apprentissage	441	460,4	19,4	442,29	1,29
590	Benzal-5-hydrazinotetrazole	C8H8N6	108480-28-0	Apprentissage	441	460,4	19,4	442,29	1,29
591	Endo-bicyclo[2,2,1]heptane-2-carbonitrile	C8H11N	3211-87-8	Apprentissage	20,3	20,3	0	20,50	0,20
592	1-Norbornyl cyanide	C8H11N	88523-51-7	Apprentissage	13,3	51,91	38,61	14,51	1,21
593	Tetramethylbutanedinitrile	C8H12N2	3333-52-6	Apprentissage	19,9	32,08	12,18	17,90	2,00
594	Pyrazine, tetramethyl-	C8H12N2	1124-11-4	Apprentissage	-39,9	-12,33	27,57	-48,33	8,43
595	2,2'-azo-bis-isobutyronitrile	C8H12N4	78-67-1	Test	246	265,03	19,03	240,21	5,79
596	1,4-dimethyl-2,3-diaza-bicyclo[2,2,2]oct-2-ene	C8H14N2	49570-30-1	Apprentissage	20,4	-3,26	23,66	-14,68	35,08
597	1,2-bis(2-cyano-2-propyl)-hydrazine	C8H14N4	04/07/6869	Apprentissage	119,3	133,8	14,5	121,03	1,73
598	3-azabicyclo[3,2,2]nonane	C8H15N	283-24-9	Apprentissage	-101,6	-152,38	50,78	-146,76	45,16
599	Di-2-pyrrolylmethane	C9H10N2	21211-65-4	Apprentissage	126,2	132,58	6,38	126,16	0,04
600	3-ethyl-2,4,5-trimethyl-1H-pyrrole	C9H15N	520-69-4	Test	-89,2	-145,66	56,46	-116,14	26,94
601	2-Quinolincarbonitrile	C10H6N2	1436-43-7	Apprentissage	246,5	246,81	0,31	260,00	13,50
602	3-Quinolincarbonitrile	C10H6N2	34846-64-5	Test	242,3	246,81	4,51	260,00	17,70

603	1H-naphtho[2,3-d]triazole	C10H7N3	269-12-5	Apprentissage	274,2	286,81	12,61	274,27	0,07
604	1H-naphtho[1,2-d]triazole	C10H7N3	233-59-0	Apprentissage	260,5	244,63	15,87	260,21	0,29
605	1-naphthylamine	C10H9N	134-32-7	Apprentissage	87	66,11	20,89	76,99	10,01
606	2-naphthylamine	C10H9N	91-59-8	Apprentissage	77,8	53,47	24,33	67,14	10,66
607	1-phenyl-1H-pyrrole	C10H9N	635-90-5	Test	154,3	179,24	24,94	171,91	17,61
608	2-phenyl-1H-pyrrole	C10H9N	3042-22-6	Test	139,2	96,65	42,55	147,34	8,14
609	2,3-dimethyl-1H-indole	C10H11N	91-55-4	Apprentissage	4,23	-4,64	8,87	37,32	33,09
610	Benzonitrile, 2,4,6-trimethyl-	C10H11N	2571-52-0	Test	23,5	52,44	28,94	42,28	18,78
611	Benzal-3-hydrazino-5-methyl-1,2,4-triazole	C10H11N5	87123-46-4	Apprentissage	257,7	218,91	38,79	255,84	1,86
612	Bicyclo[2,2,1]hept-5-ene-2,2,3,3-tetracarbonitrile	C11H6N4	6343-21-1	Apprentissage	622,8	610,63	12,17	628,96	6,16
613	3-methyl-4-cyclohexene-1,1,2,2-tetracarbonitrile	C11H8N4	13358-02-6	Apprentissage	514,7	504,58	10,12	505,47	9,23
614	Tetracyano-p-quinodimethane	C12H4N4	1518-16-7	Apprentissage	666,1	723,77	57,67	665,39	0,71
615	3-hexyne-1,1,1,6,6,6-hexacarbonitrile	C12H4N6	10350-89-7	Apprentissage	1001,5	1001,64	0,14	1025,58	24,08
616	3-hexene-1,1,1,6,6,6-hexacarbonitrile	C12H6N6		Apprentissage	837,4	831,51	5,89	838,27	0,87
617	Phenazine	C12H8N2	92-82-0	Apprentissage	237	215,14	21,86	249,89	12,89
618	Benzo[c]cinnoline	C12H8N2	230-17-1	Apprentissage	279,4	215,14	64,26	249,89	29,51
619	Bicyclo[2,2,2]oct-5-ene-2,2,3,3-tetracarbonitrile	C12H8N4	1017-93-2	Apprentissage	576,1	535,03	41,07	567,14	8,96
620	9H-carbazole	C12H9N	86-74-8	Apprentissage	101,7	86,6	15,1	94,29	7,41
621	(E)-azobenzene	C12H10N2	17082-12-1	Apprentissage	320	364,59	44,59	352,10	32,10
622	(Z)-azobenzene	C12H10N2	1080-16-6	Apprentissage	359	364,59	5,59	352,10	6,90
623	Azobenzene	C12H10N2	103-33-3	Apprentissage	374	364,59	9,41	352,10	21,90
624	4,5-dimethyl-4-cyclohexene-1,1,2,2-tetracarbonitrile	C12H10N4	69155-29-9	Apprentissage	472,4	466,73	5,67	481,19	8,79
625	2-aminobiphenyl	C12H11N	90-41-5	Apprentissage	93,8	76,04	17,76	94,07	0,27
626	4-aminobiphenyl	C12H11N	92-67-1	Test	81	72,89	8,11	78,99	2,01
627	Diphenylamine	C12H11N	122-39-4	Apprentissage	109	103,21	5,79	92,98	16,02
628	1,3-diphenyltriazene	C12H11N3	136-35-6	Apprentissage	331,6	342,13	10,53	332,50	0,90
629	Benzenamine, 4-(phenylazo)-	C12H11N3	60-09-3	Apprentissage	323	342,11	19,11	341,53	18,53
630	1,2-diphenylhydrazine	C12H12N2	122-66-7	Apprentissage	221	231,3	10,3	216,06	4,94
631	4,4'-diaminobiphenyl	C12H12N2	92-87-5	Apprentissage	107	50,41	56,59	70,05	36,95
632	2,2'-Bipyridine, 4,4'-dimethyl-	C12H12N2	1134-35-6	Apprentissage	109,6	102,28	7,32	109,56	0,04
633	1,3-diphenyl-1-tetrazene	C12H12N4	35364-31-9	Apprentissage	411,7	416,45	4,75	418,28	6,58
634	1,3-Benzenediamine, 4-(phenylazo)-	C12H12N4	495-54-5	Apprentissage	280	317,97	37,97	285,52	5,52
635	2,2',5,5'-tetramethyl-1,1'-bipyrrole	C12H16N2	10507-71-8	Apprentissage	132,2	70,51	61,69	119,33	12,87
636	Acridine	C13H9N	260-94-6	Apprentissage	179,4	175,14	4,26	179,44	0,04
637	Biphenyl-2-carbonitrile	C13H9N	24973-49-7	Apprentissage	232,7	220,82	11,88	223,25	9,45
638	6,7-benzoquinoline	C13H9N	260-36-6	Test	148,9	143,63	5,27	140,86	8,04
639	Benzo[f]quinoline	C13H9N	85-02-9	Apprentissage	150,6	148,14	2,46	156,70	6,10
640	Benzo[h]quinoline	C13H9N	230-27-3	Apprentissage	160,2	148,14	12,06	156,70	3,50

641	Phenanthridine	C13H9N	229-87-8	Apprentissage	141,9	164,93	23,03	161,59	19,69
642	9-aminoacridine	C13H10N2	90-45-9	Apprentissage	159,2	143,83	15,37	155,97	3,23
643	2-aminoacridine	C13H10N2	581-28-2	Apprentissage	166,4	157,67	8,73	167,01	0,61
644	1,5-diphenyl-1H-tetrazole	C13H10N4	7477-73-8	Apprentissage	415,6	420,18	4,58	415,99	0,39
645	2,5-diphenyl-2H-tetrazole	C13H10N4	18039-45-7	Apprentissage	395	420,18	25,18	415,99	20,99
646	p-benzylideneaniline	C13H11N	538-51-2	Apprentissage	185	200,53	15,53	197,38	12,38
647	9-methyl-9H-carbazole	C13H11N	1484-12-4	Apprentissage	105,5	117,2	11,7	102,22	3,28
648	3,6-diaminoacridine	C13H11N3	92-62-6	Apprentissage	127,2	140,2	13	126,84	0,36
649	1,5-diphenylformazan	C13H12N4	1885-34-3	Apprentissage	457,9	442,91	14,99	458,25	0,35
650	4-methyldiphenylamine	C13H13N	620-84-8	Apprentissage	48,9	65,86	16,96	56,53	7,63
651	Cyclopentylidenephenylacetonitrile	C13H13N	21713-75-7	Apprentissage	225,4	176,47	48,93	233,21	7,81
652	N-Benzylaniline	C13H13N	103-32-2	Apprentissage	101,4	88,01	13,39	97,34	4,06
653	3,5-octadiyne-1,1,1,8,8,8-hexacarbonitrile	C14H4N6	10350-90-0	Apprentissage	1218,6	1230,82	12,22	1202,39	16,21
654	N,N'-dibenzylidene-hydrazine	C14H12N2	588-68-1	Test	339,3	306,13	33,17	340,52	1,22
655	4,4'-dimethyldiphenylamine	C14H15N	620-93-9	Apprentissage	-11,6	28,51	40,11	19,08	30,68
656	Benzeneacetonitrile, α -cyclohexylidene	C14H15N	10461-98-0	Test	204,8	121,57	83,23	199,01	5,79
657	N-phenyl-2-naphthylamine	C16H13N	135-88-6	Apprentissage	162	146,65	15,35	165,53	3,53
658	Dibenzylidene-1,2-ethylenediamine	C16H16N2	104-71-2	Apprentissage	271,4	250,53	20,87	261,71	9,69
659	5-methyl-5H-indeno[2,1-b]quinoline	C17H13N	6626-64-8	Apprentissage	205,4	242,18	36,78	203,00	2,40
660	Triphenylamine	C18H15N	603-34-9	Test	235	230,87	4,13	242,18	7,18
661	1,3,5-triphenylformazan	C19H16N4	531-52-2	Apprentissage	543,1	543,1	0	543,58	0,48
662	N-benzylidiphenylamine	C19H17N	606-87-1	Apprentissage	185	196,35	11,35	190,27	5,27
663	Benzylidene-5,6,7,8-tetrahydronaphthyl-2-acetonitrile	C19H17N	21848-09-9	Apprentissage	259	200,62	58,38	252,77	6,23
664	9,10-dihydro-9,10-ethanoanthracene-11,11,12,12- tetracarbonitrile	C20H10N4	1625-84-9	Apprentissage	712,5	683,68	28,82	703,01	9,49
665	Tribenzylamine	C21H21N	620-40-6	Apprentissage	141	141	0	140,88	0,12
666	Tetraphenylhydrazine	C24H20N2	632-52-0	Apprentissage	457,9	447,99	9,91	455,36	2,54
667	2,7,12,17-tetraethyl-3,8,13,18-tetramethyl-21H,23H- porphin	C32H38N4	448-71-5	Test	-25,2	27,25	52,45	-18,81	6,39
668	2,8,12,18-tetraethyl-3,7,13,18-tetramethyl-21H,23H-porphin	C32H38N4	448-70-4	Apprentissage	1,6	27,25	25,65	-18,81	20,41
669	2,3,7,8,12,13,17,18-octaethyl-21H,23H-porphin	C36H46N4	2683-82-1	Test	-183,2	-73,36	109,84	-167,32	15,88
670	5-hydroxytetrazole	CH2N4O	16421-52-6	Apprentissage	6,3	-10,28	16,58	-17,35	23,65
671	Nitroguanylazide	CH2N6O2	62154-79-4	Apprentissage	298,4	243,53	54,87	298,32	0,08
672	Urea	CH4N2O	57-13-6	Apprentissage	-320,2	-317,22	2,98	-307,60	12,60
673	Nitroguanidine	CH4N4O2	556-88-7	Apprentissage	-97,9	-94,56	3,34	-101,57	3,67
674	5-aminotetrazole nitrate	CH4N6O3		Apprentissage	-27,6	42,21	69,81	3,04	30,64
675	Guanyl azide nitrate	CH4N6O3		Apprentissage	15,9	70,77	54,87	16,03	0,13
676	Aminonitroguanidine	CH5N5O2	27256-18-4	Apprentissage	22,2	18,09	4,11	21,47	0,73
677	Diaminoguanidine nitrate	CH8N6O3	37160-07-9	Test	-197	-172,72	24,28	-192,54	4,46
678	Trinitromethane	CHN3O6	517-25-9	Apprentissage	-48	-38,29	9,71	-40,70	7,30

679	Trinitroacetonitrile	C2N4O6	630-72-8	Test	174	112,43	61,57	154,83	19,17
680	oxamic acid	C2H3NO3	471-47-6	Apprentissage	-661,2	-682,1	20,9	-672,72	11,52
681	1,1,1-trinitroethane	C2H3N3O6	595-86-8	Apprentissage	-113	-83,23	29,77	-69,38	43,62
682	2,2,2-trinitroethanol	C2H3N3O7	918-54-7	Apprentissage	-261	-268,76	7,76	-274,10	13,10
683	N-nitro-1H-1,2,4-triazol-3-amine	C2H3N5O2	34815-01-5	Apprentissage	112,4	53,85	58,55	104,84	7,56
684	Oxamide	C2H4N2O2	471-46-5	Apprentissage	-505,4	-498,97	6,43	-513,90	8,50
685	Glyoxime	C2H4N2O2	557-30-2	Apprentissage	-88,7	-52,96	35,74	-87,50	1,20
686	1,2-Hydrazinedicarboxaldehyde	C2H4N2O2	628-36-4	Apprentissage	-331	-330,65	0,35	-330,31	0,69
687	1,2-dinitroethane	C2H4N2O4	7570-26-5	Apprentissage	-179	-210,51	31,51	-193,17	14,17
688	Ethane, 1,1-dinitro-	C2H4N2O4	600-40-8	Apprentissage	-108	-128,99	20,99	-124,02	16,02
689	5-methoxy-1H-tetrazole	C2H4N4O	5376-15-8	Apprentissage	69,1	34,55	34,55	68,84	0,26
690	Azodicarbonamide	C2H4N4O2	123-77-3	Apprentissage	-293	-279,36	13,64	-293,44	0,44
691	Acetamide	C2H5NO	60-35-5	Apprentissage	-310,1	-312,55	2,45	-298,44	11,66
692	Acetaldoxime	C2H5NO	107-29-9	Apprentissage	-85,8	-89,54	3,74	-105,81	20,01
693	Glycine	C2H5NO2	56-40-6	Apprentissage	-528,61	-531,92	3,31	-520,18	8,43
694	3-amino-1,2,4-triazole nitrate	C2H5N5O3	13040-74-9	Test	-171,1	-146,79	24,31	-182,16	11,06
695	1-formamido-2-nitroguanidine	C2H5N5O3		Apprentissage	-146,9	-147,59	0,69	-147,81	0,91
696	1-nitro-3-guanidinourea	C2H5N5O3	28787-21-5	Test	-302,5	-281,83	20,67	-298,06	4,44
697	Urea, methyl-	C2H6N2O	598-50-5	Apprentissage	-332,78	-358,17	25,39	-332,30	0,48
698	N-nitrodimethylamine	C2H6N2O2	4164-28-7	Apprentissage	-75	-67,16	7,84	-61,71	13,29
699	Oxalic acid dihydrazide	C2H6N4O2	996-98-5	Apprentissage	-295,2	-348,39	53,19	-290,22	4,98
700	1,2-hydrazinedicarboxamide	C2H6N4O2	110-21-4	Apprentissage	-498,7	-470,1	28,6	-497,75	0,95
701	N,N'-dinitro-1,2-ethanediamine	C2H6N4O4	505-71-5	Apprentissage	-102,8	-106,52	3,72	-97,13	5,67
702	1-(5-tetrazolyl)-4-guanyltetrazene hydrate	C2H8N10O	109-27-3	Apprentissage	189,1	213,18	24,08	192,70	3,60
703	1,3,5-triazine-2,4,6(1H,3H,5H)-triol	C3H3N3O3	108-80-5	Test	-703,5	-700,89	2,61	-704,08	0,58
704	3-methyl-4-nitrofuoxan	C3H3N3O4	49558-02-3	Apprentissage	101	105,38	4,38	96,57	4,43
705	3-nitroisoxazolidine-2-oxide	C3H4N2O4	4122-45-6	Apprentissage	-51	-61,21	10,21	-47,75	3,25
706	1-acetyl-1H-tetrazole	C3H4N4O	21565-41-3	Apprentissage	81,5	84,27	2,77	80,27	1,23
707	6-amino-1,3,5-triazine-2,4(1H,3H)-dione	C3H4N4O2	645-93-2	Apprentissage	-492,9	-471,23	21,67	-491,12	1,78
708	2-Propenamamide	C3H5NO	79-06-1	Apprentissage	-212,08	-211,12	0,96	-210,49	1,59
709	2-Azetidinone	C3H5NO	930-21-2	Apprentissage	-173,4	-141,35	32,05	-117,65	55,75
710	1-nitro-2-propanone	C3H5NO3	10230-68-9	Apprentissage	-295	-278,96	16,04	-294,30	0,70
711	N-(1H-tetrazol-5-yl)-acetamide	C3H5N5O	6158-77-6	Test	-7,57	-30,21	22,64	-19,66	12,09
712	4,6-diamino-1,3,5-triazin-2(1H)-one	C3H5N5O	645-92-1	Apprentissage	-300	-288,74	11,26	-297,86	2,14
713	5-methyl-N-nitro-1H-1,2,4-triazol-3-amine	C3H5N5O2	42216-41-1	Apprentissage	53,2	1,36	51,84	42,05	11,15
714	Propanediamide	C3H6N2O2	108-13-4	Apprentissage	-542,81	-526,77	16,04	-545,33	2,52
715	Methylglyoxime	C3H6N2O2	1804-15-5	Apprentissage	-126,7	-113,43	13,27	-90,00	36,70
716	Acetamide, N-(aminocarbonyl)-	C3H6N2O2	591-07-1	Apprentissage	-544,74	-526,98	17,76	-538,23	6,51

717	2,2-dinitropropane	C3H6N2O4	595-49-3	Apprentissage	-187,7	-173,94	13,76	-163,17	24,53
718	1,4-dimethyl-5-tetrazolone	C3H6N4O	13576-20-0	Apprentissage	-28	-43,69	15,69	-28,42	0,42
719	Hexahydro-1,3,5-trinitroso-1,3,5-triazine	C3H6N6O3	13980-04-6	Apprentissage	285,9	249,54	36,36	284,70	1,20
720	Hexahydro-1,3,5-trinitro-1,3,5-triazine	C3H6N6O6	121-82-4	Apprentissage	61,5	25,49	36,01	25,54	35,96
721	Propanamide	C3H7NO	79-05-0	Test	-338,19	-340,35	2,16	-325,95	12,24
722	Acetamide, N-methyl-	C3H7NO	79-16-3	Apprentissage	-318,8	-318,8	0	-318,82	0,02
723	2-Propanone, oxime	C3H7NO	127-06-0	Apprentissage	-140	-150,01	10,01	-142,57	2,57
724	N-methylglycine	C3H7NO2	107-97-1	Apprentissage	-513,24	-518,63	5,39	-512,73	0,51
725	L-alanine	C3H7NO2	56-41-7	Test	-562,7	-566,84	4,14	-565,32	2,62
726	DL-alanine	C3H7NO2	302-72-7	Apprentissage	-563,63	-566,84	3,21	-565,32	1,69
727	D-alanine	C3H7NO2	338-69-2	Apprentissage	-561,24	-566,84	5,6	-565,32	4,08
728	Urethane	C3H7NO2	51-79-6	Apprentissage	-517,1	-497,04	20,06	-498,88	18,22
729	β -Alanine	C3H7NO2	107-95-9	Apprentissage	-547,1	-542,07	5,03	-547,42	0,32
730	2-amino-3-hydroxypropanoic acid	C3H7NO3	56-45-1	Apprentissage	-732,73	-730,51	2,22	-742,94	10,21
731	N-methyl-N-(2-nitroxyethyl)nitramine	C3H7N3O5	17096-47-8	Apprentissage	-186,1	-189,7	3,6	-202,90	16,80
732	1-acetamido-2-nitroguanidine	C3H7N5O3	42216-29-5	Apprentissage	-193,6	-184,33	9,27	-189,07	4,53
733	5-methyl-1H-1,2,4-triazol-3-amine nitrate	C3H7N5O3	13040-75-0	Apprentissage	-228,4	-199,27	29,13	-230,87	2,47
734	Urea, N,N-dimethyl-	C3H8N2O	598-94-7	Apprentissage	-319,06	-327,21	8,15	-313,49	5,57
735	Urea, N,N'-dimethyl-	C3H8N2O	96-31-1	Apprentissage	-313,7	-341,08	27,38	-317,66	3,96
736	Urea, ethyl-	C3H8N2O	625-52-5	Test	-357,76	-385,97	28,21	-363,85	6,09
737	dimethylurea	C3H8N2O	1320-50-9	Apprentissage	-326,5	-341,08	14,58	-317,66	8,84
738	Bis(hydroxymethyl)urea	C3H8N2O3	25155-29-7	Apprentissage	-717,05	-698,28	18,77	-715,73	1,32
739	1,3-Bis(hydroxymethyl)urea	C3H8N2O3	140-95-4	Test	-717	-712,14	4,86	-716,87	0,13
740	Propanedioyl dihydrazide	C3H8N4O2	3815-86-9	Apprentissage	-332,6	-376,19	43,59	-336,97	4,37
741	Acetamidoguanidine nitrate	C3H9N5O4	75011-77-7	Apprentissage	-494	-479,01	14,99	-492,89	1,11
742	3,4-dicyano-1,2,4-oxadiazole	C4N4O	55644-07-0	Apprentissage	456,1	492,38	36,28	456,88	0,78
743	3,4-dicyanofuroxan	C4N4O2	17557-81-2	Apprentissage	465,7	454,19	11,51	465,33	0,37
744	2-nitrofuran	C4H3NO3	609-39-2	Apprentissage	-104	-95,51	8,49	-105,94	1,94
745	Uracil	C4H4N2O2	66-22-8	Test	-424,4	-412,09	12,31	-439,47	15,07
746	Barbituric acid	C4H4N2O3	67-52-7	Apprentissage	-634,7	-604,85	29,85	-634,57	0,13
747	N-nitrosuccinimide	C4H4N2O4	5336-95-8	Apprentissage	-325,6	-361,68	36,08	-348,42	22,82
748	Alloxan monohydrate	C4H4N2O5	03/11/2244	Apprentissage	-1000,7	-1073,58	72,88	-997,97	2,73
749	2,4,6(1H,3H,5H)-Pyrimidinetrione, 5,5-dihydroxy-	C4H4N2O5	3237-50-1	Apprentissage	-1004,2	-1006,69	2,49	-1004,80	0,60
750	N-nitrosobis(2,2,2-trinitroethyl)amine	C4H4N8O13	34882-73-0	Apprentissage	49,4	20,55	28,85	48,11	1,29
751	N-nitrobis(2,2,2-trinitroethyl)amine	C4H4N8O14	19836-28-3	Apprentissage	-27	-34,31	7,31	-31,75	4,75
752	Succinimide	C4H5NO2	123-56-8	Apprentissage	-459,1	-428,05	31,05	-438,80	20,30
753	3-methyl-2,5-oxazolidine-dione	C4H5NO3	5840-76-6	Apprentissage	-600,4	-574,28	26,12	-600,80	0,40
754	3-amino-5-methylisoxazole	C4H6N2O	1072-67-9	Apprentissage	-61,84	-42,06	19,78	-54,98	6,86

755	Cytosine	C4H5N3O	71-30-7	Apprentissage	-221,3	-229,41	8,11	-206,83	14,47
756	Bis(2,2,2-trinitroethyl)amine	C4H5N7O12	34880-53-0	Test	-33	-110,78	77,78	-46,75	13,75
757	5-methyl-2,4-imidazolidinedione	C4H6N2O2	616-03-5	Apprentissage	-486,6	-478,7	7,9	-500,14	13,54
758	2,5-piperazinedione	C4H6N2O2	106-57-0	Apprentissage	-446	-388,36	57,64	-447,34	1,34
759	1,3,4-Oxadiazol-2(5H)-one,5,5-dimethyl-	C4H6N4O2	28873-61-2	Apprentissage	-235	-201,42	33,58	-214,24	20,76
760	Glycoluril	C4H6N4O2	496-46-8	Apprentissage	-492,8	-472,49	20,31	-502,37	9,57
761	2,5-dioxo-4-imidazolidinylurea	C4H6N4O3	97-59-6	Apprentissage	-717,56	-717,56	0	-717,50	0,06
762	N,N'-dimethyl-N,N'-dinitroethanediamide	C4H6N4O6	14760-99-7	Apprentissage	-305,3	-304,53	0,77	-305,64	0,34
763	1-nitroacetaldehyde o-(1,1-dinitroethyl)oxime	C4H6N4O7	10565-52-3	Test	-165,5	-248,86	83,36	-165,71	0,21
764	2,2,3,3-tetranitrobutane	C4H6N4O8	20919-97-5	Apprentissage	-182	-221,75	39,75	-218,50	36,50
765	1,1,1,4-tetranitrobutane	C4H6N4O8	20919-96-4	Apprentissage	-190	-181,04	8,96	-190,50	0,50
766	1,1,3,3-Tetranitrobutane	C4H6N4O8	3759-60-2	Apprentissage	-215,9	-204,61	11,29	-208,49	7,41
767	Aspartic acid	C4H7NO4	56-84-8	Apprentissage	-973,32	-978,35	5,03	-972,82	0,50
768	Iminodiacetic acid	C4H7NO4	142-73-4	Apprentissage	-932,6	-936,23	3,63	-924,64	7,96
769	Creatinine	C4H7N3O	60-27-5	Apprentissage	-238,5	-238,5	0	-238,46	0,04
770	2-methyl-2-nitro-1,3-propanediol dinitrate	C4H7N3O8	4055-94-1	Apprentissage	-374	-405,94	31,94	-380,71	6,71
771	5-tetrazolylurethane	C4H7N5O2	5326-16-9	Apprentissage	-220	-214,7	5,3	-206,58	13,42
772	Butanediamide	C4H8N2O2	110-14-5	Apprentissage	-581,2	-581,2	0	-581,12	0,08
773	2,3-butanedione dioxime	C4H8N2O2	95-45-4	Apprentissage	-177,9	-173,89	4,01	-179,11	1,21
774	1-Acetyl-3-methylurea	C4H8N2O2	623-59-6	Apprentissage	-563,1	-509,89	53,21	-563,89	0,79
775	L-asparagine	C4H8N2O3	70-47-3	Apprentissage	-789,02	-781,07	7,95	-795,66	6,64
776	N-glycylglycine	C4H8N2O3	556-50-3	Apprentissage	-747,7	-744,3	3,4	-747,88	0,18
777	Tartramide	C4H8N2O4	634-63-9	Apprentissage	-1193,5	-1193,5	0	-1193,53	0,03
778	1,4-dinitrobutane	C4H8N2O4	4286-49-1	Test	-249,1	-266,12	17,02	-235,31	13,79
779	1,4-dinitrosopiperazine	C4H8N4O2	140-79-4	Apprentissage	93	113,86	20,86	92,30	0,70
780	1,4-dinitropiperazine	C4H8N4O4	4164-37-8	Apprentissage	-53	-35,51	17,49	-29,77	23,23
781	N-nitrobis(2-hydroxyethyl)amine dinitrate	C4H8N4O8	4185-47-1	Test	-311	-309,57	1,43	-273,19	37,81
782	Cyclotetramethylenetetranitramine	C4H8N8O8	2691-41-0	Apprentissage	75	77,62	2,62	91,92	16,92
783	Butanamide	C4H9NO	541-35-5	Apprentissage	-364	-368,15	4,15	-353,65	10,35
784	Propanamide, 2-methyl-	C4H9NO	563-83-7	Apprentissage	-368,6	-357,23	11,37	-355,01	13,59
785	2-Butanone, oxime	C4H9NO	96-29-7	Test	-151	-177,81	26,81	-166,06	15,06
786	4-aminobutanoic acid	C4H9NO2	56-12-2	Apprentissage	-581,1	-581,42	0,32	-579,79	1,31
787	n-propylcarbamate	C4H9NO2	627-12-3	Apprentissage	-552,6	-524,84	27,76	-526,49	26,11
788	2-methyl-2-nitropropane	C4H9NO2	594-70-7	Apprentissage	-230	-222,67	7,33	-234,24	4,24
789	α -Aminoisobutanoic acid	C4H9NO2	62-57-7	Apprentissage	-594,28	-595,48	1,2	-594,31	0,03
790	dl-2-Aminobutyric acid	C4H9NO2	2835-81-6	Test	-605,8	-594,65	11,15	-595,78	10,02
791	2-methyl-2-nitro-1-propanol	C4H9NO3	76-39-1	Test	-410,2	-401,98	8,22	-403,36	6,84
792	L-threonine	C4H9NO3	72-19-5	Apprentissage	-776,3	-744,06	32,24	-760,59	15,71

793	DL-threonine	C4H9NO3	80-68-2	Apprentissage	-758,8	-744,06	14,74	-760,59	1,79
794	2-methyl-2-nitro-1,3-propanediol	C4H9NO4	77-49-6	Apprentissage	-580,1	-587,51	7,41	-578,51	1,59
795	2-(hydroxymethyl)-2-nitro-1,3-propanediol	C4H9NO5	126-11-4	Apprentissage	-742,2	-773,04	30,84	-744,56	2,36
796	Creatine	C4H9N3O2	57-00-1	Apprentissage	-537,18	-533,67	3,51	-525,81	11,37
797	Trimethylurea	C4H10N2O	632-14-4	Apprentissage	-330,5	-330,5	0	-330,52	0,02
798	isopropylurea	C4H10N2O	691-60-1	Apprentissage	-389,5	-402,86	13,36	-398,50	9,00
799	L-asparagine monohydrate	C4H10N2O4	5794-13-8	Apprentissage	-1086,6	-1046,25	40,35	-1088,98	2,38
800	Butanedioyl dihydrazide	C4H10N4O2	4146-43-4	Test	-366,6	-403,99	37,39	-383,61	17,01
801	Diethanolamine	C4H11NO2	111-42-2	Apprentissage	-493,8	-523,89	30,09	-497,57	3,77
802	2-amino-2-(hydroxymethyl)-1,3-propanediol	C4H11NO3	77-86-1	Apprentissage	-717,84	-716,64	1,2	-717,79	0,05
803	Morpholine, 4-nitro-	C4H8N2O3	4164-32-3	Apprentissage	-213	-226,03	13,03	-220,78	7,78
804	Acetamide,ethoxy	C4H9NO2	51770-98-0	Apprentissage	-491	-524,84	33,84	-526,49	35,49
805	5-nitro-2-furancarboxaldehyde	C5H3NO4	698-63-5	Apprentissage	-227	-265,05	38,05	-242,31	15,31
806	5-nitro-2-furancarboxylic acid	C5H3NO5	645-12-5	Apprentissage	-517,1	-514,06	3,04	-534,32	17,22
807	5-nitro-2-furamide	C5H4N2O4	701-51-9	Apprentissage	-323	-322,7	0,3	-329,15	6,15
808	1,7-dihydro-6H-purin-6-one	C5H4N4O	68-94-0	Test	-110,8	-88,62	22,18	-121,80	11,00
809	3,7-dihydro-1H-purine-2,6-dione	C5H4N4O2	69-89-6	Apprentissage	-379,6	-382,84	3,24	-366,94	12,66
810	Uric acid	C5H4N4O3	69-93-2	Apprentissage	-618,8	-594,84	23,96	-635,55	16,75
811	1H-pyrrole-2-carboxaldehyde	C5H5NO	1003-29-8	Test	-106,4	-124,67	18,27	-104,21	2,19
812	2-pyridinol	C5H5NO	72762-00-6	Apprentissage	-166,3	-164,71	1,59	-162,06	4,24
813	3-pyridinol	C5H5NO	109-00-2	Apprentissage	-132	-134,97	2,97	-131,63	0,37
814	4-pyridinol	C5H5NO	626-64-2	Apprentissage	-144,6	-144,6	0	-144,58	0,02
815	Guanine	C5H5N5O	73-40-5	Apprentissage	-183,9	-172,84	11,06	-132,89	51,01
816	1,1,1,3,5,5,5-heptanitropentane	C5H5N7O14	20919-99-7	Test	-154	-141,34	12,66	-151,33	2,67
817	1-acetyl-1H-imidazole	C5H6N2O	2466-76-4	Apprentissage	-119,6	-102,41	17,19	-115,05	4,55
818	1H-pyrrole-2-carboxaldehyde oxime	C5H6N2O	32597-34-5	Apprentissage	12,1	22,71	10,61	27,38	15,28
819	5-methyluracil	C5H6N2O2	65-71-4	Apprentissage	-462,8	-460,16	2,64	-453,32	9,48
820	Bis(2,2,2-trinitroethoxy)methane	C5H6N6O14	6263-74-7	Test	-403,3	-437,13	33,83	-421,06	17,76
821	N,3,3,3-tetranitro-N-(2,2,2-trinitroethyl)-propylamine	C5H6N8O14	71742-94-4	Apprentissage	-88,7	-62,11	26,59	-66,75	21,95
822	5-amino-3,4-dimethylisoxazole	C5H8N2O	19947-75-2	Apprentissage	-82,7	-87,56	4,86	-82,38	0,32
823	5,5-dimethyl-2,4-imidazolidinedione	C5H8N2O2	77-71-4	Apprentissage	-533,3	-505,77	27,53	-512,40	20,90
824	Pentaerythritol tetranitrate	C5H8N4O12	78-11-5	Apprentissage	-538,5	-550,67	12,17	-531,90	6,60
825	3-(5-tetrazolylazo)-butan-2-one	C5H8N6O	74999-21-6	Apprentissage	167,4	181,18	13,78	166,38	1,02
826	2-piperidone	C5H9NO	675-20-7	Test	-306,6	-322,91	16,31	-318,88	12,28
827	Ethanone, 1-cyclopropyl-, oxime	C5H9NO	51761-72-9	Apprentissage	-27,6	-4,35	23,25	-27,61	0,01
828	DL-proline	C5H9NO2	609-36-9	Apprentissage	-524,2	-520,8	3,4	-525,09	0,89
829	L-proline	C5H9NO2	147-85-3	Apprentissage	-515,18	-520,8	5,62	-525,09	9,91
830	L-glutamic acid	C5H9NO4	56-86-0	Test	-1003,3	-992	11,3	-990,89	12,41

831	D-glutamic acid	C5H9NO4	6893-26-1	Apprentissage	-1002,47	-992	10,47	-990,89	11,58
832	2-methyl-2,3,3-trinitrobutane	C5H9N3O6	5324-72-1	Apprentissage	-331,5	-264,27	67,23	-277,01	54,49
833	L-glutamine	C5H10N2O3	56-85-9	Apprentissage	-826,4	-808,87	17,53	-829,66	3,26
834	N-DL-alanylglycine	C5H10N2O3	1188-01-8	Test	-777,39	-779,22	1,83	-786,58	9,19
835	2,2-dimethyl-1,3-dinitropropane	C5H10N2O4	762-98-1	Apprentissage	-275,1	-256,09	19,01	-275,24	0,14
836	3,7-dinitroso-1,3,5,7-tetraazabicyclo[3.3.1]nonane	C5H10N6O2	101-25-7	Test	228,2	217,79	10,41	226,13	2,07
837	Pentanamide	C5H11NO	626-97-1	Apprentissage	-379,5	-395,96	16,46	-381,54	2,04
838	Propanamide, 2,2-dimethyl-	C5H11NO	754-10-9	Apprentissage	-399,7	-364,34	35,36	-385,94	13,76
839	Butanamide, 3-methyl-	C5H11NO	541-46-8	Test	-390	-385,04	4,96	-382,53	7,47
840	5-aminopentanoic acid	C5H11NO2	660-88-8	Test	-604,17	-609,23	5,06	-607,40	3,23
841	DL-Valine	C5H11NO2	516-06-3	Apprentissage	-617	-611,53	5,47	-611,31	5,69
842	L-valine	C5H11NO2	72-18-4	Apprentissage	-618	-611,53	6,47	-611,31	6,69
843	2-ethyl-2-nitro-1,3-propanediol	C5H11NO4	597-09-1	Apprentissage	-607,7	-615,32	7,62	-608,28	0,58
844	Urea, butyl-	C5H12N2O	592-31-4	Apprentissage	-419,5	-441,58	22,08	-427,48	7,98
845	Urea, (1,1-dimethylethyl)-	C5H12N2O	1118-12-3	Test	-414,73	-409,96	4,77	-415,65	0,92
846	Urea, N,N-diethyl-	C5H12N2O	634-95-7	Apprentissage	-372,2	-382,82	10,62	-378,95	6,75
847	Urea, N,N'-diethyl-	C5H12N2O	623-76-7	Test	-379,8	-396,68	16,88	-371,47	8,33
848	sec-butylurea	C5H12N2O	689-11-2	Apprentissage	-413,2	-427,33	14,13	-398,54	14,66
849	DL-ornithine	C5H12N2O2	616-07-9	Apprentissage	-652,6	-658,41	5,81	-656,03	3,43
850	1,3,5-trinitrobenzene	C6H3N3O6	99-35-4	Apprentissage	-37	-19,41	17,59	-26,53	10,47
851	2,4,6-trinitrophenol	C6H3N3O7	88-89-1	Apprentissage	-214	-205,19	8,81	-214,23	0,23
852	2,4,6-Trinitroresorcinol	C6H3N3O8	82-71-3	Apprentissage	-433	-409,36	23,64	-407,30	25,70
853	1,2,3-benzoxadiazole	C6H4N2O	273-59-6	Apprentissage	235,8	151,6	84,2	227,20	8,60
854	Benzofurazan	C6H4N2O	273-09-6	Apprentissage	235,8	290,92	55,12	234,56	1,24
855	1,3-dinitrobenzene	C6H4N2O4	99-65-0	Apprentissage	-19,2	-22,44	3,24	-31,96	12,76
856	1,2-dinitrobenzene	C6H4N2O4	528-29-0	Apprentissage	-2	2,52	4,52	-3,06	1,06
857	1,4-dinitrobenzene	C6H4N2O4	100-25-4	Apprentissage	-38	-44,9	6,9	-51,02	13,02
858	2,4-dinitrophenol	C6H4N2O5	51-28-5	Apprentissage	-223	-227,67	4,67	-216,38	6,62
859	2,6-dinitrophenol	C6H4N2O5	573-56-8	Apprentissage	-209,6	-209,44	0,16	-204,78	4,82
860	2,4-dinitro-1,3-benzenediol	C6H4N2O6	519-44-8	Apprentissage	-422,8	-424,03	1,23	-407,99	14,81
861	4,6-dinitro-1,3-benzenediol	C6H4N2O6	616-74-0	Test	-435,09	-433,37	1,72	-430,03	5,06
862	3-pyridinecarboxylic acid	C6H5NO2	59-67-6	Apprentissage	-344,9	-341,99	2,91	-345,08	0,18
863	2-Pyridinecarboxylic acid	C6H5NO2	98-98-6	Test	-343,8	-326,94	16,86	-346,59	2,79
864	5-nitro-2-furancarboxylic acid methyl ester	C6H5NO5	1874-23-3	Test	-471,1	-497,58	26,48	-458,50	12,60
865	2,3-dinitroaniline	C6H5N3O4	602-03-9	Apprentissage	-12	-16,52	4,52	-11,26	0,74
866	2,4-dinitroaniline	C6H5N3O4	97-02-9	Apprentissage	-65,7	-54,1	11,6	-45,55	20,15
867	2,5-dinitroaniline	C6H5N3O4	619-18-1	Apprentissage	-44,4	-79,02	34,62	-64,20	19,80
868	2,6-dinitroaniline	C6H5N3O4	606-22-4	Apprentissage	-50,6	-45,85	4,75	-34,16	16,44

869	3,4-dinitroaniline	C6H5N3O4	610-41-3	Test	-33	-24,77	8,23	-32,67	0,33
870	3,5-dinitroaniline	C6H5N3O4	618-87-1	Apprentissage	-39	-53,02	14,02	-34,42	4,58
871	2,4,6-trinitrophenylhydrazine	C6H5N5O6	653-49-6	Test	40,9	56,83	15,93	38,09	2,81
872	1,3-diamino-2,4,6-trinitrobenzene	C6H5N5O6	1630-08-6	Apprentissage	-98	-82,18	15,82	-112,90	14,90
873	2-nitroaniline	C6H6N2O2	88-74-4	Apprentissage	-26,3	-35,5	9,2	-19,82	6,48
874	3-nitroaniline	C6H6N2O2	99-09-2	Apprentissage	-38	-31,13	6,87	-23,10	14,90
875	4-nitroaniline	C6H6N2O2	100-01-6	Test	-38,5	-28,67	9,83	-25,76	12,74
876	5-cyclohexene-(1 α ,2 β ,3 β ,4 α)-1,2,3,4-tetrol tetranitrate	C6H6N4O12	29585-45-3	Apprentissage	-388	-367,57	20,43	-387,48	0,52
877	α -epoxyconduritol-E tetranitrate	C6H6N4O13	23627-80-7	Apprentissage	-444	-481,09	37,09	-444,48	0,48
878	2,4-dinitrophenylhydrazine	C6H6N4O4	119-26-6	Apprentissage	49,9	34,34	15,56	9,09	40,81
879	5-nitrofurazone	C6H6N4O4	59-87-0	Test	-223,6	-285,53	61,93	-225,30	1,70
880	1,3,5-triamino-2,4,6-trinitrobenzene	C6H6N6O6	3058-38-6	Apprentissage	-140	-129,25	10,75	-134,06	5,94
881	2-methyl-3-hydroxypyridine	C6H7NO	1121-25-1	Apprentissage	-173,6	-173,6	0	-173,60	0,00
882	2-methyl-4-hydroxypyridine	C6H7NO	18615-86-6	Apprentissage	-184,7	-170,06	14,64	-184,67	0,03
883	2-methyl-5-hydroxypyridine	C6H7NO	1121-78-4	Apprentissage	-166	-166	0	-165,99	0,01
884	2-methyl-6-hydroxypyridine	C6H7NO	3279-76-3	Apprentissage	-212,3	-231,01	18,71	-211,57	0,73
885	Phenol, 4-amino-	C6H7NO	123-30-8	Apprentissage	-194,1	-195,99	1,89	-194,80	0,70
886	Phenol, 3-amino-	C6H7NO	591-27-5	Apprentissage	-200,2	-198,46	1,74	-190,99	9,21
887	Phenol, o-amino-	C6H7NO	95-55-6	Apprentissage	-201,3	-192,84	8,46	-184,07	17,23
888	N,N'-dinitro-N,N'-bis(2-hydroxyethyl)oxamide dinitrate	C6H8N6O12	62209-60-3	Apprentissage	-536	-524,43	11,57	-535,97	0,03
889	1,1,1,9,9,9-hexanitro-3,5,7-trioxanonane	C6H8N6O15		Apprentissage	-596,9	-621,63	24,73	-604,80	7,90
890	3-(5-tetrazolylazo)-pentan-2,4-dione	C6H8N6O2	74999-20-5	Apprentissage	14,1	7,21	6,89	14,67	0,57
891	1,1,1,5,9,9,9-heptanitro-3,7-dioxa-5-azanonane	C6H8N8O16	80308-88-9	Test	-387,4	-403,29	15,89	-378,79	8,61
892	2-hexynamide	C6H9NO	62155-28-6	Apprentissage	-117,9	-138,97	21,07	-97,61	20,29
893	L-histidine	C6H9N3O2	71-00-1	Apprentissage	-466,7	-470,71	4,01	-474,05	7,35
894	3-cyano-5-(cyanofurazanyl)-1,2,4-oxadiazole N- oxide	C6N6O3	56092-91-2	Apprentissage	565,3	556,62	8,68	563,61	1,69
895	Benzotrifuroxan	C6N6O6	3470-17-5	Apprentissage	606	614,67	8,67	607,13	1,13
896	Benzoic acid, 2,4,6-trinitro-	C7H3N3O8	129-66-8	Apprentissage	-409,7	-412,21	2,51	-427,74	18,04
897	3,5-dinitrobenzoic acid	C7H4N2O6	99-34-3	Apprentissage	-432,6	-443,59	10,99	-434,21	1,61
898	1-phenyl-5-hydroxytetrazole	C7H4N4O	51449-77-5	Apprentissage	111,8	153,54	41,74	110,81	0,99
899	Benzoxazole	C7H5NO	273-53-0	Apprentissage	-24,2	-22,11	2,09	-18,98	5,22
900	Benzonitrile, 4-hydroxy-	C7H5NO	767-00-0	Apprentissage	-60,92	-51,22	9,7	-66,82	5,90
901	2-nitrobenzoic acid	C7H5NO4	552-16-9	Apprentissage	-399	-416,09	17,09	-413,90	14,90
902	3-nitrobenzoic acid	C7H5NO4	121-92-6	Apprentissage	-414	-421,7	7,7	-417,34	3,34
903	4-nitrobenzoic acid	C7H5NO4	62-23-7	Test	-427,2	-419,24	7,96	-421,14	6,06
904	3-(5-nitro-2-furyl)-2-propenal	C7H5NO4	1874-22-2	Apprentissage	-163	-180,61	17,61	-162,43	0,57
905	2,4,6-trinitrotoluene	C7H5N3O6	118-96-7	Apprentissage	-49,96	-42,38	7,58	-47,99	1,97
906	3-methyl-2,4,6-trinitrophenol	C7H5N3O7	602-99-3	Apprentissage	-255,9	-246,55	9,35	-244,69	11,21

907	2-methoxy-1,3,5-trinitrobenzene	C7H5N3O7	606-35-9	Apprentissage	-187,2	-165,95	21,25	-189,38	2,18
908	N-methyl-N,2,4,6-tetranitroaniline	C7H5N5O8	479-45-8	Apprentissage	30,7	40,5	9,8	36,58	5,88
909	1-methyl-2,4-dinitrobenzene	C7H6N2O4	121-14-2	Apprentissage	-66,4	-61,93	4,47	-63,12	3,28
910	1-methyl-2,6-dinitrobenzene	C7H6N2O4	606-20-2	Test	-55,2	-46,63	8,57	-46,99	8,21
911	(dinitromethyl)benzene	C7H6N2O4	611-38-1	Apprentissage	-41	-41	0	-40,96	0,04
912	2,4-dinitro-1-methoxybenzene	C7H6N2O5	119-27-7	Apprentissage	-186,6	-188,43	1,83	-194,89	8,29
913	2,6-dinitro-1-methoxybenzene	C7H6N2O5	3535-67-9	Apprentissage	-189,3	-170,2	19,1	-180,51	8,79
914	Phenol, 4-methyl-2,6-dinitro-	C7H6N2O5	609-93-8	Test	-239	-253,67	14,67	-249,18	10,18
915	2,4,6-trinitro-N-methylaniline	C7H6N4O6	1022-07-7	Apprentissage	-49,3	-39,63	9,67	-37,25	12,05
916	2,4,N-trinitro-N-methylaniline	C7H6N4O6	19092-03-6	Test	16,2	18,02	1,82	23,78	7,58
917	2,6,N-trinitro-N-methylaniline	C7H6N4O6	102153-82-2	Apprentissage	39,5	36,25	3,25	34,86	4,64
918	Benzamide	C7H7NO	55-21-0	Apprentissage	-202,14	-200,7	1,44	-189,26	12,88
919	2-amino-2,4,6-cycloheptatrien-1-one	C7H7NO	33504-43-7	Apprentissage	-31,6	-67,23	35,63	-31,51	0,09
920	Benzaldehyde, oxime	C7H7NO	932-90-1	Apprentissage	25	22,09	2,91	23,87	1,13
921	2-hydroxybenzaldoxime	C7H7NO2	94-67-7	Apprentissage	-183,7	-180,79	2,91	-182,43	1,27
922	2-aminobenzoic acid	C7H7NO2	118-92-3	Apprentissage	-401,1	-399,86	1,24	-404,99	3,89
923	3-aminobenzoic acid	C7H7NO2	99-05-8	Apprentissage	-411	-405,48	5,52	-411,42	0,42
924	4-aminobenzoic acid	C7H7NO2	150-13-0	Test	-410	-403,01	6,99	-418,05	8,05
925	1-methyl-4-nitrobenzene	C7H7NO2	99-99-0	Apprentissage	-48,2	-43,55	4,65	-52,72	4,52
926	Salicylamide	C7H7NO2	65-45-2	Apprentissage	-402,7	-403,57	0,87	-404,08	1,38
927	N-methyl-2,6-dinitroaniline	C7H7N3O4	5910-19-0	Apprentissage	-14	-43,89	29,89	-40,87	26,87
928	N-methyl-2,4-dinitroaniline	C7H7N3O4	2044-88-4	Apprentissage	-67,4	-52,14	15,26	-47,29	20,11
929	Urea, phenyl-	C7H8N2O	64-10-8	Apprentissage	-231,5	-246,05	14,55	-232,28	0,78
930	Benzamide, 4-amino-	C7H8N2O	2835-68-9	Test	-187	-223,18	36,18	-200,54	13,54
931	2-methyl-5-nitroaniline	C7H8N2O2	99-55-8	Apprentissage	-91,3	-67,69	23,61	-60,82	30,48
932	4-methyl-3-nitroaniline	C7H8N2O2	119-32-4	Apprentissage	-71,7	-70,62	1,08	-57,75	13,95
933	Ethylmethyl maleimide	C7H9NO2	29720-92-1	Apprentissage	-469,7	-467,07	2,63	-468,99	0,71
934	α -D-methyl glucopyranoside-2,3,4,6-tetranitrate	C7H10N4O14	13225-10-0	Apprentissage	-826,3	-804,63	21,67	-826,93	0,63
935	1,1,1,4,9,9,9-heptanitro-4-aza-6-oxanonane	C7H10N8O15		Apprentissage	-303,7	-294,24	9,46	-303,03	0,67
936	3-isopropyl-2,5-piperazinedione	C7H12N2O2	14771-77-8	Apprentissage	-502,9	-498,38	4,52	-496,62	6,08
937	Hexahydro-5-methyl-2H-azepin-2-one	C7H13NO	03/07/2210	Apprentissage	-364	-342,87	21,13	-354,67	9,33
938	Hexahydro-7-methyl-2H-azepin-2-one	C7H13NO	1985-48-4	Test	-362,3	-342,87	19,43	-354,67	7,63
939	Hexahydro-2(1H)-azocinone	C7H13NO	673-66-5	Apprentissage	-348,5	-331,79	16,71	-346,19	2,31
940	N-glycyl-DL-valine	C7H14N2O3	2325-17-9	Apprentissage	-835	-825,06	9,94	-846,75	11,75
941	7-aminoheptanoic acid	C7H15NO2	929-17-9	Apprentissage	-667,4	-670,65	3,25	-660,96	6,44
942	α -oxobenzeneacetonitrile	C8H5NO	613-90-1	Apprentissage	38,9	44,14	5,24	54,87	15,97
943	1H-Indole-2,3-dione	C8H5NO2	91-56-5	Apprentissage	-268,2	-319,71	51,51	-279,38	11,18
944	3-picrylamino-1,2,4-triazole	C8H5N7O6	18212-12-9	Apprentissage	151	74,38	76,62	148,80	2,20

