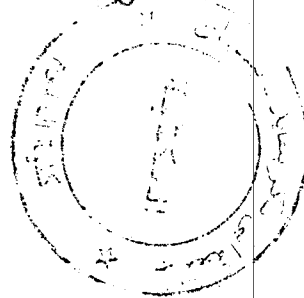
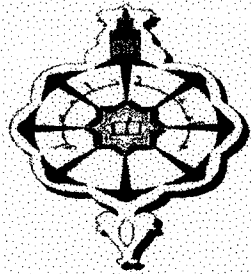


IN/530.4-09/
FACULTE DES SCIENCES

DEPARTEMENT DE PHYSIQUE



Mémoire :

Présenté par : Belahcene Brahim

Pour l'obtention du diplôme d'Ingénieur d'Etat en Physique

Spécialité : Matériaux et caractérisation

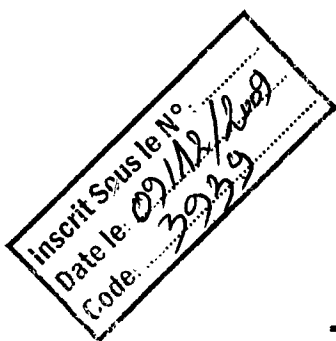
THEME :

***DATAMINING DES PROPRIETES
PHYSIQUES DES ELEMENTS DU
TABLEAU PERIODIQUE***

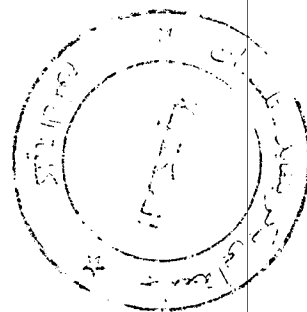
Soutenu en Mai 2009 devant le jury :

| | | | | |
|-------------------|---------------|-----------|---------------------------|---------------|
| M ^r | G. Merad | Président | Professeur | Univ. Tlemcen |
| M ^{elle} | R. Mahiaoui | Examineur | Maitre assistant (A) | Univ. Tlemcen |
| M ^{elle} | H. I. Faraoun | Encadreur | Maitre de Conférences (A) | Univ. Tlemcen |





Remerciements



Je remercie ALLAH le tout puissant de nous avoir accordé la puissance et la volonté pour terminer ce travail.

Je tiens à exprimer ma reconnaissance à M^{elle} H.I. FARAOUN Maitre de Conférences (A) à l'université de Tlemcen, pour avoir dirigé ce mémoire.

J'exprime mes sincères remerciements à monsieur G. MERAD, Professeur à l'Université de Tlemcen, d'avoir accepter de présider le Jury de cette thèse.

Je remercie sincèrement M^{elle} R. Mahiaoui Maitre assistant (A) à l'université de Tlemcen, d'avoir accepter de faire partie du Jury.

A mes parents,

A mes frères,

A mes amis.

Table de matière

| | |
|----------------------------|---|
| Introduction générale..... | 2 |
|----------------------------|---|

Chapitre 1

| | |
|--|----|
| Constitution de la base de données – Le tableau périodique des éléments..... | 3 |
| I.1. Historique..... | 4 |
| I.1.1. La théorie des triades..... | 4 |
| I.1.2. La détermination du « <i>poids atomique</i> »..... | 4 |
| I.1.3. Le tableau périodique de Mendeleïev..... | 5 |
| I.2. Construction de la base de données..... | 6 |
| I.2.1. La base de données..... | 6 |
| I.3. Définitions..... | 10 |
| I.3.1. Le nombre atomique..... | 10 |
| I.3.2. La masse atomique..... | 10 |
| I.3.3. Les états d'oxydation..... | 11 |
| I.3.4. L'électronégativité..... | 11 |
| I.3.4.1 Définitions..... | 12 |
| a. Définition de <i>Pauling</i> | 12 |
| b. Définition de <i>