945	Phenylfurazan	C8H6N2O	10349-06-1	Apprentissage	237,9	262,3	24,4	260,06	22,16
946	3-phenyl-1,2,4-oxadiazol-5(4H)-one	C8H6N2O2	1456-22-0	Apprentissage	-109,4	-66,94	42,46	-109,66	0,26
947	5-phenyl-1,2,4-oxadiazol-3(2H)-one	C8H6N2O2	21084-84-4	Apprentissage	-4,4	-46,86	42,46	-4,17	0,23
948	2,4,6-trinitrophenoxyethyl nitrate	C8H6N4O10	62030-33-5	Test	-287,7	-357,1	69,4	-297,49	9,79
949	2-phenyl-5-carboxytetrazole	C8H6N4O2	54798-92-4	Apprentissage	-41,5	-58,29	16,79	-38,87	2,63
950	1-nitro-2-phenylethene	C8H7NO2	102-96-5	Apprentissage	30,5	72,7	42,2	33,00	2,50
951	4-phenylfurazan amine	C8H7N3O	10349-14-1	Apprentissage	220,9	205,29	15,61	216,35	4,55
952	2-ethyl-1,3,5-trinitrobenzene	C8H7N3O6	13985-60-9	Apprentissage	-71,5	-75,21	3,71	-81,39	9,89
953	2,4-dimethyl-1,3,5-trinitrobenzene	C8H7N3O6	632-92-8	Apprentissage	-83,14	-83,74	0,6	-89,08	5,94
954	1,1,1-trinitro-2-phenylethane	C8H7N3O6	38677-56-4	Test	-18	5,21	23,21	-7,15	10,85
955	2-ethoxy-1,3,5-trinitrobenzene	C8H7N3O7	4732-14-3	Apprentissage	-204,6	-193,75	10,85	-213,23	8,63
956	2-(2,4-dinitrophenoxy)-ethanol nitrate	C8H7N3O8	62030-34-6	Test	-298,8	-310,98	12,18	-316,12	17,32
957	α -phenylglyoxime	C8H8N2O2	4589-97-3	Apprentissage	42,4	-2,91	45,31	7,91	34,49
958	β -phenylglyoxime	C8H8N2O2	4589-97-3	Apprentissage	-20,4	-2,91	17,49	7,91	28,31
959	1,4-benzenedicarboxamide	C8H8N2O2	3010-82-0	Apprentissage	-433,1	-433,91	0,81	-434,78	1,68
960	1,3-benzenedicarboxamide	C8H8N2O2	1740-57-4	Apprentissage	-436,9	-436,37	0,53	-434,11	2,79
961	Methyl(4-nitrophenyl)carbamate	C8H8N2O4	1943-87-9	Apprentissage	-427,9	-399,67	28,23	-427,18	0,72
962	2,4-dinitro-1,3-dimethylbenzene	C8H8N2O4	603-02-1	Apprentissage	-85,6	-95,47	9,87	-86,92	1,32
963	4,6-dinitro-1,3-dimethylbenzene	C8H8N2O4	616-72-8	Test	-102	-101,88	0,12	-109,11	7,11
964	(1,1'-bipyrrolidine)-2,2',5,5'-tetrone	C8H8N2O4	3741-24-0	Apprentissage	-709,4	-682,27	27,13	-696,30	13,10
965	2,4-dinitro-1-ethoxybenzene	C8H8N2O5	610-54-8	Apprentissage	-226,4	-216,24	10,16	-217,38	9,02
966	2,4-dinitrophenoxyethanol	C8H8N2O6	2831-60-9	Apprentissage	-398,88	-398,88	0	-398,87	0,01
967	N-phenylacetamide	C8H9NO	103-84-4	Apprentissage	-209,5	-218,63	9,13	-227,64	18,14
968	1-(4-aminophenyl)ethanone	C8H9NO	99-92-3	Apprentissage	-182	-174	8	-180,12	1,88
969	1-(3-aminophenyl)ethanone	C8H9NO	99-03-6	Test	-173	-176,47	3,47	-166,17	6,83
970	Benzeneacetamide	C8H9NO	103-81-1	Apprentissage	-224	-224	0	-223,96	0,04
971	Ethanone, 1-phenyl-, oxime	C8H9NO	613-91-2	Test	-41	-39,49	1,51	-30,51	10,49
972	N-Phenylglycine	C8H9NO2	103-01-5	Test	-396,71	-385,64	11,07	-384,06	12,65
973	Benzene, 1-ethyl-4-nitro-	C8H9NO2	100-12-9	Apprentissage	-55,31	-76,38	21,07	-76,77	21,46
974	α -phenylglycine	C8H9NO2	69-91-0	Apprentissage	-445,5	-443,46	2,04	-446,04	0,54
975	5-nitro-2-acetoxy-2,5-dihydro-2-furancarboxylic acid methyl ester	C8H9NO7	22401-53-2	Apprentissage	-919,2	-940,76	21,56	-919,82	0,62
976	N,N-dimethyl-2,4-dinitroaniline	C8H9N3O4	1670-17-3	Apprentissage	-30,7	-54,31	23,61	-48,21	17,51
977	2-methyl-1H-pyrrole-3-carboxylic acid ethyl ester	C8H11NO2	936-12-9	Test	-411	-419,87	8,87	-399,96	11,04
978	2,4-dimethyl-1H-pyrrole-3-carboxylic acid methyl ester	C8H11NO2	52459-90-2	Apprentissage	-422,3	-440,33	18,03	-433,36	11,06
979	2,4-dimethyl-1H-pyrrole-5-carboxylic acid methyl ester	C8H11NO2	74999-36-3	Apprentissage	-422,3	-440,33	18,03	-433,36	11,06
980	4-hydroxy-5-methyl-1H-pyrrole-3-carboxylic acid ethyl ester	C8H11NO3	74999-30-7	Apprentissage	-611,9	-636,34	24,44	-618,48	6,58
981	1,2-bis(3-carboxypropanoyl)hydrazine	C8H12N2O6	02/02/5343	Apprentissage	-1329,4	-1270,52	58,88	-1330,34	0,94
982	1,1,1,5,7,9,13,13,13-nonanitro-3,11-dioxa-5,7,9-triazatridecane	C8H12N12O20	80308-90-3	Apprentissage	-340,1	-335,6	4,5	-342,99	2,89

983	3-isopropyl-6-methyl-2,5-piperazinedione	C8H14N2O2	15136-26-2	Test	-514,3	-543,66	29,36	-521,79	7,49
984	N-DL-leucylglycine	C8H16N2O3	615-82-7	Apprentissage	-859,9	-851,71	8,19	-860,74	0,84
985	N,N'-dicarbethoxy-ethylenediamine	C8H16N2O4	539-71-9	Apprentissage	-980,9	-950,66	30,24	-975,11	5,79
986	Octanamide	C8H17NO	629-01-6	Apprentissage	-473,2	-479,37	6,17	-466,57	6,63
987	3-benzoyl-5-hydroxy-1,2,4-oxadiazole	C9H6N2O3	30738-69-3	Apprentissage	-269,9	-226,9	43	-282,32	12,42
988	Nitroxoline	C9H6N2O3	4008-48-4	Apprentissage	-115,7	-103,02	12,68	-116,69	0,99
989	5-phenylisoxazole	C9H7NO	1006-67-3	Apprentissage	80,5	114,99	34,49	83,43	2,93
990	8-quinolinol	C9H7NO	148-24-3	Apprentissage	-81,2	-79,36	1,84	-76,23	4,97
991	β -oxobenzenepropanenitrile	C9H7NO	614-16-4	Apprentissage	-22,3	-31,38	9,08	-29,50	7,20
992	2(1H)-Quinolinone	C9H7NO	59-31-4	Apprentissage	-144,9	-136,45	8,45	-133,96	10,94
993	4-Quinolinol	C9H7NO	611-36-9	Apprentissage	-114,3	-81,51	32,79	-105,19	9,11
994	Phenylpropiolamide	C9H7NO	7223-30-5	Apprentissage	-20	5,41	25,41	-20,02	0,02
995	4-phenyl-3-furazancarboxamide	C9H7N3O2	18600-75-4	Apprentissage	79,2	23,55	55,65	63,61	15,59
996	3-methyl-4-phenylfurazan	C9H8N2O	10349-09-4	Apprentissage	187,8	209,82	22,02	204,03	16,23
997	Benzyl-1,2,4-oxadiazole	C9H8N2O	37216-04-9	Apprentissage	37,2	117,09	79,89	49,43	12,23
998	3-methyl-5-phenyl-1,2,4-oxadiazole	C9H8N2O	1199-00-4	Apprentissage	103,3	85,07	18,23	94,45	8,85
999	5-methyl-3-phenyl-1,2,4-oxadiazole	C9H8N2O	1198-98-7	Test	97,4	85,07	12,33	94,45	2,95
1000	2,2'-carbonylbis-(1H-pyrrole)	C9H8N2O	15770-21-5	Apprentissage	-25,2	-3,92	21,28	-23,67	1,53
1001	2-nitro-1-phenylpropene	C9H9NO2	705-60-2	Apprentissage	-15,4	6,03	21,43	-14,17	1,23
1002	N-benzoylglycine	C9H9NO3	495-69-2	Apprentissage	-611,1	-619,8	8,7	-611,48	0,38
1003	2-(diacetylmethyl)-5-nitrofuran	C9H9NO7	92-55-7	Test	-897,9	-920,19	22,29	-894,04	3,86
1004	2,4,6-trinitro-1,3,5-tris(methylnitramino)benzene	C9H9N9O12	62030-37-9	Apprentissage	118,1	117,05	1,05	112,72	5,38
1005	α -(4-methylphenyl)-glyoxime	C9H10N2O2		Apprentissage	-41,8	-40,26	1,54	-22,08	19,72
1006	β -(4-methylphenyl)-glyoxime	C9H10N2O2		Apprentissage	25,1	-40,26	65,36	-22,08	47,18
1007	4-(diméthylamino)-benzaldehyde	C9H11NO	100-10-7	Apprentissage	-137	-119,3	17,7	-137,14	0,14
1008	Benzamide, N,N-diméthyl-	C9H11NO	611-74-5	Apprentissage	-171,4	-161,01	10,39	-171,53	0,13
1009	Acetamide, N-(2-méthylphényl)-	C9H11NO	120-66-1	Apprentissage	-242,43	-252,82	10,39	-233,81	8,62
1010	L-phenylalanine	C9H11NO2	63-91-2	Apprentissage	-466,9	-478,4	11,5	-460,01	6,89
1011	DL-phenylalanine	C9H11NO2	150-30-1	Apprentissage	-460,6	-478,4	17,8	-460,01	0,59
1012	4-aminobenzoic acid ethyl ester	C9H11NO2	94-09-7	Apprentissage	-417,9	-383,54	34,36	-398,48	19,42
1013	L-tyrosine	C9H11NO3	60-18-4	Apprentissage	-685,6	-684,42	1,18	-665,70	19,90
1014	3,5-diméthyl-1H-pyrrole-2,4-dicarboxylic acid 4-méthyl ester	C9H11NO4	50296-60-1	Apprentissage	-841,8	-845,48	3,68	-855,40	13,60
1015	N,N'-diméthyl-N-phenylurea	C9H12N2O	938-91-0	Apprentissage	-217,8	-210,89	6,91	-219,83	2,03
1016	Fenuron	C9H12N2O	101-42-8	Test	-203	-222,01	19,01	-213,04	10,04
1017	N-(4-éthoxyphényl)urea	C9H12N2O2	150-69-6	Apprentissage	-468,8	-440,64	28,16	-455,05	13,75
1018	N-(3-éthoxyphényl)urea	C9H12N2O2	13142-86-4	Apprentissage	-429,5	-443,11	13,61	-442,18	12,68
1019	4-éthyl-3,5-diméthyl-1H-pyrrole-2-carboxaldehyde	C9H13NO	6250-80-2	Test	-254,8	-266,93	12,13	-253,22	1,58
1020	2,5-diméthyl-1H-pyrrole-3-carboxylic acid ethyl ester	C9H13NO2	2199-52-2	Apprentissage	-478,7	-468,14	10,56	-461,56	17,14

1021	3,5-dimethyl-1H-pyrrole-2-carboxylic acid ethyl ester	C9H13NO2	2199-44-2	Apprentissage	-474,5	-468,14	6,36	-461,56	12,94
1022	4,5-dimethyl-1H-pyrrole-3-carboxylic acid ethyl ester	C9H13NO2	2199-53-3	Test	-470,3	-468,14	2,16	-461,56	8,74
1023	2,4-dimethyl-1H-pyrrole-3-carboxylic acid ethyl ester	C9H13NO2	2199-51-1	Apprentissage	-463,2	-468,14	4,94	-461,56	1,64
1024	4,5-dimethyl-1H-pyrrole-2-carboxylic acid ethyl ester	C9H13NO2	2199-45-3	Apprentissage	-449,4	-468,14	18,74	-461,56	12,16
1025	2,4-dimethyl-5-hydroxy-1H-pyrrole-3-carboxylic acid ethyl ester	C9H13NO3	74999-31-8	Apprentissage	-684,5	-671,21	13,29	-678,29	6,21
1026	1-hydroxy-2,2,6,6-tetramethyl-4-piperidinone	C9H17NO2	04/11/3637	Apprentissage	-378,2	-398,14	19,94	-393,51	15,31
1027	N-butylpentanamide	C9H19NO	2763-67-9	Apprentissage	-465,1	-477,52	12,42	-465,17	0,07
1028	1-hydroxy-2,2,6,6-tetramethyl-4-piperidinol	C9H19NO2	03/10/3637	Apprentissage	-445,7	-425,76	19,94	-430,71	14,99
1029	9-aminononanoic acid	C9H19NO2	1120-12-3	Apprentissage	-727,8	-726,26	1,54	-716,73	11,07
1030	DL-5-ethyl-5-methyl-2,4-imidazolidinedione	C6H10N2O2	16820-12-5	Apprentissage	-566,1	-514,07	52,03	-565,90	0,20
1031	3,6-bis(hydroxymethyl)-2,5-piperazinedione	C6H10N2O4	5625-41-2	Apprentissage	-875,6	-881,35	5,75	-877,42	1,82
1032	N-nitro-bis(2,2-dinitropropyl)amine	C6H10N6O10	28464-24-6	Apprentissage	-232	-215,71	16,29	-242,10	10,10
1033	N-nitroso-(2,2-dinitropropyl)amine	C6H10N6O9	28464-26-8	Apprentissage	-192,4	-160,86	31,54	-192,47	0,07
1034	ϵ -caprolactam	C6H11NO	105-60-2	Apprentissage	-329,4	-297,58	31,82	-311,58	17,82
1035	Cyclohexanone, oxime	C6H11NO	100-64-1	Apprentissage	-153,2	-153,2	0	-153,07	0,13
1036	2-methyl-2,3,3-trinitropentane	C6H11N3O6	62154-78-3	Apprentissage	-290,3	-292,07	1,77	-308,38	18,08
1037	2-ethyl-2-(hydroxymethyl)-1,3-propanediol trinitrate	C6H11N3O9	2921-92-8	Apprentissage	-479,9	-483,73	3,83	-478,96	0,94
1038	Bis(2,2-dinitropropyl)amine	C6H11N5O8	1924-47-6	Apprentissage	-265	-292,19	27,19	-270,15	5,15
1039	2,3-dimethyl-2,3-dinitrobutane	C6H12N2O4	3964-18-9	Apprentissage	-311	-333,45	22,45	-304,64	6,36
1040	Glycine, N,N'-1,2-ethanediybis-	C6H12N2O4	5657-17-0	Apprentissage	-980,2	-1006,67	26,47	-992,18	11,98
1041	N-serylserine	C6H12N2O5	6620-95-7	Test	-1177,7	-1272,85	95,15	-1177,61	0,09
1042	Hexanamide	C6H13NO	628-02-4	Test	-423	-423,76	0,76	-409,64	13,36
1043	L-leucine	C6H13NO2	61-90-5	Apprentissage	-637,39	-639,34	1,95	-641,84	4,45
1044	DL-leucine	C6H13NO2	328-39-2	Apprentissage	-640,7	-639,34	1,36	-641,84	1,14
1045	D-leucine	C6H13NO2	328-38-1	Test	-637,56	-639,34	1,78	-641,84	4,28
1046	L-isoleucine	C6H13NO2	73-32-5	Apprentissage	-638,1	-636	2,1	-642,07	3,97
1047	DL-isoleucine	C6H13NO2	443-79-8	Apprentissage	-635,2	-636	0,8	-642,07	6,87
1048	2-aminohexanoic acid	C6H13NO2	616-06-8	Test	-639,1	-650,25	11,15	-656,84	17,74
1049	4-aminohexanoic acid	C6H13NO2	5415-99-6	Apprentissage	-646,2	-649,97	3,77	-636,49	9,71
1050	5-aminohexanoic acid	C6H13NO2	628-47-7	Apprentissage	-643,3	-649,97	6,67	-636,49	6,81
1051	6-aminohexanoic acid	C6H13NO2	60-32-2	Apprentissage	-637,35	-637,03	0,32	-635,34	2,01
1052	2-nitro-2-propyl-1,3-propanediol	C6H13NO4	5638-92-6	Apprentissage	-625,3	-643,12	17,82	-637,88	12,58
1053	2-isopropyl-2-nitro-1,3-propanediol	C6H13NO4	62155-31-1	Apprentissage	-623,2	-632,2	9	-621,77	1,43
1054	2-(diethylamino)acetamide	C6H14N2O	7409-48-5	Apprentissage	-351	-396,66	45,66	-366,87	15,87
1055	DL-lysine	C6H14N2O2	70-54-2	Test	-678,7	-686,22	7,52	-683,91	5,21
1056	Lysine	C6H14N2O2	56-87-1	Test	-678,7	-686,22	7,52	-683,91	5,21
1057	D-arginine	C6H14N4O2	157-06-2	Apprentissage	-623,6	-671,61	48,01	-616,65	6,95
1058	Adipic dihydrazide	C6H14N4O2	1071-93-8	Test	-493,1	-459,6	33,5	-476,83	16,27

1059	1,4,5,8-tetranitronaphthalene	C10H4N4O8	4793-98-0	Apprentissage	21,9	-18,49	40,39	17,96	3,94
1060	1,3,8-trinitronaphthalene	C10H5N3O6	2364-46-7	Apprentissage	-8,49	13,58	22,07	3,16	11,65
1061	1,4,5-trinitronaphthalene	C10H5N3O6	2243-95-0	Apprentissage	36,4	5,17	31,23	38,29	1,89
1062	1,5-dinitronaphthalene	C10H6N2O4	605-71-0	Apprentissage	33,6	28,83	4,77	30,19	3,41
1063	1,8-dinitronaphthalene	C10H6N2O4	602-38-0	Apprentissage	26,7	28,83	2,13	30,19	3,49
1064	2,4-dinitro-1-naphthol	C10H6N2O5	605-69-6	Apprentissage	-172	-181,45	9,45	-170,45	1,55
1065	1-nitronaphthalene	C10H7NO2	86-57-7	Apprentissage	45,73	49,88	4,15	43,76	1,97
1066	4-nitroso-1-naphthol	C10H7NO2	605-60-7	Apprentissage	-107,8	-33,31	74,49	-89,97	17,83
1067	2-nitroso-1-naphthol	C10H7NO2	132-53-6	Apprentissage	-61,8	-40,79	21,01	-58,78	3,02
1068	1-nitroso-2-naphthol	C10H7NO2	131-91-9	Apprentissage	-50,5	-40,79	9,71	-58,78	8,28
1069	2,6-dimethylbenzo-[1,2-d,5,4-d]bisoxazole	C10H8N2O2	55850-41-4	Test	-212,5	-221,16	8,66	-235,39	22,89
1070	2,7-dimethylbenzo-[1,2-d,3,4-d]bisoxazole	C10H8N2O2	53816-93-6	Apprentissage	-207,5	-225,68	18,18	-203,55	3,95
1071	3-methyl-4-benzoylfurazan	C10H8N2O2	10349-11-8	Apprentissage	119,4	75,5	43,9	110,97	8,43
1072	3-methyl-5-phenylisoxazole	C10H9NO	1008-75-9	Apprentissage	18,3	62,51	44,21	41,40	23,10
1073	3-phenyl-5-methylisoxazole	C10H9NO	1008-74-8	Apprentissage	14	71,54	57,54	50,30	36,30
1074	β -cyanopropiophenone	C10H9NO	5343-98-6	Apprentissage	-71,46	-59,18	12,28	-66,49	4,97
1075	8-Quinolinol, 2-methyl-	C10H9NO	826-81-3	Test	-129,8	-101,21	28,59	-126,14	3,66
1076	4-Quinolinol, 2-methyl-	C10H9NO	607-67-0	Apprentissage	-162,3	-117,48	44,82	-140,39	21,91
1077	4-Methyl-2-hydroxyquinoline	C10H9NO	84909-43-3	Apprentissage	-189,1	-162,27	26,83	-169,13	19,97
1078	4-benzyl-2,5-oxazolidinedione	C10H9NO3	1892-35-9	Apprentissage	-552,4	-510,2	42,2	-556,21	3,81
1079	4-(4-methylphenyl)-3-furazancarboxamide	C10H9N3O2		Apprentissage	42,1	-13,8	55,9	26,83	15,27
1080	N,N-diacetylaniline	C10H11NO2	1563-87-7	Test	-362,6	-384,83	22,23	-370,31	7,71
1081	Phenylcarbamic acid isopropyl ester	C10H13NO2	122-42-9	Apprentissage	-442,1	-442,1	0	-442,08	0,02
1082	Phenacetin	C10H13NO2	62-44-2	Apprentissage	-341	-413,22	72,22	-354,98	13,98
1083	N,N-Dimethyl 4-methoxybenzamide	C10H13NO2	7291-00-1	Apprentissage	-317,4	-327,79	10,39	-317,25	0,15
1084	2-methyl-2-nitro-1-phenyl-1-propanol	C10H13NO3	33687-74-0	Test	-317,5	-321,02	3,52	-336,29	18,79
1085	2-methyl-2-nitro-3-phenyl-1-propanol	C10H13NO3	62030-36-8	Apprentissage	-347,7	-313,54	34,16	-315,65	32,05
1086	4-formyl-3,5-dimethyl-1H-pyrrole-2-carboxylic acid ethyl ester	C10H13NO3	2199-64-6	Apprentissage	-640,8	-624,28	16,52	-638,71	2,09
1087	5-formyl-2,4-dimethyl-1H-pyrrole-3-carboxylic acid ethyl ester	C10H13NO3	2199-59-9	Apprentissage	-645,8	-624,28	21,52	-638,71	7,09
1088	3,5-dimethyl-1H-pyrrole-2,4-dicarboxylic acid dimethyl ester	C10H13NO4	5448-17-9	Apprentissage	-846,3	-829,01	17,29	-851,75	5,45
1089	N'-ethyl-N-methyl-N-phenylurea	C10H14N2O	52073-04-8	Apprentissage	-304,7	-258,66	46,04	-255,39	49,31
1090	2,4,5-trimethyl-1H-pyrrole-3-carboxylic acid ethyl ester	C10H15NO2	2199-54-4	Apprentissage	-489,8	-503	13,2	-518,91	29,11
1091	Tricyclo[3.3.1.1(3,7)]decane, 1-nitro-	C10H15NO2	7575-82-8	Apprentissage	-254,7	-191,67	63,03	-174,00	80,70
1092	Tricyclo[3.3.1.1(3,7)]decane, 2-nitro-	C10H15NO2	54564-31-7	Apprentissage	-237,8	-237,8	0	-237,48	0,32
1093	N,N'-1,2-ethanediybis-(N-(carboxymethyl)glycine)	C10H16N2O8	60-00-4	Apprentissage	-1761,7	-1773,7	12	-1759,89	1,81
1094	Ethylenediamine-N,N'-disuccinic acid	C10H16N2O8	20846-91-7	Apprentissage	-1950,2	-1891,51	58,69	-1951,57	1,37
1095	Dipentaerythritol hexanitrate	C10H16N6O19	13184-80-0	Apprentissage	-979,6	-998,03	18,43	-979,32	0,28
1096	2-(3,3-diacetoxypropenyl)-5-nitrofurane	C11H11NO7	1874-14-2	Apprentissage	-872	-872	0	-871,94	0,06

1097	L-tryptophan	C11H12N2O2	73-22-3	Apprentissage	-415,3	-434,76	19,46	-415,26	0,04
1098	3-benzyl-2,5-piperazinedione	C11H12N2O2	5037-75-2	Apprentissage	-345,4	-340,99	4,41	-345,92	0,52
1099	3-((4-hydroxyphenyl)methyl)-2,5-piperazinedione	C11H12N2O3	5845-66-9	Apprentissage	-512,3	-547,01	34,71	-507,96	4,34
1100	(E)-4-(p-Nitroanilino)-3-penten-2-one	C11H12N2O3	20771-72-6	Apprentissage	-220,8	-216,4	4,4	-221,36	0,56
1101	N-hippuroylglycine	C11H12N2O4	1145-32-0	Apprentissage	-833	-832,17	0,83	-831,82	1,18
1102	5-carbomethoxy-2,4-dimethyl-1H-pyrrole-3-acrylic acid	C11H13NO4		Test	-808,4	-799,14	9,26	-812,85	4,45
1103	2-acetoxy-2-bis(acetoxy)methyl-2,5-dihydro-5-nitrofuran	C11H13NO9	75631-81-1	Apprentissage	-1374	-1352,44	21,56	-1373,63	0,37
1104	2,4-dimethyl-3-methylcarbonitrile-1H-pyrrole-carboxylic acid ethyl ester	C11H14N2O2		Apprentissage	-387,3	-321,04	66,26	-385,36	1,94
1105	p-Nitrobenzylidene tert-butylamine	C11H14N2O2	718-36-5	Apprentissage	-41,7	-0,49	41,21	-33,55	8,15
1106	2-Cyano-2-nitroadamantane	C11H14N2O2	128478-71-7	Apprentissage	-91	-24,85	66,15	-74,94	16,06
1107	N-glycylphenylalanine	C11H14N2O3	6491-52-7	Apprentissage	-684,4	-691,93	7,53	-679,12	5,28
1108	Phenylcarbamic acid butyl ester	C11H15NO2	1538-74-5	Apprentissage	-395,5	-458,73	63,23	-381,17	14,33
1109	3,5-dimethyl-4-vinyl-1H-pyrrole-2-carboxylic acid ethyl ester	C11H15NO2	25894-11-5	Apprentissage	-472,5	-412,06	60,44	-473,36	0,86
1110	ethyl ethyl(phenyl)carbamate	C11H15NO2	1013-75-8	Test	-404	-428,32	24,32	-414,44	10,44
1111	4-acetyl-3,5-dimethyl-1H-pyrrole-2-carboxylic acid ethyl ester	C11H15NO3	2386-26-7	Apprentissage	-654,5	-664,31	9,81	-648,72	5,78
1112	3,5-dimethyl-4-ethyl-1H-pyrrole-2-carboxylic acid ethyl ester	C11H17NO2	2199-47-5	Apprentissage	-534	-527,27	6,73	-535,71	1,71
1113	3-isopropyl-6-(2-methyl-propyl)-2,5-piperazinedione	C11H20N2O2	5625-50-3	Apprentissage	-626	-631,84	5,84	-625,78	0,22
1114	2,2',4,4',6,6'-hexanitrobiphenyl	C12H4N6O12	4433-16-3	Apprentissage	68,2	75,36	7,16	68,49	0,29
1115	5,7-dinitro-1-picrylbenzotriazole	C12H4N8O10	50892-90-5	Apprentissage	300	318,6	18,6	287,07	12,93
1116	2,2',4,4',6,6'-hexanitroazobenzene	C12H4N8O12	19159-68-3	Apprentissage	290	301,25	11,25	281,00	9,00
1117	2,4,5,7-tetranitrocarbazole	C12H5N5O8	28453-24-9	Apprentissage	18,8	14	4,8	19,06	0,26
1118	3,3'-diamino-2,2',4,4',6,6'-hexanitrobiphenyl	C12H6N8O12	17215-44-0	Apprentissage	-15	14,02	29,02	-7,35	7,65
1119	2-methyl-1',2'-naphthoxazole	C12H9NO	85-15-4	Apprentissage	-87,6	-55,55	32,05	-46,98	40,62
1120	2-methylnaphth[2,3-d]oxazole	C12H9NO	20686-66-2	Apprentissage	-52,4	-60,06	7,66	-40,21	12,19
1121	Phenoxazine	C12H9NO	135-67-1	Test	-2,1	-79,36	77,26	-3,90	1,80
1122	3-nitrobiphenyl	C12H9NO2	2113-58-8	Test	65,1	54,2	10,9	61,67	3,43
1123	4-nitrobiphenyl	C12H9NO2	92-93-3	Apprentissage	40,5	56,66	16,16	59,00	18,50
1124	N-phenyl-2,4-dinitroaniline	C12H9N3O4	961-68-2	Apprentissage	22,5	39,07	16,57	24,40	1,90
1125	4-nitroso-diphenylamine	C12H10N2O	156-10-5	Apprentissage	213,1	172,3	40,8	211,45	1,65
1126	N-nitroso-diphenylamine	C12H10N2O	86-30-6	Apprentissage	237,3	237,54	0,24	232,67	4,63
1127	Phenol, 4-(phenylazo)-	C12H10N2O	1689-82-3	Apprentissage	163	141,51	21,49	145,91	17,09
1128	2-nitrodiphenylamine	C12H10N2O2	119-75-5	Test	64,5	57,68	6,82	59,01	5,49
1129	4,4'-dinitrohydrazobenzene	C12H10N4O4	22719-28-4	Apprentissage	109,6	153,89	44,29	128,25	18,65
1130	3-benzyl-6-methyl-2,5-piperazinedione	C12H14N2O2	14474-78-3	Apprentissage	-372	-386,27	14,27	-370,35	1,65
1131	Saccharose octanitrate	C12H14N8O27	30236-29-4	Apprentissage	-1364	-1360,71	3,29	-1363,52	0,48
1132	Phenylalanine-N-carboxylic acid dimethyl ester	C12H15NO4	70288-75-4	Apprentissage	-766,4	-766,4	0	-766,36	0,04
1133	N-alanylphenylalanine	C12H16N2O3	3061-90-3	Apprentissage	-710,2	-726,85	16,65	-720,64	10,44
1134	3,5-dimethyl-4-(1-oxopropyl)-1H-pyrrole-2-carboxylic acid ethyl ester	C12H17NO3	40484-82-0	Apprentissage	-679,4	-662,01	17,39	-679,66	0,26

1135	2,4-dimethyl-5-(1-oxopropyl)-1H-pyrrole-3-carboxylic acid ethyl ester	C12H17NO3	78956-69-1	Apprentissage	-681,5	-662,01	19,49	-679,66	1,84
1136	3,5-dimethyl-2-carboxy-1H-pyrrole-4-propanoic acid dimethyl ester	C12H17NO4	16132-20-0	Apprentissage	-849,7	-831,35	18,35	-860,51	10,81
1137	3,5-dimethyl-1H-pyrrole-2,4-dicarboxylic acid diethyl ester	C12H17NO4	2436-79-5	Apprentissage	-916,7	-884,62	32,08	-899,54	17,16
1138	2,4-dimethyl-5-carboxy-1H-pyrrole-3-propanoic acid 5-ethyl ester	C12H17NO4	37789-64-3	Apprentissage	-935,9	-924,63	11,27	-911,96	23,94
1139	5-(hydroxymethyl)-3-methyl-1H-pyrrole-2,4-dicarboxylic acid diethyl ester	C12H17NO5	5422-89-9	Apprentissage	-1057,7	-1066,61	8,91	-1063,68	5,98
1140	3,5-dimethyl-4-propyl-1H-pyrrole-2-carboxylic acid ethyl ester	C12H19NO2	4758-64-9	Apprentissage	-569	-555,08	13,92	-564,72	4,28
1141	N,N-diphenylurea	C13H12N2O	603-54-3	Apprentissage	-122,7	-110,18	12,52	-97,92	24,78
1142	Urea, N,N'-diphenyl-	C13H12N2O	102-07-8	Apprentissage	-116,8	-116,8	0	-116,78	0,02
1143	Diazene, (4-methoxyphenyl)phenyl-	C13H12N2O	2396-60-3	Apprentissage	184	197,8	13,8	188,86	4,86
1144	2,4-dimethyl-5-carboxy- α -oxo-1H-pyrrole-3-oxoacetic acid diethyl ester	C13H17NO5	21898-53-3	Apprentissage	-1015,2	-1015,81	0,61	-1016,76	1,56
1145	3-methyl-5-(1-hydroxyethyl)-1H-pyrrole-2,4-dicarboxylic acid diethyl ester	C13H19NO5	74999-34-1	Apprentissage	-1135,8	-1096,3	39,5	-1101,63	34,17
1146	2,2',4,4',6-pentanitrobenzophenone	C13H5N5O11	32255-35-9	Apprentissage	-115	-142,14	27,14	-118,13	3,13
1147	Diphenylfurazan	C14H10N2O	19768-02-6	Apprentissage	328,9	318,89	10,01	320,72	8,18
1148	3,5-diphenyl-1,2,4-oxadiazole	C14H10N2O	888-71-1	Test	207,1	194,14	12,96	209,51	2,41
1149	2,5-diphenyl-1,3,4-oxadiazole	C14H10N2O	725-12-2	Apprentissage	75,7	69,4	6,3	71,82	3,88
1150	(Z)-1,2-bis(4-nitrophenyl)ethylene	C14H10N2O4	619-93-2	Apprentissage	74,1	65,77	8,33	78,82	4,72
1151	(E)-1,2-bis(4-nitrophenyl)ethylene	C14H10N2O4	736-31-2	Apprentissage	54,9	65,77	10,87	78,82	23,92
1152	Cis-4-nitrostilbène	C14H11NO2	6624-53-9	Apprentissage	132	104,47	27,53	102,66	29,34
1153	Trans-4-nitrostilbène	C14H11NO2	1694-20-8	Apprentissage	102,7	104,47	1,77	102,66	0,04
1154	(Z,Z)-diphenylethanedione dioxime	C14H12N2O2	572-45-2	Apprentissage	41,8	47,15	5,35	38,80	3,00
1155	(E,E)-diphenylethanedione dioxime	C14H12N2O2	522-34-9	Apprentissage	18	47,15	29,15	38,80	20,80
1156	(E,Z)-diphenylethanedione dioxime	C14H12N2O2	572-43-0	Apprentissage	53,1	47,15	5,95	38,80	14,30
1157	Benzoic acid 2-benzoylhydrazide	C14H12N2O2	787-84-8	Apprentissage	-202	-198,07	3,93	-202,31	0,31
1158	N,N-diphenylacetamide	C14H13NO	519-87-9	Apprentissage	-42,9	-105,5	62,6	-94,59	51,69
1159	N,N-diphenyl-N'-methylurea	C14H14N2O	13114-72-2	Apprentissage	-106,8	-100,37	6,43	-105,27	1,53
1160	Acetic acid 1,2-diphenylhydrazide	C14H14N2O	22293-38-5	Apprentissage	-11,2	22,75	33,95	-3,26	7,94
1161	4-acetamidobiphenyl	C14H14N2O	3366-61-8	Apprentissage	-160,6	-178,25	17,65	-179,72	19,12
1162	3-benzyl-6-isopropyl-2,5-piperazinedione	C14H18N2O2	14474-71-6	Test	-392,7	-451	58,3	-392,94	0,24
1163	N-acetyl-N-cyclohexyl-phenylamine	C14H19NO	09/11/5769	Apprentissage	-300	-300	0	-299,96	0,04
1164	N-(N-glycyl-DL-phenylalanyl)alanine	C14H19N3O4	18828-33-6	Test	-926,8	-940,38	13,58	-931,55	4,75
1165	(E)-2,2',4,4',6,6'-hexanitrostilbene	C14H6N6O12	20062-22-0	Apprentissage	68	79,84	11,84	78,54	10,54
1166	N-valylphenylalanine	C14H20N2O3	75946-40-6	Test	-765,8	-771,54	5,74	-765,20	0,60
1167	3-methyl-5-(1-hydroxypropyl)-1H-pyrrole-2,4-dicarboxylic acid diethyl ester	C14H21NO5		Apprentissage	-1084,6	-1124,1	39,5	-1118,74	34,14
1168	N,N-bis(2-(bis(carboxymethyl)amino)ethyl)glycine	C14H23N3O10	67-43-6	Apprentissage	-2225	-2227,65	2,65	-2224,60	0,40
1169	1,1'-methylenebis(4-isocyanatobenzene)	C15H10N2O2	101-68-8	Apprentissage	-53	-53	0	-52,96	0,04
1170	Nitrobenzene, 3-(2-cyano-2-phenylethenyl)	C15H10N2O2	6720-37-2	Apprentissage	176	231,92	55,92	174,77	1,23
1171	(o-Nitrobenzylidene)phenylacetone nitrile	C15H10N2O2	19016-67-2	Apprentissage	187	237,54	50,54	175,66	11,34
1172	Nitrobenzene, 4-(2-cyano-2-phenylethenyl)	C15H10N2O2	7431-35-8	Apprentissage	155	234,39	79,39	181,17	26,17

1173	3,5-diphenylisoxazole	C15H11NO	2039-49-8	Apprentissage	144,8	171,58	26,78	148,30	3,50
1174	Ethyl-N,N-diphenylcarbamate	C15H15NO2	603-52-1	Apprentissage	-290	-289,99	0,01	-279,73	10,27
1175	N,N'-dimethyl-N,N'-diphenylurea	C15H16N2O	611-92-7	Apprentissage	-73,1	-80,08	6,98	-78,49	5,39
1176	N,N-diphenyl-N'-ethylurea	C15H16N2O	18168-01-9	Apprentissage	-152,6	-148,13	4,47	-144,78	7,82
1177	N,N-diphenyl-N'-2-hydroxyethylurea	C15H16N2O2	6123-87-1	Apprentissage	-319,2	-311,8	7,4	-316,34	2,86
1178	N,N'-diheptylurea	C15H32N2O	1798-20-5	Apprentissage	-627,6	-674,72	47,12	-659,18	31,58
1179	3,4-dibenzoyl-1,2,5-oxadiazole	C16H10N2O3	10349-12-9	Apprentissage	104,2	50,24	53,96	102,42	1,78
1180	N,N-diphenylacetoacetamide	C16H15NO2	2540-31-0	Apprentissage	-227,9	-243,94	16,04	-228,51	0,61
1181	N,N-diphenyl-N'-allylurea	C16H16N2O	101279-92-9	Apprentissage	-38,7	-36,26	2,44	-37,79	0,91
1182	1,2-diacetyl-1,2-diphenylhydrazine	C16H16N2O2	793-25-9	Apprentissage	-188,4	-188,4	0	-188,43	0,03
1183	Biphenyl-4,4'-diacetamide	C16H16N2O2	613-35-4	Apprentissage	-472,5	-406,91	65,59	-455,46	17,04
1184	N-ethyl-N'-methyl-N,N'-diphenylurea	C16H18N2O	07/03/4474	Apprentissage	-93,14	-107,88	14,74	-101,83	8,69
1185	2,6-Bis(picrylazo)-3,5-dinitropyridine	C17H5N13O16	55106-96-2	Apprentissage	617,1	635,19	18,09	612,58	4,52
1186	2,6-Pyridinediamine, 3,5-dinitro-N,N'-bis(2,4,6-trinitrophenyl)-	C17H7N11O16	38082-89-2	Apprentissage	80,3	72,52	7,78	76,82	3,48
1187	3-N-phenylamino-2-naphthoic acid	C17H13NO2	6973-58-6	Apprentissage	-263,6	-259,74	3,86	-274,08	10,48
1188	4-diphenylamino-carbonylmorpholine	C17H18N2O2	75125-45-0	Test	-217,6	-247,93	30,33	-226,46	8,86
1189	N,N'-diethyl-N,N'-diphenylurea	C17H20N2O	85-98-3	Apprentissage	-150,2	-135,69	14,51	-125,25	24,95
1190	2-anilinomethyl-3-methyl-4-ethyl-5-carbethoxypyrrole	C17H22N2O2		Apprentissage	-380,9	-413,42	32,52	-385,70	4,80
1191	2,2',4,4'-tetramethyl-3,3'-diethyldipyrnyl ketone	C17H24N2O	13228-22-3	Apprentissage	-253,8	-288,46	34,66	-256,23	2,43
1192	N,N'-dioctylurea	C17H36N2O	04/08/1943	Test	-715,2	-730,33	15,13	-721,60	6,40
1193	2,2',2'',4,4',4'',6,6',6''-nonanitroterphenyl	C18H5N9O18	51460-84-5	Apprentissage	132	151,74	19,74	137,03	5,03
1194	2,2',4,4',4'',6,6',6''-octanitroterphenyl	C18H6N8O16	33491-88-2	Apprentissage	95	106,06	11,06	82,17	12,83
1195	3,4-bis(4-methylbenzoyl)-1,2,5-oxadiazole	C18H14N2O3		Apprentissage	20,4	-24,46	44,86	18,87	1,53
1196	3,6-dibenzyl-2,5-piperazinedione	C18H18N2O2	2308-61-4	Apprentissage	-287,6	-293,61	6,01	-287,61	0,01
1197	N-piperidyl-N,N'-diphenylformamide	C18H20N2O	75534-73-5	Apprentissage	-108	-118,4	10,4	-113,05	5,05
1198	2,2',4,4'-tetramethyl-3,3'-dicarboethoxy-dipyrnylmethene	C19H24N2O4	2407-87-6	Apprentissage	-824	-824	0	-823,90	0,10
1199	4,4'-methylenebis(2,5-dimethyl-1H-pyrrole-3-carboxylic acid)diethyl ester	C19H26N2O4		Apprentissage	-873,9	-866,64	7,26	-865,06	8,84
1200	5,5'-methylenebis(2,4-dimethyl-1H-pyrrole-3-carboxylic acid)diethyl ester	C19H26N2O4	5442-92-2	Apprentissage	-853	-866,64	13,64	-865,06	12,06
1201	4,4'-methylenebis(3,5-dimethyl-1H-pyrrole-2-carboxylic acid)diethyl ester	C19H26N2O4	6285-54-7	Test	-868,4	-866,64	1,76	-865,06	3,34
1202	4,4'-ethylenebis(2,5-dimethyl-1H-pyrrole-3-carboxylic acid)diethyl ester	C20H28N2O4		Apprentissage	-891,7	-928,43	36,73	-903,04	11,34
1203	2,4,6-Tripicyltriiazine	C21H6N12O18	49753-54-0	Apprentissage	296,5	279,46	17,04	310,78	14,28
1204	N,N'-didecylurea	C21H44N2O	05/09/1943	Apprentissage	-877,4	-841,54	35,86	-852,83	24,57
1205	N,N'-bis(2-methoxyphenyl)terephthalamide	C22H20N2O4	36360-34-6	Test	-507,9	-540,03	32,13	-514,26	6,36
1206	N,N'-bis(3-methoxyphenyl)terephthalamide	C22H20N2O4	6957-81-9	Apprentissage	-549,2	-551,26	2,06	-539,28	9,92
1207	N,N'-bis(4-methoxyphenyl)terephthalamide	C22H20N2O4	7144-15-2	Apprentissage	-548,4	-546,34	2,06	-551,58	3,18
1208	N'-(2-naphthyl)-N,N-diphenylurea	C23H18N2O	112322-16-4	Apprentissage	64	71,27	7,27	62,19	1,81
1209	N'-(1-naphthyl)-N,N-diphenylurea	C23H18N2O	60302-02-5	Apprentissage	78	83,92	5,92	90,99	12,99
1210	2,2',2'',2''',4,4',4'',4''',6,6',6'',6'''-dodecanitroquatrphenyl	C24H6N12O24	23242-92-4	Apprentissage	213	228,11	15,11	212,48	0,52

1211	Azo-bis(2,2',4,4',6,6'-hexanitrodiphenyl)	C24H6N14O24	23987-32-8	Test	480,3	453,99	26,31	477,24	3,06
1212	2,2',2'',2''',4,4',4'',4'''-dodecanitro-3,3'-bis(phenylazo)biphenyl	C24H6N16O24	58505-80-9	Apprentissage	792	723,21	68,79	795,00	3,00
1213	1,2-bis(diphenylcarbamoyl)hydrazine	C26H22N4O2	75011-84-6	Apprentissage	54,4	42,45	11,95	50,99	3,41
1214	Ethylene-bis-diphenylurea	C28H26N4O2	6123-88-2	Test	-195	-170,15	24,85	-203,88	8,88
1215	8,13-diethyl-3,7,12,17,20-pentamethyl-21H,23H- porphine-2-propanoic acid methyl ester	C33H38N4O2	33719-66-3	Apprentissage	-381,9	-290,84	91,06	-351,90	30,00
1216	Protoporphyrin	C34H34N4O4	553-12-8	Apprentissage	-521,7	-521,7	0	-521,73	0,03
1217	Pyrophaeophorbide-a-monomethyl ester	C34H36N4O3	6453-67-4	Apprentissage	-374,9	-354,43	20,47	-373,39	1,51
1218	3,4-didehydro-9,14-diethyl-4,8,13,18-tetramethyl-20- oxophorbine-3-propanoic acid methyl ester	C34H36N4O3	33719-95-8	Apprentissage	-368,2	-380,58	12,38	-401,70	33,50
1219	3,4-didehydro-9,14-diethyl-4,8,13,18-tetramethyl- phorbine-3-propanoic acid methyl ester	C34H38N4O2	33902-83-9	Apprentissage	-181,7	-220,54	38,84	-170,76	10,94
1220	Chloroporphyrin-e6-trimethyl ester	C37H42N4O6	28211-96-3	Apprentissage	-983,7	-1011,4	27,7	-983,22	0,48
1221	Chlorin-e6-trimethyl ester	C37H42N4O6	71217-51-1	Apprentissage	-946,4	-985,25	38,85	-948,38	1,98
1222	Isouroporphyrin (II) octamethyl ester	C48H54N4O16	10170-03-3	Apprentissage	-2624	-2617,19	6,81	-2623,87	0,13

Tableau 66 : valeurs des poids et biais du réseau de neurones pour la prédiction des enthalpies de formation des composés à l'état solide.

W	Neurones cachées			W	Neurones cachées			W	Neurones cachées			W	Neurones cachées			W	Neurones cachées		
Neurones d'entrées	1	2	3	Neurones d'entrées	1	2	3	Neurones d'entrées	1	2	3	Neurones d'entrées	1	2	3	Neurones d'entrées	1	2	3
1	0,21	0,5	-0,04	72	0,23	0,06	0,1	143	-0,53	0,31	-0,04	144	-0,03	-0,45	0,23	215	-0,04	-0,13	0,09
2	0,22	0,31	-0,48	73	0,29	0,34	0,59	144	-0,03	-0,45	0,23	145	0,04	-0,41	-0,45	216	0,09	0,02	0,22
3	0	-0,2	-0,08	74	-0,05	0,09	-0,35	145	0,04	-0,41	-0,45	146	0,15	-0,24	0,69	217	0,07	0	0,12
4	0,27	-0,68	0,08	75	-0,57	0,06	-0,64	146	0,15	-0,24	0,69	147	-0,74	-0,66	0,38	218	-0,02	0,01	-0,02
5	0,03	0	0,14	76	0,1	-0,08	-0,74	147	-0,74	-0,66	0,38	148	-0,27	0,76	-0,35	219	-0,2	0,27	-0,07
6	-0,01	0,31	0,37	77	0,13	-0,09	-0,14	148	-0,27	0,76	-0,35	149	0,19	-0,08	0,43	220	0,34	-0,09	0,68
7	0,05	-0,37	0,11	78	-0,3	0,14	-0,45	149	0,19	-0,08	0,43	150	0,16	0,11	0,4	221	-0,57	-0,48	-0,16
8	-0,83	0,41	-0,32	79	0,24	-0,11	-0,02	150	0,16	0,11	0,4	151	0,17	0,38	0,96	222	0,22	-0,2	0,18
9	0,26	0,03	0,43	80	0,29	-0,22	-0,32	151	0,17	0,38	0,96	152	0,24	-0,19	0,46	223	0,19	-0,37	-0,25
10	-0,31	-0,17	-0,35	81	0,2	-0,03	-0,22	152	0,24	-0,19	0,46	153	0,04	-0,09	0,16	224	-0,01	0,19	0,25
11	-0,07	-0,02	0,69	82	0,07	0,25	0,46	153	0,04	-0,09	0,16	154	-0,03	0,1	0,05	225	0,05	-0,05	-0,19
12	-0,06	0	0,16	83	-0,19	0,07	-0,26	154	-0,03	0,1	0,05	155	-0,03	0,05	-0,04	226	0,17	0,02	0,51
13	-0,24	0,08	0,21	84	0,22	-0,13	0,38	155	-0,03	0,05	-0,04	156	0,06	-0,07	0,2	227	0,1	0,24	0,66
14	-0,21	-0,16	-0,24	85	0,28	0,12	0,2	156	0,06	-0,07	0,2	157	-0,11	0,27	0,3	228	-0,07	0,08	0,2
15	-0,03	-0,18	0,21	86	0,18	0,08	-0,16	157	-0,11	0,27	0,3	158	-0,6	-0,65	0,61	229	-0,29	0,22	-0,03
16	0,08	-0,26	-0,09	87	0,14	0,26	-0,09	158	-0,6	-0,65	0,61	159	0	-0,65	-0,21	230	0,22	-0,52	-0,57
17	0,02	0,12	-0,07	88	0,64	0,51	0,34	159	0	-0,65	-0,21	160	-0,23	0,15	-0,36	231	-0,06	-0,09	-0,28
18	0,07	0,22	0,51	89	0,46	0,17	-0,44	160	-0,23	0,15	-0,36	161	0,01	0,01	0,22	232	0,03	-0,12	-0,11

19	-0,09	-0,13	-0,29	90	0,26	0,42	-0,3	161	0,01	0,01	0,22	162	-0,22	0,18	-0,15	233	0,12	-0,05	0,17
20	0,06	-0,29	0,05	91	0,35	0,15	-0,02	162	-0,22	0,18	-0,15	163	-0,05	-0,07	-0,02	234	0,11	0,03	0,31
21	-0,19	0,46	0,58	92	0,14	-0,08	-0,1	163	-0,05	-0,07	-0,02	164	0,11	0,03	0,19	235	0,35	-0,38	0,05
22	-0,33	0,33	0,21	93	-0,52	-0,11	-0,6	164	0,11	0,03	0,19	165	-0,02	-0,07	0,01	236	0,22	-0,24	0,19
23	-0,36	-0,27	-0,29	94	0	0,18	0,49	165	-0,02	-0,07	0,01	166	-0,07	-0,01	0,09	237	-0,08	-0,1	-0,24
24	0,26	1,25	-0,7	95	0,1	-0,2	0,3	166	-0,07	-0,01	0,09	167	0,04	-0,13	0,2	238	0,21	-0,25	-0,28
25	0,11	0,29	-0,36	96	-0,01	-0,11	-0,1	167	0,04	-0,13	0,2	168	-0,12	-0,5	-0,16	239	-0,06	0,18	0,24
26	0,77	0,8	-0,68	97	0,25	-0,07	0,29	168	-0,12	-0,5	-0,16	169	-0,03	0,04	0,11	240	0,12	-0,06	0,18
27	0,65	1,64	-0,89	98	-0,26	0,07	0,07	169	-0,03	0,04	0,11	170	-0,49	-0,11	-0,25	241	0,19	-0,29	-0,19
28	0,05	0,19	-0,35	99	0,02	0	0,05	170	-0,49	-0,11	-0,25	171	-0,2	0,45	0,4	242	0,47	-0,28	0,28
29	0,12	-0,16	-0,12	100	0,08	-0,11	0,03	171	-0,2	0,45	0,4	172	-0,1	0,05	0,04	243	-0,31	0	-0,25
30	0,31	-0,1	0,23	101	0,29	0,81	0,25	172	-0,1	0,05	0,04	173	-0,69	-0,7	-0,19	244	-0,05	0,07	0,06
31	0,64	0,81	-0,58	102	0,2	0,31	-0,37	173	-0,69	-0,7	-0,19	174	-0,13	0,33	0,09	245	-0,03	0,22	0,48
32	0,19	-0,02	0,24	103	0,19	-0,35	-0,42	174	-0,13	0,33	0,09	175	-0,08	-0,56	0,14	246	-0,36	0,17	-0,12
33	0,6	1,84	-1,2	104	0,08	-0,14	-0,2	175	-0,08	-0,56	0,14	176	-0,01	-0,16	0,31	247	-0,07	0,15	0,31
34	1,25	0,25	-1,25	105	0,31	0	0,33	176	-0,01	-0,16	0,31	177	-0,09	0,11	0,23	248	-0,1	-0,11	1,03
35	0,15	0,3	0,16	106	0,01	-0,06	0,67	177	-0,09	0,11	0,23	178	0,04	-0,13	0,16	249	0,54	-0,34	-0,08
36	0,38	1,24	-0,96	107	-0,43	0,11	-0,05	178	0,04	-0,13	0,16	179	-0,09	-0,13	-0,08	250	0,27	-0,41	0,28
37	0,15	0,3	-0,36	108	0,22	-0,18	0,26	179	-0,09	-0,13	-0,08	180	0,09	-0,07	0,13	251	-0,07	-0,11	-0,08
38	0,19	1,01	-0,12	109	-0,17	0,37	0	180	0,09	-0,07	0,13	181	0,22	-0,11	0,08	252	-0,24	-0,22	0
39	0,16	-0,06	-0,02	110	0,33	-0,36	-0,03	181	0,22	-0,11	0,08	182	-0,06	-0,08	-0,2	253	-0,27	-0,53	-0,29
40	-0,08	0,36	-0,56	111	-0,39	0,22	0,49	182	-0,06	-0,08	-0,2	183	-0,02	-0,03	-0,09	254	-0,57	-0,4	-0,63
41	0,17	-0,09	0,19	112	-0,12	-0,18	0,18	183	-0,02	-0,03	-0,09	184	0	-0,06	-0,11	255	0,03	-0,22	0,15
42	-0,09	0,15	-0,32	113	0,23	-0,15	-0,04	184	0	-0,06	-0,11	185	0,02	0	0,05	256	0,06	-0,11	-0,02
43	0,05	0,37	0,16	114	0,21	-0,14	0,27	185	0,02	0	0,05	186	0	0,02	0,02	257	-0,03	-0,19	-0,35
44	0,09	-0,1	0,05	115	-0,65	-0,03	-0,12	186	0	0,02	0,02	187	0,03	-0,03	0,02	258	-0,05	-0,01	0
45	0,04	-0,2	-0,12	116	-0,28	0,45	-0,38	187	0,03	-0,03	0,02	188	-0,02	0,01	-0,04	259	0,31	0	1,05
46	-0,09	0,04	-0,16	117	-0,61	-0,5	-0,19	188	-0,02	0,01	-0,04	189	0,04	-0,11	-0,07	260	0,23	-0,15	0,49
47	-0,1	0,1	-0,18	118	-0,04	0,08	-0,05	189	0,04	-0,11	-0,07	190	-0,18	0,05	-0,28	261	-0,19	-0,2	-0,69
48	-0,06	-0,07	-0,24	119	0	-0,05	-0,27	190	-0,18	0,05	-0,28	191	-0,15	0,05	-0,14	262	-0,01	-0,33	-0,14
49	-0,01	0,04	0,2	120	0,2	-0,04	0,26	191	-0,15	0,05	-0,14	192	-0,07	0,06	0,02	263	0,02	0,01	0,07
50	0,04	0,02	0,11	121	0,04	-0,17	-0,08	192	-0,07	0,06	0,02	193	0,19	-0,08	0,48	264	0,07	-0,01	0,18
51	-0,08	-0,04	0,01	122	0,09	-0,11	-0,02	193	0,19	-0,08	0,48	194	-0,05	0,02	-0,02	265	0,05	-0,38	-0,44
52	-0,11	-0,1	0,24	123	0,13	-0,17	0,31	194	-0,05	0,02	-0,02	195	-0,15	0,07	-0,12	266	0,15	-0,11	-0,01
53	-0,06	0,05	-0,31	124	-0,29	0,26	0	195	-0,15	0,07	-0,12	196	-0,1	0,12	0,04	267	0,05	0,39	0,34
54	0,17	-0,27	-0,06	125	0,05	-0,12	-0,01	196	-0,1	0,12	0,04	197	-0,58	0,26	-0,3	268	-0,09	-0,26	-0,3
55	0,29	-0,22	0,05	126	0,23	-0,38	0,38	197	-0,58	0,26	-0,3	198	0,03	0,25	0,26	269	-0,03	-0,4	-0,07
56	0,09	-0,2	0	127	-0,12	-0,99	0,45	198	0,03	0,25	0,26	199	-0,05	0,03	-0,1	270	0,36	-0,4	-0,01
57	-0,75	0,09	-0,03	128	-0,05	-0,42	-0,56	199	-0,05	0,03	-0,1	200	-0,38	0,14	-0,26	271	-0,14	0,19	0,31
58	-0,18	-0,24	-0,21	129	-0,01	0,15	0,25	200	-0,38	0,14	-0,26	201	0,02	-0,22	-0,16	272	-0,04	0,19	0,08

59	0,02	-0,1	0,35	130	0,1	-0,03	0,31	201	0,02	-0,22	-0,16	202	-0,23	-0,09	-0,47	273	-0,02	-0,18	0,23
60	-0,11	-0,32	-0,05	131	-0,09	0,47	0,31	202	-0,23	-0,09	-0,47	203	-0,1	-0,24	-0,32	274	-0,2	0,21	0,05
61	0,15	0,08	0,26	132	0,11	0,13	0,37	203	-0,1	-0,24	-0,32	204	-0,09	0,06	0,07	275	0,08	0,01	0,31
62	0,03	0,29	0,14	133	0,28	-0,05	0,3	204	-0,09	0,06	0,07	205	0	-0,19	-0,45	276	-0,26	0,37	-0,12
63	0,12	-0,96	-0,98	134	0,07	-0,16	-0,04	205	0	-0,19	-0,45	206	0,01	0,2	0,25	277	0,04	-0,12	-0,07
64	0,21	-0,22	0,14	135	0,27	-1,08	-0,46	206	0,01	0,2	0,25	207	-0,17	0,29	-0,15	278	-0,76	-0,37	-0,7
65	-0,3	0,37	-0,44	136	0,01	0,21	0,16	207	-0,17	0,29	-0,15	208	0,25	0,09	0,43	279	0,18	-0,68	0,93
66	0,08	0,06	0,06	137	-0,05	0,15	0,04	208	0,25	0,09	0,43	209	-0,46	0,06	-0,49	280	-0,16	-0,35	-0,54
67	-0,24	1,32	-0,63	138	-0,33	0,59	-0,46	209	-0,46	0,06	-0,49	210	-0,09	-0,05	-0,06	281	-0,12	-0,36	-0,62
68	0,04	0,09	-0,53	139	-0,12	0,11	-0,2	210	-0,09	-0,05	-0,06	211	-0,38	0,05	-0,17	282	0,02	-0,25	-0,12
69	-0,2	0,23	-0,38	140	-0,02	0,17	0,01	211	-0,38	0,05	-0,17	212	0	0,16	1,04	283	0	-0,22	-0,18
70	0,12	0	-0,03	141	-0,12	0,25	-0,16	212	0	0,16	1,04	213	-0,17	0,22	0,23	284	0,05	0,01	0,31
71	0,08	0,07	-0,42	142	0,02	-0,08	0,01	213	-0,17	0,22	0,23	214	-0,34	0,02	-0,32				

Annexe B : Résultats de prédiction des enthalpies standards de formation à l'état liquide

- **Type** : Ensemble de molécules d'appartiennent ou de test
- **CAS** : Numéro d'enregistrement unique ([Chemical Abstracts Service](#)).
- **EXP** : Valeurs expérimentales d'enthalpie de formation de la littérature en *kJ/mol*.
- **CAL-MCG** : Valeurs d'enthalpie de formation issues de la méthode de contributions de groupes en *kJ/mol*.
- **CAL-MRNA** : Valeurs d'enthalpie de formation issues du réseau de neurones en *kJ/mol*.
- **EAM**: erreur de prédiction en *kJ/mol*.

Tableau 67 : Banque de données thermochimiques d'enthalpie de formation concernant les 900 molécules à l'état liquide

N°:	Nomenclature	Formule brute	CAS N°	EXP	Type	KJ/mol			
						CAL-MCG	EAM	CAL-MRNA	EAM
1	FORMAMIDE	CH3NO	75-12-7	-251	Apprentissage	-251,00	0,00	-251,00	0,00
2	NITROMETHANE	CH3NO2	75-52-5	-113	Apprentissage	-113,00	0,00	-113,02	-0,02
3	TETRANITROMETHANE	CN4O8	509-14-8	38,3	Apprentissage	38,30	0,00	38,27	-0,03
4	1,1,2-TRICHLOROTRIFLUOROETHANE	C2Cl3F3	76-13-1	-806	Apprentissage	-788,13	17,87	-802,65	3,35
5	TETRACHLOROETHYLENE	C2Cl4	127-18-4	-51,7	Apprentissage	-58,19	-6,49	-51,73	-0,03
6	TRICHLOROACETYL CHLORIDE	C2Cl4O	76-02-8	-281	Apprentissage	-281,00	0,00	-281,02	-0,02
7	HALOTHANE	C2HBrClF3	151-67-7	-720	Apprentissage	-735,67	-15,67	-719,99	0,01
8	1,2-DICHLORO-1,1,2-TRIFLUOROETHANE	C2HCl2F3	354-23-4	-736	Apprentissage	-736,00	0,00	-736,00	0,00
9	2,2-DICHLORO-1,1,1-TRIFLUOROETHANE	C2HCl2F3	306-83-2	-770	Apprentissage	-759,25	10,75	-769,99	0,01
10	DICHLOROACETYL CHLORIDE	C2HCl3O	79-36-7	-280	Apprentissage	-292,12	-12,12	-279,99	0,01
11	TRICHLOROACETALDEHYDE	C2HCl3O	75-87-6	-235	Apprentissage	-237,58	-2,58	-234,92	0,08
12	PENTACHLOROETHANE	C2HCl5	76-01-7	-188	Apprentissage	-195,84	-7,84	-188,06	-0,06
13	TRIFLUOROACETIC ACID	C2HF3O2	76-05-1	-1070	Apprentissage	-1085,41	-15,41	-1069,99	0,01
14	1,1,1,2-TETRABROMOETHANE	C2H2Br4	79-27-6	-51,3	Apprentissage	-59,87	-8,57	-60,15	-8,85
15	CHLOROACETYL CHLORIDE	C2H2Cl2O	79-04-9	-284	Apprentissage	-281,64	2,36	-292,90	-8,90
16	1,1,1,2-TETRACHLOROETHANE	C2H2Cl4	630-20-6	-191	Apprentissage	-180,58	10,42	-191,07	-0,07
17	1,1,2,2-TETRACHLOROETHANE	C2H2Cl4	79-34-5	-195	Apprentissage	-203,08	-8,08	-202,15	-7,15
18	ACETYL CHLORIDE	C2H3ClO	75-36-5	-273	Apprentissage	-261,00	12,00	-264,90	8,10
19	1,1-DICHLORO-1-FLUOROETHANE	C2H3Cl2F	1717-00-6	-366	Apprentissage	-383,87	-17,87	-369,20	-3,20
20	1,1,2-TRICHLOROETHANE	C2H3Cl3	79-00-5	-182	Apprentissage	-187,83	-5,83	-186,19	-4,19
21	ACETONITRILE	C2H3N	75-05-8	40,6	Apprentissage	40,60	0,00	40,59	-0,01
22	HYDROXYACETONITRILE	C2H3NO	107-16-4	-142	Apprentissage	-137,73	4,27	-136,76	5,24
23	1,1-DIBROMOETHANE	C2H4Br2	557-91-5	-66,1	Apprentissage	-78,22	-12,12	-79,20	-13,10
24	1,2-DIBROMOETHANE	C2H4Br2	106-93-4	-79,2	Apprentissage	-75,24	3,96	-76,98	2,22
25	1,1-DICHLOROETHANE	C2H4Cl2	75-34-3	-158	Apprentissage	-149,83	8,17	-150,16	7,84
26	1,2-DICHLOROETHANE	C2H4Cl2	107-06-2	-167	Apprentissage	-172,57	-5,57	-170,41	-3,41
27	METHYL FORMATE	C2H4O2	107-31-3	-386	Apprentissage	-393,28	-7,28	-390,88	-4,88
28	NITROETHANE	C2H5NO2	79-24-3	-144	Apprentissage	-142,74	1,26	-142,81	1,19

29	ETHANOL	C2H6O	64-17-5	-277	Apprentissage	-273,13	3,87	-273,86	3,14
30	ETHYLENE GLYCOL	C2H6O2	107-21-1	-460	Apprentissage	-461,36	-1,36	-463,24	-3,24
31	DIMETHYL SULFATE	C2H6O4S	77-78-1	-736	Apprentissage	-750,65	-14,65	-745,56	-9,56
32	DIMETHYL SULFIDE	C2H6S	75-18-3	-65,4	Apprentissage	-71,78	-6,38	-72,64	-7,24
33	ETHYL MERCAPTAN	C2H6S	75-08-1	-73,6	Apprentissage	-73,63	-0,03	-74,40	-0,80
34	DIMETHYL DISULFIDE	C2H6S2	624-92-0	-62,6	Apprentissage	-46,99	15,61	-47,54	15,06
35	1,2-ETHANEDITHIOL	C2H6S2	540-63-6	-54,4	Apprentissage	-54,40	0,00	-54,42	-0,02
36	ETHYLENEDIAMINE	C2H8N2	107-15-3	-63	Apprentissage	-64,98	-1,98	-64,14	-1,14
37	1,3-DICHLOROHXAFUOROPROPANE	C3Cl2F6	662-01-1	-1320	Apprentissage	-1328,94	-8,94	-1321,92	-1,92
38	2,3-DICHLOROPROPENE	C3H4Cl2	78-88-6	-73,3	Apprentissage	-63,26	10,04	-73,97	-0,67
39	3-CHLOROPROPENE	C3H5Cl	107-05-1	-30,8	Test	-34,64	-3,84	-33,07	-2,27
40	alpha-EPICHLOROHYDRIN	C3H5ClO	106-89-8	-148	Apprentissage	-154,33	-6,33	-152,98	-4,98
41	METHYL CHLOROACETATE	C3H5ClO2	96-34-4	-496	Apprentissage	-480,55	15,45	-486,31	9,69
42	1,2,3-TRICHLOROPROPANE	C3H5Cl3	96-18-4	-231	Apprentissage	-238,17	-7,17	-237,11	-6,11
43	PROPIONITRILE	C3H5N	107-12-0	15,5	Apprentissage	13,58	-1,92	12,88	-2,62
44	NITROGLYCERINE	C3H5N3O9	55-63-0	-371	Apprentissage	-371,00	0,00	-371,01	-0,01
45	1,1-DICHLOROPROPANE	C3H6Cl2	78-99-9	-186	Apprentissage	-175,08	10,92	-175,38	10,62
46	1,2-DICHLOROPROPANE	C3H6Cl2	78-87-5	-199	Apprentissage	-200,17	-1,17	-201,15	-2,15
47	1,3-DICHLOROPROPANE	C3H6Cl2	142-28-9	-200	Test	-197,83	2,17	-195,64	4,36
48	1,3-DICHLORO-2-PROPANOL	C3H6Cl2O	96-23-1	-385	Test	-389,51	-4,51	-385,47	-0,47
49	2,3-DICHLORO-1-PROPANOL	C3H6Cl2O	616-23-9	-370	Apprentissage	-376,73	-6,73	-376,47	-6,47
50	ACETONE	C3H6O	67-64-1	-248	Apprentissage	-256,68	-8,68	-254,76	-6,76
51	ALLYL ALCOHOL	C3H6O	107-18-6	-171	Test	-173,20	-2,20	-172,26	-1,26
52	1,2-PROPYLENE OXIDE	C3H6O	75-56-9	-123	Apprentissage	-114,86	8,14	-117,84	5,16
53	2,3-EPOXY-1-PROPANOL	C3H6O2	556-52-5	-298	Apprentissage	-292,89	5,11	-293,84	4,16
54	ETHYL FORMATE	C3H6O2	109-94-4	-421	Apprentissage	-418,54	2,46	-416,49	4,51
55	METHYL ACETATE	C3H6O2	79-20-9	-446	Test	-452,14	-6,14	-452,77	-6,77
56	DIMETHYL CARBONATE	C3H6O3	616-38-6	-607	Apprentissage	-619,74	-12,74	-620,43	-13,43
57	2-BROMOPROPANE	C3H7Br	75-26-3	-131	Apprentissage	-117,21	13,79	-118,04	12,96
58	ISOPROPYL CHLORIDE	C3H7Cl	75-29-6	-172	Apprentissage	-165,24	6,76	-168,20	3,80
59	3-CHLORO-1,2-PROPANEDIOL	C3H7ClO2	96-24-2	-525	Apprentissage	-527,59	-2,59	-526,30	-1,30
60	ISOPROPYL IODIDE	C3H7I	75-30-9	-74,8	Apprentissage	-71,72	3,08	-70,94	3,86
61	1-NITROPROPANE	C3H7NO2	108-03-2	-167	Apprentissage	-168,00	-1,00	-168,01	-1,01
62	2-NITROPROPANE	C3H7NO2	79-46-9	-180	Apprentissage	-180,00	0,00	-180,02	-0,02

63	2-METHOXYETHANOL	C3H8O2	109-86-4	-416	Apprentissage	-425,07	-9,07	-426,93	-10,93
64	METHYLAL	C3H8O2	109-87-5	-378	Test	-368,82	9,18	-366,74	11,26
65	1,2-PROPYLENE GLYCOL	C3H8O2	57-55-6	-500	Apprentissage	-489,59	10,41	-490,47	9,53
66	1,3-PROPYLENE GLYCOL	C3H8O2	504-63-2	-481	Apprentissage	-479,74	1,26	-480,09	0,91
67	GLYCEROL	C3H8O3	56-81-5	-670	Apprentissage	-677,81	-7,81	-676,90	-6,90
68	ISOPROPYL MERCAPTAN	C3H8S	75-33-2	-106	Apprentissage	-106,45	-0,45	-106,49	-0,49
69	METHYL ETHYL SULFIDE	C3H8S	624-89-5	-91,6	Apprentissage	-97,04	-5,44	-97,81	-6,21
70	n-PROPYL MERCAPTAN	C3H8S	107-03-9	-99,9	Apprentissage	-98,89	1,01	-99,51	0,39
71	ISOPROPYLAMINE	C3H9N	75-31-0	-112	Apprentissage	-113,03	-1,03	-113,20	-1,20
72	n-PROPYLAMINE	C3H9N	107-10-8	-101	Test	-104,38	-3,38	-102,38	-1,38
73	1,2-PROPANEDIAMINE	C3H10N2	78-90-0	-97,8	Apprentissage	-95,82	1,98	-96,70	1,10
74	1,3-PROPANEDIAMINE	C3H10N2	109-76-2	-86,7	Apprentissage	-88,09	-1,39	-87,69	-0,99
75	1,2-DICHLOROHEXAFLUOROCYCLOBUTANE	C4Cl2F6	356-18-3	-1280	Apprentissage	-1280,00	0,00	-1279,96	0,04
76	PYRIMIDINE	C4H4N2	289-95-2	146	Apprentissage	151,71	5,71	148,54	2,54
77	DIKETENE	C4H4O2	674-82-8	-233	Apprentissage	-233,00	0,00	-233,02	-0,02
78	cis-CROTONITRILE	C4H5N	1190-76-7	95,1	Apprentissage	102,43	7,33	98,02	2,92
79	trans-CROTONITRILE	C4H5N	627-26-9	101	Apprentissage	102,43	1,43	98,02	-2,98
80	VINYLACETONITRILE	C4H5N	109-75-1	118	Apprentissage	113,51	-4,49	112,86	-5,14
81	ACROLEIN CYANOHYDRIN	C4H5NO	5809-59-6	-51,3	Apprentissage	-51,30	0,00	-51,32	-0,02
82	DIMETHYLACETYLENE	C4H6	503-17-3	119	Apprentissage	121,13	2,13	120,87	1,87
83	2,5-DIHYDROFURAN	C4H6O	1708-29-8	-141	Test	-127,32	13,68	-120,56	20,44
84	DIVINYL ETHER	C4H6O	109-93-3	-39,8	Apprentissage	-41,26	-1,46	-39,25	0,55
85	METHYL ACRYLATE	C4H6O2	96-33-3	-362	Apprentissage	-353,37	8,63	-357,63	4,37
86	VINYL ACETATE	C4H6O2	108-05-4	-350	Test	-358,14	-8,14	-357,55	-7,55
87	1,2-DICHLOROBUTANE	C4H8Cl2	616-21-7	-230	Apprentissage	-225,42	4,58	-226,36	3,64
88	1,4-DICHLOROBUTANE	C4H8Cl2	110-56-5	-225	Apprentissage	-223,08	1,92	-220,89	4,11
89	2,3-DICHLOROBUTANE	C4H8Cl2	7581-97-7	-232	Apprentissage	-225,09	6,91	-229,72	2,28
90	DI(2-CHLOROETHYL)ETHER	C4H8Cl2O	111-44-4	-356	Test	-354,97	1,03	-354,28	1,72
91	1,2-EPOXYBUTANE	C4H8O	106-88-7	-147	Apprentissage	-141,58	5,42	-141,77	5,23
92	1,2-EPOXY-2-METHYLPROPANE	C4H8O	558-30-5	-159	Apprentissage	-159,00	0,00	-159,03	-0,03
93	ETHYL VINYL ETHER	C4H8O	109-92-2	-167	Apprentissage	-167,74	-0,74	-167,82	-0,82
94	METHYL ETHYL KETONE	C4H8O	78-93-3	-273	Apprentissage	-272,62	0,38	-272,13	0,87
95	2-METHYLPROPANAL	C4H8O	78-84-2	-247	Apprentissage	-248,13	-1,13	-247,74	-0,74
96	TETRAHYDROFURAN	C4H8O	109-99-9	-216	Test	-233,24	-17,24	-224,62	-8,62

97	3-(METHYLMERCAPTO)PROPANAL	C4H8OS	3268-49-3	-211	Apprentissage	-215,89	-4,89	-216,76	-5,76
98	ACETALDOL	C4H8O2	107-89-1	-434	Apprentissage	-432,37	1,63	-431,13	2,87
99	cis-2-BUTENE-1,4-DIOL	C4H8O2	6117-80-2	-373	Apprentissage	-382,81	-9,81	-381,12	-8,12
100	1,3-DIOXANE	C4H8O2	505-22-6	-378	Apprentissage	-377,30	0,70	-370,76	7,24
101	1,4-DIOXANE	C4H8O2	123-91-1	-355	Test	-377,30	-22,30	-370,76	-15,76
102	ETHYL ACETATE	C4H8O2	141-78-6	-479	Test	-477,40	1,60	-477,84	1,16
103	4-HYDROXYBUTYRALDEHYDE	C4H8O2	25714-71-0	-417	Apprentissage	-417,25	-0,25	-417,23	-0,23
104	3-HYDROXY-2-METHYL PROPIONALDEHYDE	C4H8O2	38433-80-6	-428	Apprentissage	-421,62	6,38	-423,68	4,32
105	ISOBUTYRIC ACID	C4H8O2	79-31-2	-531	Apprentissage	-532,54	-1,54	-538,64	-7,64
106	METHYL PROPIONATE	C4H8O2	554-12-1	-463	Apprentissage	-476,23	-13,23	-475,60	-12,60
107	TETRAHYDROTHIOPHENE	C4H8S	110-01-0	-72,9	Apprentissage	-66,18	6,72	-65,18	7,72
108	2-BROMOBUTANE	C4H9Br	78-76-2	-155	Apprentissage	-139,40	15,60	-140,22	14,78
109	sec-BUTYL CHLORIDE	C4H9Cl	78-86-4	-193	Apprentissage	-187,43	5,57	-190,41	2,59
110	tert-BUTYL CHLORIDE	C4H9Cl	507-20-0	-211	Apprentissage	-211,00	0,00	-211,02	-0,02
111	ISOBUTYL CHLORIDE	C4H9Cl	513-36-0	-191	Test	-191,13	-0,13	-189,99	1,01
112	PYRROLIDINE	C4H9N	123-75-1	-41,2	Apprentissage	-52,55	-11,35	-49,01	-7,81
113	N,N-DIMETHYLACETAMIDE	C4H9NO	127-19-5	-278	Apprentissage	-278,00	0,00	-278,02	-0,02
114	MORPHOLINE	C4H9NO	110-91-8	-187	Apprentissage	-196,61	-9,61	-195,24	-8,24
115	1-NITROBUTANE	C4H9NO2	627-05-4	-193	Apprentissage	-193,26	-0,26	-193,22	-0,22
116	DIETHYL ETHER	C4H10O	60-29-7	-279	Test	-278,98	0,02	-281,78	-2,78
117	METHYL ISOPROPYL ETHER	C4H10O	598-53-8	-279	Test	-276,62	2,38	-275,62	3,38
118	2-METHYL-1-PROPANOL	C4H10O	78-83-1	-335	Test	-329,69	5,31	-329,70	5,30
119	METHYL n-PROPYL ETHER	C4H10O	557-17-5	-266	Test	-270,58	-4,58	-270,27	-4,27
120	1,2-BUTANEDIOL	C4H10O2	584-03-2	-524	Apprentissage	-514,85	9,15	-515,47	8,53
121	1,3-BUTANEDIOL	C4H10O2	107-88-0	-501	Apprentissage	-515,33	-14,33	-513,60	-12,60
122	1,4-BUTANEDIOL	C4H10O2	110-63-4	-503	Apprentissage	-505,00	-2,00	-505,02	-2,02
123	t-BUTYL HYDROPEROXIDE	C4H10O2	75-91-2	-294	Apprentissage	-293,14	0,86	-292,28	1,72
124	1,2-DIMETHOXYETHANE	C4H10O2	110-71-4	-381	Test	-394,07	-13,07	-391,96	-10,96
125	2-ETHOXYETHANOL	C4H10O2	110-80-5	-448	Test	-450,33	-2,33	-451,85	-3,85
126	2-METHOXY PROPANOL-1	C4H10O2	1589-47-5	-454	Apprentissage	-465,71	-11,71	-454,91	-0,91
127	2-METHYL-1,3-PROPANEDIOL	C4H10O2	2163-42-0	-506	Apprentissage	-503,18	2,82	-501,71	4,29
128	DIETHYLENE GLYCOL	C4H10O3	111-46-6	-629	Apprentissage	-626,89	2,11	-624,01	4,99
129	DIETHYLSULFITE	C4H10O3S	623-81-4	-600	Apprentissage	-600,00	0,00	-600,01	-0,01
130	DIETHYL SULFATE	C4H10O4S	64-67-5	-813	Apprentissage	-801,16	11,84	-799,37	13,63

131	n-BUTYL MERCAPTAN	C4H10S	109-79-5	-125	Apprentissage	-124,14	0,86	-124,66	0,34
132	sec-BUTYL MERCAPTAN	C4H10S	513-53-1	-131	Apprentissage	-128,64	2,36	-128,67	2,33
133	tert-BUTYL MERCAPTAN	C4H10S	75-66-1	-141	Apprentissage	-140,52	0,48	-141,39	-0,39
134	DIETHYL SULFIDE	C4H10S	352-93-2	-119	Apprentissage	-128,51	-9,51	-129,37	-10,37
135	ISOBUTYL MERCAPTAN	C4H10S	513-44-0	-132	Apprentissage	-130,19	1,81	-129,79	2,21
136	METHYL n-PROPYL SULFIDE	C4H10S	3877-15-4	-119	Apprentissage	-122,29	-3,29	-123,03	-4,03
137	DIETHYL DISULFIDE	C4H10S2	110-81-6	-120	Apprentissage	-109,94	10,06	-110,25	9,75
138	n-BUTYLAMINE	C4H11N	109-73-9	-128	Apprentissage	-129,64	-1,64	-127,69	0,31
139	sec-BUTYLAMINE	C4H11N	13952-84-6	-137	Apprentissage	-135,23	1,77	-135,30	1,70
140	tert-BUTYLAMINE	C4H11N	75-64-9	-151	Apprentissage	-151,66	-0,66	-149,86	1,14
141	DIETHYLAMINE	C4H11N	109-89-7	-104	Apprentissage	-108,26	-4,26	-106,43	-2,43
142	ISOBUTYLAMINE	C4H11N	78-81-9	-133	Test	-135,68	-2,68	-133,15	-0,15
143	3-METHOXYISOPROPYLAMINE	C4H11NO	37143-54-7	-256	Apprentissage	-258,72	-2,72	-257,66	-1,66
144	2-AMINOETHOXYETHANOL	C4H11NO2	929-06-6	-438	Test	-432,88	5,12	-429,68	8,32
145	DIETHYLENETRIAMINE	C4H13N3	111-40-0	-61,7	Apprentissage	-72,04	-10,34	-67,54	-5,84
146	FURFURAL	C5H4O2	98-01-1	-202	Apprentissage	-202,00	0,00	-202,02	-0,02
147	METHYL MALEIC ANHYDRIDE	C5H4O3	616-02-4	-505	Apprentissage	-499,81	5,19	-501,19	3,81
148	PYRIDINE	C5H5N	110-86-1	100	Apprentissage	88,58	-11,42	94,90	-5,10
149	CYCLOPENTADIENE	C5H6	542-92-7	106	Apprentissage	100,36	-5,64	104,02	-1,98
150	GLUTARONITRILE	C5H6N2	544-13-8	105	Apprentissage	107,68	2,68	107,44	2,44
151	FURFURYL ALCOHOL	C5H6O2	98-00-0	-276	Apprentissage	-275,13	0,87	-276,01	-0,01
152	2-METHYLTHIOPHENE	C5H6S	554-14-3	44,6	Apprentissage	42,65	-1,95	41,93	-2,67
153	3-METHYLTHIOPHENE	C5H6S	616-44-4	43,1	Apprentissage	42,65	-0,45	41,93	-1,17
154	N-METHYLPYRROLE	C5H7N	96-54-8	62,4	Apprentissage	73,49	11,09	73,57	11,17
155	ISOPRENE	C5H8	78-79-5	49	Apprentissage	47,49	-1,51	46,54	-2,46
156	3-METHYL-1,2-BUTADIENE	C5H8	598-25-4	101	Apprentissage	101,00	0,00	100,97	-0,03
157	3-METHYL-1-BUTYNE	C5H8	598-23-2	110	Apprentissage	109,49	-0,51	109,49	-0,51
158	1,2-PENTADIENE	C5H8	591-95-7	112	Apprentissage	113,43	1,43	113,18	1,18
159	cis-1,3-PENTADIENE	C5H8	1574-41-0	54,3	Apprentissage	49,62	-4,68	51,64	-2,66
160	trans-1,3-PENTADIENE	C5H8	2004-70-8	47,9	Apprentissage	49,62	1,72	51,64	3,74
161	1,4-PENTADIENE	C5H8	591-93-5	81,2	Test	78,04	-3,16	77,92	-3,28
162	2,3-PENTADIENE	C5H8	591-96-8	104	Apprentissage	104,00	0,00	103,97	-0,03
163	1-PENTYNE	C5H8	627-19-0	116	Apprentissage	115,54	-0,46	114,63	-1,37
164	2-PENTYNE	C5H8	627-21-4	98	Apprentissage	95,87	-2,13	96,09	-1,91

165	CYCLOPENTANONE	C5H8O	120-92-3	-236	Apprentissage	-246,21	-10,21	-243,44	-7,44
166	ALLYL ACETATE	C5H8O2	591-87-7	-386	Test	-377,47	8,53	-376,65	9,35
167	ETHYL ACRYLATE	C5H8O2	140-88-5	-380	Apprentissage	-378,62	1,38	-382,78	-2,78
168	GLUTARALDEHYDE	C5H8O2	111-30-8	-366	Test	-359,54	6,46	-361,56	4,44
169	VALERONITRILE	C5H9N	110-59-8	-33,1	Apprentissage	-36,93	-3,83	-37,21	-4,11
170	N-METHYL-2-PYRROLIDONE	C5H9NO	872-50-4	-262	Apprentissage	-273,09	-11,09	-273,06	-11,06
171	CYCLOPENTANE	C5H10	287-92-3	-106	Test	-111,47	-5,47	-104,00	2,00
172	2-METHYL-1-BUTENE	C5H10	563-46-2	-61	Test	-59,85	1,15	-60,95	0,05
173	2-METHYL-2-BUTENE	C5H10	513-35-9	-68,1	Apprentissage	-71,82	-3,72	-71,00	-2,90
174	1,5-DICHLOROPENTANE	C5H10Cl2	628-76-2	-251	Test	-248,34	2,66	-246,14	4,86
175	METHYL ISOPROPYL KETONE	C5H10O	563-80-4	-300	Apprentissage	-298,43	1,57	-299,18	0,82
176	2-PENTANONE	C5H10O	107-87-9	-297	Apprentissage	-297,87	-0,87	-297,46	-0,46
177	3-PENTANONE	C5H10O	96-22-0	-297	Test	-298,26	-1,26	-296,04	0,96
178	n-BUTYL FORMATE	C5H10O2	592-84-7	-469	Apprentissage	-469,05	-0,05	-467,74	1,26
179	sec-BUTYL FORMATE	C5H10O2	589-40-2	-483	Apprentissage	-472,03	10,97	-469,51	13,49
180	tert-BUTYL FORMATE	C5H10O2	762-75-4	-500	Apprentissage	-485,35	14,65	-494,34	5,66
181	ETHYL PROPIONATE	C5H10O2	105-37-3	-503	Test	-501,48	1,52	-500,75	2,25
182	ISOBUTYL FORMATE	C5H10O2	542-55-2	-476	Apprentissage	-475,09	0,91	-473,81	2,19
183	ISOPROPYL ACETATE	C5H10O2	108-21-4	-519	Apprentissage	-517,21	1,79	-519,47	-0,47
184	ISOVALERIC ACID	C5H10O2	503-74-2	-562	Test	-563,39	-1,39	-564,02	-2,02
185	METHYL n-BUTYRATE	C5H10O2	623-42-7	-490	Test	-501,48	-11,48	-500,75	-10,75
186	2-METHYLBUTYRIC ACID	C5H10O2	116-53-0	-555	Apprentissage	-554,73	0,27	-560,49	-5,49
187	METHYL ISOBUTYRATE	C5H10O2	547-63-7	-502	Apprentissage	-510,47	-8,47	-509,55	-7,55
188	n-PROPYL ACETATE	C5H10O2	109-60-4	-504	Apprentissage	-502,65	1,35	-502,86	1,14
189	TETRAHYDROFURFURYL ALCOHOL	C5H10O2	97-99-4	-436	Test	-449,38	-13,38	-441,78	-5,78
190	DIETHYL CARBONATE	C5H10O3	105-58-8	-683	Apprentissage	-670,26	12,74	-669,48	13,52
191	CYCLOPENTYLAMINE	C5H11N	1003-03-8	-95,1	Apprentissage	-95,10	0,00	-95,12	-0,02
192	PIPERIDINE	C5H11N	110-89-4	-86,4	Apprentissage	-74,84	11,56	-73,07	13,33
193	ISOPENTANE	C5H12	78-78-4	-179	Test	-178,38	0,62	-179,16	-0,16
194	n-PENTANE	C5H12	109-66-0	-174	Test	-172,34	1,66	-173,89	0,11
195	ETHYL ISOPROPYL ETHER	C5H12O	625-54-7	-316	Apprentissage	-310,28	5,72	-312,29	3,71
196	ETHYL PROPYL ETHER	C5H12O	628-32-0	-304	Apprentissage	-304,23	-0,23	-307,02	-3,02
197	METHYL n-BUTYL ETHER	C5H12O	628-28-4	-291	Test	-295,83	-4,83	-295,52	-4,52
198	METHYL sec-BUTYL ETHER	C5H12O	6795-87-5	-305	Apprentissage	-298,81	6,19	-297,75	7,25

199	METHYL ISOBUTYL ETHER	C5H12O	625-44-5	-296	Apprentissage	-301,88	-5,88	-300,88	-4,88
200	ETHYLAL	C5H12O2	462-95-3	-450	Test	-436,12	13,88	-440,08	9,92
201	ETHYLENE GLYCOL MONOPROPYL ETHER	C5H12O2	2807-30-9	-473	Apprentissage	-475,58	-2,58	-476,73	-3,73
202	1,5-PENTANEDIOL	C5H12O2	111-29-5	-531	Apprentissage	-530,26	0,74	-529,90	1,10
203	METHYL n-BUTYL SULFIDE	C5H12S	628-29-5	-143	Apprentissage	-147,55	-4,55	-148,27	-5,27
204	METHYL t-BUTYL SULFIDE	C5H12S	6163-64-0	-157	Apprentissage	-163,85	-6,85	-161,03	-4,03
205	n-PENTYL MERCAPTAN	C5H12S	110-66-7	-150	Apprentissage	-149,40	0,60	-149,82	0,18
206	HEXAFLUOROBENZENE	C6F6	392-56-3	-991	Apprentissage	-992,14	-1,14	-993,69	-2,69
207	1,2,4-TRICHLOROBENZENE	C6H3Cl3	120-82-1	-67,5	Apprentissage	-67,41	0,09	-67,79	-0,29
208	FLUOROBENZENE	C6H5F	462-06-6	-151	Apprentissage	-144,15	6,85	-136,30	14,70
209	IODOBENZENE	C6H5I	591-50-4	117	Apprentissage	117,00	0,00	116,97	-0,03
210	NITROBENZENE	C6H5NO2	98-95-3	12,5	Apprentissage	12,50	0,00	12,47	-0,03
211	BENZENE	C6H6	71-43-2	49	Test	25,45	-23,55	39,19	-9,81
212	PHENYL MERCAPTAN	C6H6S	108-98-5	63,7	Apprentissage	63,70	0,00	63,67	-0,03
213	ANILINE	C6H7N	62-53-3	31,6	Apprentissage	31,94	0,34	31,58	-0,02
214	2-METHYLPYRIDINE	C6H7N	109-06-8	56,7	Apprentissage	56,70	0,00	56,67	-0,03
215	3-METHYLPYRIDINE	C6H7N	108-99-6	61,9	Apprentissage	61,90	0,00	61,87	-0,03
216	4-METHYLPYRIDINE	C6H7N	108-89-4	59,2	Apprentissage	59,20	0,00	59,17	-0,03
217	1,3-CYCLOHEXADIENE	C6H8	592-57-4	71,4	Test	78,07	6,67	80,44	9,04
218	1,4-CYCLOHEXADIENE	C6H8	628-41-1	69,7	Apprentissage	78,07	8,37	80,44	10,74
219	ADIPONITRILE	C6H8N2	111-69-3	85,1	Apprentissage	82,42	-2,68	82,61	-2,49
220	PHENYLHYDRAZINE	C6H8N2	100-63-0	141	Apprentissage	141,00	0,00	140,97	-0,03
221	BIS(CYANOETHYL)ETHER	C6H8N2O	1656-48-0	-64,1	Apprentissage	-58,67	5,43	-58,39	5,71
222	2,3-DIMETHYL-1,3-BUTADIENE	C6H10	513-81-5	13,5	Apprentissage	9,54	-3,96	8,09	-5,41
223	1,2-HEXADIENE	C6H10	592-44-9	89,6	Apprentissage	88,17	-1,43	88,37	-1,23
224	1,5-HEXADIENE	C6H10	592-42-7	54,1	Apprentissage	52,78	-1,32	53,03	-1,07
225	1-HEXYNE	C6H10	693-02-7	90,4	Apprentissage	90,28	-0,12	89,82	-0,58
226	CYCLOHEXANONE	C6H10O	108-94-1	-271	Apprentissage	-268,50	2,50	-268,19	2,81
227	MESITYL OXIDE	C6H10O	141-79-7	-238	Apprentissage	-235,08	2,92	-231,62	6,38
228	ISOPROPYL ACRYLATE	C6H10O2	689-12-3	-419	Apprentissage	-409,92	9,08	-413,19	5,81
229	METHOXYDIHYDROPIRAN	C6H10O2	932952	-322	Apprentissage	-318,17	3,83	-314,48	7,52
230	2-HYDROXYETHYL METHACRYLATE	C6H10O3	868-77-9	-576	Apprentissage	-577,13	-1,13	-579,14	-3,14
231	PROPIONIC ANHYDRIDE	C6H10O3	123-62-6	-679	Apprentissage	-670,65	8,35	-671,07	7,93
232	DIETHYL OXALATE	C6H10O4	95-92-1	-806	Apprentissage	-797,73	8,27	-800,02	5,98

233	ETHYLIDENE DIACETATE	C6H10O4	542-10-9	-866	Apprentissage	-878,22	-12,22	-875,13	-9,13
234	HEXANENITRILE	C6H11N	628-73-9	-57,3	Apprentissage	-62,19	-4,89	-62,31	-5,01
235	2,3-DIMETHYL-1-BUTENE	C6H12	563-78-0	-95,6	Apprentissage	-90,00	5,60	-90,86	4,74
236	2,3-DIMETHYL-2-BUTENE	C6H12	563-79-1	-102	Apprentissage	-95,51	6,49	-102,01	-0,01
237	3,3-DIMETHYL-1-BUTENE	C6H12	558-37-2	-88,3	Apprentissage	-87,55	0,75	-83,07	5,23
238	2-ETHYL-1-BUTENE	C6H12	760-21-4	-87,1	Apprentissage	-82,33	4,77	-86,58	0,52
239	cis-3-HEXENE	C6H12	2097470	-79	Apprentissage	-80,20	-1,20	-80,95	-1,95
240	trans-3-HEXENE	C6H12	13269-52-8	-86,1	Apprentissage	-80,20	5,90	-80,95	5,15
241	METHYLCYCLOPENTANE	C6H12	96-37-7	-138	Apprentissage	-149,58	-11,58	-143,75	-5,75
242	2-METHYL-1-PENTENE	C6H12	763-29-1	-90	Apprentissage	-85,11	4,89	-86,08	3,92
243	2-METHYL-2-PENTENE	C6H12	625-27-4	-98,5	Apprentissage	-94,30	4,20	-96,47	2,03
244	3-METHYL-1-PENTENE	C6H12	760-20-3	-78,2	Apprentissage	-74,23	3,97	-74,62	3,58
245	3-METHYL-cis-2-PENTENE	C6H12	922-62-3	-94,5	Apprentissage	-94,30	0,20	-96,47	-1,97
246	3-METHYL-trans-2-PENTENE	C6H12	616-12-6	-94,6	Apprentissage	-94,30	0,30	-96,47	-1,87
247	4-METHYL-1-PENTENE	C6H12	691-37-2	-80	Test	-78,45	1,55	-77,81	2,19
248	4-METHYL-cis-2-PENTENE	C6H12	691-38-3	-87	Apprentissage	-87,87	-0,87	-87,97	-0,97
249	4-METHYL-trans-2-PENTENE	C6H12	674-76-0	-91,6	Apprentissage	-87,87	3,73	-87,97	3,63
250	BUTYL VINYL ETHER	C6H12O	111-34-2	-219	Apprentissage	-218,26	0,74	-218,21	0,79
251	3,3-DIMETHYL-2-BUTANONE	C6H12O	75-97-8	-329	Apprentissage	-333,94	-4,94	-332,48	-3,48
252	ETHYL ISOPROPYL KETONE	C6H12O	565-69-5	-326	Apprentissage	-329,56	-3,56	-326,82	-0,82
253	2-HEXANONE	C6H12O	591-78-6	-322	Apprentissage	-323,13	-1,13	-322,79	-0,79
254	3-HEXANONE	C6H12O	589-38-8	-320	Apprentissage	-323,51	-3,51	-321,39	-1,39
255	METHYL ISOBUTYL KETONE	C6H12O	108-10-1	-328	Apprentissage	-329,17	-1,17	-328,21	-0,21
256	3-METHYL-2-PENTANONE	C6H12O	565-61-7	-324	Apprentissage	-320,62	3,38	-321,37	2,63
257	n-BUTYL ACETATE	C6H12O2	123-86-4	-529	Test	-527,91	1,09	-527,85	1,15
258	sec-BUTYL ACETATE	C6H12O2	105-46-4	-544	Apprentissage	-539,40	4,60	-541,19	2,81
259	tert-BUTYL ACETATE	C6H12O2	540-88-5	-561	Apprentissage	-552,72	8,28	-554,19	6,81
260	CYCLOHEXYL HYDROPEROXIDE	C6H12O2	766-07-4	-273	Apprentissage	-283,32	-10,32	-279,19	-6,19
261	ETHYL n-BUTYRATE	C6H12O2	105-54-4	-515	Apprentissage	-526,74	-11,74	-525,86	-10,86
262	ETHYL ISOBUTYRATE	C6H12O2	97-62-1	-539	Apprentissage	-535,73	3,27	-534,60	4,40
263	ISOBUTYL ACETATE	C6H12O2	110-19-0	-536	Apprentissage	-533,95	2,05	-533,18	2,82
264	NEOHEXANOIC ACID	C6H12O2	595-37-9	-595	Apprentissage	-586,73	8,27	-589,36	5,64
265	n-PENTYL FORMATE	C6H12O2	638-49-3	-493	Apprentissage	-494,30	-1,30	-493,38	-0,38
266	n-PROPYL PROPIONATE	C6H12O2	106-36-5	-528	Apprentissage	-526,74	1,26	-525,86	2,14

267	PROPYLENE GLYCOL MONOMETHYL ETHER ACETATE	C6H12O3	108-65-6	-663	Apprentissage	-662,89	0,11	-661,36	1,64
268	CYCLOHEXYL MERCAPTAN	C6H12S	1569-69-3	-141	Apprentissage	-141,00	0,00	-141,02	-0,02
269	N-ETHYL-2-METHYLLALLYLAMINE	C6H13N	18328-90-0	-43,9	Apprentissage	-46,28	-2,38	-43,88	0,02
270	2,2-DIMETHYLBUTANE	C6H14	75-83-2	-214	Apprentissage	-213,90	0,10	-210,94	3,06
271	2,3-DIMETHYLBUTANE	C6H14	79-29-8	-207	Apprentissage	-207,00	0,00	-206,97	0,03
272	n-HEXANE	C6H14	110-54-3	-199	Test	-197,60	1,40	-199,12	-0,12
273	2-METHYLPENTANE	C6H14	107-83-5	-205	Apprentissage	-203,64	1,36	-204,40	0,60
274	3-METHYLPENTANE	C6H14	96-14-0	-202	Test	-200,57	1,43	-201,35	0,65
275	n-BUTYL ETHYL ETHER	C6H14O	628-81-9	-329	Test	-329,49	-0,49	-332,25	-3,25
276	DIISOPROPYL ETHER	C6H14O	108-20-3	-352	Apprentissage	-359,36	-7,36	-357,29	-5,29
277	DI-n-PROPYL ETHER	C6H14O	111-43-3	-329	Apprentissage	-329,49	-0,49	-332,25	-3,25
278	3-METHYL-1-PENTANOL	C6H14O	589-35-5	-381	Test	-377,14	3,86	-377,00	4,00
279	3-METHYL-3-PENTANOL	C6H14O	77-74-7	-405	Apprentissage	-406,86	-1,86	-405,03	-0,03
280	4-METHYL-2-PENTANOL	C6H14O	108-11-2	-395	Test	-395,32	-0,32	-394,15	0,85
281	METHYL n-PENTYL ETHER	C6H14O	628-80-8	-315	Apprentissage	-321,09	-6,09	-320,77	-5,77
282	METHYL tert-PENTYL ETHER	C6H14O	994-05-8	-340	Apprentissage	-330,80	9,20	-327,03	12,97
283	2-BUTOXYETHANOL	C6H14O2	111-76-2	-497	Apprentissage	-500,84	-3,84	-501,58	-4,58
284	1,2-DIETHOXYETHANE	C6H14O2	629-14-1	-451	Apprentissage	-461,38	-10,38	-465,20	-14,20
285	HEXYLENE GLYCOL	C6H14O2	107-41-5	-603	Apprentissage	-598,54	4,46	-602,63	0,37
286	1-ISOPROPOXY-2-PROPANOL	C6H14O2	3944-36-3	-530	Apprentissage	-528,91	1,09	-528,72	1,28
287	PROPYLENE GLYCOL n-PROPYL ETHER	C6H14O2	1569-01-3	-506	Apprentissage	-522,87	-16,87	-523,23	-17,23
288	DIETHYLENE GLYCOL DIMETHYL ETHER	C6H14O3	111-96-6	-563	Test	-576,47	-13,47	-574,60	-11,60
289	2-(2-ETHOXYETHOXY)ETHANOL	C6H14O3	111-90-0	-626	Apprentissage	-632,73	-6,73	-632,91	-6,91
290	TRIETHYLENE GLYCOL	C6H14O4	112-27-6	-804	Apprentissage	-804,08	-0,08	-805,69	-1,69
291	DI-n-PROPYL SULFIDE	C6H14S	111-47-7	-170	Apprentissage	-179,03	-9,03	-179,76	-9,76
292	ETHYL t-BUTYL SULFIDE	C6H14S	14290-92-7	-187	Apprentissage	-195,32	-8,32	-190,93	-3,93
293	n-HEXYL MERCAPTAN	C6H14S	111-31-9	-176	Apprentissage	-174,66	1,34	-175,00	1,00
294	METHYL t-PENTYL SULFIDE	C6H14S	13286-92-5	-180	Apprentissage	-182,52	-2,52	-179,88	0,12
295	DI-n-PROPYL DISULFIDE	C6H14S2	629-19-6	-172	Apprentissage	-160,46	11,54	-160,61	11,39
296	DIISOPROPYLAMINE	C6H15N	108-18-9	-179	Apprentissage	-179,00	0,00	-179,02	-0,02
297	N,N-DIMETHYL-n-BUTYLAMINE	C6H15N	927-62-8	-125	Apprentissage	-127,83	-2,83	-126,58	-1,58
298	DI-n-PROPYLAMINE	C6H15N	142-84-7	-156	Apprentissage	-158,78	-2,78	-156,83	-0,83
299	n-HEXYLAMINE	C6H15N	111-26-2	-177	Apprentissage	-180,15	-3,15	-178,40	-1,40
300	TRIETHYLAMINE	C6H15N	121-44-8	-128	Apprentissage	-131,81	-3,81	-129,77	-1,77

301	DIETHYLETHANOLAMINE	C6H15NO	100-37-8	-310	Apprentissage	-308,37	1,63	-307,03	2,97
302	TRIEHTANOLAMINE	C6H15NO3	102-71-6	-667	Apprentissage	-661,49	5,51	-665,82	1,18
303	TETRAMETHYLETHYLENEDIAMINE	C6H16N2	110-18-9	-61,1	Apprentissage	-58,06	3,04	-58,95	2,15
304	TRIEHTYLENETETRAMINE	C6H18N4	112-24-3	-85,6	Apprentissage	-83,73	1,87	-81,25	4,35
305	m-CHLOROBENZOYL CHLORIDE	C7H4Cl2O	618-46-2	-190	Apprentissage	-192,31	-2,31	-193,67	-3,67
306	BENZOYL CHLORIDE	C7H5ClO	98-88-4	-158	Apprentissage	-151,50	6,50	-154,31	3,69
307	BENZOTRICHLORIDE	C7H5Cl3	98-07-7	-62,9	Apprentissage	-56,18	6,72	-62,88	0,02
308	BENZOTRIFLUORIDE	C7H5F3	98-08-8	-637	Apprentissage	-637,00	0,00	-637,01	-0,01
309	PHENYL ISOCYANATE	C7H5NO	103-71-9	-61,1	Apprentissage	-61,10	0,00	-61,12	-0,02
310	BENZYL DICHLORIDE	C7H6Cl2	98-87-3	-36,8	Apprentissage	-46,88	-10,08	-36,88	-0,08
311	BENZALDEHYDE	C7H6O	100-52-7	-86,8	Apprentissage	-82,50	4,30	-82,60	4,20
312	SALICYLALDEHYDE	C7H6O2	90-02-8	-266	Apprentissage	-275,45	-9,45	-274,61	-8,61
313	o-CHLOROTOLUENE	C7H7Cl	95-49-8	-27,6	Apprentissage	-23,34	4,26	-21,63	5,97
314	ANISOLE	C7H8O	100-66-3	-115	Apprentissage	-123,53	-8,53	-124,42	-9,42
315	m-CRESOL	C7H8O	108-39-4	-194	Apprentissage	-189,02	4,98	-188,55	5,45
316	BENZYL MERCAPTAN	C7H8S	100-53-8	36,2	Apprentissage	36,20	0,00	36,17	-0,03
317	CYCLOHEPTENE	C7H12	628-92-2	-46,9	Apprentissage	-50,14	-3,24	-47,08	-0,18
318	1-HEPTYNE	C7H12	628-71-7	66,1	Apprentissage	65,02	-1,08	64,95	-1,15
319	CYCLOHEXYL FORMATE	C7H12O2	4351-54-6	-496	Apprentissage	-496,00	0,00	-496,08	-0,08
320	CYCLOPENTYLACETIC ACID	C7H12O2	1123-00-8	-552	Test	-561,31	-9,31	-554,72	-2,72
321	2-HYDROXYPROPYL METHACRYLATE	C7H12O3	923-26-2	-629	Apprentissage	-624,41	4,59	-623,38	5,62
322	CYCLOHEPTANE	C7H14	291-64-5	-157	Test	-156,05	0,95	-156,07	0,93
323	1,1-DIMETHYLCYCLOPENTANE	C7H14	1638-26-2	-172	Apprentissage	-158,57	13,43	-173,19	-1,19
324	trans-1,2-DIMETHYLCYCLOPENTANE	C7H14	822-50-4	-171	Apprentissage	-187,69	-16,69	-184,40	-13,40
325	cis-1,3-DIMETHYLCYCLOPENTANE	C7H14	2532-58-3	-170	Apprentissage	-187,69	-17,69	-184,40	-14,40
326	trans-1,3-DIMETHYLCYCLOPENTANE	C7H14	1759-58-6	-168	Apprentissage	-187,69	-19,69	-184,40	-16,40
327	ETHYLCYCLOPENTANE	C7H14	1640-89-7	-163	Test	-176,30	-13,30	-170,87	-7,87
328	2-ETHYL-1-PENTENE	C7H14	3404-71-5	-110	Test	-107,58	2,42	-111,75	-1,75
329	3-ETHYL-1-PENTENE	C7H14	780984	-98,5	Apprentissage	-99,49	-0,99	-99,71	-1,21
330	cis-3-HEPTENE	C7H14	2097503	-104	Test	-105,45	-1,45	-106,09	-2,09
331	trans-3-HEPTENE	C7H14	14686-14-7	-109	Apprentissage	-105,45	3,55	-106,09	2,91
332	2-METHYL-1-HEXENE	C7H14	1531866	-113	Test	-110,36	2,64	-111,25	1,75
333	3-METHYL-1-HEXENE	C7H14	3404-61-3	-101	Apprentissage	-99,49	1,51	-99,71	1,29
334	4-METHYL-1-HEXENE	C7H14	3769-23-1	-102	Test	-100,64	1,36	-99,97	2,03

335	5-METHYL-1-HEXENE	C7H14	3524-73-0	-100	Apprentissage	-103,71	-3,71	-102,97	-2,97
336	2,3,3-TRIMETHYL-1-BUTENE	C7H14	594-56-9	-118	Apprentissage	-125,51	-7,51	-121,66	-3,66
337	DIISOPROPYL KETONE	C7H14O	565-80-0	-353	Apprentissage	-338,77	14,23	-353,09	-0,09
338	2-HEPTANONE	C7H14O	110-43-0	-348	Apprentissage	-348,39	-0,39	-348,12	-0,12
339	3-HEPTANONE	C7H14O	106-35-4	-349	Test	-348,77	0,23	-346,76	2,24
340	4-HEPTANONE	C7H14O	123-19-3	-346	Test	-348,77	-2,77	-346,76	-0,76
341	cis-2-METHYLCYCLOHEXANOL	C7H14O	7443-70-1	-390	Apprentissage	-405,80	-15,80	-405,81	-15,81
342	trans-2-METHYLCYCLOHEXANOL	C7H14O	7443-52-9	-416	Apprentissage	-405,80	10,20	-405,81	10,19
343	cis-3-METHYLCYCLOHEXANOL	C7H14O	5454-79-5	-416	Apprentissage	-405,80	10,20	-405,81	10,19
344	trans-3-METHYLCYCLOHEXANOL	C7H14O	7443-55-2	-394	Apprentissage	-405,80	-11,80	-405,81	-11,81
345	cis-4-METHYLCYCLOHEXANOL	C7H14O	7731-28-4	-413	Apprentissage	-405,80	7,20	-405,81	7,19
346	2-METHYLHEXANAL	C7H14O	925-54-2	-317	Apprentissage	-320,83	-3,83	-320,84	-3,84
347	3-METHYLHEXANAL	C7H14O	19269-28-4	-315	Test	-319,43	-4,43	-319,67	-4,67
348	n-BUTYL PROPIONATE	C7H14O2	590-01-2	-550	Test	-551,99	-1,99	-550,95	-0,95
349	ETHYL ISOVALERATE	C7H14O2	108-64-5	-571	Apprentissage	-558,04	12,96	-556,45	14,55
350	n-HEXYL FORMATE	C7H14O2	629-33-4	-518	Apprentissage	-519,56	-1,56	-519,04	-1,04
351	ISOPENTYL ACETATE	C7H14O2	123-92-2	-559	Apprentissage	-559,21	-0,21	-558,12	0,88
352	NEOHEPTANOIC ACID	C7H14O2	1185-39-3	-614	Apprentissage	-611,98	2,02	-614,02	-0,02
353	n-PENTYL ACETATE	C7H14O2	628-63-7	-553	Apprentissage	-553,17	-0,17	-552,78	0,22
354	n-PROPYL ISOBUTYRATE	C7H14O2	644-49-5	-565	Apprentissage	-560,99	4,01	-559,61	5,39
355	ETHYL-3-ETHOXYPROPIONATE	C7H14O3	763-69-9	-685	Test	-683,89	1,11	-683,37	1,63
356	2,2-DIMETHYLPENTANE	C7H16	590-35-2	-238	Test	-239,15	-1,15	-236,28	1,72
357	2,3-DIMETHYLPENTANE	C7H16	565-59-3	-233	Apprentissage	-229,19	3,81	-229,17	3,83
358	2,4-DIMETHYLPENTANE	C7H16	108-08-7	-235	Test	-234,94	0,06	-234,98	0,02
359	3,3-DIMETHYLPENTANE	C7H16	562-49-2	-234	Apprentissage	-232,57	1,43	-230,79	3,21
360	3-ETHYLPENTANE	C7H16	617-78-7	-225	Test	-225,83	-0,83	-226,60	-1,60
361	2-METHYLHEXANE	C7H16	591-76-4	-229	Apprentissage	-228,90	0,10	-229,66	-0,66
362	3-METHYLHEXANE	C7H16	589-34-4	-226	Apprentissage	-225,83	0,17	-226,60	-0,60
363	2,2,3-TRIMETHYLBUTANE	C7H16	464-06-2	-237	Apprentissage	-235,10	1,90	-234,38	2,62
364	ETHYL tert-PENTYL ETHER	C7H16O	919-94-8	-369	Test	-364,46	4,54	-363,79	5,21
365	ISOPROPYL BUTYL ETHER	C7H16O	1860-27-1	-366	Test	-360,79	5,21	-362,76	3,24
366	ISOPROPYL ISOBUTYL ETHER	C7H16O	78448-33-6	-371	Apprentissage	-366,83	4,17	-368,11	2,89
367	2-METHYL-1-HEXANOL	C7H16O	624-22-6	-405	Test	-402,39	2,61	-402,18	2,82
368	PROPYLENE GLYCOL 1-tert-BUTYL ETHER	C7H16O2	57018-52-7	-577	Apprentissage	-564,42	12,58	-564,86	12,14

369	PROPYLENE GLYCOL 2-tert-BUTYL ETHER	C7H16O2	94023-15-1	-571	Apprentissage	-557,77	13,23	-567,88	3,12
370	DIETHYLENE GLYCOL MONOPROPYL ETHER	C7H16O3	6881-94-3	-648	Test	-657,99	-9,99	-657,34	-9,34
371	DIPROPYLENE GLYCOL MONOMETHYL ETHER	C7H16O3	34590-94-8	-661	Apprentissage	-667,94	-6,94	-660,67	0,33
372	n-HEPTYL MERCAPTAN	C7H16S	1639-09-4	-201	Apprentissage	-199,91	1,09	-200,20	0,80
373	n-HEPTYLAMINE	C7H17N	111-68-2	-201	Apprentissage	-205,40	-4,40	-203,79	-2,79
374	ETHYNYLBENZENE	C8H6	536-74-3	283	Apprentissage	283,00	0,00	282,96	-0,04
375	STYRENE	C8H8	100-42-5	103	Apprentissage	103,15	0,15	102,49	-0,51
376	ACETOPHENONE	C8H8O	98-86-2	-143	Apprentissage	-147,18	-4,18	-143,06	-0,06
377	m-TOLUALDEHYDE	C8H8O	620-23-5	-123	Apprentissage	-121,57	1,43	-121,31	1,69
378	o-TOLUALDEHYDE	C8H8O	529-20-4	-113	Apprentissage	-114,80	-1,80	-115,31	-2,31
379	BENZYL FORMATE	C8H8O2	104-57-4	-305	Apprentissage	-308,84	-3,84	-308,20	-3,20
380	METHYL BENZOATE	C8H8O2	93-58-3	-344	Apprentissage	-345,04	-1,04	-339,84	4,16
381	METHYL SALICYLATE	C8H8O3	119-36-8	-532	Apprentissage	-537,99	-5,99	-534,57	-2,57
382	m-ETHYLPHENOL	C8H10O	620-17-7	-214	Apprentissage	-212,73	1,27	-212,68	1,32
383	o-ETHYLPHENOL	C8H10O	90-00-6	-209	Apprentissage	-205,96	3,04	-205,90	3,10
384	PHENETOLE	C8H10O	103-73-1	-153	Apprentissage	-148,78	4,22	-149,59	3,41
385	m-TOLUALCOHOL	C8H10O	587-03-1	-208	Apprentissage	-205,83	2,17	-205,08	2,92
386	2,4-XYLENOL	C8H10O	105-67-9	-229	Apprentissage	-222,85	6,15	-227,80	1,20
387	ETHYLBENZENE HYDROPEROXIDE	C8H10O2	3071-32-7	-149	Apprentissage	-145,20	3,80	-147,88	1,12
388	o-ETHYLANILINE	C8H11N	578-54-1	-25,5	Apprentissage	-24,08	1,42	-25,54	-0,04
389	VINYLCYCLOHEXENE	C8H12	100-40-3	26,8	Apprentissage	26,80	0,00	26,77	-0,03
390	2,5-DIMETHYL-1,5-HEXADIENE	C8H14	627-58-7	-23,9	Apprentissage	-23,13	0,77	-23,88	0,02
391	2,5-DIMETHYL-2,4-HEXADIENE	C8H14	764-13-6	-63,1	Apprentissage	-59,37	3,73	-62,60	0,50
392	2-ETHYL-2-HEXENAL	C8H14O	645-62-5	-245	Apprentissage	-245,90	-0,90	-244,86	0,14
393	CYCLOHEXYL ACETATE	C8H14O2	622-45-7	-553	Apprentissage	-553,62	-0,62	-558,99	-5,99
394	ISOBUTYL METHACRYLATE	C8H14O2	97-86-9	-465	Apprentissage	-473,13	-8,13	-476,74	-11,74
395	DIETHYL SUCCINATE	C8H14O4	123-25-1	-913	Apprentissage	-904,26	8,74	-912,81	0,19
396	CYCLOOCTANE	C8H16	292-64-8	-168	Test	-178,35	-10,35	-184,10	-16,10
397	cis-1,2-DIMETHYLCYCLOHEXANE	C8H16	112134	-212	Apprentissage	-209,99	2,01	-210,20	1,80
398	trans-1,2-DIMETHYLCYCLOHEXANE	C8H16	6876-23-9	-218	Test	-209,99	8,01	-210,20	7,80
399	cis-1,3-DIMETHYLCYCLOHEXANE	C8H16	638-04-0	-223	Apprentissage	-209,99	13,01	-210,20	12,80
400	trans-1,3-DIMETHYLCYCLOHEXANE	C8H16	112195	-216	Apprentissage	-209,99	6,01	-210,20	5,80
401	cis-1,4-DIMETHYLCYCLOHEXANE	C8H16	624-29-3	-216	Apprentissage	-209,99	6,01	-210,20	5,80
402	trans-1,4-DIMETHYLCYCLOHEXANE	C8H16	112227	-222	Apprentissage	-209,99	12,01	-210,20	11,80

403	2,3-DIMETHYL-1-HEXENE	C8H16	16746-86-4	-136	Apprentissage	-137,44	-1,44	-138,28	-2,28
404	ETHYLCYCLOHEXANE	C8H16	1678-91-7	-212	Apprentissage	-198,60	13,40	-198,53	13,47
405	ISOPROPYLCYCLOPENTANE	C8H16	3875-51-2	-190	Apprentissage	-208,41	-18,41	-206,39	-16,39
406	1-METHYL-1-ETHYLCYCLOPENTANE	C8H16	16747-50-5	-194	Apprentissage	-204,11	-10,11	-194,39	-0,39
407	2-METHYL-1-HEPTENE	C8H16	15870-10-7	-134	Apprentissage	-135,62	-1,62	-136,43	-2,43
408	6-METHYL-1-HEPTENE	C8H16	5026-76-6	-130	Test	-128,96	1,04	-128,15	1,85
409	cis-3-OCTENE	C8H16	14850-22-7	-129	Apprentissage	-130,71	-1,71	-131,25	-2,25
410	trans-3-OCTENE	C8H16	14919-01-8	-134	Apprentissage	-130,71	3,29	-131,25	2,75
411	cis-4-OCTENE	C8H16	7642-15-1	-128	Test	-130,71	-2,71	-131,25	-3,25
412	trans-4-OCTENE	C8H16	14850-23-8	-135	Apprentissage	-130,71	4,29	-131,25	3,75
413	n-PROPYLCYCLOPENTANE	C8H16	2040-96-2	-189	Test	-201,56	-12,56	-196,38	-7,38
414	2,4,4-TRIMETHYL-1-PENTENE	C8H16	107-39-1	-146	Apprentissage	-151,92	-5,92	-147,58	-1,58
415	2,4,4-TRIMETHYL-2-PENTENE	C8H16	107-40-4	-142	Apprentissage	-159,96	-17,96	-157,36	-15,36
416	2-OCTANONE	C8H16O	111-13-7	-373	Apprentissage	-373,64	-0,64	-373,44	-0,44
417	n-BUTYL n-BUTYRATE	C8H16O2	109-21-7	-575	Apprentissage	-577,25	-2,25	-575,99	-0,99
418	n-HEPTYL FORMATE	C8H16O2	112-23-2	-543	Apprentissage	-544,82	-1,82	-544,71	-1,71
419	n-HEXYL ACETATE	C8H16O2	142-92-7	-578	Test	-578,42	-0,42	-577,66	0,34
420	ETHYLENE GLYCOL MONOBUTYL ETHER ACETATE	C8H16O3	112-07-2	-710	Apprentissage	-710,31	-0,31	-708,13	1,87
421	2,2-DIMETHYLHEXANE	C8H18	590-73-8	-262	Apprentissage	-264,41	-2,41	-261,63	0,37
422	2,3-DIMETHYLHEXANE	C8H18	584-94-1	-253	Apprentissage	-254,45	-1,45	-254,41	-1,41
423	2,4-DIMETHYLHEXANE	C8H18	589-43-5	-257	Apprentissage	-257,13	-0,13	-257,15	-0,15
424	2,5-DIMETHYLHEXANE	C8H18	592-13-2	-260	Apprentissage	-260,19	-0,19	-260,24	-0,24
425	3,3-DIMETHYLHEXANE	C8H18	563-16-6	-258	Apprentissage	-257,82	0,18	-256,02	1,98
426	3,4-DIMETHYLHEXANE	C8H18	583-48-2	-252	Apprentissage	-251,38	0,62	-251,39	0,61
427	3-ETHYLHEXANE	C8H18	619-99-8	-250	Apprentissage	-251,09	-1,09	-251,84	-1,84
428	2-METHYL-3-ETHYLPENTANE	C8H18	609-26-7	-250	Apprentissage	-257,13	-7,13	-257,15	-7,15
429	3-METHYL-3-ETHYLPENTANE	C8H18	1067-08-9	-253	Apprentissage	-257,82	-4,82	-256,02	-3,02
430	2-METHYLHEPTANE	C8H18	592-27-8	-255	Apprentissage	-254,15	0,85	-254,91	0,09
431	3-METHYLHEPTANE	C8H18	589-81-1	-252	Test	-251,09	0,91	-251,84	0,16
432	4-METHYLHEPTANE	C8H18	589-53-7	-252	Test	-251,09	0,91	-251,84	0,16
433	n-OCTANE	C8H18	111-65-9	-250	Apprentissage	-248,11	1,89	-249,61	0,39
434	2,2,3-TRIMETHYLPENTANE	C8H18	564-02-3	-257	Apprentissage	-257,29	-0,29	-256,42	0,58
435	2,2,4-TRIMETHYLPENTANE	C8H18	540-84-1	-259	Apprentissage	-270,45	-11,45	-267,09	-8,09
436	2,3,3-TRIMETHYLPENTANE	C8H18	560-21-4	-254	Apprentissage	-253,77	0,23	-253,61	0,39

437	2,3,4-TRIMETHYLPENTANE	C8H18	565-75-3	-255	Apprentissage	-257,81	-2,81	-257,01	-2,01
438	DI-n-BUTYL ETHER	C8H18O	142-96-1	-378	Apprentissage	-380,00	-2,00	-382,67	-4,67
439	DI-sec-BUTYL ETHER	C8H18O	6863-58-7	-402	Apprentissage	-403,74	-1,74	-401,30	0,70
440	DIISOBUTYL ETHER	C8H18O	628-55-7	-388	Apprentissage	-392,09	-4,09	-393,33	-5,33
441	2-ETHYL-1-HEXANOL	C8H18O	104-76-7	-433	Test	-427,65	5,35	-427,33	5,67
442	ETHYL n-HEXYL ETHER	C8H18O	5756-43-4	-381	Apprentissage	-380,00	1,00	-382,67	-1,67
443	DI-t-BUTYL PEROXIDE	C8H18O2	110-05-4	-381	Apprentissage	-381,00	0,00	-381,02	-0,02
444	2-HEXOXYETHANOL	C8H18O2	112-25-4	-560	Apprentissage	-551,35	8,65	-551,17	8,83
445	2-(2-BUTOXYETHOXY)ETHANOL	C8H18O3	112-34-5	-674	Apprentissage	-683,24	-9,24	-681,70	-7,70
446	DI-n-BUTYL SULFATE	C8H18O4S	625-22-9	-905	Apprentissage	-902,19	2,81	-909,05	-4,05
447	TETRAETHYLENE GLYCOL	C8H18O5	112-60-7	-982	Apprentissage	-986,48	-4,48	-980,70	1,30
448	n-OCTYL MERCAPTAN	C8H18S	111-88-6	-224	Apprentissage	-225,17	-1,17	-225,40	-1,40
449	tert-OCTYL MERCAPTAN	C8H18S	141-59-3	-245	Apprentissage	-251,26	-6,26	-248,72	-3,72
450	DI-n-BUTYLAMINE	C8H19N	111-92-2	-206	Apprentissage	-209,29	-3,29	-207,30	-1,30
451	DIISOBUTYLAMINE	C8H19N	110-96-3	-219	Apprentissage	-221,37	-2,37	-217,89	1,11
452	n-OCTYLAMINE	C8H19N	111-86-4	-226	Apprentissage	-230,66	-4,66	-229,21	-3,21
453	TETRAETHYLENEPENTAMINE	C8H23N5	112-57-2	-102	Apprentissage	-95,42	6,58	-96,37	5,63
454	QUINOLINE	C9H7N	91-22-5	141	Apprentissage	138,21	-2,79	140,98	-0,02
455	alpha-METHYLSTYRENE	C9H10	98-83-9	70,5	Apprentissage	70,50	0,00	70,47	-0,03
456	alpha-METHYLBENZYL ALCOHOL FORMATE	C9H10O2	7775-38-4	-347	Apprentissage	-343,16	3,84	-343,82	3,18
457	5-ETHYLIDENE-2-NORBORNENE	C9H12	16219-75-3	102	Apprentissage	102,00	0,00	101,97	-0,03
458	m-ETHYLTOLUENE	C9H12	620-14-4	-48,7	Apprentissage	-52,09	-3,39	-52,08	-3,38
459	o-ETHYLTOLUENE	C9H12	611-14-3	-46,4	Apprentissage	-45,31	1,09	-45,59	0,81
460	p-ETHYLTOLUENE	C9H12	622-96-8	-49,8	Apprentissage	-50,98	-1,18	-51,17	-1,37
461	MESITYLENE	C9H12	108-67-8	-63,4	Apprentissage	-63,78	-0,38	-63,93	-0,53
462	1,2,3-TRIMETHYLBENZENE	C9H12	526-73-8	-58,5	Apprentissage	-57,56	0,94	-58,15	0,35
463	1,2,4-TRIMETHYLBENZENE	C9H12	95-63-6	-61,8	Apprentissage	-62,20	-0,40	-62,17	-0,37
464	1-PHENYL-1-PROPANOL	C9H12O	93-54-9	-220	Apprentissage	-226,33	-6,33	-226,95	-6,95
465	1-PHENYL-2-PROPANOL	C9H12O	698-87-3	-220	Test	-229,95	-9,95	-227,10	-7,10
466	2-PHENYL-1-PROPANOL	C9H12O	1123-85-9	-223	Apprentissage	-223,89	-0,89	-223,94	-0,94
467	3-PHENYL-1-PROPANOL	C9H12O	122-97-4	-228	Apprentissage	-214,83	13,17	-213,30	14,70
468	CUMENE HYDROPEROXIDE	C9H12O2	80-15-9	-148	Apprentissage	-154,72	-6,72	-148,04	-0,04
469	GLYCERYL TRIACETATE	C9H14O6	102-76-1	-1330	Apprentissage	-1321,76	8,24	-1329,91	0,09
470	1-NONYNE	C9H16	567104	13,6	Apprentissage	14,51	0,91	15,04	1,44

471	n-BUTYLCYCLOPENTANE	C9H18	2040-95-1	-214	Apprentissage	-226,81	-12,81	-221,97	-7,97
472	ISOPROPYLCYCLOHEXANE	C9H18	696-29-7	-239	Apprentissage	-230,70	8,30	-231,97	7,03
473	2-METHYL-1-OCTENE	C9H18	4588-18-5	-165	Apprentissage	-160,87	4,13	-161,63	3,37
474	7-METHYL-1-OCTENE	C9H18	13151-06-9	-155	Apprentissage	-154,22	0,78	-153,35	1,65
475	n-PROPYLCYCLOHEXANE	C9H18	1678-92-8	-237	Test	-223,85	13,15	-224,14	12,86
476	1-trans-3,5-TRIMETHYLCYCLOHEXANE	C9H18	1795-26-2	-251	Apprentissage	-248,10	2,90	-252,24	-1,24
477	DIISOBUTYL KETONE	C9H18O	108-83-8	-409	Apprentissage	-411,37	-2,37	-408,61	0,39
478	2-NONANONE	C9H18O	821-55-6	-397	Apprentissage	-398,90	-1,90	-398,75	-1,75
479	5-NONANONE	C9H18O	502-56-7	-398	Apprentissage	-399,28	-1,28	-397,47	0,53
480	n-BUTYL VALERATE	C9H18O2	591-68-4	-613	Test	-602,50	10,50	-601,00	12,00
481	n-HEPTYL ACETATE	C9H18O2	112-06-1	-603	Test	-603,68	-0,68	-602,49	0,51
482	n-OCTYL FORMATE	C9H18O2	112-32-3	-566	Apprentissage	-570,07	-4,07	-570,40	-4,40
483	DIPROPYLENE GLYCOL MONOMETHYL ETHER ACETATE	C9H18O4	88917-22-0	-879	Apprentissage	-873,53	5,47	-866,95	12,05
484	3,3-DIETHYLPENTANE	C9H20	1067-20-5	-275	Apprentissage	-283,08	-8,08	-281,24	-6,24
485	2,2-DIMETHYL-3-ETHYLPENTANE	C9H20	16747-32-3	-273	Apprentissage	-292,64	-19,64	-289,14	-16,14
486	2,4-DIMETHYL-3-ETHYLPENTANE	C9H20	1068-87-7	-270	Test	-288,43	-18,43	-287,73	-17,73
487	2,2-DIMETHYLHEPTANE	C9H20	1071-26-7	-288	Test	-289,66	-1,66	-286,99	1,01
488	2,6-DIMETHYLHEPTANE	C9H20	1072-05-5	-286	Apprentissage	-285,45	0,55	-285,50	0,50
489	3-ETHYLHEPTANE	C9H20	15869-80-4	-275	Test	-276,34	-1,34	-277,09	-2,09
490	3-METHYLOCTANE	C9H20	2216-33-3	-279	Test	-276,34	2,66	-277,09	1,91
491	4-METHYLOCTANE	C9H20	2216-34-4	-280	Apprentissage	-276,34	3,66	-277,09	2,91
492	n-NONANE	C9H20	111-84-2	-275	Apprentissage	-273,36	1,64	-274,86	0,14
493	2,2,3,3-TETRAMETHYLPENTANE	C9H20	7154-79-2	-278	Apprentissage	-277,87	0,13	-277,85	0,15
494	2,2,3,4-TETRAMETHYLPENTANE	C9H20	1186-53-4	-278	Apprentissage	-285,91	-7,91	-284,46	-6,46
495	2,3,3,4-TETRAMETHYLPENTANE	C9H20	16747-38-9	-278	Apprentissage	-274,97	3,03	-276,60	1,40
496	2,2,5-TRIMETHYLHEXANE	C9H20	3522-94-9	-293	Test	-295,71	-2,71	-292,47	0,53
497	2,4,4-TRIMETHYLHEXANE	C9H20	16747-30-1	-280	Apprentissage	-289,12	-9,12	-286,49	-6,49
498	DIPROPYLENE GLYCOL n-PROPYL ETHER	C9H20O3	29911-27-1	-738	Apprentissage	-733,51	4,49	-731,79	6,21
499	TRIPROPYLENE GLYCOL	C9H20O4	24800-44-0	-921	Apprentissage	-926,89	-5,89	-922,59	-1,59
500	n-NONYL MERCAPTAN	C9H20S	1455-21-6	-249	Apprentissage	-250,42	-1,42	-250,60	-1,60
501	tert-NONYL MERCAPTAN	C9H20S	25360-10-5	-266	Apprentissage	-260,22	5,78	-261,93	4,07
502	n-NONYLAMINE	C9H21N	112-20-9	-250	Apprentissage	-255,91	-5,91	-254,64	-4,64
503	TRIPROPYLAMINE	C9H21N	102-69-2	-207	Apprentissage	-207,58	-0,58	-205,91	1,09
504	1-METHYLINDENE	C10H10	767-59-9	90,3	Apprentissage	93,96	3,66	90,26	-0,04

505	n-BUTYLBENZENE	C10H14	104-51-8	-63,4	Test	-63,53	-0,13	-63,36	0,04
506	sec-BUTYLBENZENE	C10H14	135-98-8	-66,4	Apprentissage	-72,58	-6,18	-73,93	-7,53
507	tert-BUTYLBENZENE	C10H14	98-06-6	-70,7	Apprentissage	-69,60	1,10	-69,20	1,50
508	m-CYMENE	C10H14	535-77-3	-78,6	Apprentissage	-80,11	-1,51	-80,05	-1,45
509	o-CYMENE	C10H14	527-84-4	-73,3	Apprentissage	-73,34	-0,04	-73,34	-0,04
510	p-CYMENE	C10H14	99-87-6	-78	Apprentissage	-79,01	-1,01	-78,78	-0,78
511	m-DIETHYLBENZENE	C10H14	141-93-5	-73,5	Apprentissage	-75,80	-2,30	-76,15	-2,65
512	o-DIETHYLBENZENE	C10H14	135-01-3	-68,5	Apprentissage	-69,03	-0,53	-69,57	-1,07
513	p-DIETHYLBENZENE	C10H14	105-05-5	-72,8	Apprentissage	-74,69	-1,89	-75,08	-2,28
514	2-ETHYL-m-XYLENE	C10H14	354381	-80,1	Apprentissage	-81,27	-1,17	-81,25	-1,15
515	2-ETHYL-p-XYLENE	C10H14	1758-88-9	-84,8	Apprentissage	-85,91	-1,11	-85,27	-0,47
516	3-ETHYL-o-XYLENE	C10H14	933-98-2	-80,5	Apprentissage	-81,27	-0,77	-81,25	-0,75
517	4-ETHYL-m-XYLENE	C10H14	874-41-9	-84,1	Apprentissage	-85,91	-1,81	-85,27	-1,17
518	4-ETHYL-o-XYLENE	C10H14	934-80-5	-86	Apprentissage	-85,91	0,09	-85,27	0,73
519	5-ETHYL-m-XYLENE	C10H14	934-74-7	-87,8	Apprentissage	-87,50	0,30	-87,40	0,40
520	ISOBUTYLBENZENE	C10H14	538-93-2	-69,8	Test	-69,57	0,23	-68,42	1,38
521	1-METHYL-2-n-PROPYLBENZENE	C10H14	1074-17-5	-72,5	Test	-70,57	1,93	-70,65	1,85
522	1-METHYL-3-n-PROPYLBENZENE	C10H14	1074-43-7	-76,2	Apprentissage	-77,34	-1,14	-77,18	-0,98
523	1-METHYL-4-n-PROPYLBENZENE	C10H14	1074-55-1	-75,1	Apprentissage	-76,24	-1,14	-76,24	-1,14
524	1,2,3,5-TETRAMETHYLBENZENE	C10H14	527-53-7	-96,4	Apprentissage	-98,78	-2,38	-98,21	-1,81
525	N,N-DIETHYLANILINE	C10H15N	91-66-7	-19,6	Apprentissage	-19,60	0,00	-19,63	-0,03
526	d-LIMONENE	C10H16	5989-27-5	-54,5	Apprentissage	-54,50	0,00	-54,52	-0,02
527	1-DECYNE	C10H18	764-93-2	-12	Apprentissage	-10,74	1,26	-9,99	2,01
528	n-BUTYLCYCLOHEXANE	C10H20	1678-93-9	-263	Test	-249,11	13,89	-249,86	13,14
529	1,1-DIETHYLCYCLOHEXANE	C10H20	78-01-3	-277	Apprentissage	-271,94	5,06	-276,82	0,18
530	2-METHYL-1-NONENE	C10H20	2980-71-4	-189	Apprentissage	-186,13	2,87	-186,84	2,16
531	8-METHYL-1-NONENE	C10H20	26741-24-2	-180	Apprentissage	-179,47	0,53	-178,56	1,44
532	1,2,3,4-TETRAMETHYLCYCLOHEXANE	C10H20	3726-45-2	-292	Apprentissage	-286,22	5,78	-295,38	-3,38
533	2-ETHYLHEXYL ACETATE	C10H20O2	103-09-3	-628	Test	-631,91	-3,91	-629,36	-1,36
534	ISOPENTYL ISOVALERATE	C10H20O2	659-70-1	-645	Apprentissage	-639,85	5,15	-637,20	7,80
535	n-NONYL FORMATE	C10H20O2	5451-92-3	-589	Apprentissage	-595,33	-6,33	-596,11	-7,11
536	n-OCTYL ACETATE	C10H20O2	112-14-1	-628	Apprentissage	-628,93	-0,93	-627,26	0,74
537	DIETHYLENE GLYCOL MONOBUTYL ETHER ACETATE	C10H20O4	124-17-4	-884	Apprentissage	-892,72	-8,72	-885,69	-1,69
538	n-DECANE	C10H22	124-18-5	-301	Apprentissage	-298,62	2,38	-300,10	0,90

539	2,2-DIMETHYLOCTANE	C10H22	15869-87-1	-313	Apprentissage	-314,92	-1,92	-312,36	0,64
540	2,3-DIMETHYLOCTANE	C10H22	7146-60-3	-310	Apprentissage	-304,96	5,04	-304,89	5,11
541	2,4-DIMETHYLOCTANE	C10H22	4032-94-4	-308	Test	-307,64	0,36	-307,64	0,36
542	2,5-DIMETHYLOCTANE	C10H22	15869-89-3	-308	Apprentissage	-307,64	0,36	-307,64	0,36
543	2,6-DIMETHYLOCTANE	C10H22	2051-30-1	-308	Test	-307,64	0,36	-307,64	0,36
544	2,7-DIMETHYLOCTANE	C10H22	1072-16-8	-311	Apprentissage	-310,71	0,29	-310,76	0,24
545	3-METHYLNONANE	C10H22	1465084	-304	Test	-301,60	2,40	-302,32	1,68
546	4-METHYLNONANE	C10H22	17301-94-9	-304	Test	-301,60	2,40	-302,32	1,68
547	5-METHYLNONANE	C10H22	15869-85-9	-310	Test	-301,60	8,40	-302,32	7,68
548	2,2,3,3-TETRAMETHYLHEXANE	C10H22	13475-81-5	-303	Apprentissage	-303,13	-0,13	-303,18	-0,18
549	2,2,5,5-TETRAMETHYLHEXANE	C10H22	1071-81-4	-324	Test	-331,22	-7,22	-327,78	-3,78
550	3,3,5-TRIMETHYLHEPTANE	C10H22	7154-80-5	-305	Test	-311,31	-6,31	-308,67	-3,67
551	DI-n-PENTYL ETHER	C10H22O	693-65-2	-425	Apprentissage	-430,51	-5,51	-433,00	-8,00
552	ETHYLENE GLYCOL 2-ETHYLHEXYL ETHER	C10H22O2	1559-35-9	-598	Test	-604,84	-6,84	-602,58	-4,58
553	DIPROPYLENE GLYCOL t-BUTYL ETHER	C10H22O3	132739-31-2	-801	Apprentissage	-792,84	8,16	-801,56	-0,56
554	2-(2-HEXOXYETHOXY)ETHANOL	C10H22O3	112-59-4	-743	Apprentissage	-733,75	9,25	-730,24	12,76
555	TRIPROPYLENE GLYCOL MONOMETHYL ETHER	C10H22O4	25498-49-1	-884	Apprentissage	-878,58	5,42	-886,65	-2,65
556	n-DECYL MERCAPTAN	C10H22S	143-10-2	-277	Apprentissage	-275,68	1,32	-275,80	1,20
557	n-DECYLAMINE	C10H23N	2016-57-1	-275	Test	-281,17	-6,17	-280,09	-5,09
558	PENTAETHYLENE HEXAMINE	C10H28N6	4067-16-7	-109	Apprentissage	-107,11	1,89	-113,21	-4,21
559	1-METHYLNAPHTHALENE	C11H10	90-12-0	56,2	Apprentissage	58,73	2,53	54,78	-1,42
560	1-ETHYL-2-ISOPROPYLBENZENE	C11H16	18970-44-0	-99,6	Apprentissage	-97,05	2,55	-97,47	2,13
561	n-PENTYLBENZENE	C11H16	538-68-1	-89,5	Apprentissage	-88,78	0,72	-88,47	1,03
562	2-ETHYLHEXYL ACRYLATE	C11H20O2	103-11-7	-526	Apprentissage	-533,14	-7,14	-535,13	-9,13
563	n-DECYL FORMATE	C11H22O2	5451-52-5	-614	Apprentissage	-620,58	-6,58	-621,84	-7,84
564	METHYL DECANOATE	C11H22O2	110-42-9	-640	Test	-653,02	-13,02	-650,89	-10,89
565	n-NONYL ACETATE	C11H22O2	143-13-5	-654	Test	-654,19	-0,19	-651,97	2,03
566	n-UNDECANE	C11H24	1120-21-4	-327	Apprentissage	-323,87	3,13	-325,33	1,67
567	UNDECYL MERCAPTAN	C11H24S	5332-52-5	-303	Apprentissage	-300,93	2,07	-301,00	2,00
568	UNDECYLAMINE	C11H25N	7307-55-3	-300	Apprentissage	-306,43	-6,43	-305,55	-5,55
569	2-ETHYLNAPHTHALENE	C12H12	939-27-5	33,7	Apprentissage	36,49	2,79	33,67	-0,03
570	DIETHYL PHTHALATE	C12H14O4	84-66-2	-777	Apprentissage	-783,58	-6,58	-777,72	-0,72
571	p-tert-BUTYLSTYRENE	C12H16	1746-23-2	-14,3	Apprentissage	-15,12	-0,82	-15,04	-0,74
572	CYCLOHEXYLBENZENE	C12H16	827-52-1	-76,6	Apprentissage	-76,60	0,00	-76,64	-0,04

573	4-ISOBUTYLSTYRENE	C12H16	63444-56-4	-18	Apprentissage	-15,09	2,91	-13,64	4,36
574	p-tert-BUTYL ETHYLBENZENE	C12H18	7364-19-4	-131	Apprentissage	-131,28	-0,28	-131,82	-0,82
575	1,5,9-CYCLODODECATRIENE	C12H18	706-31-0	46	Test	50,22	4,22	40,25	-5,75
576	n-HEXYLBENZENE	C12H18	1077-16-3	-115	Apprentissage	-114,04	0,96	-113,60	1,40
577	1,2,3-TRIETHYLBENZENE	C12H18	42205-08-3	-130	Apprentissage	-128,70	1,30	-128,37	1,63
578	1,2,4-TRIETHYLBENZENE	C12H18	877-44-1	-134	Apprentissage	-133,33	0,67	-132,40	1,60
579	1,3,5-TRIETHYLBENZENE	C12H18	102-25-0	-135	Apprentissage	-134,92	0,08	-134,95	0,05
580	2-CYCLOHEXYL CYCLOHEXANONE	C12H20O	90-42-6	-391	Apprentissage	-391,00	0,00	-391,03	-0,03
581	n-DECYL ACETATE	C12H24O2	112-17-4	-679	Test	-679,44	-0,44	-676,61	2,39
582	n-DODECANE	C12H26	112-40-3	-352	Apprentissage	-349,13	2,87	-350,55	1,45
583	3-METHYLNUNDECANE	C12H26	1002-43-3	-357	Test	-352,11	4,89	-352,77	4,23
584	DI-n-HEXYL ETHER	C12H26O	112-58-3	-482	Test	-481,02	0,98	-483,21	-1,21
585	n-DODECYL MERCAPTAN	C12H26S	112-55-0	-327	Apprentissage	-326,19	0,81	-326,18	0,82
586	TRI-n-BUTYLAMINE	C12H27N	102-82-9	-282	Apprentissage	-283,34	-1,34	-282,25	-0,25
587	n-HEPTYLBENZENE	C13H20	1078-71-3	-141	Test	-139,29	1,71	-138,77	2,23
588	n-BUTYL NONANOATE	C13H26O2	50623-57-9	-698	Apprentissage	-703,53	-5,53	-700,60	-2,60
589	METHYL DODECANOATE	C13H26O2	111-82-0	-692	Test	-703,53	-11,53	-700,60	-8,60
590	n-TRIDECANE	C13H28	629-50-5	-378	Test	-374,39	3,61	-375,75	2,25
591	cis-STILBENE	C14H12	645-49-8	184	Apprentissage	184,00	0,00	183,97	-0,03
592	BENZYL BENZOATE	C14H12O2	120-51-4	-273	Apprentissage	-273,00	0,00	-273,02	-0,02
593	1,1-DIPHENYLETHANE	C14H14	612-00-0	48,7	Apprentissage	48,70	0,00	48,68	-0,02
594	DIBENZYL ETHER	C14H14O	103-50-4	-56,8	Apprentissage	-56,80	0,00	-56,83	-0,03
595	1-n-BUTYLNAPHTHALENE	C14H16	1634-09-9	-18,5	Apprentissage	-15,49	3,01	-15,80	2,70
596	n-OCTYLBENZENE	C14H22	2189-60-8	-166	Apprentissage	-164,55	1,45	-163,96	2,04
597	1,2,3,5-TETRAETHYLBENZENE	C14H22	38842-05-6	-196	Apprentissage	-193,62	2,38	-194,23	1,77
598	n-TETRADECANE	C14H30	629-59-4	-403	Apprentissage	-399,64	3,36	-400,93	2,07
599	1-n-PENTYLNAPHTHALENE	C15H18	86-89-5	-40,6	Apprentissage	-40,74	-0,14	-40,32	0,28
600	n-NONYLBENZENE	C15H24	1081-77-2	-190	Test	-189,80	0,20	-189,16	0,84
601	1-PENTADECENE	C15H30	13360-61-7	-301	Apprentissage	-299,71	1,29	-299,39	1,61
602	n-PENTADECANE	C15H32	629-62-9	-429	Apprentissage	-424,90	4,10	-426,08	2,92
603	1-n-HEXYLNAPHTHALENE	C16H20	2876-53-1	-66,6	Apprentissage	-66,00	0,60	-64,93	1,67
604	DIISOBUTYL PHTHALATE	C16H22O4	84-69-5	-890	Apprentissage	-896,69	-6,69	-894,65	-4,65
605	1-n-HEXYL-1,2,3,4-TETRAHYDRONAPHTHALENE	C16H24	66325-11-9	-179	Apprentissage	-186,08	-7,08	-174,89	4,11
606	n-DECYLBENZENE	C16H26	104-72-3	-218	Apprentissage	-215,06	2,94	-214,37	3,63

607	PENTAETHYLBENZENE	C16H26	605-01-6	-258	Apprentissage	-258,00	0,00	-258,02	-0,02
608	n-DECYLCYCLOHEXANE	C16H32	1795-16-0	-417	Test	-400,64	16,36	-406,42	10,58
609	1-HEXADECENE	C16H32	629-73-2	-329	Apprentissage	-324,96	4,04	-324,60	4,40
610	2,2,4,4,6,8,8-HEPTAMETHYLNONANE	C16H34	909554	-477	Test	-495,44	-18,44	-487,81	-10,81
611	n-HEXADECANE	C16H34	544-76-3	-456	Test	-450,15	5,85	-451,21	4,79
612	DI-n-OCTYL ETHER	C16H34O	629-82-3	-583	Apprentissage	-582,04	0,96	-583,17	-0,17
613	n-UNDECYLBENZENE	C17H28	6742-54-7	-241	Test	-240,31	0,69	-239,59	1,41
614	1-HEPTADECENE	C17H34	6765-39-5	-350	Test	-350,22	-0,22	-349,78	0,22
615	ISOPROPYL MYRISTATE	C17H34O2	110-27-0	-820	Test	-810,59	9,41	-805,36	14,64
616	n-HEPTADECANE	C17H36	629-78-7	-480	Apprentissage	-475,41	4,59	-476,29	3,71
617	n-DODECYLBENZENE	C18H30	123-01-3	-265	Apprentissage	-265,57	-0,57	-264,81	0,19
618	LINOLENIC ACID	C18H30O2	463-40-1	-526	Apprentissage	-533,47	-7,47	-532,75	-6,75
619	DIBUTYL SEBACATE	C18H34O4	109-43-3	-1160	Test	-1158,95	1,05	-1163,14	-3,14
620	DIHEXYL ADIPATE	C18H34O4	110-33-8	-1160	Test	-1158,95	1,05	-1163,14	-3,14
621	1-OCTADECENE	C18H36	112-88-9	-375	Apprentissage	-375,47	-0,47	-374,94	0,06
622	n-TRIDECYLBENZENE	C19H32	123-02-4	-289	Test	-290,83	-1,83	-290,03	-1,03
623	METHYL OLEATE	C19H36O2	112-62-9	-735	Test	-737,66	-2,66	-729,18	5,82
624	1-NONADECENE	C19H38	18435-45-5	-400	Test	-400,73	-0,73	-400,08	-0,08
625	DI-n-HEXYL PHTHALATE	C20H30O4	84-75-3	-988	Apprentissage	-985,63	2,37	-982,38	5,62
626	n-TETRADECYLBENZENE	C20H34	1459-10-5	-311	Apprentissage	-316,08	-5,08	-315,24	-4,24
627	n-PENTADECYLBENZENE	C21H36	2131-18-2	-335	Test	-341,34	-6,34	-340,44	-5,44
628	DI-n-HEPTYL PHTHALATE	C22H34O4	3648-21-3	-1040	Apprentissage	-1036,14	3,86	-1034,35	5,65
629	DI(2-ETHYLHEXYL)ADIPATE	C22H42O4	103-23-1	-1270	Apprentissage	-1265,93	4,07	-1266,03	3,97
630	DIOCTYL ADIPATE	C22H42O4	123-79-5	-1270	Test	-1259,97	10,03	-1270,95	-0,95
631	DIOCTYL PHTHALATE	C24H38O4	117-81-7	-1080	Apprentissage	-1092,61	-12,61	-1085,36	-5,36
632	TRI-n-OCTYLAMINE	C24H51N	1116-76-3	-585	Apprentissage	-586,41	-1,41	-588,30	-3,30
633	DI-n-NONYL PHTHALATE	C26H42O4	84-76-4	-1130	Apprentissage	-1137,16	-7,16	-1140,15	-10,15
634	DI-n-DECYL PHTHALATE	C28H46O4	84-77-5	-1200	Apprentissage	-1187,67	12,33	-1194,35	5,65
635	DI-n-UNDECYL PHTHALATE	C30H50O4	3648-20-2	-1250	Apprentissage	-1238,18	11,82	-1249,70	0,30
636	SQUALANE	C30H62	111-01-3	-806	Test	-827,73	-21,73	-816,15	-10,15
637	TRIOLEIN	C57H104O6	122-32-7	-2170	Apprentissage	-2169,81	0,19	-2169,97	0,03
638	DI-2-ETHYLHEXYLAMINE	C16H35N	106-20-7	-416	Apprentissage	-417,29	-1,29	-413,53	2,47
639	4-FORMYLMORPHOLINE	C5H9NO2	4394-85-8	-367	Apprentissage	-367,00	0,00	-367,00	0,00
640	DIPROPYLENE GLYCOL MONOETHYL ETHER	C8H18O3	30025-38-8	-722	Apprentissage	-708,25	13,75	-707,03	14,97

641	DI-n-OCTYLAMINE	C16H35N	1120-48-5	-407	Apprentissage	-411,33	-4,33	-409,17	-2,17
642	2-METHYLOCTANOIC ACID	C9H18O2	3004-93-1	-662	Apprentissage	-655,76	6,24	-659,01	2,99
643	1,2-BENZENE DICARBOXYLIC ACID, HEPTYL, UNDECYL ESTER	C26H42O4	65185-88-8	-1140	Apprentissage	-1137,16	2,84	-1140,15	-0,15
644	1,2-BENZENEDICARBOXYLIC ACID, HEPTYL, NONYL ESTER	C24H38O4	19295-81-9	-1090	Apprentissage	-1086,65	3,35	-1086,88	3,12
645	ALLYL GLYCIDYL ETHER	C6H10O2	106-92-3	-185	Apprentissage	-198,80	-13,80	-197,74	-12,74
646	3-METHYL-1,4-PENTADIENE	C6H10	1115-08-8	51	Apprentissage	52,11	1,11	48,20	-2,80
647	DICYCLOHEXYL SULFIDE	C12H22S	7133-46-2	-242	Apprentissage	-242,00	0,00	-242,04	-0,04
648	2-METHYLHEXANOIC ACID	C7H14O2	4536-23-6	-614	Apprentissage	-605,24	8,76	-609,90	4,10
649	1-METHYL-3-(METHYLETHOXY)BENZENE	C10H14O	19177-04-9	-222	Apprentissage	-219,15	2,85	-219,16	2,84
650	2-METHYL-2-AMINOBUTANE	C5H13N	594-39-8	-171	Apprentissage	-170,34	0,66	-172,18	-1,18
651	2,6,8-TRIMETHYL-4-NONANONE	C12H24O	123-18-2	-491	Test	-490,11	0,89	-486,76	4,24
652	DIMETHYL SUCCINATE	C6H10O4	106-65-0	-845	Apprentissage	-853,74	-8,74	-845,18	-0,18
653	1,2-EPOXY-3-PHENOXYPROPANE	C9H10O2	122-60-1	-170	Apprentissage	-168,54	1,46	-166,90	3,10
654	1-ETHOXY-2-PROPANOL	C5H12O2	1569-02-4	-493	Apprentissage	-497,61	-4,61	-498,12	-5,12
655	trans-2-METHYL-1,3-PENTADIENE	C6H10	926-54-5	10,3	Apprentissage	11,67	1,37	13,47	3,17
656	1,2,3-TRIMETHYL-4-ETHYLBENZENE	C11H16	61827-86-9	-167	Apprentissage	-166,00	1,00	-166,02	0,98
657	1,2,4-TRIMETHYL-3-ETHYLBENZENE	C11H16	61827-87-0	-165	Apprentissage	-166,00	-1,00	-166,02	-1,02
658	1,2,4-TRIMETHYL-5-ETHYLBENZENE	C11H16	17851-27-3	-169	Apprentissage	-169,00	0,00	-169,02	-0,02
659	1,1,2,2,3-PENTAFLUOROPROPANE	C3H3F5	679-86-7	-591	Apprentissage	-591,00	0,00	-591,01	-0,01
660	PENTAETHYLENE GLYCOL DIMETHYL ETHER	C12H26O6	1191-87-3	-1120	Apprentissage	-1123,68	-3,68	-1119,39	0,61
661	1-tert-BUTOXY-2-[2-(HYDROXY)PROPOXY]PROPANE	C10H22O3	58797-58-3	-775	Apprentissage	-775,06	-0,06	-780,56	-5,56
662	m-ETHYLSTYRENE	C10H12	7525-62-4	42,4	Apprentissage	40,36	-2,04	40,09	-2,31
663	p-ETHYLSTYRENE	C10H12	567776	43,6	Apprentissage	41,47	-2,13	41,23	-2,37
664	o-ETHYLSTYRENE	C10H12	7564-63-8	45,2	Apprentissage	47,13	1,93	46,63	1,43
665	3-METHYLBUTYRALDEHYDE	C5H10O	590-86-3	-277	Apprentissage	-271,99	5,01	-272,22	4,78
666	2-METHYL-1,3-PENTANEDIOL	C6H14O2	149-31-5	-578	Apprentissage	-568,81	9,19	-565,73	12,27
667	PERFLUOROMETHYLCYCLOPENTANE	C6F12	1805-22-7	-2530	Apprentissage	-2530,00	0,00	-2529,95	0,05
668	trans-1,3-HEXADIENE	C6H10	20237-34-7	23,8	Apprentissage	27,14	3,34	26,76	2,96
669	METHYL GLYCOLATE	C3H6O3	96-35-5	-609	Apprentissage	-608,79	0,21	-609,94	-0,94
670	CYCLOPROPYL CYANIDE	C4H5N	5500-21-0	141	Apprentissage	141,00	0,00	140,97	-0,03
671	trans-1,4-DIETHYLCYCLOHEXANE	C10H20	13990-93-7	-266	Apprentissage	-263,43	2,57	-276,38	-10,38
672	3-OCTANONE	C8H16O	106-68-3	-372	Test	-374,02	-2,02	-372,12	-0,12
673	4-OCTANONE	C8H16O	589-63-9	-373	Test	-374,02	-1,02	-372,12	0,88
674	3-ETHYL-1-HEPTANOL	C9H20O	3525-25-5	-441	Test	-452,90	-11,90	-452,46	-11,46

675	3-NONANONE	C9H18O	925-78-0	-397	Test	-399,28	-2,28	-397,47	-0,47
676	4-NONANONE	C9H18O	4485-09-0	-398	Test	-399,28	-1,28	-397,47	0,53
677	1-METHYLVINYL ACETATE	C5H8O2	108-22-5	-390	Test	-396,09	-6,09	-396,21	-6,21
678	METHYL ISOPROPYL SULFIDE	C4H10S	1551-21-9	-124	Apprentissage	-128,34	-4,34	-128,28	-4,28
679	DIMETHYLMALONATE	C5H8O4	108-59-8	-785	Apprentissage	-801,55	-16,55	-796,94	-11,94
680	1,3-DIMETHYLADAMANTANE	C12H20	702-79-4	-263	Apprentissage	-263,00	0,00	-263,06	-0,06
681	cis-2-PENTENE	C5H10	627-20-3	-53,5	Apprentissage	-57,72	-4,22	-55,78	-2,28
682	trans-2-PENTENE	C5H10	646-04-8	-58	Apprentissage	-57,72	0,28	-55,78	2,22
683	cis-2-HEXENE	C6H12	7688-21-3	-80,1	Test	-82,98	-2,88	-80,84	-0,74
684	trans-2-HEXENE	C6H12	4050-45-7	-85,5	Apprentissage	-82,98	2,52	-80,84	4,66
685	cis-2-HEPTENE	C7H14	6443-92-1	-105	Apprentissage	-108,23	-3,23	-105,94	-0,94
686	trans-2-HEPTENE	C7H14	14686-13-6	-110	Test	-108,23	1,77	-105,94	4,06
687	cis-2-OCTENE	C8H16	2097322	-129	Apprentissage	-133,49	-4,49	-131,06	-2,06
688	trans-2-OCTENE	C8H16	13389-42-9	-135	Apprentissage	-133,49	1,51	-131,06	3,94
689	cis-2-DECENE	C10H20	20348-51-0	-183	Test	-184,00	-1,00	-181,38	1,62
690	trans-2-DECENE	C10H20	20063-97-2	-187	Test	-184,00	3,00	-181,38	5,62
691	cis-2-DODECENE	C12H24	7206-26-0	-234	Test	-234,51	-0,51	-231,75	2,25
692	trans-2-DODECENE	C12H24	7206-13-5	-239	Test	-234,51	4,49	-231,75	7,25
693	trans-2-PENTADECENE	C15H30	74392-36-2	-320	Test	-310,28	9,72	-307,32	12,68
694	2-PENTANETHIOL	C5H12S	2084-19-7	-152	Apprentissage	-153,90	-1,90	-153,89	-1,89
695	4-METHYL-1-OCTANOL	C9H20O	38514-03-3	-463	Apprentissage	-452,90	10,10	-452,46	10,54
696	6-METHYL-1-OCTANOL	C9H20O	38514-05-5	-464	Test	-452,90	11,10	-452,46	11,54
697	n-HEPTANE	C7H16	142-82-5	-224	Apprentissage	-222,85	1,15	-224,37	-0,37
698	ACRYLOXY PROPIONIC ACID	C6H8O4	24615-84-7	-787	Apprentissage	-788,88	-1,88	-785,79	1,21
699	1,2-DIMETHOXYPROPANE	C5H12O2	7778-85-0	-422	Test	-422,30	-0,30	-419,33	2,67
700	sec-BUTYL-tert-BUTYL ETHER	C8H18O	32970-45-9	-418	Apprentissage	-417,06	0,94	-412,89	5,11
701	ISOBUTYL-tert-BUTYL ETHER	C8H18O	33021-02-2	-407	Test	-402,34	4,66	-401,32	5,68
702	ETHYL ISOAMYL KETONE	C8H16O	624-42-0	-374	Test	-380,07	-6,07	-377,61	-3,61
703	tert-BUTYL METHACRYLATE	C8H14O2	585-07-9	-498	Apprentissage	-483,39	14,61	-483,03	14,97
704	2-METHYLBUTYRALDEHYDE	C5H10O	96-17-3	-272	Apprentissage	-270,32	1,68	-269,50	2,50
705	1,6-HEXAMETHYLENE DIISOCYANATE	C8H12N2O2	822-06-0	-327	Apprentissage	-327,00	0,00	-327,02	-0,02
706	2-METHYL OCTANAL	C9H18O	7786-29-0	-370	Apprentissage	-371,34	-1,34	-372,29	-2,29
707	ETHYL PROPYL DISULFIDE	C5H12S2	30453-31-7	-146	Apprentissage	-135,20	10,80	-135,42	10,58
708	ETHYL METHYL DISULFIDE	C3H8S2	20333-39-5	-91,3	Apprentissage	-78,47	12,83	-78,27	13,03

709	1,9-DECADIENE	C10H18	1647-16-1	-49	Apprentissage	-48,24	0,76	-47,05	1,95
710	DIISOPENTYLSULFIDE	C10H22S	544-02-5	-282	Apprentissage	-292,14	-10,14	-291,20	-9,20
711	CROTYL GLYCOL ETHER	C6H12O2	52458-04-5	-387	Test	-386,22	0,78	-389,11	-2,11
712	DI-n-BUTYL SULFIDE	C8H18S	544-40-1	-221	Apprentissage	-229,54	-8,54	-230,20	-9,20
713	N,N-DIETHYLMETHYLAMINE	C5H13N	616-39-7	-103	Apprentissage	-102,57	0,43	-101,31	1,69
714	METHYL PHENYL SULFIDE	C7H8S	100-68-5	43,3	Apprentissage	43,30	0,00	43,27	-0,03
715	ETHYL HYDROPEROXIDE	C2H6O2	3031-74-1	-244	Apprentissage	-226,33	17,67	-230,79	13,21
716	ISOBUTYRIC ANHYDRIDE	C8H14O3	97-72-3	-712	Apprentissage	-714,11	-2,11	-711,94	0,06
717	4-[(TETRAHYDRO-2-FURANYL)OXY]-1-BUTANOL	C8H16O3	64001-06-5	-669	Apprentissage	-662,52	6,48	-670,37	-1,37
718	PROPYLENE GLYCOL n-BUTYL ETHER	C7H16O2	5131-66-8	-539	Apprentissage	-548,12	-9,12	-548,29	-9,29
719	DIPROPYLENE GLYCOL n-BUTYL ETHER	C10H22O3	29911-28-2	-760	Apprentissage	-758,76	1,24	-756,51	3,49
720	TRIETHYLENE GLYCOL BIS(2-ETHYLHEXANOATE)	C22H42O6	94-28-0	-1540	Apprentissage	-1535,60	4,40	-1540,09	-0,09
721	2-METHYL-1-UNDECANOL	C12H26O	10522-26-6	-515	Apprentissage	-528,67	-13,67	-527,61	-12,61
722	2-METHYL-DODECAN-1-OL	C13H28O	22663-61-2	-553	Test	-553,92	-0,92	-552,57	0,43
723	2-METHYL-1-TRIDECANOL	C14H30O	32480-16-3	-567	Test	-579,18	-12,18	-577,48	-10,48
724	2-BUTYL-OCTAN-1-OL	C12H26O	735273	-512	Apprentissage	-528,67	-16,67	-527,61	-15,61
725	2-BUTYL-NONAN-1-OL	C13H28O	51655-57-3	-540	Apprentissage	-553,92	-13,92	-552,57	-12,57
726	2-BUTYL-1-DECANOL	C14H30O	21078-81-9	-568	Apprentissage	-579,18	-11,18	-577,48	-9,48
727	1-DODECANOL	C12H26O	112-53-8	-531	Test	-525,69	5,31	-525,47	5,53
728	1-UNDECANOL	C11H24O	112-42-5	-505	Apprentissage	-500,43	4,57	-500,45	4,55
729	1-DECANOL	C10H22O	112-30-1	-480	Test	-475,18	4,82	-475,38	4,62
730	1-NONANOL	C9H20O	143-08-8	-454	Test	-449,92	4,08	-450,28	3,72
731	1-OCTANOL	C8H18O	111-87-5	-429	Apprentissage	-424,67	4,33	-425,15	3,85
732	1-PENTANOL	C5H12O	71-41-0	-352	Apprentissage	-348,90	3,10	-349,58	2,42
733	1-BUTANOL	C4H10O	71-36-3	-326	Apprentissage	-323,65	2,35	-324,36	1,64
734	1-PROPANOL	C3H8O	71-23-8	-301	Apprentissage	-298,39	2,61	-299,11	1,89
735	8-METHYL-1-NONANOL	C10H22O	55505-26-5	-491	Test	-481,22	9,78	-480,75	10,25
736	1-HEPTANOL	C7H16O	111-70-6	-403	Test	-399,41	3,59	-399,98	3,02
737	1,3,5,7-CYCLOOCTATETRAENE	C8H8	629-20-9	255	Apprentissage	245,31	-9,69	236,26	-18,74
738	2-ETHYL-1-BUTANOL	C6H14O	97-95-0	-380	Apprentissage	-377,14	2,86	-377,00	3,00
739	2-(2-PENTOXYETHOXY)ETHANOL	C9H20O3	18912-81-7	-726	Apprentissage	-708,50	17,50	-706,01	19,99
740	3-PENTANOL	C5H12O	584-02-1	-370	Test	-364,02	5,98	-363,54	6,46
741	2-PENTOXYETHANOL	C7H16O2	6196-58-3	-528	Apprentissage	-526,09	1,91	-526,40	1,60
742	3-ETHYL HEPTANAL	C9H18O	2570-97-0	-370	Apprentissage	-369,94	0,06	-370,06	-0,06

743	BENZYL ALCOHOL	C7H8O	100-51-6	-158	Apprentissage	-166,76	-8,76	-166,23	-8,23
744	2-ETHYL-TETRAHYDROTHIOPHENE	C6H12S	1551-32-2	-126	Apprentissage	-131,02	-5,02	-129,52	-3,52
745	MONOBUTYL SULFATE	C4H10O4S	15507-13-8	-861	Apprentissage	-861,00	0,00	-861,00	0,00
746	2-METHYL-1-BUTANOL	C5H12O	137-32-6	-357	Test	-351,88	5,12	-351,80	5,20
747	3-METHYL-1-BUTANOL	C5H12O	123-51-3	-356	Apprentissage	-354,95	1,05	-354,93	1,07
748	3-HEXANOL	C6H14O	623-37-0	-391	Test	-389,28	1,72	-388,76	2,24
749	3-HEPTANOL	C7H16O	589-82-2	-415	Test	-414,53	0,47	-413,96	1,04
750	ETHYL PROPYL SULFIDE	C5H12S	4110-50-3	-140	Apprentissage	-153,77	-13,77	-154,56	-14,56
751	METHYL PENTYL SULFIDE	C6H14S	1741-83-9	-167	Apprentissage	-172,80	-5,80	-173,53	-6,53
752	2-METHYL-2-BUTANOL	C5H12O	75-85-4	-379	Apprentissage	-381,60	-2,60	-379,35	-0,35
753	3-METHYL-2-BUTANOL	C5H12O	598-75-4	-366	Apprentissage	-367,38	-1,38	-366,09	-0,09
754	1,3,5-TRIIISOPROPYLBENZENE	C15H24	717-74-8	-219	Apprentissage	-219,00	0,00	-218,99	0,01
755	PERFLUORO-n-PENTANE	C5F12	678-26-2	-2600	Apprentissage	-2586,96	13,04	-2605,90	-5,90
756	PERFLUORO-n-HEXANE	C6F14	355-42-0	-3030	Apprentissage	-3010,81	19,19	-3016,08	13,92
757	PERFLUORO-n-HEPTANE	C7F16	335-57-9	-3420	Apprentissage	-3434,66	-14,66	-3430,65	-10,65
758	PERFLUORO-n-OCTANE	C8F18	307-34-6	-3860	Apprentissage	-3858,50	1,50	-3857,26	2,74
759	PERFLUORO-n-NONANE	C9F20	375-96-2	-4280	Apprentissage	-4282,35	-2,35	-4279,56	0,44
760	t-BUTYL ACETOACETATE	C8H14O3	1694-31-1	-726	Apprentissage	-716,67	9,33	-716,99	9,01
761	ETHYL TRIMETHYL ACETATE	C7H14O2	3938-95-2	-567	Apprentissage	-567,00	0,00	-567,01	-0,01
762	ISOPROPANOL	C3H8O	67-63-0	-317	Test	-316,57	0,43	-316,22	0,78
763	2-BUTANOL	C4H10O	78-92-2	-342	Test	-338,76	3,24	-338,31	3,69
764	2-PENTANOL	C5H12O	6032-29-7	-367	Apprentissage	-364,02	2,98	-363,54	3,46
765	2-HEXANOL	C6H14O	626-93-7	-391	Test	-389,28	1,72	-388,76	2,24
766	2-HEPTANOL	C7H16O	543-49-7	-419	Test	-414,53	4,47	-413,96	5,04
767	2-OCTANOL	C8H18O	123-96-6	-441	Test	-439,79	1,21	-439,13	1,87
768	2-NONANOL	C9H20O	628-99-9	-466	Apprentissage	-465,04	0,96	-464,26	1,74
769	2-ACETOACETOXY ETHYL METHACRYLATE	C10H14O5	21282-97-3	-976	Apprentissage	-992,85	-16,85	-976,11	-0,11
770	ACETOMETHOXANE	C8H14O4	828-00-2	-874	Apprentissage	-873,38	0,62	-867,66	6,34
771	PROPANESULFONYL CHLORIDE	C3H7ClO2S	10147-36-1	-962	Apprentissage	-962,00	0,00	-962,00	0,00
772	alpha-TOCOPHEROL	C29H50O2	59-02-9	-873	Apprentissage	-873,00	0,00	-873,02	-0,02
773	ETHYL n-OCTYL SULFIDE	C10H22S	3698-94-0	-270	Apprentissage	-280,05	-10,05	-280,63	-10,63
774	1-CHLORO-2-PROPANOL	C3H7ClO	127-00-4	-348	Apprentissage	-351,51	-3,51	-349,23	-1,23
775	3-CHLORO-o-XYLENE	C8H9Cl	608-23-1	-59	Apprentissage	-59,30	-0,30	-59,16	-0,16
776	4-CHLORO-o-XYLENE	C8H9Cl	615-60-1	-62	Apprentissage	-63,93	-1,93	-63,39	-1,39

777	1-n-NONYLNAPHTHALENE	C19H26	26438-26-6	-138	Apprentissage	-141,77	-3,77	-139,22	-1,22
778	1-n-DECYLNAPHTHALENE	C20H28	26438-27-7	-162	Apprentissage	-167,02	-5,02	-164,10	-2,10
779	2-METHYL THIAINDAN	C9H10S	6165-55-5	44,2	Apprentissage	47,86	3,66	44,16	-0,04
780	ACETYLACETONE	C5H8O2	123-54-6	-424	Apprentissage	-423,41	0,59	-424,96	-0,96
781	2-CYCLOHEXENE-1-ONE	C6H8O	930-68-7	-171	Apprentissage	-162,59	8,41	-162,90	8,10
782	DIAMYL KETONE	C11H22O	927-49-1	-447	Test	-449,79	-2,79	-448,16	-1,16
783	5-HEXEN-2-ONE	C6H10O	109-49-9	-197	Apprentissage	-197,94	-0,94	-195,06	1,94
784	2-METHYLTHIACYCLOPENTANE	C5H10S	1795-09-1	-105	Apprentissage	-104,30	0,70	-105,47	-0,47
785	TRIETHYLENE GLYCOL n-HEXYL ETHER	C12H26O4	25961-89-1	-900	Test	-916,15	-16,15	-905,26	-5,26
786	TRIETHYLENE GLYCOL n-PROPYL ETHER	C9H20O4	23305-64-8	-842	Test	-840,39	1,61	-834,39	7,61
787	alpha-METHYLBENZYL ALCOHOL	C8H10O	98-85-1	-214	Apprentissage	-201,08	12,92	-201,80	12,20
788	METHYL tert-BUTYL ETHER	C5H12O	1634-04-4	-314	Test	-312,13	1,87	-307,97	6,03
789	n-CROTYL ACETATE	C6H10O2	628-08-0	-410	Apprentissage	-413,29	-3,29	-409,51	0,49
790	sec-BUTENYL ACETATE	C6H10O2	1766990	-409	Apprentissage	-413,06	-4,06	-413,87	-4,87
791	tert-BUTYL ETHYL ETHER	C6H14O	637-92-3	-347	Apprentissage	-345,79	1,21	-344,92	2,08
792	BIS(alpha-METHYLBENZYL) ETHER	C16H18O	93-96-9	-119	Apprentissage	-117,54	1,46	-119,57	-0,57
793	2-HYDROXYPROPYL ACRYLATE	C6H10O3	999-61-1	-583	Apprentissage	-586,46	-3,46	-585,46	-2,46
794	BENZONITRILE	C7H5N	100-47-0	163	Apprentissage	163,00	0,00	162,97	-0,03
795	TRIETHYLENE GLYCOL n-BUTYL ETHER	C10H22O4	143-22-6	-861	Test	-865,64	-4,64	-858,09	2,91
796	n-PROPYLBENZENE HYDROPEROXIDE	C9H12O2	60956-33-4	-165	Apprentissage	-168,02	-3,02	-170,36	-5,36
797	n-BUTYLBENZENE HYDROPEROXIDE	C10H14O2	99172-63-1	-191	Apprentissage	-193,28	-2,28	-195,57	-4,57
798	N-ETHYLMORPHOLINE	C6H13NO	100-74-3	-226	Apprentissage	-222,48	3,52	-223,23	2,77
799	ALLYL ACRYLATE	C6H8O2	999-55-3	-279	Apprentissage	-278,69	0,31	-281,64	-2,64
800	2,4-DIMETHYLANILINE	C8H11N	95-68-1	-39,2	Apprentissage	-40,96	-1,76	-39,21	-0,01
801	2-METHYLNONANE	C10H22	871-83-0	-312	Apprentissage	-304,66	7,34	-305,42	6,58
802	2-ETHYLBENZOTHIOPHENE	C10H10S	1196-81-2	104	Apprentissage	113,56	9,56	113,96	9,96
803	2,3-DIMETHYLBENZOTHIOPHENE	C10H10S	4923-91-5	93	Apprentissage	93,00	0,00	92,97	-0,03
804	PROPYL CHLORIDE	C3H7Cl	540-54-5	-162	Apprentissage	-159,83	2,17	-159,51	2,49
805	n-BUTYL CHLORIDE	C4H9Cl	109-69-3	-189	Test	-185,08	3,92	-184,74	4,26
806	1-CHLOROPENTANE	C5H11Cl	543-59-9	-215	Apprentissage	-210,34	4,66	-209,98	5,02
807	METHYL ACETOACETATE	C5H8O3	105-45-3	-642	Apprentissage	-624,61	17,39	-633,16	8,84
808	BIS-(2-AMINOETHYL)ETHER	C4H12N2O	2752-17-2	-252	Apprentissage	-244,08	7,92	-250,55	1,45
809	trans-CROTONALDEHYDE	C4H6O	123-73-9	-140	Apprentissage	-139,10	0,90	-140,17	-0,17
810	PHENYL ACETATE	C8H8O2	122-79-2	-353	Apprentissage	-353,00	0,00	-353,02	-0,02

811	ETHYL n-PENTYL SULFIDE	C7H16S	26158-99-6	-196	Apprentissage	-204,28	-8,28	-204,98	-8,98
812	METHYL-3-MERCAPTOPROPIONATE	C4H8O2S	2935-90-2	-445	Apprentissage	-453,29	-8,29	-450,32	-5,32
813	PERFLUOROBUTANOIC ACID	C4HF7O2	375-22-4	-1920	Apprentissage	-1933,11	-13,11	-1919,95	0,05
814	2-METHYLHEPTANAL	C8H16O	16630-91-4	-344	Apprentissage	-346,09	-2,09	-346,55	-2,55
815	2-METHYL-1,3-DIOXOLANE	C4H8O2	497-26-7	-387	Test	-393,12	-6,12	-386,57	0,43
816	p-TOLUALDEHYDE	C8H8O	104-87-0	-126	Apprentissage	-120,47	5,53	-121,03	4,97
817	ETHYL ISOBUTYL ETHER	C6H14O	627-02-1	-334	Apprentissage	-335,53	-1,53	-337,53	-3,53
818	1,5-PENTANEDIAMINE	C5H14N2	462-94-2	-140	Apprentissage	-138,61	1,39	-139,05	0,95
819	ACETIC ANHYDRIDE	C4H6O3	108-24-7	-624	Apprentissage	-630,24	-6,24	-631,94	-7,94
820	1-PENTENE	C5H10	109-67-1	-47	Test	-47,15	-0,15	-47,45	-0,45
821	1-HEXENE	C6H12	592-41-6	-72,2	Test	-72,41	-0,21	-72,57	-0,37
822	1-HEPTENE	C7H14	592-76-7	-98,4	Apprentissage	-97,66	0,74	-97,72	0,68
823	1-OCTENE	C8H16	111-66-0	-122	Test	-122,92	-0,92	-122,89	-0,89
824	1-NONENE	C9H18	124-11-8	-149	Apprentissage	-148,17	0,83	-148,08	0,92
825	1-DECENE	C10H20	872-05-9	-172	Apprentissage	-173,43	-1,43	-173,29	-1,29
826	1-UNDECENE	C11H22	821-95-4	-201	Test	-198,69	2,31	-198,51	2,49
827	1-TRIDECENE	C13H26	2437-56-1	-254	Apprentissage	-249,20	4,80	-248,96	5,04
828	1-TETRADECENE	C14H28	1120-36-1	-280	Apprentissage	-274,45	5,55	-274,18	5,82
829	1-DODECENE	C12H24	112-41-4	-226	Apprentissage	-223,94	2,06	-223,73	2,27
830	2-ETHYL HEXANOIC ACID	C8H16O2	149-57-5	-635	Apprentissage	-630,50	4,50	-634,49	0,51
831	ETHYL IODIDE	C2H5I	75-03-6	-40,4	Apprentissage	-40,42	-0,02	-40,88	-0,48
832	n-PROPYL IODIDE	C3H7I	107-08-4	-66,7	Apprentissage	-65,68	1,02	-65,96	0,74
833	n-BUTYL IODIDE	C4H9I	542-69-8	-89,3	Apprentissage	-90,93	-1,63	-91,08	-1,78
834	n-HEXYL IODIDE	C6H13I	638-45-9	-139	Apprentissage	-141,44	-2,44	-141,42	-2,42
835	2-METHYLOCTANE	C9H20	3221-61-2	-281	Test	-279,41	1,59	-280,17	0,83
836	sec-BUTENYL GLYCOL ETHER	C6H12O2	100524-60-5	-385	Apprentissage	-377,47	7,53	-382,20	2,80
837	TETRAETHYLENE GLYCOL MONOBUTYL ETHER	C12H26O5	1559-34-8	-1030	Test	-1048,05	-18,05	-1030,10	-0,10
838	CYCLOPROPANE CARBOXYLIC ACID	C4H6O2	1759-53-1	-397	Apprentissage	-397,00	0,00	-397,01	-0,01
839	BROMOETHANE	C2H5Br	74-96-4	-91	Apprentissage	-85,91	5,09	-87,63	3,37
840	1-BROMOPROPANE	C3H7Br	106-94-5	-119	Apprentissage	-111,16	7,84	-112,80	6,20
841	1-BROMOBUTANE	C4H9Br	109-65-9	-148	Apprentissage	-136,42	11,58	-137,99	10,01
842	1-BROMOHEPTANE	C7H15Br	629-04-9	-218	Apprentissage	-212,19	5,81	-213,67	4,33
843	1-BROMODODECANE	C12H25Br	143-15-7	-345	Apprentissage	-338,46	6,54	-339,87	5,13
844	iso-BUTYLCYCLOHEXANE	C10H20	1678-98-4	-267	Apprentissage	-255,15	11,85	-254,73	12,27

845	sec-BUTYLCYCLOHEXANE	C10H20	1883929	-263	Apprentissage	-252,89	10,11	-253,75	9,25
846	tert-BUTYLCYCLOHEXANE	C10H20	3178-22-1	-262	Apprentissage	-262,00	0,00	-262,05	-0,05
847	cis-2-NONENE	C9H18	6434-77-1	-157	Apprentissage	-158,74	-1,74	-156,21	0,79
848	trans-2-NONENE	C9H18	6434-78-2	-156	Test	-158,74	-2,74	-156,21	-0,21
849	cis-1,3-DICHLOROPROPENE	C3H4Cl2	10061-01-5	-70,1	Apprentissage	-61,13	8,97	-68,77	1,33
850	trans-1,3-DICHLOROPROPENE	C3H4Cl2	10061-02-6	-68,1	Apprentissage	-61,13	6,97	-68,77	-0,67
851	FORMIC ACID	CH2O2	64-18-6	-426	Apprentissage	-433,29	-7,29	-426,66	-0,66
852	n-BUTYRIC ACID	C4H8O2	107-92-6	-534	Apprentissage	-532,09	1,91	-534,05	-0,05
853	n-HEXANOIC ACID	C6H12O2	142-62-1	-585	Test	-582,60	2,40	-583,62	1,38
854	n-HEPTANOIC ACID	C7H14O2	111-14-8	-611	Apprentissage	-607,86	3,14	-608,31	2,69
855	n-OCTANOIC ACID	C8H16O2	124-07-2	-636	Apprentissage	-633,11	2,89	-632,93	3,07
856	n-NONANOIC ACID	C9H18O2	112-05-0	-662	Apprentissage	-658,37	3,63	-657,48	4,52
857	n-PENTANOIC ACID	C5H10O2	109-52-4	-559	Apprentissage	-557,35	1,65	-558,87	0,13
858	PROPIONIC ACID	C3H6O2	79-09-4	-511	Test	-506,83	4,17	-509,18	1,82
859	ISOBUTYL ISOBUTYRATE	C8H16O2	97-85-8	-587	Apprentissage	-592,28	-5,28	-590,02	-3,02
860	4-[2-(2-AMINOETHOXY)ETHYL]MORPHOLINE	C8H18N2O2	20207-13-0	-390	Apprentissage	-387,43	2,57	-384,21	5,79
861	2-(N-MORPHOLINO)-2'-HYDROXYDIETHYLETHER	C8H17NO3	3603-45-0	-571	Apprentissage	-576,23	-5,23	-574,23	-3,23
862	8-METHYLQUINOLINE	C10H9N	611-32-5	103	Apprentissage	105,79	2,79	102,96	-0,04
863	3,5-DIMETHYLBENZOFURAN	C10H10O	10410-35-2	-93,3	Apprentissage	-93,30	0,00	-93,33	-0,03
864	DIISOPROPYL SULFIDE	C6H14S	625-80-9	-182	Apprentissage	-182,00	0,00	-182,02	-0,02
865	2-ETHYLHEXANAL	C8H16O	123-05-7	-349	Apprentissage	-346,09	2,91	-346,55	2,45
866	2-BUTOXIME	C4H9NO	96-29-7	-3,2	Apprentissage	-3,20	0,00	-3,23	-0,03
867	4-METHYL-CYCLOHEXANE-METHANOL	C8H16O	34885-03-5	-371	Test	-388,01	-17,01	-386,45	-15,45
868	1-HEXANOL	C6H14O	111-27-3	-377	Test	-374,16	2,84	-374,80	2,20
869	ACRYLONITRILE	C3H3N	107-13-1	147	Apprentissage	138,25	-8,75	146,98	-0,02
870	ETHYL PHENYL ACETATE	C10H12O2	101-97-3	-398	Apprentissage	-398,00	0,00	-398,01	-0,01
871	ETHYL LEVULINATE	C7H12O3	539-88-8	-683	Apprentissage	-677,53	5,47	-680,15	2,85
872	SUCROSE ACETATE ISOBUTYRATE	C40H62O19	126-13-6	-4080	Apprentissage	-4080,00	0,00	-4080,08	-0,08
873	METHYL LACTATE	C4H8O3	547-64-8	-653	Apprentissage	-639,98	13,02	-639,65	13,35
874	ETHYL LACTATE	C5H10O3	97-64-3	-652	Apprentissage	-665,23	-13,23	-664,46	-12,46
875	ETHYL ACETOACETATE	C6H10O3	141-97-9	-640	Apprentissage	-649,86	-9,86	-657,68	-17,68
876	4-(2-METHOXYETHYL)MORPHOLINE	C7H15NO2	10220-23-2	-370	Apprentissage	-371,23	-1,23	-369,73	0,27
877	4-(2-HYDROXYETHYL)MORPHOLINE	C6H13NO2	622-40-2	-390	Apprentissage	-399,04	-9,04	-398,39	-8,39
878	3-ETHYLBENZOTHIOPHENE	C10H10S	31283-14-4	124	Apprentissage	113,56	-10,44	113,96	-10,04

879	3,5-DIMETHYLBENZOTHIOPHENE	C10H10S	1964-45-0	84,8	Apprentissage	82,01	-2,79	84,78	-0,02
880	1-ETHYLTETRALIN	C12H16	13556-58-6	-87,7	Apprentissage	-85,05	2,65	-94,29	-6,59
881	1-METHYLTETRALIN	C11H14	1559-81-5	-59,1	Apprentissage	-58,33	0,77	-56,88	2,22
882	1,1,3-TRIMETHYLCYCLOPENTANE	C8H16	4516-69-2	-194	Apprentissage	-196,69	-2,69	-191,83	2,17
883	1,1,2-TRIMETHYLCYCLOPENTANE	C8H16	4259-00-1	-191	Apprentissage	-196,69	-5,69	-191,83	-0,83
884	trans-2,2,4,6,6-PENTAMETHYL-3-HEPTENE	C12H24	27656-49-1	-282	Apprentissage	-274,50	7,50	-269,61	12,39
885	N-(2-HYDROXYETHYL)PIPERAZINE	C6H14N2O	103-76-4	-218	Apprentissage	-218,35	-0,35	-223,30	-5,30
886	N-AMINOETHYL PIPERAZINE	C6H15N3	140-31-8	-34,1	Apprentissage	-24,34	9,76	-26,10	8,00
887	CYCLOHEXANECARBOXALDEHYDE	C7H12O	2043-61-0	-276	Apprentissage	-276,00	0,00	-276,02	-0,02
888	TETRAHYDROPYRAN	C5H10O	142-68-7	-255	Test	-255,53	-0,53	-249,01	5,99
889	ETHYL TERT-BUTYL DISULFIDE	C6H14S2	4151-69-3	-185	Apprentissage	-185,00	0,00	-185,02	-0,02
890	METHYL DIETHANOLAMINE	C5H13NO2	105-59-9	-452	Apprentissage	-455,69	-3,69	-456,50	-4,50
891	PROPANAL	C3H6O	123-38-6	-215	Test	-215,43	-0,43	-216,71	-1,71
892	BUTANAL	C4H8O	123-72-8	-240	Apprentissage	-240,69	-0,69	-241,92	-1,92
893	PENTANAL	C5H10O	110-62-3	-266	Test	-265,94	0,06	-267,12	-1,12
894	HEXANAL	C6H12O	66-25-1	-288	Apprentissage	-291,20	-3,20	-292,33	-4,33
895	HEPTANAL	C7H14O	111-71-7	-316	Apprentissage	-316,45	-0,45	-317,54	-1,54
896	OCTANAL	C8H16O	124-13-0	-343	Test	-341,71	1,29	-342,73	0,27
897	NONANAL	C9H18O	124-19-6	-368	Test	-366,97	1,03	-367,92	0,08
898	DECANAL	C10H20O	112-31-2	-395	Apprentissage	-392,22	2,78	-393,08	1,92
899	ACETIC ACID	C2H4O2	64-19-7	-485	Apprentissage	-481,58	3,42	-484,26	0,74
900	DIMETHYL SULFOXIDE	C2H6OS	67-68-5	-204	Apprentissage	-204,00	0,00	-204,02	-0,02

Tableau 68 : valeurs des poids et biais du réseau de neurones pour la prédiction des enthalpies de formation des composés à l'état liquide

W1	Poids			W1	Poids			W1	Poids			W1	Poids		
Neurones cachés	1	2	3	Neurones cachés	1	2	3	Neurones cachés	1	2	3	Neurones cachés	1	2	3
1	0,18	0,14	-0,42	58	0,24	-0,04	-0,14	115	-0,05	0,2	-0,13	172	-0,09	0,01	0,04
2	-0,93	0,2	1,05	59	0,49	-0,02	-0,1	116	-0,91	0,05	-1,22	173	0,37	0	0,36
3	-0,26	-0,01	0,9	60	0,42	0,02	0,02	117	-0,43	0,99	-0,21	174	-0,01	0	-0,04
4	-0,03	-0,02	-0,03	61	0,77	-0,02	0,38	118	-0,31	0,36	-0,07	175	-0,2	0,14	0,09
5	0,31	-0,01	-0,02	62	-0,13	-0,01	0,22	119	0,18	-0,04	1,36	176	0,05	-0,03	-0,1
6	0,08	-0,03	-0,97	63	0,08	-0,03	0,01	120	0,12	0,02	-0,59	177	0,05	-0,06	0,12
7	-0,01	-0,02	0,6	64	0,35	-0,02	-0,4	121	0,17	0,24	0,38	178	0,54	-0,03	0,19
8	-0,24	-0,03	0,79	65	0,17	0,05	-0,02	122	0,22	-0,02	0,01	179	0,53	-0,49	-0,61
9	0,53	-0,03	-0,83	66	0,07	0,02	0,01	123	0,13	-0,01	1,88	180	-0,54	-0,25	-0,42
10	0,3	-0,04	-0,04	67	0,17	0,02	0,01	124	0,28	0	0,28	181	-0,13	-0,12	0,35
11	0,35	-0,04	-0,09	68	0,22	0,02	-0,09	125	0,09	0,06	0,91	182	-0,12	-0,12	0,02
12	0,36	-0,04	-0,02	69	0,12	-0,05	-0,12	126	0	0,06	0,24	183	0,41	-0,12	-0,17
13	0,31	-0,04	-0,13	70	0,28	0	-0,1	127	0,17	0	-0,05	184	0,09	-0,13	-0,27
14	0,29	-0,01	-0,72	71	0,33	0,04	-0,09	128	-0,07	0,03	-0,51	185	0,19	-0,11	-0,05
15	0,23	0,13	0,08	72	0,33	0,07	-0,13	129	0,4	-0,19	-0,04	186	0,46	-0,14	-0,13
16	-0,31	0,28	-1,15	73	0,04	0,05	-0,08	130	1,13	0,04	-0,42	187	0,22	-0,21	-0,02
17	-0,7	0,3	0,16	74	-0,13	0,04	-0,22	131	0,2	-0,19	-0,04	188	0,46	-0,14	-0,09
18	0,31	-0,02	-0,62	75	0,67	0,03	0,61	132	-0,09	-0,04	-0,03	189	0,13	-0,14	-0,03
19	-0,18	0,02	-0,32	76	0,19	0,01	-0,04	133	-0,57	0,77	0,75	190	0,15	-0,06	-0,09
20	0,13	-0,01	0,11	77	-0,03	0,04	0,46	134	-0,05	-0,15	0,42	191	0,45	-0,12	-0,19
21	0,17	-0,02	0,46	78	0,01	0,02	-1,23	135	-0,27	0	0,68	192	-0,36	-0,12	0,6
22	-0,22	-0,02	-0,32	79	0,26	-0,14	-0,07	136	-0,76	0	0,67	193	-0,06	-0,12	-0,08
23	0,29	-0,01	-0,02	80	0,22	0,17	-0,08	137	0,04	0	-0,59	194	0,39	-0,58	-0,33
24	-0,27	-0,22	0,05	81	-1,2	0,56	-0,21	138	-0,14	0	-0,62	195	-0,72	-0,19	0

25	0,38	-0,02	-0,02	82	-0,9	0,01	-5,12	139	-0,04	0	0,01	196	0,57	-0,18	-0,13
26	-0,01	-0,05	0	83	0,04	0,06	0,34	140	-0,52	0	0,06	197	-0,05	0	0,01
27	-0,43	0,12	0,63	84	0,15	0,05	-0,07	141	0,51	0	-0,69	198	0,67	-0,01	0,14
28	-0,29	0,04	0,92	85	0,27	0,2	-0,1	142	0,99	-0,01	0,59	199	0,05	0	-0,06
29	0,1	0,09	-0,06	86	-0,39	0,01	0,07	143	0,92	0	-0,97	200	0,11	0	0,09
30	-1,34	0,08	0,56	87	0,18	0,2	-0,03	144	-0,53	0	0,46	201	-0,12	0	-0,1
31	-0,46	0,03	-0,15	88	0,12	-0,02	-0,03	145	0,6	0	-0,71	202	-0,49	0	-0,06
32	-1,26	0,01	-0,44	89	-0,09	0	-0,45	146	0,42	0	-0,65	203	-0,51	0	0,05
33	0,2	0	0	90	0,21	0,02	-0,2	147	0,36	0	0,32	204	-0,3	0	-0,16
34	-0,29	0,02	0,52	91	-0,08	0,01	0,06	148	-0,25	0	-0,02	205	-0,15	0,01	0,03
35	-0,18	0,06	-0,79	92	0,37	0,05	-0,56	149	0,49	0,01	0,08	206	-0,09	0	0,02
36	0,16	0,02	-0,25	93	0,08	-0,02	-0,1	150	-0,15	0	0,4	207	0,22	0,01	0,08
37	-0,77	0,24	1,41	94	0,05	0,15	-1,19	151	-0,58	0	0,04	208	0,26	0	0
38	-1,5	0,22	0,18	95	-0,83	0,07	0,01	152	-0,09	-0,01	0,22	209	0,45	0	-0,03
39	-2,63	0,41	0,13	96	-0,79	0,14	1,32	153	0	0	0,62	210	-0,06	0	-0,04
40	0,14	0,06	-0,07	97	0,39	0,03	0,87	154	0,15	0,01	-0,27	211	-0,28	0,01	0,23
41	-0,7	0,07	0,32	98	0,71	0,01	-0,48	155	-0,09	0	-0,11	212	0,89	0	0
42	-1,09	0,12	0,23	99	-0,13	0	-0,03	156	-0,27	0	-0,13	213	0,06	0	-0,14
43	0,46	0,06	-0,05	100	-0,07	0	0	157	-0,35	0	-0,12	214	0,42	0	0,06
44	0,08	0,13	1,2	101	0,41	-0,01	0	158	-0,41	0,01	-0,29	215	0,28	-0,18	0
45	-0,25	0,07	1,02	102	0,3	0,09	0,22	159	-0,48	-0,02	0	216	0,21	-0,43	-0,15
46	-0,74	0,12	-0,38	103	-0,36	0,01	-0,33	160	1,65	0	0,93	217	0,09	-0,51	-1,4
47	-0,29	0,03	1,83	104	0,5	0	0,19	161	0,2	0	-0,07	218	0,33	-0,24	-0,01
48	-0,29	0,01	-0,01	105	0,43	-0,01	-0,13	162	-1,47	-0,01	0,05	219	-0,3	-0,08	-0,21
49	0,06	0,02	0,26	106	0,28	-0,01	-0,14	163	0,31	0	-0,33	220	0,05	-0,53	-0,15
50	-0,71	0,01	1,42	107	-0,12	-0,01	-0,01	164	-0,13	0	0,41	221	0,07	-0,31	0,02
51	-0,37	0	-0,09	108	0,04	0,02	-0,14	165	-0,67	0	-0,26	222	-0,24	-0,11	0,01
52	0,09	0	-0,74	109	-0,46	0,16	-0,01	166	-0,02	-0,01	-0,32	223	-0,11	-0,26	-0,09
53	-0,14	-0,01	-0,41	110	0,27	0,09	-0,01	167	0,4	0	0	224	0,27	0	0,05
54	-0,05	-0,01	-0,12	111	0,22	0,11	0	168	0,12	0	-0,43	225	0,25	-0,03	0,47

55	-0,74	-0,02	-0,6	112	-1,13	0,12	-0,03	169	0,24	-0,09	0,09	226	-0,39	-0,07	-0,6
56	-0,4	-0,02	1,18	113	-0,09	0,1	-0,26	170	0,16	0	0,01	227	0,14	-0,06	0,02
57	-0,42	-0,02	-1,35	114	-0,17	0,14	1,25	171	0,25	0	0,12	228	0,39	-0,07	-0,44

Annexe C : Résultats de prédiction des enthalpies standards de formation à l'état gazeux

- **Type** : Ensemble de molécules d'appartiennent ou de test
- **CAS** : Numéro d'enregistrement unique ([Chemical Abstracts Service](#)).
- **EXP** : Valeurs expérimentales d'enthalpie de formation de la littérature en *kJ/mol*.
- **CAL-MCG** : Valeurs d'enthalpie de formation issues de la méthode de contributions de groupes en *kJ/mol*.
- **CAL-MRNA** : Valeurs d'enthalpie de formation issues du réseau de neurones en *kJ/mol*.
- **ERR**: erreur de prédiction en *kJ/mol*.

Tableau 69 : Banque de données thermochimiques d'enthalpie de formation concernant les 900 molécules à l'état gazeux

N°:	Nomenclature	Formule brute	CAS N°	EXP	Statue	CAL-MCG	EAM	CAL-MRNA	EAM
1	Propyne	C3H4	74-99-7	185,4	Apprentissage	189,54	4,14	189,18	3,78
2	1,3-Butadiyne	C4H2	460-12-8	464	Apprentissage	461,90	-2,10	460,33	-3,67
3	1,2-Butadiene	C4H6	590-19-2	162,2	Apprentissage	161,82	-0,38	161,74	-0,46
4	2-Butyne	C4H6	503-17-3	145,1	Apprentissage	146,28	1,18	146,59	1,49
5	cis-2-Butene	C4H8	590-18-1	-7,7	Test	-9,59	-1,89	-10,52	-2,82
6	3-Methyl-1,2-butadiene	C5H8	598-25-4	129,07	Apprentissage	129,07	0,00	129,04	-0,03
7	1,2-Pentadiene	C5H8	591-95-7	140,6	Apprentissage	140,98	0,38	141,01	0,41
8	trans-1,3-Pentadiene	C5H8	2004-70-8	75,77	Test	76,39	0,62	78,51	2,74
9	2,3-Pentadiene	C5H8	591-96-8	133	Apprentissage	133,00	0,00	132,97	-0,03
10	1-Butyne, 3-methyl-	C5H8	598-23-2	136,4	Apprentissage	138,34	1,94	141,74	5,34
11	Cyclopropane,ethenyl-	C5H8	693-86-7	127	Apprentissage	128,16	1,16	125,45	-1,55
12	Cyclopentane	C5H10	287-92-3	-76,4	Apprentissage	-65,44	10,96	-66,75	9,65
13	1,1-Dimethylcyclopropane	C5H10	1630-94-0	-8,2	Test	-5,81	2,39	-10,23	-2,03
14	2-Methyl-1-butene	C5H10	563-46-2	-35,1	Apprentissage	-33,39	1,71	-33,43	1,67
15	3-Methyl-1-butene	C5H10	563-45-1	-25,5	Apprentissage	-25,13	0,37	-25,74	-0,24
16	2-Methyl-2-butene	C5H10	513-35-9	-41,5	Apprentissage	-50,95	-9,45	-54,00	12,50
17	trans-2-Pentene	C5H10	646-04-8	-32	Test	-32,94	-0,94	-31,28	0,72
18	Isopentane	C5H12	78-78-4	-153,7	Test	-154,86	-1,16	-156,17	-2,47
19	Pentane	C5H12	109-66-0	-146,8	Test	-145,35	1,45	-148,06	-1,26
20	Cyclohexene	C6H10	110-83-8	-4,32	Apprentissage	-6,94	-2,62	-7,76	-3,44
21	1,5-Hexadiene	C6H10	592-42-7	85	Test	88,48	3,48	86,53	1,53
22	3-Methylcyclopentene	C6H10	1120-62-3	9,67	Apprentissage	13,45	3,78	11,73	2,06
23	1-Hexyne	C6H10	693-02-7	122,3	Apprentissage	127,01	4,71	124,94	2,64
24	2-Hexyne	C6H10	764-35-2	107,7	Apprentissage	104,60	-3,10	104,55	-3,15
25	Cyclopentane, methylene-	C6H10	1528-30-9	10,2	Apprentissage	13,49	3,29	11,44	1,24
26	3-Hexyne	C6H10	928-49-4	105,4	Apprentissage	104,60	-0,80	104,55	-0,85
27	Bicyclo[3,1,0]hexane	C6H10	285-58-5	39	Test	40,84	1,84	39,97	0,97
28	1,1-Bicyclopropyl	C6H10	5685-46-1	130	Apprentissage	134,97	4,97	133,04	3,04
29	1,3-Butadiene, 2-ethyl-	C6H10	3404-63-5	63,6	Test	52,59	-11,01	57,28	-6,32
30	(E)-1,3-Hexadiene	C6H10	20237-34-7	54	Test	53,04	-0,96	57,18	3,18
31	cis-1,3-hexadiene	C6H10	14596-92-0	59	Test	53,04	-5,96	57,18	-1,82
32	trans-1,4-Hexadiene	C6H10	7319-00-8	74	Test	73,56	-0,44	76,35	2,35
33	cis-2-Methyl-1-vinylcyclopropane	C6H10	2628-57-1	103	Apprentissage	101,84	-1,16	104,46	1,46
34	Cyclohexane	C6H12	110-82-7	-123,3	Test	-112,14	11,16	-113,66	9,64
35	2,3-Dimethyl-1-butene	C6H12	563-78-0	-65,9	Apprentissage	-61,34	4,56	-59,05	6,85

36	cis-2-Hexene	C6H12	7688-21-3	-47	Apprentissage	-53,78	-6,78	-52,19	-5,19
37	trans-2-Hexene	C6H12	4050-45-7	-51	Apprentissage	-53,78	-2,78	-52,19	-1,19
38	Bicyclo[6,2,0]decapentaene	C10H8	20455-01-0	514,2	Apprentissage	516,76	2,56	513,42	-0,78
39	Benzene, 1-butynyl-	C10H10	622-76-4	248,6	Apprentissage	246,17	-2,43	245,71	-2,89
40	1,4-Dicyclopropylbuta-1,3-diyne	C10H10	114546-62-2	561,8	Apprentissage	563,52	1,72	564,84	3,04
41	3,4-Dimethylenebicyclo[4,2,0]octa-1,5-diene	C10H10	136846-72-5	359	Apprentissage	354,01	-4,99	357,96	-1,04
42	cis-Decahydronaphthalene	C10H18	493-01-6	-169,2	Apprentissage	-165,69	3,51	-166,24	2,96
43	Butylbenzene	C10H14	104-51-8	-12,8	Test	-11,87	0,93	-13,17	-0,37
44	Benzene, (1-methylpropyl)-	C10H14	135-98-8	-17,4	Test	-11,14	6,26	-15,01	2,39
45	1,2,4,5-Tetramethylbenzene	C10H14	95-93-2	-47,1	Apprentissage	-52,63	-5,53	-50,54	-3,44
46	Benzene, 1,2,3,4-tetramethyl-	C10H14	488-23-3	-36	Apprentissage	-36,55	-0,55	-34,59	1,41
47	Camphene	C10H16	79-92-5	-28	Apprentissage	-23,70	4,30	-28,33	-0,33
48	Adamantane	C10H16	281-23-2	-134,4	Test	-126,60	7,80	-130,15	4,25
49	trans-1-Methyl-1,2-dicyclopropylcyclopropane	C10H16	150895-64-0	179,2	Apprentissage	182,51	3,31	183,17	3,97
50	cis-1-Methyl-1,2-dicyclopropylcyclopropane	C10H16	150895-65-1	181	Apprentissage	182,51	1,51	183,17	2,17
51	1,3-Cyclopentadiene, 1,2,3,4,5-pentamethyl-	C10H16	4045-44-7	-25	Apprentissage	-25,90	-0,90	-25,22	-0,22
52	Spiro[5,5]undecane	C11H20	180-43-8	-188,3	Test	-192,57	-4,27	-193,19	-4,89
53	Cyclohexene, 1-methyl-4-(1-methylethyl)-	C10H18	5502-88-5	-110,8	Apprentissage	-116,11	-5,31	-116,14	-5,34
54	5-Decyne	C10H18	1942-46-7	18,7	Apprentissage	21,23	2,53	20,82	2,12
55	4-Decyne	C10H18	2384-86-3	19,9	Apprentissage	21,23	1,33	20,82	0,92
56	2-Decyne	C10H18	2384-70-5	23,6	Apprentissage	21,23	-2,37	20,82	-2,78
57	Bicyclo[5,3,0]decane	C10H18	5661-80-3	-130,1	Apprentissage	-131,32	-1,22	-130,62	-0,52
58	Cyclopentane, pentyl-	C10H20	3741-00-2	-188,9	Apprentissage	-187,94	0,96	-187,76	1,14
59	trans-1,2-di-tert-butylethylene	C10H20	692-48-8	-167	Apprentissage	-169,46	-2,46	-170,37	-3,37
60	1,1,4-Trimethylcycloheptane	C10H20	2158-55-6	-210,3	Apprentissage	-204,29	6,01	-209,54	0,76
61	Bicyclo[4,4,1]undeca-1,3,5,7,9-pentaene	C11H10	2443-46-1	323	Apprentissage	327,98	4,98	327,66	4,66
62	1a,7b-Dihydrocyclopropa[a]naphthalene	C11H10	3463-79-4	238	Apprentissage	227,19	-10,81	230,12	-7,88
63	Bicyclo[4,4,1]undeca-1,3,5,8-tetralene	C11H12	6074-99-3	261	Apprentissage	253,63	-7,37	256,21	-4,79
64	1,1-Dimethylindan	C11H14	4912-92-9	-1,6	Test	2,73	4,33	-2,33	-0,73
65	1H-Indene, 2,3-dihydro-4,7-dimethyl-	C11H14	6682-71-9	-7,4	Apprentissage	-8,95	-1,55	-6,65	0,75
66	1-tert-Butyl-3-methylbenzene	C11H16	1075-38-3	-54	Test	-60,07	-6,07	-55,80	-1,80
67	Pentamethylbenzene	C11H16	700-12-9	-67,2	Apprentissage	-63,52	3,68	-67,60	-0,40
68	Tetracyclo[6,2,1,0(2,7),0(3,5)]undecane	C11H16	1777-44-2	59	Test	50,31	-8,69	50,22	-8,78
69	1-Methyladamantane	C11H18	768-91-2	-171,7	Test	-165,60	6,10	-169,56	2,14
70	Bicyclo[2,2,2]oct-2-ene, 5-(1-methylethyl)-, (1 α ,4 α ,5 β)-	C11H18	106562-31-6	-51,9	Apprentissage	-44,56	7,34	-45,90	6,00
71	Bicyclo[2,2,2]oct-2-ene, 5-(1-methylethyl)-, (1 α ,4 α ,5 α)-	C11H18	106623-87-4	-50,6	Apprentissage	-44,56	6,04	-45,90	4,70
72	Bicyclo[3,3,3]undecane	C11H20	29415-95-0	-89	Apprentissage	-86,22	2,78	-88,12	0,88
73	Cyclohexane, pentyl-	C11H22	4292-92-6	-233,8	Test	-234,65	-0,85	-234,32	-0,52

74	Acenaphthylene	C12H8	208-96-8	259,7	Apprentissage	265,11	5,41	263,64	3,94
75	Acenaphthene	C12H10	83-32-9	156	Apprentissage	147,55	-8,45	150,47	-5,53
76	Biphenyl	C12H10	92-52-4	180	Test	180,54	0,54	182,00	2,00
77	Naphthalene, 2,3-dimethyl-	C12H12	581-40-8	76,1	Apprentissage	73,09	-3,01	69,91	-6,19
78	Naphthalene, 2,7-dimethyl-	C12H12	582-16-1	79,5	Apprentissage	72,37	-7,13	71,56	-7,94
79	Tricyclo[4,4,2,0(1,6)]dodeca-2,4,8-triene	C12H14	60329-21-7	276,6	Test	271,22	-5,38	267,83	-8,77
80	Anti tricyclo[4.2.2.2(2,5)]dodeca-3,7-diene	C12H16	69349-54-8	143	Apprentissage	143,44	0,44	145,37	2,37
81	Syn tricyclo[4.2.2.2(2,5)]dodeca-3,7-diene	C12H16	67278-00-6	154	Apprentissage	143,44	-10,56	145,37	-8,63
82	(Z) 3,3-Bis-(1-cyclohexenylidene)	C12H16	132911-35-4	92,5	Apprentissage	91,85	-0,65	91,83	-0,67
83	(E) 3,3-Bis-(1-cyclohexenylidene)	C12H16	132911-34-3	91,2	Apprentissage	91,85	0,65	91,83	0,63
84	Benzene, 1,2,4-trimethyl-5-(1-methylethyl)-	C12H18	10222-95-4	-103,3	Apprentissage	-94,73	8,57	-100,96	2,34
85	Tricyclo[4,2,2,2(2,5)]dodec-3-ene	C12H18	69122-74-3	33	Apprentissage	38,23	5,23	34,65	1,65
86	Adamantane, 1,3-dimethyl-	C12H20	702-79-4	-219	Test	-204,59	14,41	-208,88	10,12
87	2,2-dimethyladamantane	C12H20	19740-34-2	-183	Test	-180,11	2,89	-185,09	-2,09
88	Cyclohexane, hexyl-	C12H24	4292-75-5	-254,4	Test	-255,49	-1,09	-254,86	-0,46
89	(Z) 2,3-Di-tert-butyl-2-butene	C12H24	54429-93-5	-123,1	Apprentissage	-122,35	0,75	-125,16	-2,06
90	9H-Fluorene	C13H10	86-73-7	175	Test	172,30	-2,70	174,16	-0,84
91	Diphenylmethane	C13H12	101-81-5	165	Apprentissage	158,75	-6,25	160,59	-4,41
92	1H-Indene, 2,3-dihydro-1,1,4,7-tetramethyl-	C13H18	1078-04-2	-62,5	Apprentissage	-62,45	0,05	-63,69	-1,19
93	1,3,5-Trimethyladamantane	C13H22	707-35-7	-255	Test	-243,59	11,41	-248,14	6,86
94	Cyclopentane, octyl-	C13H26	1795-20-6	-250,7	Test	-250,46	0,24	-249,68	1,02
95	Tridecane	C13H28	629-50-5	-311,5	Apprentissage	-312,08	-0,58	-312,68	-1,18
96	Diphenylacetylene	C14H10	501-65-5	385	Apprentissage	387,43	2,43	387,89	2,89
97	Phenanthrene	C14H10	85-01-8	201,2	Test	202,58	1,38	203,46	2,26
98	trans-Stilbene	C14H12	103-30-0	219,6	Apprentissage	219,60	0,00	219,57	-0,03
99	9H-Fluorene, 9-methyl-	C14H12	2523-37-7	148	Apprentissage	145,98	-2,02	148,70	0,70
100	Pyracene	C14H12	567-79-3	174,3	Apprentissage	176,12	1,82	174,12	-0,18
101	Octalene	C14H12	257-55-6	551,5	Apprentissage	549,89	-1,61	553,40	1,90
102	1,2-Diphenylethane	C14H14	103-29-7	135,6	Apprentissage	135,60	0,00	135,57	-0,03
103	Phenanthrene, 1,2,3,4-tetrahydro-	C14H14	1013-08-7	92,3	Test	82,83	-9,47	84,02	-8,28
104	n-Nonylcyclohexane	C14H14	2883-02-5 -	-316,2	Test	-318,01	-1,81	-316,47	-0,27
105	Cyclotetradecane	C14H28	295-17-0	-239,2	Apprentissage	-245,99	-6,79	-239,23	-0,03
106	Cyclopentane, nonyl-	C14H28	2882-98-6	-271,3	Test	-271,31	-0,01	-270,35	0,95
107	(E)-3,4-Di-tert-butyl-3-hexene	C14H28	75245-21-5	-168,3	Apprentissage	-169,05	-0,75	-166,27	2,03
108	2,2,3,3,4,4,5,5-Octamethylhexane	C14H30	65149-84-0	-248,3	Apprentissage	-249,70	-1,40	-249,44	-1,14
109	Phenanthrene, 4-methyl-	C15H12	832-64-4	195,8	Apprentissage	193,05	-2,75	194,34	-1,46
110	4-Methyldiadamantane	C15H22	30545-28-9	-182,1	Test	-180,06	2,04	-186,25	-4,15
111	6-(tert-butyl)-1,1-dimethylindan	C15H22	3605-31-0	-104	Apprentissage	-97,90	6,10	-102,49	1,51

112	Pentadecane	C15H32	629-62-9	-354,8	Test	-353,76	1,04	-353,70	1,10
113	Phenanthrene, 2,7-dimethyl-	C16H14	1576-69-8	143	Apprentissage	145,67	2,67	145,69	2,69
114	Phenanthrene, 9,10-dimethyl-	C16H14	604-83-1	167	Apprentissage	177,85	10,85	177,60	10,60
115	[2,2]Paracyclophane	C16H16	1633-22-3	244,7	Apprentissage	242,53	-2,17	250,45	5,75
116	(2,2)Metacyclophane	C16H16	2319-97-3	170	Apprentissage	168,73	-1,27	167,82	-2,18
117	2,2-Metaparacyclophane	C16H16	5385-36-4	218,3	Apprentissage	214,02	-4,28	218,04	-0,26
118	Tricyclo[8,2,2,24,7]-hexadecane	C16H28	283-68-1	-152	Apprentissage	-154,11	-2,11	-157,91	-5,91
119	1-Hexadecene	C16H32	629-73-2	-248,4	Test	-247,26	1,14	-245,83	2,57
120	Cyclopentane, undecyl-	C16H32	6785-23-5	-312,5	Apprentissage	-312,99	-0,49	-311,74	0,76
121	Hexadecane	C16H34	544-76-3	-374,9	Test	-374,60	0,30	-374,21	0,69
122	n-Dodecylcyclopentane	C17H34	5634-30-0	-333,2	Test	-333,83	-0,63	-332,48	0,72
123	Chrysene	C18H12	218-01-9	268,7	Apprentissage	275,89	7,19	276,65	7,95
124	Triphenylene	C18H12	217-59-4	270,1	Apprentissage	274,49	4,39	272,93	2,83
125	p-Terphenyl	C18H14	92-94-4	279	Test	270,61	-8,39	273,78	-5,22
126	Naphthacene, 5,12-dihydro-	C18H14	959-02-4	224,9	Apprentissage	227,67	2,77	230,11	5,21
127	Phenanthrene, 2,4,5,7-tetramethyl-	C18H18	7396-38-5	130	Apprentissage	127,30	-2,70	130,01	0,01
128	Phenanthrene, 3,4,5,6-tetramethyl-	C18H18	7343-06-8	160	Apprentissage	155,58	-4,42	160,02	0,02
129	[18]-Annulene	C18H18	2040-73-5	280	Apprentissage	280,00	0,00	279,97	-0,03
130	2,5-Diphenyl-1,5-hexadiene	C18H18	7283-49-0	285	Apprentissage	282,42	-2,58	282,08	-2,92
131	Tricyclo[10,2,2,2(5,8)]octadeca-5,7,12,14,15,17-hexaene	C18H20	2913-24-8	129,4	Apprentissage	136,19	6,79	129,41	0,01
132	Octadecane	C18H38	593-45-3	-414,6	Apprentissage	-416,28	-1,68	-415,24	-0,64
133	Triphenylmethane	C19H16	519-73-3	276,1	Apprentissage	276,11	0,01	277,26	1,16
134	2,6-Diphenyl-1,6-heptadiene	C19H20	27905-65-3	259	Apprentissage	261,58	2,58	261,86	2,86
135	1,5-Diphenylbicyclo[3,2,0]heptane	C19H22	94383-67-2	215	Apprentissage	214,90	-0,10	211,31	-3,69
136	Perylene	C20H12	198-55-0	318,3	Apprentissage	319,32	1,02	321,21	2,91
137	Benzo[k]fluoranthene	C20H12	207-08-9	306,2	Apprentissage	307,21	1,01	301,99	-4,21
138	Chrysene, 5,6-dimethyl-	C20H16	3697-27-6	262	Apprentissage	251,15	-10,85	251,22	-10,78
139	Benz[a]anthracene, 7,12-dimethyl-	C20H16	56-56-4	277	Apprentissage	277,00	0,00	276,97	-0,03
140	Hexacyclopropylethane	C20H30	26902-55-6	466,5	Apprentissage	466,50	0,00	466,46	-0,04
141	Pentalene,1,3,5-tris(1,1-dimethylethyl)-	C20H30	50356-52-0	14	Apprentissage	11,39	-2,61	11,49	-2,51
142	meso-3,4-Dicyclohexyl-2,5-dimethylhexane	C20H38	62678-52-8	-300	Apprentissage	-304,04	-4,04	-302,80	-2,80
143	Cyclohexane, tetradecyl-	C20H40	1795-18-2	-419,3	Test	-422,21	-2,91	-419,32	-0,02
144	Eicosane	C20H42	112-95-8	-455,8	Test	-457,96	-2,16	-456,33	-0,53
145	1,8-Paracyclophane	C21H26	6169-94-4	29	Apprentissage	29,00	0,00	29,00	0,00
146	Benzo[b]triphenylene	C22H14	215-58-7	331	Apprentissage	323,69	-7,31	323,68	-7,32
147	1,1-Diphenyl-1,1-bicyclopentyl	C22H26	59358-70-2	111	Apprentissage	102,45	-8,55	106,01	-4,99
148	Benzene, 1,1,1,1-(1,2-ethanediylidene)tetrakis-	C26H22	632-50-8	357	Apprentissage	360,12	3,12	357,43	0,43
149	Pentacyclo[18,2,2,2(9,12),0(4,15),0(6,17)]hexacosane-4,6(17),9,11,15,20,22,23,25-	C26H26	35117-21-6	326	Apprentissage	330,28	4,28	326,24	0,24

	nonane								
150	5-Butyldocosane	C26H54	55282-16-1	-587,6	Test	-592,23	-4,63	-591,76	-4,16
151	11-Butyldocosane	C26H54	13475-76-8	-593,3	Test	-592,23	1,07	-591,76	1,54
152	9,9-Bianthracene	C28H18	1055-23-8	475	Apprentissage	475,00	0,00	474,96	-0,04
153	11-Decylheneicosane	C31H64	55320-06-4	-700	Test	-696,43	3,57	-698,98	1,02
154	1,8-Cyclotetradecadiyne	C14H20	1540-80-3	313,8	Apprentissage	313,80	0,00	313,77	-0,03
155	Oxiniac acid	C6H5NO3	2398-81-4	-225,1	Apprentissage	-225,10	0,00	-225,13	-0,03
156	1,2,6,7-Cyclodecatetraene	C10H12	3451-55-6	356,1	Apprentissage	356,10	0,00	356,08	-0,02
157	9,10[1,2]-Benzenoanthracene, 9,10-dihydro-	C20H14	477-75-8	322	Test	328,22	6,22	322,09	0,09
158	Hexane, 2,2,5,5-tetramethyl-	C10H22	1071-81-4	-285	Apprentissage	-284,15	0,85	-286,81	-1,81
159	o-Terphenyl	C18H14	84-15-1	282,8	Test	281,23	-1,57	284,66	1,86
160	3,3-Dimethyl-1-butene	C6H10	917-92-0	106,1	Apprentissage	109,71	3,61	107,93	1,83
161	m-Terphenyl	C18H14	92-06-8	280	Test	268,95	-11,05	282,42	2,42
162	1,1-Biphenyl, 4-methyl-	C13H12	644-08-6	138,2	Test	142,18	3,98	143,81	5,61
163	3,9-Dimethylbenz[a]anthracene	C20H16	316-51-8	189	Apprentissage	194,87	5,87	195,08	6,08
164	2-Ethyl-1-butene	C6H12	760-21-4	-56,07	Apprentissage	-56,74	-0,67	-54,58	1,49
165	1,1-Biphenyl, 2-methyl-	C13H12	643-58-3	152,8	Apprentissage	152,80	0,00	152,07	-0,73
166	Cyclohexane, ethyl-	C8H16	1678-91-7	-172,6	Apprentissage	-172,13	0,47	-172,69	-0,09
167	Cyclohexane, propyl-	C9H18	1678-92-8	-192,4	Test	-192,97	-0,57	-193,24	-0,84
168	Butylcyclohexane	C10H20	1678-93-9	-213,2	Test	-213,81	-0,61	-213,78	-0,58
169	Benzene, 1,2,3,5-tetramethyl-	C10H14	527-53-7	-43,2	Apprentissage	-42,67	0,53	-39,11	4,09
170	Heptylcyclohexane	C13H26	5617-41-4	-275	Apprentissage	-276,33	-1,33	-275,39	-0,39
171	Cyclohexane, octyl-	C14H28	1795-15-9	-295,6	Test	-297,17	-1,57	-295,93	-0,33
172	1-Butene	C4H8	106-98-9	-0,63	Test	2,83	3,46	0,67	1,30
173	Cyclohexane, decyl-	C16H32	1795-16-0	-336,9	Test	-338,85	-1,95	-337,01	-0,11
174	1-Hexene	C6H12	592-41-6	-42	Test	-38,85	3,15	-40,90	1,10
175	4,4-Dimethylbiphenyl	C14H14	613-33-2	111,3	Test	103,83	-7,47	105,86	-5,44
176	Butane	C4H10	106-97-8	-125,6	Apprentissage	-124,51	1,09	-127,36	-1,76
177	Cyclopropane	C3H6	75-19-4	53,3	Apprentissage	47,69	-5,61	45,84	-7,46
178	1-Butyne	C4H6	107-00-6	165,2	Apprentissage	168,70	3,50	167,72	2,52
179	Neopentane	C5H12	463-82-1	-167,9	Test	-158,40	9,50	-165,05	2,85
180	1,4-Pentadiene	C5H8	591-93-5	106,3	Apprentissage	109,33	3,03	107,52	1,22
181	Dodecylcyclohexane	C18H36	1795-17-1	-378,1	Test	-380,53	-2,43	-378,13	-0,03
182	Cyclohexane, undecyl-	C17H34	54105-66-7	-357	Test	-359,69	-2,69	-357,57	-0,57
183	1-Pentyne	C5H8	627-19-0	144,3	Apprentissage	147,86	3,56	146,30	2,00
184	Propane	C3H8	74-98-6	-103,8	Test	-103,67	0,13	-106,62	-2,82
185	n-Tridecylcyclohexane	C19H38	6006-33-3	-398,7	Test	-401,37	-2,67	-398,71	-0,01
186	1-tert-Butyl-4-methylbenzene	C11H16	98-51-1	-57	Test	-58,41	-1,41	-56,60	0,40

187	2-Methylnonane	C10H22	871-83-0	-260,2	Test	-259,07	1,13	-260,65	-0,45
188	Isobutane	C4H10	75-28-5	-134,2	Test	-134,31	-0,11	-135,66	-1,46
189	n-Pentadecylcyclohexane	C21H42	6006-95-7	-439,9	Apprentissage	-443,05	-3,15	-439,94	-0,04
190	5-Methylnonane	C10H22	15869-85-9	-258,6	Test	-258,78	-0,18	-259,96	-1,36
191	Cyclohexane, hexadecyl-	C22H44	6812-38-0	-460,5	Test	-463,89	-3,39	-460,60	-0,10
192	Decane	C10H22	124-18-5	-249,7	Apprentissage	-249,56	0,14	-251,08	-1,38
193	1-Decene	C10H20	872-05-9	-123,3	Test	-122,22	1,08	-123,35	-0,05
194	1-Dodecene	C12H24	112-41-4	-165,4	Test	-163,90	1,50	-164,32	1,08
195	1,3-Butadiene	C4H6	106-99-0	108,8	Test	112,16	3,36	109,65	0,85
196	Undecane	C11H24	1120-21-4	-270,3	Test	-270,40	-0,10	-271,63	-1,33
197	Dodecane	C12H26	112-40-3	-290,9	Apprentissage	-291,24	-0,34	-292,16	-1,26
198	Dibenz[a,h]anthracene	C22H14	53-70-3	328	Apprentissage	325,08	-2,92	324,89	-3,11
199	1-Decyne	C10H18	764-93-2	41,9	Apprentissage	43,65	1,75	40,25	-1,65
200	Tetradecane	C14H30	629-59-4	-332,1	Test	-332,92	-0,82	-333,19	-1,09
201	Heptadecane	C17H36	629-78-7	-393,9	Test	-395,44	-1,54	-394,72	-0,82
202	Isobutene	C4H8	115-11-7	-17,9	Apprentissage	-10,04	7,86	-12,22	5,68
203	2-Methyl-1,3-butadiene	C5H8	78-79-5	75,7	Apprentissage	75,94	0,24	78,19	2,49
204	2-Methyladamantane	C11H18	700-56-1	-152	Apprentissage	-152,92	-0,92	-151,73	0,27
205	Nonadecane	C19H40	629-92-5	-435,1	Test	-437,12	-2,02	-435,77	-0,67
206	Cyclopentane, heptyl-	C12H24	5617-42-5	-230,1	Test	-229,62	0,48	-229,03	1,07
207	Cyclopropylacetylene	C5H6	6746-94-7	292	Apprentissage	283,60	-8,40	288,12	-3,88
208	trans-3-Hexene	C6H12	13269-52-8	-49,3	Test	-56,29	-6,99	-52,01	-2,71
209	Propene	C3H6	115-07-1	20,41	Apprentissage	26,18	5,77	21,37	0,96
210	3-Decyne	C10H18	2384-85-2	21,8	Apprentissage	21,23	-0,57	20,82	-0,98
211	Isobutylbenzene	C10H14	538-93-2	-21,5	Test	-21,38	0,12	-20,62	0,88
212	9,9-Dimethyl-9,9-bifluorenyl	C28H22	15300-82-0	323,9	Test	334,37	10,47	328,21	4,31
213	Tridecylcyclopentane	C18H36	6006-34-4	-353,8	Test	-354,67	-0,87	-353,24	0,56
214	2-Pentyne	C5H8	627-21-4	128,9	Apprentissage	125,44	-3,46	125,55	-3,35
215	Cyclopentane, tetradecyl-	C19H38	1795-22-8	-374,4	Apprentissage	-375,51	-1,11	-374,04	0,36
216	cis-3-Hexene	C6H12	7642-09-3	-45,9	Test	-56,29	-10,39	-52,01	-6,11
217	Cyclopentane, hexadecyl-	C21H42	6812-39-1	-415,6	Test	-417,19	-1,59	-415,76	-0,16
218	1,3,5,7-Tetramethyl-adamantane	C14H24	1687-36-1	-284,6	Apprentissage	-282,58	2,02	-287,37	-2,77
219	Cyclopentene	C5H8	142-29-0	34	Apprentissage	39,77	5,77	38,98	4,98
220	1,4-Hexadiene, (Z)-	C6H10	7318-67-4	77	Test	73,56	-3,44	76,35	-0,65
221	1,3-Cyclopentadiene	C5H6	542-92-7	139	Apprentissage	144,97	5,97	145,03	6,03
222	Tricyclo[4,4,2,0(1,6)]dodeca-2,4-diene	C12H16	33930-87-9	157,4	Test	166,02	8,62	162,76	5,36
223	cis-1,3-Pentadiene	C5H8	1574-41-0	81,72	Test	76,39	-5,33	78,51	-3,21
224	4-Methylcyclopentene	C6H10	1759-81-5	15	Apprentissage	13,45	-1,55	11,73	-3,27

225	trans-2-Butene	C4H8	624-64-6	-10,8	Apprentissage	-9,59	1,21	-10,52	0,28
226	Spiro[4,5]decane	C10H18	176-63-6	-145,1	Test	-145,86	-0,76	-146,32	-1,22
227	1-Methylnaphthalene	C11H10	90-12-0	116,9	Apprentissage	119,75	2,85	119,82	2,92
228	4,7-Methano-1H-indene, octahydro-	C10H16	6004-38-2	-60,2	Test	-55,97	4,23	-55,98	4,22
229	2,4-Hexadiene, (E,E)-	C6H10	5194-51-4	44	Test	40,63	-3,37	47,14	3,14
230	2,4-Hexadiene, (E,Z)-	C6H10	5194-50-3	48	Test	40,63	-7,37	47,14	-0,86
231	Tricyclo[4,4,2,0(1,6)]dodeca-2,4,7,9-tetraene	C12H12	5181-34-0	378,3	Test	376,43	-1,87	372,78	-5,52
232	Naphthalene, 1,8-dimethyl-	C12H12	569-41-5	108,8	Apprentissage	110,22	1,42	112,31	3,51
233	(Z),(Z)-2,4-Hexadiene	C6H10	6108-61-8	52	Test	40,63	-11,37	47,14	-4,86
234	Tricyclo[6,2,0,0,3,6]deca-1(8),2,6-triene	C10H10	1610-51-1	310	Apprentissage	303,54	-6,46	307,50	-2,50
235	1-Ethyl-8-methylnaphthalene	C13H14	61886-71-3	98,1	Apprentissage	87,92	-10,18	90,09	-8,01
236	2,4,5,7-Tetramethyl-4,5-bis(4-tert-butylphenyl)octane	C32H50	85668-75-3	-254	Test	-242,46	11,54	-253,68	0,32
237	4,5-Diethyl-4,5-bis(4-tert-butylphenyl)-octane	C32H50	85668-73-1	-224	Apprentissage	-223,44	0,56	-218,78	5,22
238	3,4-Diethyl-3,4-bis(4-tert-butylphenyl)-hexane	C30H46	85668-74-2	-170	Test	-181,75	-11,75	-176,38	-6,38
239	Acetaldehyde	C2H4O	75-07-0	-170,7	Apprentissage	-170,64	0,06	-167,30	3,40
240	Oxirane	C2H4O	75-21-8	-52,64	Apprentissage	-53,54	-0,90	-52,64	0,00
241	vinyl alcohol	C2H4O	557-75-5	-128	Apprentissage	-134,68	-6,68	-133,92	-5,92
242	Methyl formate	C2H4O2	107-31-3	-336,9	Apprentissage	-338,88	-1,98	-339,05	-2,15
243	(Z) Ethene-1,2-diol	C2H4O2	65144-74-3	-316	Test	-331,30	-15,30	-320,13	-4,13
244	1,2-Ethanediol	C2H6O2	107-21-1	-394,4	Apprentissage	-393,45	0,95	-394,66	-0,26
245	Peroxide, dimethyl	C2H6O2	690-02-8	-126	Apprentissage	-124,49	1,51	-124,92	1,08
246	1,3-Dioxol-2-one	C3H2O3	872-36-6	-418,61	Apprentissage	-408,20	10,41	-409,86	8,75
247	Cyclopropanone	C3H4O	5009-27-8	16	Apprentissage	16,00	0,00	15,97	-0,03
248	Acrylic acid	C3H4O2	79-10-7	-330,7	Apprentissage	-331,51	-0,81	-332,23	-1,53
249	1,3-Dioxolan-2-one	C3H4O3	96-49-1	-503	Apprentissage	-513,41	-10,41	-511,97	-8,97
250	Tartronic acid	C3H4O5	80-69-3	-952	Apprentissage	-952,00	0,00	-952,02	-0,02
251	Acetone	C3H6O	67-64-1	-218,5	Apprentissage	-208,80	9,70	-210,80	7,70
252	Oxetane	C3H6O	503-30-0	-80,54	Apprentissage	-88,28	-7,74	-85,34	-4,80
253	Propanal	C3H6O	123-38-6	-188,7	Apprentissage	-191,48	-2,78	-189,06	-0,36
254	Propen-2-ol	C3H6O	29456-04-0	-176	Test	-170,89	5,11	-171,45	4,55
255	(Z)-1-Propenol	C3H6O	57642-96-3	-174	Apprentissage	-170,44	3,56	-166,45	7,55
256	Ethyl formate	C3H6O2	109-94-4	-361,7	Apprentissage	-359,72	1,98	-359,58	2,12
257	Methyl acetate	C3H6O2	79-20-9	-410	Apprentissage	-402,31	7,69	-401,49	8,51
258	Propanoic acid	C3H6O2	79-09-4	-455,8	Test	-452,16	3,64	-455,05	0,75
259	Acetic acid, hydroxy-, methyl ester	C3H6O3	96-35-5	-556,9	Apprentissage	-556,90	0,00	-556,92	-0,02
260	Ethyl methyl ether	C3H8O	540-67-0	-216,4	Test	-212,36	4,04	-215,29	1,11
261	1-Propanol	C3H8O	71-23-8	-255,1	Test	-256,28	-1,18	-252,89	2,21
262	2-Propanol	C3H8O	67-63-0	-272,8	Apprentissage	-269,21	3,59	-271,85	0,95

263	2-Methoxyethanol	C3H8O2	109-86-4	-376,9	Apprentissage	-387,33	-10,43	-377,24	-0,34
264	1,2-Propanediol	C3H8O2	57-55-6	-429,8	Apprentissage	-423,51	6,29	-423,75	6,05
265	1,3-Propanediol	C3H8O2	504-63-2	-408,4	Apprentissage	-406,78	1,62	-406,96	1,44
266	Hydroperoxide, 1-methylethyl	C3H8O2	3031-75-2	-197,1	Apprentissage	-201,69	-4,59	-200,40	-3,30
267	Glycerol	C3H8O3	56-81-5	-577,9	Apprentissage	-581,52	-3,62	-580,94	-3,04
268	3-Cyclobutene-1,2-dione, 3,4-dihydroxy-	C4H2O4	2892-51-5	-515	Apprentissage	-515,00	0,00	-515,02	-0,02
269	Furan	C4H4O	110-00-9	-27,7	Apprentissage	-27,70	0,00	-27,73	-0,03
270	1-Buten-3-yn-2-ol	C4H4O	103905-52-8	83	Apprentissage	72,38	-10,62	77,08	-5,92
271	Diketene	C4H4O2	674-82-8	-190,2	Apprentissage	-195,16	-4,96	-194,48	-4,28
272	1,4-Dioxane-2,5-dione	C4H4O4	502-97-6	-615,6	Apprentissage	-617,92	-2,32	-614,31	1,29
273	Divinyl ether	C4H6O	109-93-3	-12,7	Apprentissage	-12,70	0,00	-12,74	-0,04
274	2-Butenal	C4H6O	4170-30-3	-109,7	Apprentissage	-112,21	-2,51	-105,97	3,73
275	Methacrolein	C4H6O	78-85-3	-106,4	Apprentissage	-112,66	-6,26	-110,16	-3,76
276	Furan, 2,3-dihydro-	C4H6O	1191-99-7	-72,25	Apprentissage	-72,25	0,00	-72,27	-0,02
277	(Z)-1,3-Butadien-1-ol	C4H6O	70415-58-6	-90	Test	-84,47	5,53	-85,28	4,72
278	(E)-1,3-Butadien-1-ol	C4H6O	70411-98-2	-88	Test	-84,47	3,53	-85,28	2,72
279	1,3-Butadiene-2-ol	C4H6O	59120-04-6	-77	Test	-84,92	-7,92	-83,95	-6,95
280	Methacrylic acid	C4H6O2	79-41-4	-367,3	Apprentissage	-367,72	-0,42	-369,77	-2,47
281	Methyl acrylate	C4H6O2	96-33-3	-333	Apprentissage	-333,00	0,00	-333,02	-0,02
282	Vinyl acetate	C4H6O2	108-05-4	-313,6	Apprentissage	-322,39	-8,79	-322,02	-8,42
283	Crotonic acid	C4H6O2	3724-65-0	-368,5	Apprentissage	-367,27	1,23	-364,54	3,96
284	2,3-Butanedione	C4H6O2	625-34-3	-326,8	Apprentissage	-334,77	-7,97	-332,75	-5,95
285	Dimethyl oxalate	C4H6O4	553-90-2	-709,27	Apprentissage	-717,58	-8,31	-709,27	0,00
286	2-Butanone	C4H8O	78-93-3	-238,6	Apprentissage	-240,86	-2,26	-237,86	0,74
287	Ethyl vinyl ether	C4H8O	109-92-2	-140,2	Apprentissage	-144,04	-3,84	-144,23	-4,03
288	Isobutanal	C4H8O	78-84-2	-215,7	Apprentissage	-215,70	0,00	-215,73	-0,03
289	Cyclobutanol	C4H8O	2919-23-5	-145	Apprentissage	-141,07	3,93	-145,46	-0,46
290	1-Propene, 2-methoxy-	C4H8O	116-11-0	-148,6	Apprentissage	-145,25	3,35	-147,54	1,06
291	Prop-1-en-1-ol, 2-methyl-	C4H8O	56640-70-1	-207	Apprentissage	-211,81	-4,81	-209,20	-2,20
292	But-2-en-2-ol, (Z)-	C4H8O	23169-87-1	-212	Apprentissage	-211,81	0,19	-209,20	2,80
293	But-2-en-2-ol, (E)-	C4H8O	21451-76-3	-214	Apprentissage	-211,81	2,19	-209,20	4,80
294	1,3-Dioxane	C4H8O2	505-22-6	-340,6	Apprentissage	-330,29	10,31	-331,13	9,47
295	2-Methyl-1,3-dioxolane	C4H8O2	497-26-7	-350	Apprentissage	-353,24	-3,24	-352,05	-2,05
296	Ethene, 1,1-dimethoxy-	C4H8O2	922-69-0	-280,7	Apprentissage	-280,46	0,24	-279,24	1,46
297	2-Methoxy-1,3-dioxolane	C4H8O3	19693-75-5	-483,2	Apprentissage	-483,20	0,00	-483,22	-0,02
298	1,3,5,7-Tetroxane	C4H8O4	293-30-1	-620,24	Apprentissage	-622,18	-1,94	-622,78	-2,54
299	1-Butanol	C4H10O	71-36-3	-277	Test	-277,12	-0,12	-273,38	3,62
300	2-Butanol	C4H10O	78-92-2	-293,1	Apprentissage	-289,77	3,33	-292,01	1,09

301	Diethyl ether	C4H100	60-29-7	-252,7	Apprentissage	-247,37	5,33	-249,59	3,11
302	2-Methyl-1-propanol	C4H100	78-83-1	-283,8	Test	-286,63	-2,83	-283,15	0,65
303	2-Methyl-2-propanol	C4H100	75-65-0	-312,6	Apprentissage	-312,60	0,00	-312,62	-0,02
304	Methyl propyl ether	C4H100	557-17-5	-238,02	Test	-233,20	4,82	-235,90	2,12
305	2-Butanol	C4H100	15892-23-6	-292,7	Apprentissage	-289,77	2,93	-292,01	0,69
306	1,3-Butanediol	C4H1002	107-88-0	-433	Apprentissage	-442,37	-9,37	-436,91	-3,91
307	1,4-Butanediol	C4H1002	110-63-4	-426	Apprentissage	-427,62	-1,62	-427,48	-1,48
308	tert-Butyl hydroperoxide	C4H1002	75-91-2	-234,9	Apprentissage	-230,31	4,59	-231,63	3,27
309	Peroxide, diethyl	C4H1002	628-37-5	-193	Apprentissage	-194,51	-1,51	-194,13	-1,13
310	Diethylene glycol	C4H1003	111-46-6	-571,2	Apprentissage	-560,77	10,43	-570,95	0,25
311	Cyclopentanol	C5H100	96-41-3	-243	Apprentissage	-239,55	3,45	-240,50	2,50
312	3,3-Dimethyloxetane	C5H100	6921-35-3	-148,2	Apprentissage	-141,78	6,42	-143,70	4,50
313	3-Methyl-2-butanone	C5H100	563-80-4	-262,57	Apprentissage	-262,57	0,00	-262,60	-0,03
314	Pentanal	C5H100	110-62-3	-228,4	Apprentissage	-233,16	-4,76	-232,88	-4,48
315	1,4-Naphthalenedione	C10H602	130-15-4	-97,5	Apprentissage	-97,50	0,00	-97,52	-0,02
316	1,4-Naphthalenedione, 5,8-dihydroxy-	C10H604	475-38-7	-499,1	Apprentissage	-500,17	-1,07	-499,16	-0,06
317	1-Naphthol	C10H80	90-15-3	-30,8	Apprentissage	-28,97	1,83	-28,05	2,75
318	11-Oxabicyclo[4,4,1]undeca-1,3,5,7,9-pentaene	C10H80	4759-11-9 -	200	Apprentissage	199,28	-0,72	201,11	1,11
319	1,2-Dihydroxynaphthalene	C10H802	574-00-5	-200,5	Apprentissage	-191,66	8,84	-200,62	-0,12
320	1,3-Naphthalenediol	C10H802	132-86-5	-211,2	Apprentissage	-205,80	5,40	-211,29	-0,09
321	3-Buten-2-one, 4-phenyl-	C10H100	122-57-6	-48,1	Apprentissage	-48,10	0,00	-48,11	-0,01
322	1,3-Butanedione, 1-phenyl-	C10H1002	93-91-4	-244,1	Apprentissage	-242,24	1,86	-243,93	0,17
323	Homocubane-4-carboxylic acid	C10H1002	15844-05-0	3	Test	-8,14	-11,14	-22,20	-25,20
324	Dimethyl isophthalate	C10H1004	1459-93-4	-629,2	Apprentissage	-624,45	4,75	-629,07	0,13
325	Dimethyl phthalate	C10H1004	131-11-3	-606,1	Apprentissage	-612,17	-6,07	-607,65	-1,55
326	2,3,6-Trimethylbenzoic acid	C10H1202	2529-36-4	-371,2	Apprentissage	-373,23	-2,03	-374,26	-3,06
327	Benzoic acid, 2,4,5-trimethyl-	C10H1202	528-90-5	-386,2	Apprentissage	-389,30	-3,10	-385,62	0,58
328	2,3,4-Trimethylbenzoic acid	C10H1202	1076-47-7	-377,3	Apprentissage	-373,23	4,07	-374,26	3,04
329	2,3,5-Trimethylbenzoic acid	C10H1202	2437-66-3	-382,2	Apprentissage	-379,35	2,85	-382,26	-0,06
330	3,4,5-Trimethylbenzoic acid	C10H1202	1076-88-6	-389,8	Apprentissage	-379,35	10,45	-382,26	7,54
331	Benzoic acid, 2-(1-methylethyl)-	C10H1202	2438-04-2 -	-359,2	Apprentissage	-354,41	4,79	-355,18	4,02
332	1,3-Dioxolane, 2-methyl-2-phenyl-	C10H1202	3674-77-9	-261,9	Apprentissage	-258,66	3,24	-259,89	2,01
333	Oxirane, [(phenylmethoxy)methyl]-	C10H1202	2930-05-4 -	-138	Apprentissage	-138,00	0,00	-138,06	-0,06
334	Thymol	C10H140	89-83-8	-184,6	Apprentissage	-192,42	-7,82	-189,76	-5,16
335	Phenol, 2-methyl-5-(1-methylethyl)-	C10H140	499-75-2	-194,2	Apprentissage	-192,42	1,78	-189,76	4,44
336	3-Methyl-4-isopropylphenol	C10H140	3228-02-2 -	-184	Apprentissage	-192,42	-8,42	-189,76	-5,76
337	5-Isopropyl-3-methylphenol	C10H140	3228-03-3 -	-210,1	Apprentissage	-206,81	3,29	-210,08	0,02
338	Phenol, 2-(1-methylpropyl)-	C10H140	89-72-5	-191,4	Apprentissage	-187,60	3,80	-187,40	4,00

339	Phenol, 4-methyl-2-(1-methylethyl)-	C10H14O	4427-56-9	-198,4	Apprentissage	-192,42	5,98	-189,76	8,64
340	Phenol, 2-methyl-6-(1-methylethyl)-	C10H14O	3228-04-4 -	-190	Apprentissage	-183,17	6,83	-182,48	7,52
341	Phenol, 2-methyl-3-(1-methylethyl)-	C10H14O	4371-48-6	-182,6	Apprentissage	-183,17	-0,57	-182,48	0,12
342	2-isopropyl-m-cresol	C10H14O	3228-01-1 -	-172	Apprentissage	-183,17	-11,17	-182,48	-10,48
343	Phenol, 4-methyl-3-(1-methylethyl)-	C10H14O	4371-46-4	-185,1	Apprentissage	-192,42	-7,32	-189,76	-4,66
344	p-tert,-Butylcatechol	C10H14O2	98-29-3	-374,7	Apprentissage	-371,20	3,50	-376,67	-1,97
345	(1,1-dimethoxyethyl)benzene	C10H14O2	4316-35-2	-288,5	Apprentissage	-284,16	4,34	-285,06	3,44
346	3-Methyl-6-isopropylcatechol	C10H14O2	490-06-2	-379,1	Apprentissage	-376,10	3,00	-379,55	-0,45
347	Benzene, (trimethoxymethyl)-	C10H14O3	707-07-3	-433,3	Apprentissage	-436,19	-2,89	-435,67	-2,37
348	Adamantan-2-ol	C10H16O	700-57-2	-299	Apprentissage	-300,72	-1,72	-300,65	-1,65
349	(1 α ,3 α ,5 α ,7 α)-3,8,8-trimethyl-4-oxatricyclo[5,1,0,0 β ,5]octane	C10H16O	35671-18-2	-98	Apprentissage	-93,31	4,69	-90,93	7,07
350	Triethyl methanetricarboxylate	C10H16O6	6279-86-3	-1173	Apprentissage	-1163,18	9,82	-1173,06	-0,06
351	Cyclodecanone	C10H18O	1502-06-3	-305,1	Apprentissage	-303,83	1,27	-302,90	2,20
352	Beta-caran-3-ol	C10H18O	54631-17-3	-259	Apprentissage	-258,79	0,21	-257,82	1,18
353	Alpha-caran-3-ol	C10H18O	38748-97-9	-250	Apprentissage	-258,79	-8,79	-257,82	-7,82
354	2(3H)-Furanone, 5-hexyldihydro-	C10H18O2	706-14-9	-496	Apprentissage	-491,35	4,65	-498,54	-2,54
355	Butanoic acid, cyclohexyl ester	C10H18O2	1551-44-6	-545,7	Apprentissage	-545,70	0,00	-545,72	-0,02
356	3,5-Heptanedione, 2,2,6-trimethyl-	C10H18O2	7333-23-5	-510,7	Apprentissage	-510,70	0,00	-510,72	-0,02
357	2,2,5,5-Tetramethyl-3-hexanone	C10H20O	868-91-7	-393,9	Apprentissage	-393,90	0,00	-393,91	-0,01
358	Methyl nonanoate	C10H20O2	1731-84-6	-554,2	Apprentissage	-563,59	-9,39	-561,49	-7,29
359	Octanoic acid, ethyl ester	C10H20O2	106-32-1	-570	Apprentissage	-563,59	6,41	-561,49	8,51
360	15-Crown-5	C10H20O5	33100-27-5	-799,5	Apprentissage	-799,50	0,00	-799,52	-0,02
361	1-Decanol	C10H22O	112-30-1	-395	Test	-402,16	-7,16	-396,15	-1,15
362	1-Tert-butoxy-3-propoxy-2-propanol	C10H22O3	42991-60-6	-708	Apprentissage	-710,34	-2,34	-703,75	4,25
363	2-Naphthalenecarboxylic acid	C11H8O2	93-09-4	-232,5	Apprentissage	-235,85	-3,35	-230,34	2,16
364	2-Phenylbicyclo[1,1,1]pentane-2-ol	C11H12O	17684-73-0	135,8	Apprentissage	144,38	8,58	142,39	6,59
365	4-Carbomethoxyhomocubane	C11H12O2	40317-63-3	26	Apprentissage	22,98	-3,02	26,04	0,04
366	Benzal diacetate	C11H12O4	581-55-5	-676,85	Apprentissage	-676,85	0,00	-676,83	0,02
367	Ethanone, 1-(2,4,5-trimethylphenyl)-	C11H14O	2040-07-5 -	-189	Apprentissage	-188,94	0,06	-188,55	0,45
368	1-Butanone, 3-methyl-1-phenyl-	C11H14O	582-62-7	-160,7	Apprentissage	-156,24	4,46	-156,14	4,56
369	Benzoic acid, p-tert-butyl-	C11H14O2	98-73-7	-398,5	Test	-395,08	3,42	-387,16	11,34
370	2,3,5,6-Tetramethylbenzoic acid	C11H14O2	2604-45-7	-400,1	Apprentissage	-400,19	-0,09	-398,86	1,24
371	2,3,4,5-Tetramethylbenzoic acid	C11H14O2	2529-39-7	-398,7	Apprentissage	-400,19	-1,49	-398,86	-0,16
372	2,3,4,6-Tetramethylbenzoic acid	C11H14O2	2408-38-0	-398,1	Apprentissage	-400,19	-2,09	-398,86	-0,76
373	3-Tert-butylbenzoic acid	C11H14O2	7498-54-6	-400,8	Apprentissage	-396,74	4,06	-398,21	2,59
374	1,2-Propadiene-1,3-dione	C3O2	504-64-3	-93,64	Apprentissage	-93,64	0,00	-93,67	-0,03
375	Butanal	C4H8O	123-72-8	-211,8	Apprentissage	-212,32	-0,52	-210,91	0,89
376	Succinic anhydride	C4H4O3	108-30-5	-527,9	Apprentissage	-522,94	4,96	-523,41	4,49

377	1,3,5-Trioxane	C3H6O3	110-88-3	-465,76	Apprentissage	-466,61	-0,85	-465,77	-0,01
378	Benzoic acid, 3-(1-methylethyl)-	C10H12O2	5651-47-8	-375,5	Test	-366,68	8,82	-365,13	10,37
379	Phenol, 2-(1,1-dimethylethyl)-	C10H14O	88-18-6	-199,1	Test	-196,52	2,58	-192,40	6,70
380	Butanoic acid	C4H8O2	107-92-6	-475,9	Apprentissage	-473,00	2,90	-475,02	0,88
381	Acetic acid	C2H4O2	64-19-7	-431,9	Apprentissage	-431,32	0,58	-435,02	-3,12
382	Benzoic acid, 2,4,6-trimethyl-	C10H12O2	480-63-7	-374,2	Apprentissage	-379,35	-5,15	-382,26	-8,06
383	2-Tert-butylbenzoic acid	C11H14O2	1077-58-3	-376,1	Apprentissage	-384,47	-8,37	-381,43	-5,33
384	(E)-1-Propenol	C3H6O	57642-95-2	-169	Test	-170,44	-1,44	-166,45	2,55
385	Allyl alcohol	C3H6O	107-18-6	-123,6	Test	-128,94	-5,34	-125,53	-1,93
386	Isopropyl methyl ether	C4H10O	598-53-8	-252	Test	-242,71	9,29	-244,37	7,63
387	1,4-Dioxane	C4H8O2	123-91-1	-315,3	Apprentissage	-322,79	-7,49	-322,61	-7,31
388	1-Naphthalenecarboxylic acid	C11H8O2	86-55-5	-223,1	Apprentissage	-216,93	6,17	-224,52	-1,42
389	Phenol, 4-(1-methylpropyl)-	C10H14O	99-71-8	-190,3	Apprentissage	-198,21	-7,91	-193,77	-3,47
390	Dimethyl ether	C2H6O	115-10-6	-184,1	Test	-191,52	-7,42	-194,62	-10,52
391	1,2-Dimethoxyethane	C4H10O2	110-71-4	-342,8	Test	-341,89	0,91	-343,60	-0,80
392	2H-Inden-2-one, octahydro-3a-methyl-, cis-	C10H16O	13351-29-6	-287	Test	-294,68	-7,68	-289,76	-2,76
393	Camphor	C10H16O	76-22-2	-267	Test	-278,32	-11,32	-275,72	-8,72
394	1H-1,2,4-Triazole	C2H3N3	288-88-0	192,7	Apprentissage	192,70	0,00	192,66	-0,04
395	Imidazole	C3H4N2	288-32-4	132,9	Apprentissage	132,90	0,00	132,86	-0,04
396	1H-Tetrazole, 1-methyl-	C2H4N4	16681-77-9	322,9	Apprentissage	322,79	-0,11	322,40	-0,50
397	1H-Pyrazole	C3H4N2	288-13-1	179,4	Apprentissage	176,34	-3,06	177,34	-2,06
398	2H-Tetrazole, 2-methyl-	C2H4N4	16681-78-0	328,4	Apprentissage	328,40	0,00	328,33	-0,07
399	Ethyleneimine	C2H5N	151-56-4	126,5	Apprentissage	122,70	-3,80	119,29	-7,21
400	5-Amino-2-methyl-2H-tetrazole	C2H5N5	6154-04-7 -	298,8	Apprentissage	295,74	-3,06	296,70	-2,10
401	1H-Tetrazol-5-amine, 1-methyl-	C2H5N5	5422-44-6	302,4	Apprentissage	307,29	4,89	305,87	3,47
402	Dimethylamine	C2H7N	124-40-3	-19	Apprentissage	-20,38	-1,38	-22,54	-3,54
403	1,2-Ethanediamine	C2H8N2	107-15-3	-17	Apprentissage	-19,93	-2,93	-21,09	-4,09
404	Cyanogen	C2N2	460-19-5	306,7	Test	306,15	-0,55	310,60	3,90
405	1,3,5-Triazine	C3H3N3	290-87-9	225,87	Test	244,40	18,53	243,49	17,62
406	1H-Imidazole, 2-methyl-	C4H6N2	693-98-1	89,8	Apprentissage	91,04	1,24	91,61	1,81
407	Propanenitrile	C3H5N	107-12-0	51,46	Test	55,83	4,37	55,51	4,05
408	1H-Tetrazole, 1,5-dimethyl-	C3H6N4	5144-11-6 -	273,2	Apprentissage	265,39	-7,81	267,66	-5,54
409	2H-Tetrazole, 2,5-dimethyl-	C3H6N4	4135-93-7	251,2	Apprentissage	251,20	0,00	251,19	-0,01
410	Cyclopropylamine	C3H7N	765-30-0	77,07	Apprentissage	67,67	-9,40	67,10	-9,97
411	Isopropylamine	C3H9N	75-31-0	-83,7	Apprentissage	-86,64	-2,94	-85,35	-1,65
412	Propylamine	C3H9N	107-10-8	-69,9	Test	-74,78	-4,88	-73,96	-4,06
413	Trimethylamine	C3H9N	75-50-3	-23,7	Apprentissage	-21,13	2,57	-23,75	-0,05
414	1,2-Propanediamine, (±)-	C3H10N2	10424-38-1	-53,68	Apprentissage	-52,35	1,33	-52,25	1,43

415	1,2-Propanediamine	C3H10N2	78-90-0	-53,6	Apprentissage	-52,35	1,25	-52,25	1,35
416	Succinonitrile	C4H4N2	110-61-2	209,7	Apprentissage	206,80	-2,90	206,08	-3,62
417	3-Butenenitrile	C4H5N	109-75-1	157,7	Apprentissage	162,33	4,63	162,00	4,30
418	1H-Imidazole, 2-ethyl-	C5H8N2	1072-62-4	68,3	Apprentissage	65,60	-2,70	66,84	-1,46
419	1H-Benzotriazole	C6H5N3	95-14-7	335,5	Apprentissage	335,50	0,00	335,47	-0,03
420	2-Methyl-5-vinyltetrazole	C4H6N4	15284-39-6	354	Apprentissage	357,06	3,06	356,09	2,09
421	2-Methylpropanenitrile	C4H7N	78-82-0	22,8	Apprentissage	19,87	-2,93	19,31	-3,49
422	1-Pyrroline	C4H7N	5724-81-2	63	Apprentissage	63,00	0,00	62,97	-0,03
423	Piperazine	C4H10N2	110-85-0	25	Test	29,70	4,70	19,19	-5,81
424	Butylamine	C4H11N	109-73-9	-95	Apprentissage	-95,62	-0,62	-94,58	0,42
425	tert-Butylamine	C4H11N	75-64-9	-120	Apprentissage	-120,00	0,00	-121,43	-1,43
426	sec-Butylamine	C4H11N	13952-84-6	-106	Apprentissage	-107,20	-1,20	-106,80	-0,80
427	2-Methyl-1,2-propanediamine	C4H12N2	811-93-8	-90,25	Apprentissage	-90,25	0,00	-88,87	1,38
428	1,2-Butanediamine	C4H12N2	4426-48-6	-73,55	Apprentissage	-73,19	0,36	-73,75	-0,20
429	Pyridine	C5H5N	110-86-1	140,4	Apprentissage	142,35	1,95	142,04	1,64
430	3-Methylenecyclobutanenitrile	C6H7N	15760-35-7	252,4	Apprentissage	259,75	7,35	257,84	5,44
431	4-Aminopyridine	C5H6N2	504-24-5	129,9	Apprentissage	137,58	7,68	136,08	6,18
432	2-Aminopyridine	C5H6N2	504-29-0	118,1	Apprentissage	127,62	9,52	126,82	8,72
433	3-Aminopyridine	C5H6N2	462-08-8	144,2	Apprentissage	138,04	-6,16	137,23	-6,97
434	Butanenitrile, 2-methyl-	C5H9N	18936-17-9	2,4	Apprentissage	-0,69	-3,09	-2,35	-4,75
435	1H-Benzimidazole	C7H6N2	51-17-2	181,7	Apprentissage	181,70	0,00	181,68	-0,02
436	Propanenitrile, 3-(dimethylamino)-	C5H10N2	1738-25-6	96,7	Apprentissage	96,69	-0,01	96,09	-0,61
437	Cyclopentylamine	C5H11N	1003-03-8	-54,86	Apprentissage	-45,46	9,40	-44,98	9,88
438	Butylmethyldiazene	C5H12N2	4426-46-4	78,9	Apprentissage	79,96	1,06	79,96	1,06
439	1,3-Propanediamine, N,N-dimethyl-	C5H14N2	109-55-7	-34,7	Apprentissage	-33,92	0,78	-31,74	2,96
440	Tetracyanoethene	C6N4	670-54-2	705	Apprentissage	705,00	0,00	704,95	-0,05
441	3-Pyridinecarbonitrile	C6H4N2	100-54-9	277,9	Apprentissage	282,53	4,63	280,22	2,32
442	4-Pyridinecarbonitrile	C6H4N2	100-48-1	283,5	Apprentissage	282,08	-1,42	278,91	-4,59
443	2-Pyridinecarbonitrile	C6H4N2	100-70-9	280,7	Apprentissage	272,11	-8,59	269,80	-10,90
444	1H-Indazole	C7H6N2	271-44-3	243	Apprentissage	243,00	0,00	242,98	-0,02
445	1-Cyclopentenecarbonitrile	C6H7N	3047-38-9	141,8	Apprentissage	145,00	3,20	144,78	2,98
446	2-Methylpyridine	C6H7N	109-06-8	98,95	Apprentissage	98,02	-0,93	100,89	1,94
447	3-Methylpyridine	C6H7N	108-99-6	103,6	Apprentissage	108,44	4,84	102,69	-0,91
448	4-Methylpyridine	C6H7N	108-89-4	103,8	Apprentissage	107,98	4,18	104,62	0,82
449	2-Cyclopentene-1-carbonitrile	C6H7N	26555-56-6	156,4	Apprentissage	150,45	-5,95	150,97	-5,43
450	1H-Tetrazole, 5-phenyl-	C7H6N4	18039-42-4	413	Apprentissage	418,64	5,64	415,75	2,75
451	Hexanedinitrile	C6H8N2	111-69-3	149	Apprentissage	149,00	0,00	148,97	-0,03
452	Phenylhydrazine	C6H8N2	100-63-0	202,9	Apprentissage	201,68	-1,22	201,57	-1,33

453	Cyclopentanecarbonitrile	C6H9N	4254-02-8 -	48,8	Apprentissage	45,25	-3,55	46,00	-2,80
454	2-(Diethylamino)acetonitrile	C6H12N2	3010-02-4 -	66	Apprentissage	62,85	-3,15	66,86	0,86
455	Tetramethyldiazetine	C6H12N2	54166-22-2	150,3	Apprentissage	152,65	2,35	155,36	5,06
456	Methenamine	C6H12N4	100-97-0	199	Apprentissage	197,51	-1,49	198,02	-0,98
457	Azopropane	C6H14N2	821-67-0	62,4	Apprentissage	59,12	-3,28	59,35	-3,05
458	Diazene, diisopropyl	C6H14N2	3880-49-7	36	Apprentissage	40,09	4,09	39,16	3,16
459	Diisopropylamine	C6H15N	108-18-9	-136,3	Apprentissage	-139,40	-3,10	-139,09	-2,79
460	Dipropylamine	C6H15N	142-84-7	-116,5	Apprentissage	-124,85	-8,35	-126,24	-9,74
461	Benzonitrile	C7H5N	100-47-0	219	Apprentissage	226,21	7,21	222,66	3,66
462	1H-Tetrazole, 1-phenyl-	C7H6N4	5378-52-9	448	Apprentissage	445,40	-2,60	447,73	-0,27
463	Benzylamine	C7H9N	100-46-9	87,8	Apprentissage	87,80	0,00	87,78	-0,02
464	1-Cyclohexanecarbonitrile	C7H9N	1855-63-6	101,5	Apprentissage	98,30	-3,20	98,49	-3,01
465	2,3-Dimethylpyridine	C7H9N	583-61-9	68,3	Apprentissage	66,26	-2,04	63,75	-4,55
466	2,4-Dimethylpyridine	C7H9N	108-47-4	63,9	Apprentissage	70,46	6,56	64,70	0,80
467	2,5-Dimethylpyridine	C7H9N	589-93-5	66,4	Apprentissage	67,51	1,11	64,31	-2,09
468	2,6-Dimethylpyridine	C7H9N	108-48-5	58,7	Apprentissage	58,70	0,00	58,67	-0,03
469	3,4-Dimethylpyridine	C7H9N	583-58-4	70	Apprentissage	70,00	0,00	69,97	-0,03
470	3,5-Dimethylpyridine	C7H9N	591-22-0	72,8	Apprentissage	72,80	0,00	72,77	-0,03
471	2-Methylaniline	C7H9N	95-53-4	53,2	Apprentissage	53,97	0,77	49,48	-3,72
472	4-Methylaniline	C7H9N	106-49-0	41,8	Test	43,36	1,56	38,53	-3,27
473	N-Methylaniline	C7H9N	100-61-8	83,9	Apprentissage	79,27	-4,63	78,99	-4,91
474	Pyrazine, trimethyl-	C7H10N2	14667-55-1	74,3	Apprentissage	75,75	1,45	76,34	2,04
475	Hydrazine, 1-methyl-1-phenyl-	C7H10N2	618-40-6	210,8	Apprentissage	212,02	1,22	212,08	1,28
476	t-Butylmalononitrile	C7H10N2	4210-60-0	126,7	Apprentissage	134,82	8,12	135,56	8,86
477	Cyclohexanecarbonitrile	C7H11N	766-05-2	-3,6	Apprentissage	-1,46	2,14	-0,83	2,77
478	1-Piperidineacetonitrile	C7H12N2	3010-03-5 -	83	Apprentissage	83,00	0,00	82,97	-0,03
479	Quinuclidine	C7H13N	100-76-5	-4,3	Apprentissage	1,65	5,95	-0,60	3,70
480	3,3,5,5-Tetramethyl-1-pyrazoline	C7H14N2	2721-31-5	39	Test	40,48	1,48	32,87	-6,13
481	1-Butanamine, N-(1-methylethyl)-	C7H17N	39099-23-5	-165	Apprentissage	-155,20	9,80	-154,82	10,18
482	1,2-Benzenedicarbonitrile	C8H4N2	91-15-6	368,3	Apprentissage	372,56	4,26	369,28	0,98
483	1,4-Benzenedicarbonitrile	C8H4N2	623-26-7	358,3	Apprentissage	361,94	3,64	358,61	0,31
484	1,3-Dicyanobenzene	C8H4N2	626-17-5	362,7	Apprentissage	360,29	-2,41	365,97	3,27
485	Quinoxaline	C8H6N2	91-19-0	240,3	Test	254,43	14,13	253,64	13,34
486	N,N-Dimethylaniline	C8H11N	121-69-7	100,5	Apprentissage	89,60	-10,90	88,92	-11,58
487	N-Ethylaniline	C8H11N	103-69-5	56,1	Apprentissage	58,43	2,33	58,65	2,55
488	Pyridine, 5-ethyl-2-methyl-	C8H11N	104-90-5	34,9	Apprentissage	45,21	10,31	40,01	5,11
489	Pyrazine, tetramethyl-	C8H12N2	1124-11-4	54,7	Test	36,54	-18,16	37,30	-17,40
490	Tetramethylbutanedinitrile	C8H12N2	3333-52-6	100,6	Apprentissage	104,79	4,19	103,92	3,32

491	n-Pentylmalononitrile	C8H12N2	42046-61-7	135,8	Apprentissage	131,28	-4,52	133,07	-2,73
492	1,4-Dimethyl-2,3-diaza-bicyclo[2,2,2]oct-2-ene	C8H14N2	49570-30-1	92,4	Test	93,23	0,83	90,55	-1,85
493	Octanenitrile	C8H15N	124-12-9	-50,6	Test	-48,37	2,23	-47,90	2,70
494	3,4,5,6-Tetrahydro-3,3,6,6-tetramethylpyridazine	C8H16N2	19403-24-8	41,8	Apprentissage	39,45	-2,35	36,78	-5,02
495	Butanamide, 3-methyl-N-(2-methylpropylidene)	C8H17N	6898-75-5	-91,2	Apprentissage	-88,24	2,96	-88,64	2,56
496	Azobutane	C8H18N2	2159-75-3	19,3	Apprentissage	17,43	-1,87	18,01	-1,29
497	Dibutylamine	C8H19N	111-92-2	-171,1	Apprentissage	-166,53	4,57	-167,50	3,60
498	Diisobutylamine	C8H19N	110-96-3	-180,8	Apprentissage	-185,55	-4,75	-184,74	-3,94
499	2-Butanamine, N-(1-methylpropyl)-	C8H19N	626-23-3	-183,6	Apprentissage	-180,50	3,10	-180,84	2,76
500	isobutyl-n-butyl-amine	C8H19N	20810-06-4	-175	Apprentissage	-176,04	-1,04	-175,69	-0,69
501	benzene-1,3,5-tricarbonitrile	C9H3N3	10365-94-3	509,6	Apprentissage	506,31	-3,29	509,51	-0,09
502	Isoquinoline	C9H7N	119-65-3	204,61	Apprentissage	204,61	0,00	204,58	-0,03
503	Quinoline	C9H7N	91-22-5	200,52	Apprentissage	196,05	-4,47	196,56	-3,96
504	5-Quinolinamine	C9H8N2	611-34-7	210,6	Apprentissage	216,12	5,52	213,70	3,10
505	6-Quinolinamine	C9H8N2	580-15-4	206,1	Apprentissage	197,19	-8,91	199,72	-6,38
506	Quinoline, 1,2,3,4-tetrahydro-	C9H11N	635-46-1	82	Apprentissage	82,00	0,00	82,01	0,01
507	Quinoline, 5,6,7,8-tetrahydro-	C9H11N	10500-57-9	71	Apprentissage	76,30	5,30	77,73	6,73
508	N-Methyl methanimine	C2H5N	1761-67-7	44	Apprentissage	44,00	0,00	43,97	-0,03
509	Acetaldimine	C2H5N	20729-41-3	24	Apprentissage	24,00	0,00	23,97	-0,03
510	1-Norbornylisocyanide	C8H11N	103434-09-9	165,8	Apprentissage	156,10	-9,70	161,96	-3,84
511	Isocyanomethane	C2H3N	593-75-9	163,5	Apprentissage	163,32	-0,18	159,95	-3,55
512	Ethyl isocyanide	C3H5N	624-79-3	132,6	Apprentissage	142,48	9,88	139,91	7,31
513	Azidocyclopentane	C5H9N3	33670-50-7	220,8	Apprentissage	230,34	9,54	227,90	7,10
514	Pyridinium dicyanomethylide	C8H5N3	27032-01-5	523	Apprentissage	523,00	0,00	522,96	-0,04
515	1-Methylpyrrole	C5H7N	96-54-8	103,1	Apprentissage	109,60	6,50	112,42	9,32
516	Bicyclo[1,1,0]butane-1-carbonitrile	C5H5N	16955-35-4	304,5	Test	309,47	4,97	309,36	4,86
517	Butanenitrile	C4H7N	109-74-0	31,2	Apprentissage	34,99	3,79	34,74	3,54
518	Pentanenitrile	C5H9N	110-59-8	11,1	Test	14,15	3,05	14,03	2,93
519	Heptanenitrile	C7H13N	629-08-3	-31	Apprentissage	-27,53	3,47	-27,29	3,71
520	trans-3-Pentenenitrile	C5H7N	16529-66-1	126	Test	126,57	0,57	130,85	4,85
521	Acetonitrile, (diméthylamino)-	C4H8N2	926-64-7	114,39	Apprentissage	117,53	3,14	116,44	2,05
522	3-Aminopropionitrile	C3H6N2	151-18-8	89,75	Test	84,73	-5,02	87,50	-2,25
523	Ethylamine	C2H7N	75-04-7	-57,7	Test	-53,93	3,77	-53,30	4,40
524	Aniline	C6H7N	62-53-3	87,03	Test	81,71	-5,32	78,62	-8,41
525	2-Butynedinitrile	C4N2	1071-98-3	533,46	Apprentissage	535,26	1,80	534,26	0,80
526	Isobutylamine	C4H11N	78-81-9	-98,62	Test	-105,13	-6,51	-102,51	-3,89
527	1-Octanamine	C8H19N	111-86-4	-173,5	Test	-178,98	-5,48	-176,90	-3,40
528	Quinazoline	C8H6N2	253-82-7	243,1	Test	254,43	11,33	253,64	10,54

529	Pyrazine, 2,3-dimethyl-	C6H8N2	5910-89-4	126	Test	114,96	-11,04	115,31	-10,69
530	Pyrimidine	C4H4N2	289-95-2	195,8	Apprentissage	193,37	-2,43	192,91	-2,89
531	Pyrazine	C4H4N2	290-37-9	196,1	Test	193,37	-2,73	192,91	-3,19
532	Dinitromethane	CH2N2O4	625-76-3	-58,9	Apprentissage	-69,54	-10,64	-65,70	-6,80
533	5-Nitroaminotetrazole	CH2N6O2	18588-16-4	252	Apprentissage	252,00	0,00	251,97	-0,03
534	Methyl nitrate	CH3NO3	598-58-3	-122	Apprentissage	-116,72	5,28	-120,26	1,74
535	Nitroglycerin	C3H5N3O9	55-63-0	-279,1	Apprentissage	-277,09	2,01	-279,41	-0,31
536	1-Nitropropane	C3H7NO2	108-03-2	-124,3	Apprentissage	-113,66	10,64	-117,57	6,73
537	2-Nitropropane	C3H7NO2	79-46-9	-138,9	Apprentissage	-138,90	0,00	-138,93	-0,03
538	Alanine	C3H7NO2	56-41-7	-414,7	Apprentissage	-416,68	-1,98	-415,66	-0,96
539	Ethanediamide	C2H4N2O2	471-46-5	-387,1	Apprentissage	-389,33	-2,23	-388,81	-1,71
540	Acetamide	C2H5NO	60-35-5	-238,33	Apprentissage	-236,08	2,25	-238,46	-0,13
541	Acetaldoxime	C2H5NO	107-29-9	-22,55	Apprentissage	-23,45	-0,90	-24,06	-1,51
542	Glycine	C2H5NO2	56-40-6	-390,5	Apprentissage	-384,26	6,24	-391,33	-0,83
543	Ethyl-nitrite-	C2H5NO2	109-95-5	-108	Apprentissage	-104,50	3,50	-105,65	2,35
544	Urea, methyl-	C2H6N2O	598-50-5	-235,68	Apprentissage	-236,08	-0,40	-235,17	0,51
545	N-Nitrosobis-(2,2,2-trinitroethyl)amine	C4H4N8O13	34882-73-0	147	Apprentissage	148,71	1,71	146,92	-0,08
546	N-Nitrobis-(2,2,2-trinitroethyl)amine	C4H4N8O14	19836-28-3	89,6	Apprentissage	88,24	-1,36	88,11	-1,49
547	Morpholine, 4-nitro-	C4H8N2O3	4164-32-3	-131	Test	-127,29	3,71	-127,17	3,83
548	Piperazine, 1,4-dinitro-	C4H8N4O4	4164-37-8	58	Test	68,22	10,22	69,72	11,72
549	2-Azetidione	C3H5NO	930-21-2	-96	Apprentissage	-96,00	0,00	-96,01	-0,01
550	Cyclotetramethylenetetranitramine	C4H8N8O8	2691-41-0	187,9	Apprentissage	189,84	1,94	190,23	2,33
551	Propane, 2-methyl-2-nitro-	C4H9NO2	594-70-7	-177,1	Apprentissage	-178,21	-1,11	-176,91	0,19
552	Acetamide, N-methyl-	C3H7NO	79-16-3	-248	Apprentissage	-248,00	0,00	-248,03	-0,03
553	2-Furancarboxaldehyde, 5-nitro-	C5H3NO4	698-63-5	-147	Apprentissage	-147,00	0,00	-147,03	-0,03
554	Pyridine, 4-nitro-, 1-oxide	C5H4N2O3	1124-33-0	126	Apprentissage	119,79	-6,21	118,10	-7,90
555	Sarcosine	C3H7NO2	107-97-1	-367,3	Apprentissage	-371,55	-4,25	-366,86	0,44
556	β -Alanine	C3H7NO2	107-95-9	-424	Apprentissage	-424,00	0,00	-424,02	-0,02
557	iso-Propyl nitrite	C3H7NO2	541-42-4	-133	Apprentissage	-134,85	-1,85	-134,09	-1,09
558	Propyl nitrite	C3H7NO2	543-67-9	-119	Apprentissage	-125,34	-6,34	-126,24	-7,24
559	Urea, ethyl-	C3H8N2O	625-52-5	-257,5	Apprentissage	-256,92	0,58	-256,27	1,23
560	Urea, N,N-dimethyl-	C3H8N2O	598-94-7	-220	Apprentissage	-225,31	-5,31	-225,53	-5,53
561	Proline	C5H9NO2	147-85-3	-366,2	Apprentissage	-366,20	0,00	-366,23	-0,03
562	Benzofurazan, 4-nitro-, 1-oxide	C6H3N3O4	18771-85-2	299,9	Apprentissage	303,80	3,90	302,88	2,98
563	Benzofuroxan	C6H4N2O2	480-96-6	298,5	Apprentissage	294,60	-3,90	295,48	-3,02
564	Benzene, nitro-	C6H5NO2	98-95-3	68,53	Apprentissage	70,83	2,30	68,26	-0,27
565	Phenol, 4-nitro-	C6H5NO3	100-02-7	-114,7	Apprentissage	-116,24	-1,54	-112,12	2,58
566	3-Methylisoxazole	C4H5NO	30842-90-1	35,6	Apprentissage	30,13	-5,47	27,08	-8,52

567	Acetic acid, cyano-, methyl ester	C4H5NO2	105-34-0	-243,3	Apprentissage	-249,37	-6,07	-250,16	-6,86
568	Cytosine	C4H5N3O	71-30-7	-59	Apprentissage	-60,69	-1,69	-58,78	0,22
569	3-Isoxazolamine, 5-methyl-	C4H6N2O	1072-67-9	20	Apprentissage	19,86	-0,14	18,38	-1,62
570	Furazan, dimethyl-	C4H6N2O	4975-21-7	107	Apprentissage	107,00	0,00	106,98	-0,02
571	Oxazole, 4,5-dihydro-2-methyl-	C4H7NO	1120-64-5	-130,5	Apprentissage	-126,98	3,52	-127,23	3,27
572	Piperazine, 1,4-dinitroso-	C4H8N4O2	140-79-4	194	Apprentissage	189,17	-4,83	188,53	-5,47
573	4-Nitrocatechol	C6H5NO4	3316-09-4	-290	Apprentissage	-280,32	9,68	-287,82	2,18
574	5-Nitro-2-furancarboxylic acid methyl ester	C6H5NO5	1874-23-3	-367	Apprentissage	-369,70	-2,70	-366,98	0,02
575	Propanamide, 2-methyl-	C4H9NO	563-83-7	-282,6	Apprentissage	-287,27	-4,67	-288,31	-5,71
576	Butanamide	C4H9NO	541-35-5	-279,17	Apprentissage	-277,76	1,41	-279,42	-0,25
577	n-Butyl nitrite	C4H9NO2	544-16-1	-146	Apprentissage	-146,18	-0,18	-146,81	-0,81
578	4-Aminobutanoic acid	C4H9NO2	56-12-2	-441	Apprentissage	-440,18	0,82	-440,63	0,37
579	Isobutyl nitrite	C4H9NO2	542-56-3	-151	Apprentissage	-155,69	-4,69	-154,87	-3,87
580	t-Butyl nitrite	C4H9NO2	540-80-7	-172	Apprentissage	-163,48	8,52	-164,86	7,14
581	sec-Butyl nitrite	C4H9NO2	924-43-6	-153	Apprentissage	-155,40	-2,40	-155,15	-2,15
582	isopropylurea	C4H10N2O	691-60-1	-289,8	Apprentissage	-287,27	2,53	-289,26	0,54
583	Diethylhydroxylamine	C4H11NO	3710-84-7	-121,77	Apprentissage	-121,77	0,00	-121,85	-0,08
584	Diethanolamine	C4H11NO2	111-42-2	-397,1	Apprentissage	-397,34	-0,24	-396,59	0,51
585	N-Nitroso-bis-(2,2-dinitropropyl)amine	C6H10N6O9	28464-26-8	-81,5	Apprentissage	-74,35	7,15	-80,90	0,60
586	4-Pyridinol	C5H5NO	626-64-2	-30,3	Apprentissage	-40,74	-10,44	-32,86	-2,56
587	N-Nitro-bis-(2,2-dinitropropyl)amine	C6H10N6O10	28464-24-6	-133	Apprentissage	-134,83	-1,83	-137,69	-4,69
588	3-Pyridinol	C5H5NO	109-00-2	-43,7	Apprentissage	-40,28	3,42	-35,69	8,01
589	Isoxazole, 3,5-dimethyl-	C5H7NO	300-87-8	-18	Apprentissage	-22,05	-4,05	-20,56	-2,56
590	2,5-Pyrrolidinedione, 1-methyl-	C5H7NO2	1121-07-9	-389,7	Apprentissage	-402,42	-12,72	-395,94	-6,24
591	5-Amino-3,4-dimethyl-isoxazole	C5H8N2O	19947-75-2	5,2	Apprentissage	5,16	-0,04	6,32	1,12
592	Oxazole, 2-ethyl-4,5-dihydro-	C5H9NO	10431-98-8	-148,9	Apprentissage	-152,42	-3,52	-152,21	-3,31
593	α -Methoxyisobutyronitrile	C5H9NO	76474-09-4	-125,4	Apprentissage	-130,69	-5,29	-130,07	-4,67
594	Methyl N,N-dimethylalaninate	C6H13NO2	130515-23-0	-394,4	Apprentissage	-404,22	-9,82	-394,38	0,02
595	Trinitrotoluene	C7H5N3O6	118-96-7	24,1	Apprentissage	19,61	-4,49	23,09	-1,01
596	Propanamide, 2,2-dimethyl-	C5H11NO	754-10-9	-313,1	Apprentissage	-315,90	-2,80	-317,66	-4,56
597	Propanamide, N,N-dimethyl-	C5H11NO	758-96-3	-250,2	Apprentissage	-249,74	0,46	-250,94	-0,74
598	2-Propanone, 1-(dimethylamino)-	C5H11NO	15364-56-4	-180,1	Apprentissage	-179,16	0,94	-180,65	-0,55
599	Glycine, N,N-dimethyl-, methyl ester	C5H11NO2	7148-06-3	-370,4	Apprentissage	-376,84	-6,44	-379,30	-8,90
600	5-Aminovaleric acid	C5H11NO2	660-88-8	-460,2	Apprentissage	-461,02	-0,82	-460,61	-0,41
601	2-methylbutan-2-yl nitrite	C5H11NO2	5156-41-2	-192	Apprentissage	-188,57	3,43	-186,43	5,57
602	Urea, tetramethyl-	C5H12N2O	632-22-4	-205,6	Apprentissage	-205,60	0,00	-205,63	-0,03
603	Urea, N,N-diethyl-	C5H12N2O	634-95-7	-272,3	Apprentissage	-266,99	5,31	-266,79	5,51
604	Urea, (1,1-dimethylethyl)-	C5H12N2O	1118-12-3	-314	Apprentissage	-315,90	-1,90	-315,82	-1,82

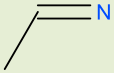
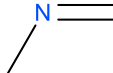
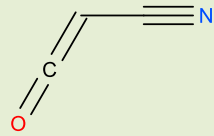
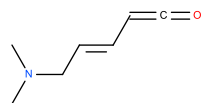
605	Urea, N,N-diethyl-	C5H12N2O	623-76-7	-282,9	Apprentissage	-284,57	-1,67	-285,51	-2,61
606	sec-butylurea	C5H12N2O	689-11-2	-307	Apprentissage	-307,82	-0,82	-307,59	-0,59
607	5-nitrofuran-2-acrylaldehyde	C7H5NO4	1874-22-2	-65	Apprentissage	-56,23	8,77	-65,04	-0,04
608	Benzofurazan	C6H4N2O	273-09-6	300,2	Apprentissage	296,86	-3,34	299,12	-1,08
609	1,2,3-Benzoxadiazole	C6H4N2O	273-59-6	300,7	Apprentissage	300,70	0,00	300,66	-0,04
610	Benzofurazan, 5-methyl-, 1-oxide	C7H6N2O2	19164-41-1	267,4	Apprentissage	275,19	7,79	268,09	0,69
611	5-Methoxybenzofurazan, 1-oxide	C7H6N2O3	7791-49-3	148,3	Apprentissage	148,87	0,57	147,97	-0,33
612	1-Methyl-2,4-dinitrobenzene	C7H6N2O4	121-14-2	33,2	Apprentissage	35,84	2,64	35,32	2,12
613	Niacin	C6H5NO2	59-67-6	-221,5	Apprentissage	-228,23	-6,73	-224,03	-2,53
614	(Dinitromethyl)benzene	C7H6N2O4	611-38-1	35	Apprentissage	30,30	-4,70	30,48	-4,52
615	(Nitromethyl)benzene	C7H7NO2	622-42-4	30,7	Apprentissage	40,11	9,41	39,68	8,98
616	Benzene, 1-methyl-4-nitro-	C7H7NO2	99-99-0	30,9	Test	32,48	1,58	29,70	-1,20
617	Terephthalonitrile N,N-dioxide	C8H4N2O2	3729-34-8	410,5	Apprentissage	408,52	-1,98	410,52	0,02
618	Benzoic acid, 4-nitro-, methyl ester	C8H7NO4	619-50-1	-287	Apprentissage	-285,80	1,20	-285,98	1,02
619	2,2,2-Trinitro-1-phenylethane	C8H7N3O6	38677-56-4	65,7	Apprentissage	64,99	-0,71	66,38	0,68
620	Phenol, 3-amino-	C6H7NO	591-27-5	-98,6	Apprentissage	-107,02	-8,42	-99,51	-0,91
621	Phenol, o-amino-	C6H7NO	95-55-6	-104,4	Test	-94,75	9,65	-92,47	11,93
622	2(1H)-Pyridone, 6-methyl-	C6H7NO	3279-76-3	-120,3	Apprentissage	-117,31	2,99	-115,81	4,49
623	3-Pyridinol, 6-methyl-	C6H7NO	1121-78-4	-69,8	Apprentissage	-81,21	-11,41	-72,87	-3,07
624	3-Pyridinol, 2-methyl-	C6H7NO	1121-25-1	-84,5	Apprentissage	-82,46	2,04	-80,09	4,41
625	2-Methyl-4-hydroxypyridine	C6H7NO	18615-86-6	-71,7	Apprentissage	-78,26	-6,56	-72,54	-0,84
626	Benzenamine, N,N-dimethyl-4-nitro-	C8H10N2O2	100-23-2	62,8	Apprentissage	69,96	7,16	67,60	4,80
627	Benzenamine, N,N-dimethyl-3-nitro-	C8H10N2O2	619-31-8	72,6	Apprentissage	68,31	-4,29	73,44	0,84
628	Isoxazole, trimethyl-	C6H9NO	10557-82-1	-20	Apprentissage	-15,55	4,45	-18,31	1,69
629	Ethyl 2-cyanopropionate	C6H9NO2	1572-99-2	-311,96	Apprentissage	-305,89	6,07	-305,09	6,87
630	Triacetamide	C6H9NO3	641-06-5	-550,1	Apprentissage	-550,10	0,00	-550,12	-0,02
631	Nitroxoline	C9H6N2O3	4008-48-4	-1,7	Apprentissage	0,87	2,57	-1,30	0,40
632	1,2-Cyclohexanedione dioxime	C6H10N2O2	492-99-9	-69,66	Apprentissage	-69,66	0,00	-69,68	-0,02
633	2-Methylquinoxaline-1,4-dioxide	C9H8N2O2	6639-86-7	169,9	Apprentissage	169,90	0,00	169,89	-0,01
634	2-(Diacetoxymethyl)-5-nitrofuran	C9H9NO7	92-55-7	-772	Apprentissage	-773,10	-1,10	-771,97	0,03
635	Caprolactam	C6H11NO	105-60-2	-239,6	Apprentissage	-238,15	1,45	-241,88	-2,28
636	Benzamide, N,N-dimethyl-4-nitro-	C9H10N2O3	7291-01-2	-86	Apprentissage	-86,61	-0,61	-90,83	-4,83
637	Acetamide, N,N-diethyl-	C6H13NO	685-91-6	-287,2	Apprentissage	-287,20	0,00	-287,22	-0,02
638	N,N-Dimethylbutyramide	C6H13NO	760-79-2	-270,9	Apprentissage	-270,58	0,32	-271,41	-0,51
639	Aminocaproic acid	C6H13NO2	60-32-2	-482,4	Apprentissage	-479,21	3,19	-481,72	0,68
640	Glycine, N,N-dimethyl-, ethyl ester	C6H13NO2	33229-89-9	-407,1	Apprentissage	-397,69	9,41	-399,41	7,69
641	Triethanolamine	C6H15NO3	102-71-6	-558,3	Apprentissage	-554,47	3,83	-559,38	-1,08
642	1-Piperidinyloxy, 4-hydroxy-2,2,6,6-tetramethyl-	C9H18NO2	2226-96-2	-291,2	Apprentissage	-299,56	-8,36	-291,61	-0,41

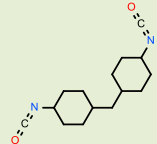
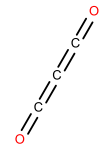
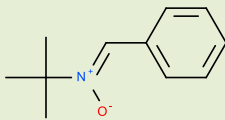
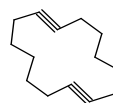
643	Benzoxazole	C7H5NO	273-53-0	45,14	Apprentissage	45,14	0,00	45,12	-0,02
644	Benzene, isocyanato-	C7H5NO	103-71-9	-14,5	Apprentissage	-9,35	5,15	-8,45	6,05
645	4-Hydroxy-5-methyl-1H-pyrrole-3-carboxylic acid ethyl ester	C8H11NO3	65713-63-5	-611,9	Apprentissage	-609,20	2,70	-611,96	-0,06
646	Benzofurazan, 5-methoxy-	C7H6N2O2	4413-48-3	147,1	Apprentissage	142,09	-5,01	147,73	0,63
647	Benzonitrile,2,4,6-trimethoxy-N-oxide	C10H11NO4	2904-59-8	-228,2	Apprentissage	-224,24	3,96	-228,35	-0,15
648	Benzamide	C7H7NO	27208-38-4	-100,9	Apprentissage	-100,86	0,04	-99,72	1,18
649	Tricyclo[3,3,1,1(3,7)]decane, 2-nitro-	C10H15NO2	54564-31-7	-179,8	Apprentissage	-180,90	-1,10	-179,79	0,01
650	(E)-4-(p-Nitroanilino)-3-penten-2-one	C11H12N2O3	20771-72-6	-98,9	Apprentissage	-92,65	6,25	-94,90	4,00
651	4-aminobenzoic acid	C7H7NO2	150-13-0	-293,9	Test	-293,32	0,58	-292,70	1,20
652	Benzoic acid, 3-amino-	C7H7NO2	99-05-8	-289,3	Test	-294,97	-5,67	-296,30	-7,00
653	5-Nitro-2-acetoxy-2,5-dihydrofurfural diacetate	C11H13NO9	75631-81-1	-1285	Apprentissage	-1283,90	1,10	-1285,03	-0,03
654	2-Methoxy-3,3-dimethylbutanenitrile	C7H13NO	162047-91-8	-164,7	Apprentissage	-168,36	-3,66	-169,42	-4,72
655	2-Methoxy-2-methylpentanenitrile	C7H13NO	162047-90-7	-169,28	Apprentissage	-172,37	-3,09	-171,30	-2,02
656	Diethylaminoacetone	C7H15NO	1620-14-0	-233,3	Apprentissage	-233,84	-0,54	-233,81	-0,51
657	p-Nitrobenzylidene tert-butylamine	C11H14N2O2	718-36-5	49,4	Apprentissage	46,44	-2,96	46,77	-2,63
658	Terephthalamide	C8H8N2O2	3010-82-0	-292	Apprentissage	-292,18	-0,18	-291,23	0,77
659	Isophthalamide	C8H8N2O2	1740-57-4	-294	Apprentissage	-293,84	0,16	-295,41	-1,41
660	Formamide, N-methyl-N-phenyl-	C8H9NO	93-61-8	-75,6	Apprentissage	-75,60	0,00	-75,63	-0,03
661	Benzene, 1,3-dimethyl-2-nitroso-	C8H9NO	19519-71-2	139,8	Apprentissage	147,29	7,49	145,67	5,87
662	N-Phenylglycine	C8H9NO2	103-01-5	-268,7	Apprentissage	-271,90	-3,20	-268,11	0,59
663	2-Phenylglycine	C8H9NO2	69-91-0	-280,5	Apprentissage	-280,50	0,00	-280,52	-0,02
664	Benzenamine, N,N-dimethyl-4-nitroso-	C8H10N2O	138-89-6	185	Apprentissage	190,88	5,88	191,05	6,05
665	N-Formylimidazole diethyl acetal	C8H14N2O2	61278-81-7	-255,3	Apprentissage	-250,12	5,18	-251,25	4,05
666	octan-2-one oxime	C8H17NO	7207-49-0	-180,8	Apprentissage	-178,23	2,57	-178,25	2,55
667	Octanone-4-oxime	C8H17NO	7207-51-4	-181,1	Apprentissage	-178,23	2,87	-178,25	2,85
668	Octanone-3-oxime	C8H17NO	7207-50-3	-172,8	Apprentissage	-178,23	-5,43	-178,25	-5,45
669	Octanaloxime	C8H17NO	929-55-5	-149,4	Apprentissage	-148,50	0,90	-147,93	1,47
670	8-Aminocaprylic acid	C8H17NO2	1002-57-9	-524	Apprentissage	-527,47	-3,47	-522,46	1,54
671	trans-Di-tert-butylhyponitrite	C8H18N2O2	82554-97-0	-189	Apprentissage	-189,00	0,00	-189,04	-0,04
672	Isoxazole, 3-phenyl-	C9H7NO	1006-65-1	139	Apprentissage	133,36	-5,64	136,33	-2,67
673	1H-Isoindole-1,3(2H)-dione, 2-methyl-	C9H7NO2	550-44-7	-233,9	Apprentissage	-232,83	1,07	-233,87	0,03
674	Alpha-methoxybenzyl cyanide	C9H9N2O	87732-38-5	26,5	Apprentissage	29,08	2,58	26,03	-0,47
675	Acetylimidazole diethyl acetal	C9H16N2O2	111456-84-9	-296,8	Apprentissage	-297,46	-0,66	-299,26	-2,46
676	Urea, N,N-bis(1,1-dimethylethyl)-	C9H20N2O	5336-24-3	-404,2	Apprentissage	-402,53	1,67	-401,58	2,62
677	Ethyl-m-phenylenediisocyanate	C10H8N2O2	64711-83-7	-135	Apprentissage	-137,57	-2,57	-138,06	-3,06
678	Isoxazole, 3-methyl-5-phenyl-	C10H9NO	1008-75-9	103	Apprentissage	108,47	5,47	111,49	8,49
679	β -Cyanopropiophenone	C10H9NO	5343-98-6	30	Test	33,61	3,61	32,53	2,53
680	2,4,6-Trimethoxybenzonitrile	C10H11NO3	2571-54-2	-244,6	Apprentissage	-247,52	-2,92	-244,15	0,45

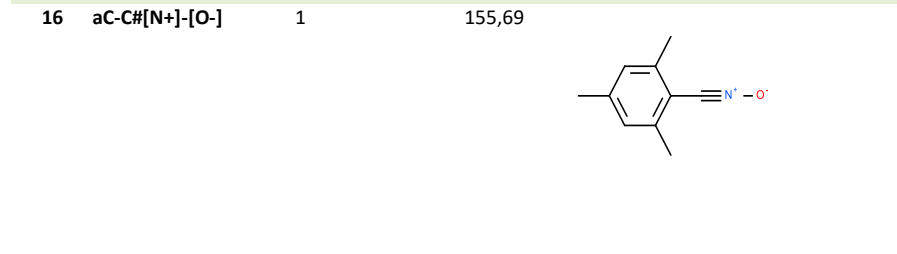
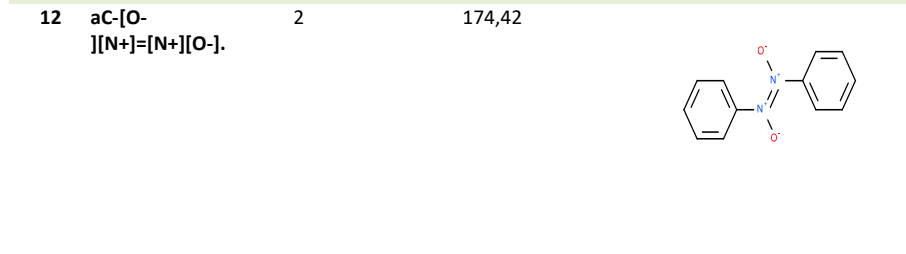
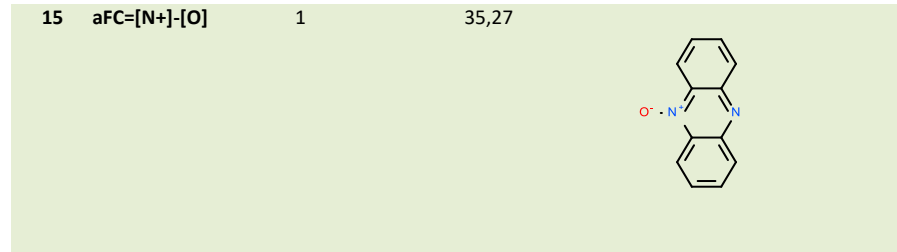
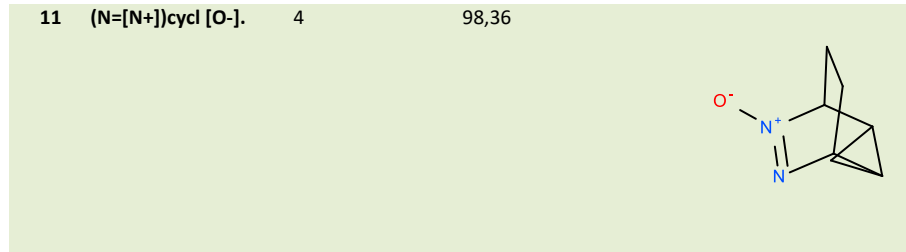
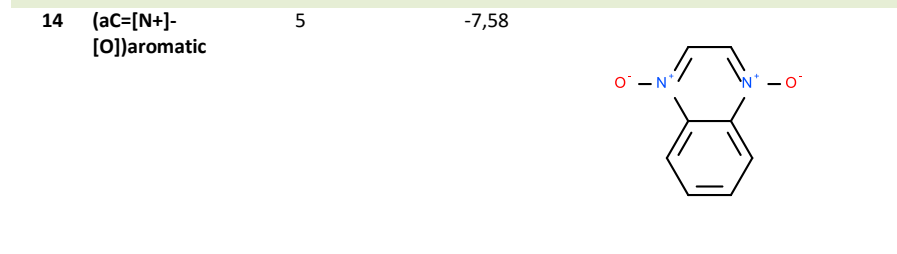
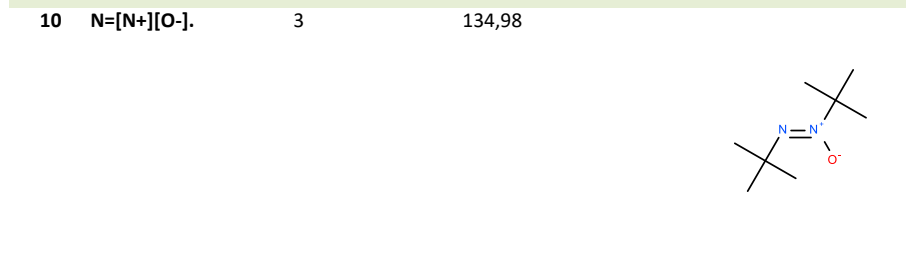
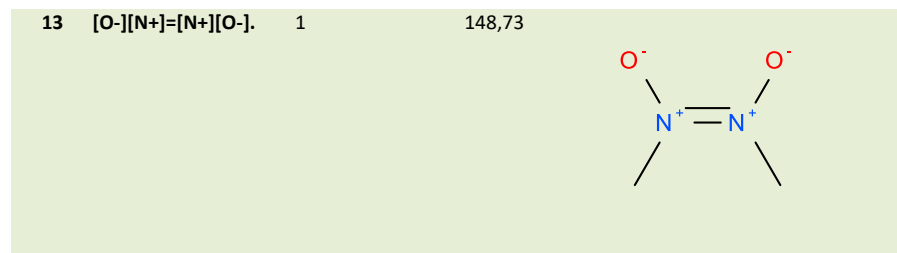
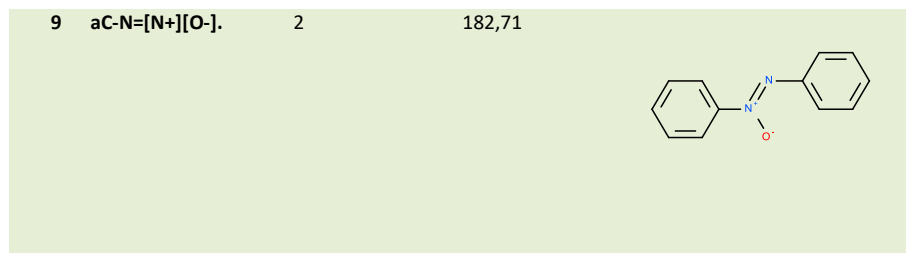
681	N,N,4-Trimethyl benzamide	C10H13NO	14062-78-3	-113	Apprentissage	-105,34	7,66	-106,41	6,59
682	N,N-Dimethyl 4-methoxybenzamide	C10H13NO2	7291-00-1	-224,6	Apprentissage	-231,65	-7,05	-226,43	-1,83
683	2-Buten-1-one, 3-(methylamino)-1-phenyl-	C11H13NO	14091-93-1	-53,7	Apprentissage	-48,07	5,63	-50,64	3,06
684	1-Adamantanecarboxamide	C11H17NO	5511-18-2	-319	Apprentissage	-318,85	0,15	-319,88	-0,88
685	N,N-Dimethylnonamide	C11H23NO	6225-08-7	-374	Apprentissage	-374,78	-0,78	-372,78	1,22
686	Phenoxazine	C12H9NO	135-67-1	94	Apprentissage	94,00	0,00	94,00	0,00
687	Phenol, 2-[(phenylimino)methyl]-, N-oxide	C13H11NO2	20357-59-9	53,9	Apprentissage	53,90	0,00	53,87	-0,03
688	2-Propanol, 1-phenoxy-3-(phenylamino)-	C15H17NO2	16112-55-3	-185	Apprentissage	-184,52	0,48	-186,06	-1,06
689	DL-2,3-Dimethoxy-2,3-diphenylsuccinonitrile	C18H16N2O2	61502-57-6	175	Apprentissage	173,71	-1,29	175,20	0,20
690	m-Terephthalanisidide	C22H20N2O4	6957-81-9	-340	Apprentissage	-332,62	7,38	-339,70	0,30
691	N,N-Bis-(p-methoxyphenyl)terephthalamide	C22H20N2O4	7144-15-2	-320	Apprentissage	-329,30	-9,30	-320,87	-0,87
692	N,N-Bis(o-methoxyphenyl)terephthalamide	C22H20N2O4	36360-34-6	-310	Apprentissage	-308,07	1,93	-309,47	0,53
693	1-Butanone, 3,3-(1,2-ethanediyldinitrilo)bis(1-phenyl-	C22H24N2O2	16087-30-2	-104,5	Apprentissage	-104,50	0,00	-104,52	-0,02
694	Benzenamine, N,N-bis(2-hydroxy-3-phenoxypropyl)-	C24H27NO4	434039	-436,8	Apprentissage	-435,87	0,93	-438,28	-1,48
695	Cyanoketene	C3HNO	4452-08-8	100	Apprentissage	100,00	0,00	99,99	-0,01
696	N,N-Dimethylamino-2,4-pentadiene-5-al	C7H11NO	4688-60-2	-29,1	Apprentissage	-28,86	0,24	-33,21	-4,11
697	N,N-Dimethylamino-2,4,6-heptatriene-7al	C9H13NO	13044-92-3	21,6	Apprentissage	21,36	-0,24	25,70	4,10
698	4,4-methylenedicyclohexyl diisocyanate	C15H22N2O2	5124-30-1	-311	Apprentissage	-311,00	0,00	-311,03	-0,03
699	2-Propanamine, 2-methyl-N-(phenylmethylene)-, N-oxide	C11H15NO	3376-24-7	30,9	Apprentissage	30,27	-0,63	32,35	1,45
700	o-Nitrosanitrobenzene dimer	C12H8N4O6	56079-22-2	313	Apprentissage	311,48	-1,52	312,56	-0,44
701	Azoxybenzene	C12H10N2O	495-48-7	342	Apprentissage	337,81	-4,19	341,78	-0,22
702	Nitrosobenzene dimer	C12H10N2O2	35506-28-6	328	Apprentissage	329,52	1,52	328,38	0,38
703	4-Isopropylbenzylidene t-butylamine N-oxide	C14H21NO	121678-88-4	-50,9	Apprentissage	-49,81	1,09	-51,64	-0,74
704	Diazene, bis(4-ethoxyphenyl)-, 1-oxide	C16H18N2O3	4792-83-0	-37,4	Apprentissage	-33,21	4,19	-37,27	0,13
705	Phenazine, 5-oxide	C12H8N2O	304-81-4	297,3	Apprentissage	297,30	0,00	297,28	-0,02
706	N-Tert-butyl-alpha-(4-nitrophenyl)nitrone	C11H14N2O3	3585-88-4	11,1	Apprentissage	10,64	-0,46	10,33	-0,77
707	2,4,6-Trimethylbenzonitrile, N-oxide	C10H11NO	2904-57-6	137	Apprentissage	137,00	0,00	136,97	-0,03
708	Di-t-butylidiazene N-oxide	C8H18N2O	16649-52-8	-107,6	Apprentissage	-107,49	0,11	-107,87	-0,27
709	Di-t-butylidiazene N-oxide	C8H18N2O	54168-23-9	-107,6	Apprentissage	-107,49	0,11	-107,87	-0,27
710	Quinoxin	C8H6N2O2	2423-66-7	227,1	Apprentissage	227,19	0,09	224,79	-2,31
711	Tetramethylene furoxan	C6H8N2O2	2209-36-1	95,31	Apprentissage	104,13	8,82	98,52	3,21
712	Diazene, dipropyl-, 1-oxide	C6H14N2O	17697-55-1	-31	Apprentissage	-31,21	-0,21	-30,51	0,49
713	6,7-Diazatricyclo[3,2,2,0(2,4)]non-6-ene, oxide	C7H10N2O	25926-99-2	226,1	Apprentissage	236,37	10,27	234,39	8,29
714	Dimethylfurazan monoxide	C4H6N2O2	2518-42-5	102	Apprentissage	102,00	0,00	101,97	-0,03
715	4,5-Bis(nitratomethyl)furoxan	C4H4N4O8	57449-44-2	21	Apprentissage	14,34	-6,66	20,42	-0,58
716	(E)-Azodioxy methane	C2H6N2O2	37765-15-4	65,9	Apprentissage	65,90	0,00	65,87	-0,03
717	4,5-Dihydro-3-nitro-isoxazole-2-oxide	C3H4N2O4	4122-45-6	20	Apprentissage	17,85	-2,15	17,35	-2,65
718	4,5-Furazandimethanol dinitrate	C4H4N4O7	57449-43-1	11	Apprentissage	12,01	1,01	11,08	0,08

719	2-Methyl-3-acetyl-quinoxaline 1,4-dioxide	C11H10N2O3	13297-17-1	33,1	Apprentissage	34,68	1,58	37,64	4,54
720	2-Methyl-3-carbomethoxyquinoxaline-1,4-dioxide	C11H10N2O4	40016-70-4	-148,7	Apprentissage	-147,27	1,43	-147,16	1,54
721	1,1-Dinitroethylazide	C2H3N5O4	56522-42-0	253	Apprentissage	243,46	-9,54	245,85	-7,15
722	2,3-Diazabicyclo[2,2,1]hept-2-ene,2-oxide	C5H8N2O	22509-00-8	127,8	Apprentissage	118,26	-9,54	124,61	-3,19
723	Benzene, 1-azido-4-nitro-	C6H4N4O2	1516-60-5	389,7	Apprentissage	389,70	0,00	389,66	-0,04
724	2,3-Diazabicyclo[2,2,2]oct-2-ene,2-oxide	C6H10N2O	25926-96-9	92,4	Apprentissage	93,69	1,29	92,72	0,32
725	Pyridazine, 3,4,5,6-tetrahydro-3,3,6,6-tetramethyl-1-oxide	C8H16N2O	54143-34-9	-26,5	Apprentissage	-28,52	-2,02	-31,86	-5,36
726	1,3,5-Triazine-2,4,6(1H,3H,5H)-trione, 1,3,5-trimethyl-	C6H9N3O3	827-16-7	-590,5	Apprentissage	-583,54	6,96	-590,16	0,34
727	2,4(1H,3H)-Pyrimidinedione, 1,3-dimethyl-	C6H8N2O2	874-14-6	-313,6	Apprentissage	-319,94	-6,34	-314,56	-0,96
728	Formamide	CH3NO	75-12-7	-186	Apprentissage	-178,01	7,99	-185,55	0,45
729	Urea	CH4N2O	57-13-6	-235,5	Apprentissage	-243,45	-7,95	-237,12	-1,62
730	Benzene, 1,3,5-trimethyl-2-nitro-	C9H11NO2	603-71-4	-26,8	Apprentissage	-23,95	2,85	-24,30	2,50
731	anthranilic acid	C7H7NO2	118-92-3	-296,2	Test	-282,70	13,50	-284,94	11,26
732	p-Nitroaniline	C6H6N2O2	100-01-6	55,2	Test	62,08	6,88	58,40	3,20
733	Propanediamide	C3H6N2O2	108-13-4	-416,4	Apprentissage	-410,17	6,23	-408,96	7,44
734	Propanamide	C3H7NO	79-05-0	-258,94	Apprentissage	-256,92	2,02	-258,96	-0,02
735	Octanamide	C8H17NO	629-01-6	-362,7	Apprentissage	-361,12	1,58	-360,95	1,75
736	4-Quinololinol, 2-methyl-	C10H9NO	607-67-0	-23,3	Test	-23,73	-0,43	-17,38	5,92
737	m-Nitroaniline	C6H6N2O2	99-09-2	62,5	Test	60,42	-2,08	67,28	4,78
738	Phenol, 3-nitro-	C6H5NO3	554-84-7	-109,3	Apprentissage	-117,90	-8,60	-114,97	-5,67
739	2-Pyrrolidinone	C4H7NO	616-45-5	-197,4	Apprentissage	-189,11	8,29	-193,27	4,13
740	2,2,6,6-Tetramethyl-4-piperidinone	C9H17NO	826-36-8	-273,4	Test	-268,93	4,47	-274,88	-1,48
741	Isoxazole, 5-methyl-	C4H5NO	5765-44-6	34,1	Apprentissage	35,35	1,25	35,15	1,05
742	4-Quinololinol	C9H7NO	611-36-9	20,8	Test	15,48	-5,32	22,28	1,48
743	2-(Diethylamino)-1-phenylethanone	C12H17NO	4061-29-4	-96,2	Apprentissage	-98,03	-1,83	-96,82	-0,62
744	Ethanone, 2-(dimethylamino)-1-phenyl-	C10H13NO	3319-03-7	-46,3	Apprentissage	-43,35	2,95	-45,01	1,29
745	Diethylpropion	C13H19NO	90-84-6	-124,1	Apprentissage	-128,09	-3,99	-126,06	-1,96
746	Benzeneacetonitrile, α -oxo-	C8H5NO	613-90-1	117,5	Apprentissage	110,29	-7,21	109,83	-7,67
747	1,3,5-tri(tert-butyl)-2-nitrosobenzene	C18H29NO	24973-59-9	-117,4	Apprentissage	-119,54	-2,14	-115,47	1,93
748	Metamfepramone	C11H15NO	15351-09-4	-69,9	Apprentissage	-73,41	-3,51	-73,94	-4,04
749	2,4,6-Trimethylnitrosobenzene	C9H11NO	1196-12-9	107,4	Apprentissage	96,97	-10,43	98,84	-8,56
750	4,5-Dihydro-3-nitro-isoxazole	C3H4N2O3	1121-14-8	39	Test	40,62	1,62	37,28	-1,72

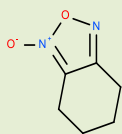
Tableau 70 : Valeurs de contributions des nouveaux groupes proposés à l'état gazeux avec des exemples illustratifs.

N°	Groupes	Occurrences	Paramètres	Exemple
1	NH=CH	1	65,41	
2	N=CH2	1	85,41	
3	O=C=CH	3	-53,08	
4	>N-	2	86,25	

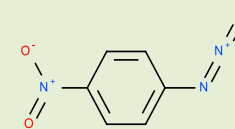
5	(-N=C=O)	1	-40,17	
6	O=C=C=C=O	1	-93,64	
7	aC-C=[N+][O-]	3	75,41	
8	-C≡C-cyc	1	233,58	



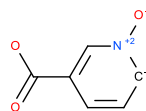
17 (C=[N+][O-])cyc 4 85,74



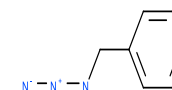
21 aC-NNN 1 333,24



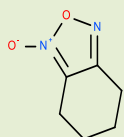
18 ([C-][N+2][O-])cyc 1 28,00



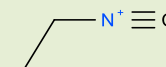
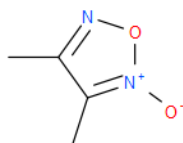
22 NNN 2 290,81



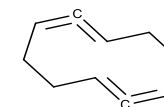
19 (C=[N+])cyc-[O-] 4 86,22

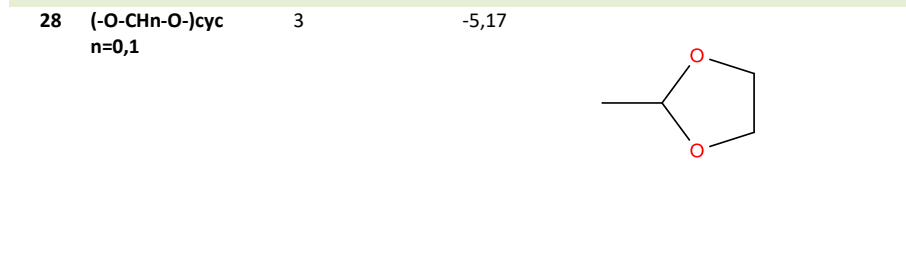
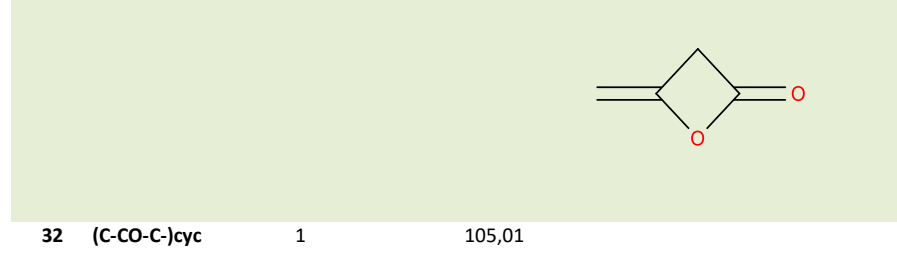
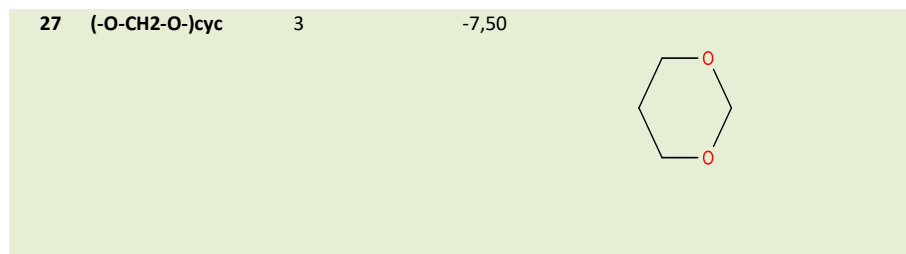
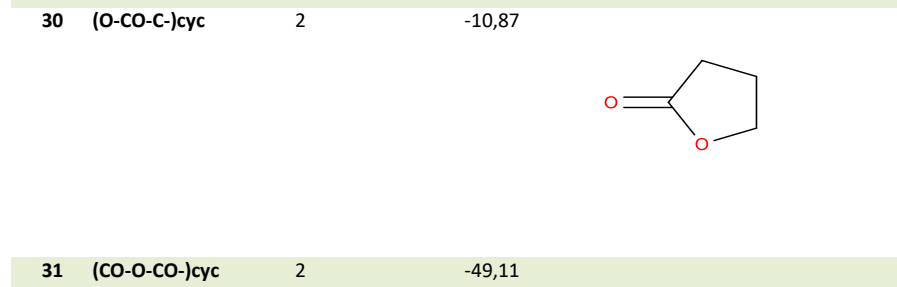
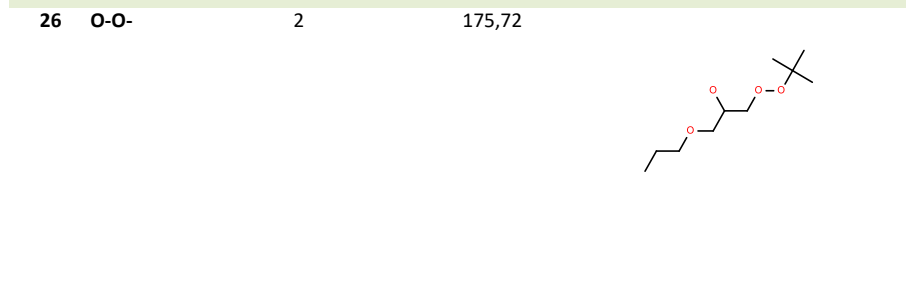
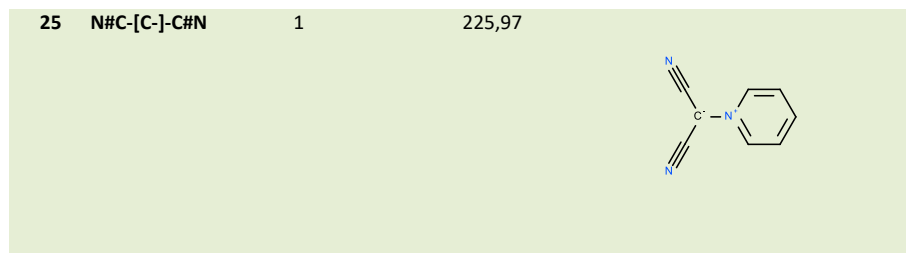


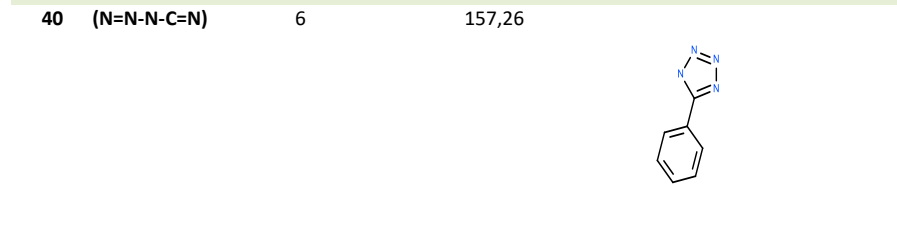
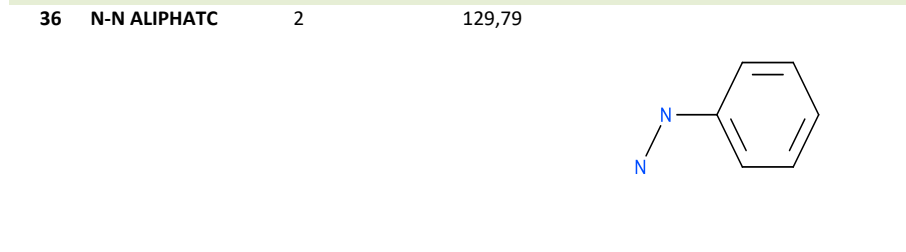
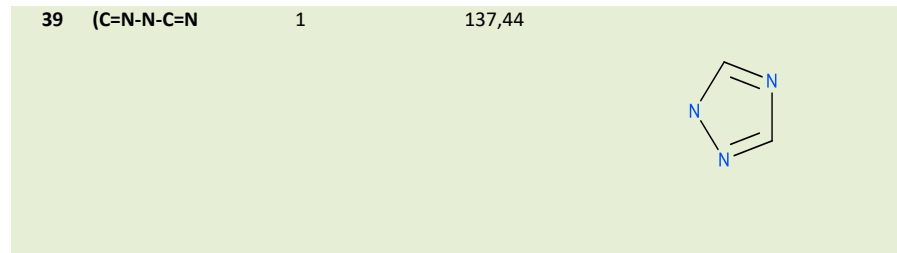
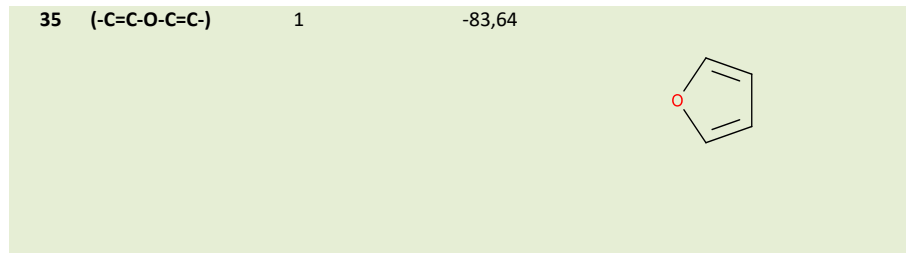
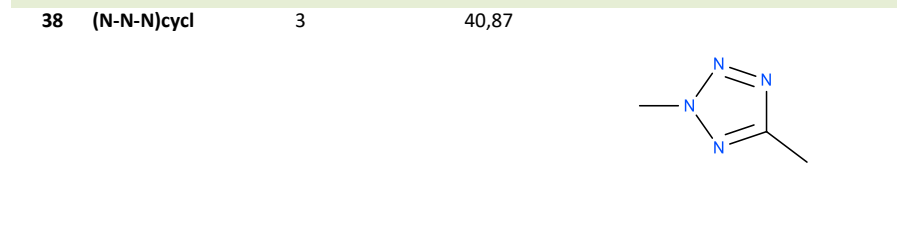
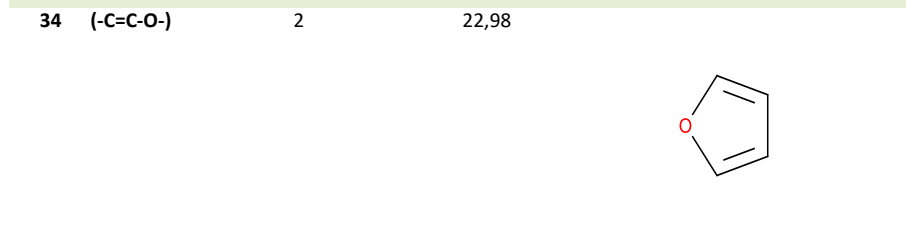
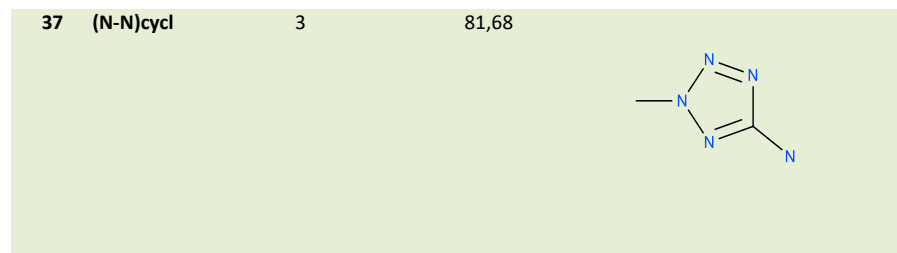
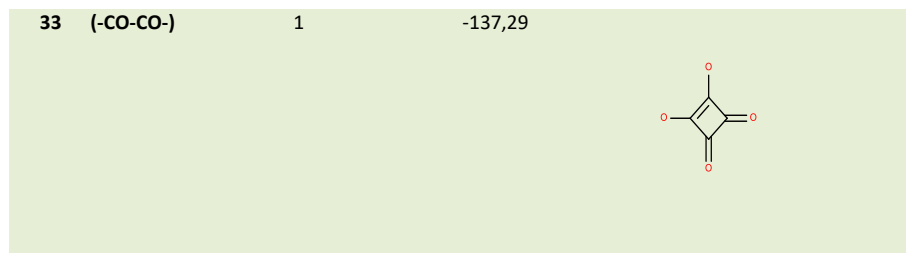
23 (-[N+]#[C-]) 3 204,73

20 (C=[N+])cyc-[O-]-CH₃ 1 -26,40

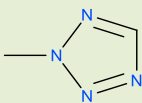
24 (C=C=C) 1 192,14



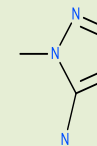




41 (N=N-N-N=C) 1 162,88



45 NHn-(C=N) 5 53,87



42 (N=C-C=N) 1 132,56



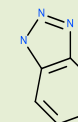
46 (C=N-C) 1 102,39



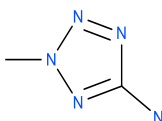
43 (C=N-N) 4 55,60



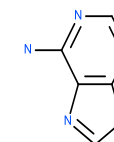
47 (N=N-N) 1 19,68



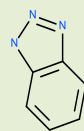
44 (N=C-N) 6 27,70



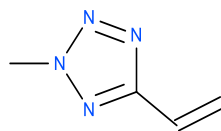
48 (-AC-N=C-N-AC) 1 32,38



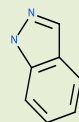
49 (-AC-N=N-N-AC) 1 20,25



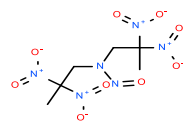
50 (N-C=N-N) 2 30,54



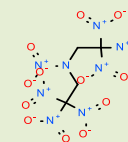
51 (ac-C=N-N-ac-) 1 39,48



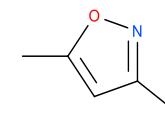
52 C-(NO2)2 3 -70,42



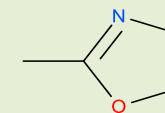
53 C-(NO2)3 3 -52,57



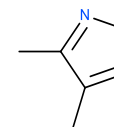
54 (C=N-O) 12 169,64

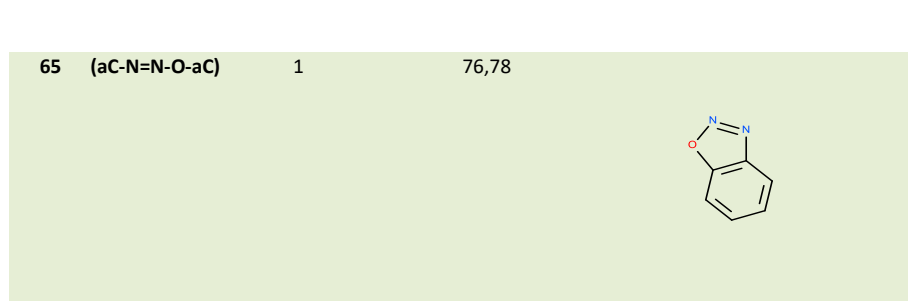
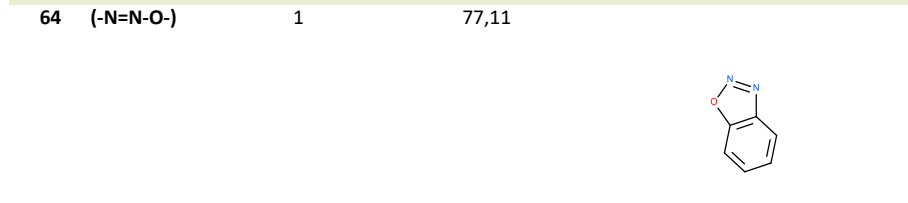
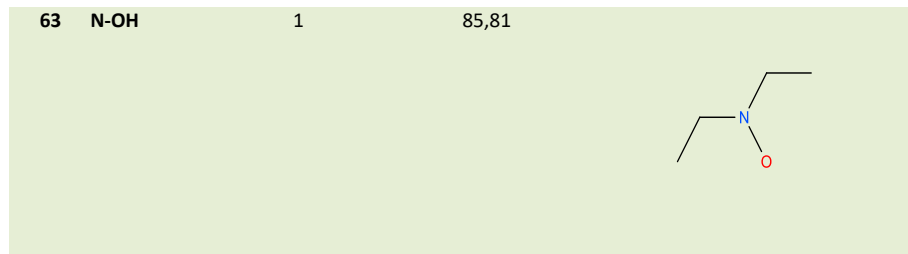
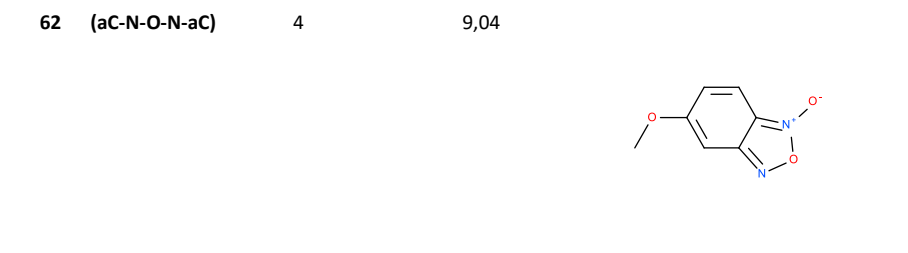
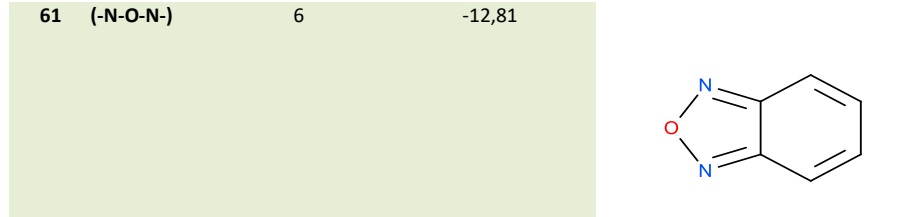
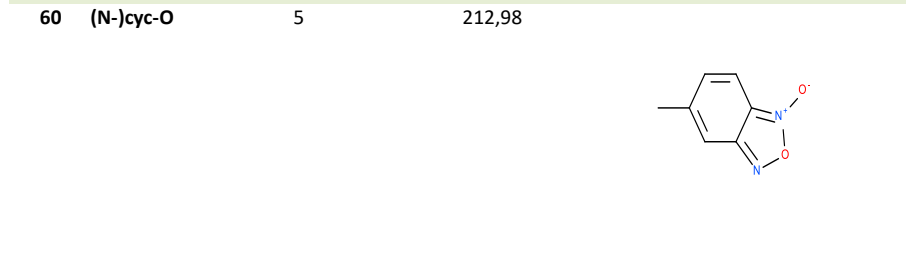
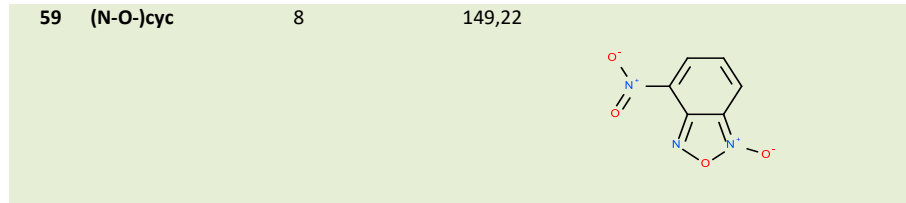
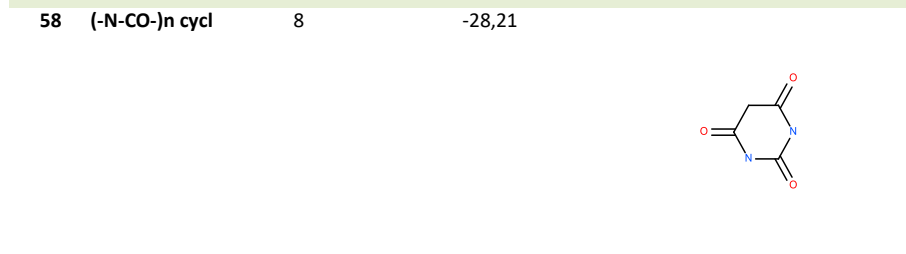
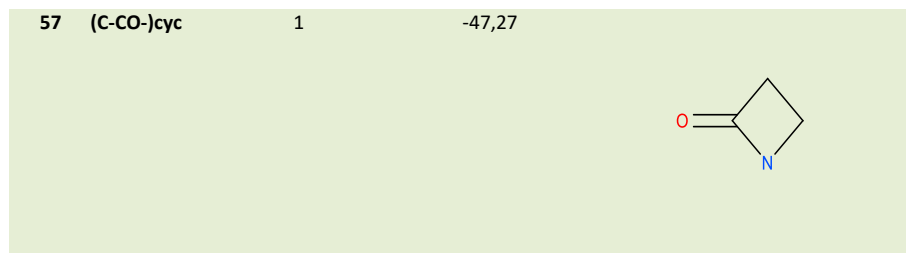


55 (N=C-O) 3 91,13

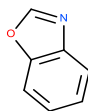


56 (-C=N-O-N=O-) 1 3,51





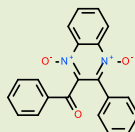
66 (AC-N=C-O-AC) 1 -18,86



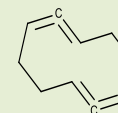
70 Carboaliphatic 5 48 50,36



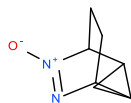
67 (aC=[N+]-[O])aromatic 4 24,01



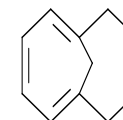
71 Carboaliphatic 6 60 26,82



68 Carboaliphatic 3 20 117,17



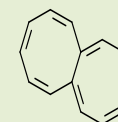
72 Carboaliphatic 7 4 37,65



69 Carboaliphatic 4 12 162,78



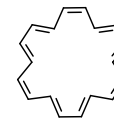
73 Carboaliphatic 8 6 78,13



74 Carboaliphatic 10 3 64,47



78 Carboaliphatic 18 1 -249,97



75 Carboaliphatic 11 2 109,76



79 Carboaliphatic 17 1 40,54



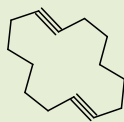
76 Carboaliphatic 12 3 138,27



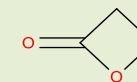
80 Hetero ring 3 4 137,26



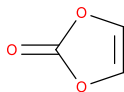
77 Carboaliphatic 14 3 78,25



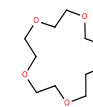
81 Hetero ring 4 6 125,68



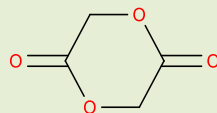
82 Hetero ring 5 68 36,68



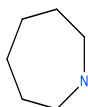
86 Hetero ring 15 1 154,50



83 Hetero ring 6 22 58,81



84 Hetero ring 7 2 33,95



85 Hetero ring 8 2 78,39

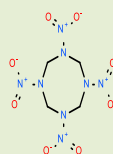


Tableau 71 : les 314 valeurs des poids et biais des trois couches de FFNNs de modèle d'estimation des enthalpies de formation des composés organiques à l'état gazeux.

Paramètres	occurrences	Valeurs	Paramètres	occurrences	Valeurs	Paramètres	occurrences	Valeurs	Paramètres	occurrences	Valeurs
1	406	-41,41	80	2	-160,06	159	1	25,51	238	3	134,98
2	207	-20,84	81	5	-194,66	160	2	37,01	239	4	98,36
3	50	-9,49	82	2	-142,48	161	5	-5,9	240	2	174,42
4	26	-1,24	83	1	-39,94	162	2	63,8	241	1	148,73
5	32	38,5	84	2	17,96	163	4	-47,35	242	5	-7,58
6	28	15,06	85	3	8,8	164	1	42,94	243	1	35,27
7	13	14,61	86	2	173,39	165	2	-111,53	244	1	155,69
8	6	-13,99	87	2	-345,91	166	1	-11,13	245	4	85,74
9	3	86,81	88	3	-358,88	167	1	-20,55	246	1	28
10	2	203,24	89	2	-109,08	168	22	-6,98	247	4	86,22
11	1	211,9	90	1	-156,75	169	3	-21,14	248	1	-26,4
12	10	230,95	91	176	-23,16	170	12	-2,19	249	1	333,24
13	10	229,11	92	93	-18,2	171	1	66,12	250	2	290,81
14	263	15,22	93	42	20,12	172	13	11,47	251	3	204,73
15	47	26,86	94	41	58,89	173	13	-0,8	252	1	192,14
16	36	4,72	95	21	49,6	174	31	0,85	253	1	225,97
17	35	2,9	96	5	125,59	175	5	33,96	254	2	175,72
18	40	66,25	97	5	55,77	176	8	24,71	255	3	-7,5
19	76	-23,99	98	31	31,77	177	2	10,33	256	3	-5,17
20	11	-4,87	99	27	-1,25	178	5	28,96	257	2	-54,95
21	23	16,43	100	13	-6,59	179	10	22,84	258	2	-10,87
22	15	68,06	101	24	-27,17	180	4	12,89	259	2	-49,11
23	2	43,19	102	53	-144,48	181	3	-5,12	260	1	105,01
24	2	59,37	103	23	-159,86	182	5	5,3	261	1	-137,29
25	2	232,33	104	1	-232,97	183	4	4,84	262	2	22,98
26	54	-173,18	105	1	-89,7	184	2	2,33	263	1	-83,64

27	31	-172,71	106	13	180,29	185	2	6,53	264	2	129,79
28	20	-389,91	107	1	171,26	186	3	3,58	265	3	81,68
29	20	-360,66	108	1	96,74	187	1	-5,23	266	3	40,87
30	10	-167,39	109	7	112,75	188	1	6,07	267	1	137,44
31	2	-151,43	110	2	59,4	189	1	8,87	268	6	157,26
32	1	-146,67	111	5	225,31	190	1	28,32	269	1	162,88
33	12	-118,89	112	3	-60,25	191	4	41,2	270	1	132,56
34	10	-129,22	113	1	-147,75	192	10	4,6	271	4	55,6
35	5	-360,89	114	7	220,93	193	2	3,93	272	6	27,7
36	6	-355,71	115	1	215,83	194	2	2,1	273	5	53,87
37	2	-341,67	116	34	-0,29	195	1	-3,81	274	1	102,39
38	2	-297,46	117	28	4,25	196	2	20,24	275	1	19,68
39	4	-300,85	118	2	53,64	197	12	22,53	276	1	32,38
40	8	-317,37	119	14	35,16	198	5	-5,62	277	1	20,25
41	17	-150,11	120	33	29,09	199	20	14,07	278	2	30,54
42	7	-143,7	121	27	26,58	200	1	-6,85	279	1	39,48
43	1	-87,16	122	5	28,98	201	6	29,66	280	3	-70,42
44	9	-108,89	123	1	6,13	202	36	1,17	281	3	-52,57
45	17	-12,52	124	4	-11,22	203	20	-34,73	282	12	169,64
46	7	-3,53	125	1	-2,58	204	3	8,52	283	3	91,13
47	2	-0,01	126	3	-42,75	205	1	21,31	284	1	3,51
48	3	21,03	127	6	-3,43	206	3	38,03	285	1	-47,27
49	6	20,51	128	1	-18,18	207	3	-54,84	286	8	-28,21
50	2	36,33	129	1	13,41	208	12	-0,37	287	8	149,22
51	10	61,7	130	3	-5,41	209	2	-39,19	288	5	212,98
52	10	69,27	131	2	-4,48	210	2	12,93	289	6	-12,81
53	15	5,61	132	5	5,11	211	1	39,23	290	4	9,04
54	6	44,58	133	6	18,17	212	3	27,12	291	1	85,81
55	7	96,33	134	1	1,91	213	48	-23,1	292	1	77,11
56	13	-48,79	135	1	4,29	214	8	6,58	293	1	76,78

57	2	108,31	136	1	-0,73	215	9	-12,35	294	1	-18,86
58	1	73,64	137	3	12,31	216	3	-0,88	295	4	24,01
59	16	97,25	138	2	12,17	217	4	-9,86	296	20	117,17
60	6	102,98	139	3	2,57	218	2	31,81	297	12	162,78
61	3	102,25	140	1	1,47	219	2	17,67	298	48	50,36
62	9	150,11	141	1	-12,71	220	4	-19,55	299	60	26,82
63	16	153,08	142	3	14,28	221	8	-34,96	300	4	37,65
64	2	-85,45	143	3	19,9	222	1	25,11	301	6	78,13
65	2	-51,4	144	2	65,36	223	1	68,67	302	3	64,47
66	1	-55,78	145	5	-43,35	224	12	-10,86	303	2	109,76
67	7	-58,21	146	2	-23,08	225	2	42,83	304	3	138,27
68	22	-5,27	147	1	-17,87	226	5	-7,36	305	3	78,25
69	20	52,27	148	2	-83,39	227	1	1,2	306	1	-249,97
70	8	-42,24	149	1	18,95	228	2	41,26	307	1	40,54
71	4	-75,31	150	14	0,3	229	1	65,41	308	4	137,26
72	10	-194,66	151	12	-39,97	230	1	85,41	309	6	125,68
73	1	-206,59	152	1	-61,44	231	3	-53,08	310	68	36,68
74	3	-187,48	153	2	-54,58	232	2	86,25	311	22	58,81
75	1	-162,96	154	10	-28,08	233	1	-40,17	312	2	33,95
76	1	-299,88	155	2	-38,55	234	1	-93,64	313	2	78,39
77	3	-176,96	156	8	10,14	235	3	75,41	314	1	154,5
78	1	-110,28	157	27	-2,69	236	1	233,58			
79	3	-55,01	158	4	57,26	237	2	182,71			

Annexe D : Résultats des calculs des enthalpies standards de formation suivant la DFT.

- **EXP** : valeurs expérimentales.
- **CAS** : c'est le numéro d'enregistrement unique ([Chemical Abstracts Service](#)).
- **GAUSSIAN** : valeurs d'enthalpie de formation calculées suivant la DFT par G09 en UA (état de référence ab-initio)
- **CAL-DFT** : valeurs d'enthalpie de formation standard calculée suivant la DFT, *exprimé en KJ/mol.*
- **EAM-DFT**: erreur absolue moyenne de la méthode de DFT.
- **CAL-N-M** : *enthalpie de formation prédite basant sur la méthode de contribution de groupe, exprimé en KJ/mol.*
- **EAM-NM** : *erreur moyenne absolue de la méthode de contribution de groupe exprimé en KJ/mol.*

N°	Composés	Formule	CAS	KJ/mol	UA		KJ/mol		
				EXP	GAUSSIAN	CAL-DFT	EAM-DFT	CAL-N-M	EAM-NM
1	Cyclopropane	C3H6	75-19-4	53,3	-117,81	73,11	19,81	47,69	5,61
2	Cyclobutene	C4H6	822-35-5	157	-155,89	157,44	0,44	175,35	18,35
3	Methylenecyclopropane	C4H6	6142-73-0	201	-155,88	182,55	18,45	126,62	74,38
4	Cyclopropylacetylene	C5H6	6746-94-7	292	-193,95	303,64	11,64	283,6	8,4
5	Bicyclo[2,1,0]pentane	C5H8	185-94-4	158	-195,17	156,57	1,43	176,41	18,41
6	1,1-Dimethylcyclopropane	C5H10	1630-94-0	-8,2	-196,4	-9,75	1,55	-5,81	2,39
7	1,3-Cyclopentadiene	C5H6	542-92-7	139	-194,01	135,91	3,09	144,98	5,98
8	Cyclopropane, ethenyl-	C5H8	693-86-7	127	-195,18	122,78	4,22	128,16	1,16
9	Methylenecyclobutane	C5H8	1120-56-5	121,5	-195,19	115,54	5,96	149,07	27,57
10	Bicyclo[3,1,0]hexane	C6H10	285-58-5	39	-234,49	55,96	16,96	40,83	1,83
11	1,1'-Bicyclopropyl	C6H10	5685-46-1	130	-234,46	135,86	5,86	134,96	4,96
12	Cyclopentane, methylene-	C6H10	1528-30-9	10,2	-234,5	13,77	3,57	13,49	3,29
13	Bicyclo[2,2,0]hexane	C6H10	186-04-9	125	-234,46	127,27	2,27	198,86	73,86
14	4-Methylcyclopentene	C6H10	1759-81-5	15	-234,5	12,13	2,87	13,46	1,54
15	Cyclohexane, methyl-	C7H14	108-87-2	-154,8	-275	-136,22	18,58	-138,45	16,35
16	Cyclohexane, ethyl-	C8H16	1678-91-7	-172,6	-314,29	-161,88	10,72	-172,12	0,48
17	Cyclohexane, propyl-	C9H18	1678-92-8	-192,4	-353,58	-171,89	20,51	-192,96	0,56
18	Bicyclo[3,3,2]decane	C10H18	283-50-1	-106	-391,65	-63,62	42,38	-144,04	38,04
19	Benzobicyclo[2,2,0]hexa-2,5-diene	C10H8	20847-82-9	399	-385,63	438,76	39,76	425,75	26,75
20	Azulene	C10H8	275-51-4	308	-385,7	269,24	19,86	363,88	55,88
21	Bicyclo[6,2,0]decapentaene	C10H8	20455-01-0	514,2	-385,61	486,74	27,46	516,78	2,58
22	Bullvalene	C10H10	1005-51-2	334,1	-386,83	364,71	30,61	263,37	70,73
23	cis-Decahydronaphthalene	C10H18	493-01-6	-169,2	-391,68	-142,86	26,34	-165,7	3,5

24	1,2,6,7-Cyclodecatetraene	C10H12	3451-55-6	356,1	-387,99	355,86	0,24	356,11	0,01
25	3,4-Dimethylenebicyclo[4,2,0]octa-1,5-diene	C10H10	136846-72-5	359	-386,83	353,65	5,35	354,02	4,98
26	1,2,3,4-Tetrahydronaphthalene	C10H12	119-64-2	30	-388,12	21,62	8,38	9,54	20,46
27	Benzene, (methylenecyclopropyl)-	C10H10	29817-09-2	292	-386,86	282,76	9,24	204,96	87,04
28	Tricyclo[6,2,0,0,3,6]deca-1(8),2,6-triene	C10H10	1610-51-1	310	-386,85	292,91	17,09	303,56	6,44
29	Cyclohexane, pentyl-	C11H22	4292-92-6	-233,8	-432,14	-194,88	38,92	-234,64	0,84
30	Heptylcyclohexane	C13H26	5617-41-4	-275	-510,73	-261,97	13,03	-276,32	1,32

Tableau 72 : Banque de données thermochimiques d'enthalpie de formation concernant les 30 molécules à l'état gaz.

Contribution au développement des méthodes d'estimation des enthalpies de formation de molécules organiques***Résumé :***

Ce travail concerne la prédiction des enthalpies de formation des composés organiques purs. Pour chaque état de la matière, solide, liquide ou gaz, deux modèles de contributions de groupes d'ordre trois ont été développés ; le premier est linéaire et le second est un réseau de neurones. La prédiction des enthalpies de formation est réalisée en utilisant uniquement la structure moléculaire d'un composé en question sans faire recours à d'autres propriétés physico-chimiques. L'ensemble de données est divisé en sous-ensemble d'apprentissage et de test en utilisant une nouvelle technique de division semi-aléatoire. Afin d'augmenter les performances des modèles proposées, des nouvelles contributions de groupes d'ordre trois (corrections) ont été proposées. Les modèles proposés sont correctement testés, validés et comparés avec d'autres modèles concurrents, et affichent des meilleurs résultats par rapport à ceux affichés par les méthodes rivales.

Une autre approche différente de celle des contributions de groupes a été proposée, basée sur un calcul ab initio d'énergie moléculaire pour la prédiction des enthalpies de formation à l'état gaz de quelques composés hydrocarbonés. Il a été constaté que plus la taille des molécules est augmentée, plus la précision de cette méthode diminue. Les résultats des prédictions sont généralement prometteurs.

Mots clés :

Enthalpie standard de formation ; phase gazeuse ; phase solide ; phase liquide ; méthode de contribution de groupes ; réseaux de neurones ; thermochimie.

Contribution to the development of predictive methods to estimate the formation enthalpies of organic compounds***Abstract:***

This work concerns the prediction of the enthalpies of formation of pure organic compounds. For each state of matter, solid, liquid or gas, two models of groups' contributions of third order have been developed; the first is linear and the second is a neural network method. The prediction of formation enthalpies is carried out using only the molecular structure of a compound, without resorting to other physicochemical properties. The data set is divided into a learning and test subset using a new semi-random division technique. In order to increase the performances of the proposed models, new groups contributions of third order (corrections) have been proposed. The models proposed are correctly tested, validated and compared with other competing models. It shows better results compared to those displayed by competing methods.

Another approach, different from that of group contributions has been proposed, it is based on an ab initio calculation of molecular energy for the prediction of enthalpies in the gas state of some hydrocarbon compounds. It has been found that the greater the size of the molecules, the more the precision of this method is impaired. The results of the predictions are generally promising.

Keywords:

Standard formation enthalpy; gaseous phase; solid phase; liquid phase; method of group contribution; neural networks; thermochemistry.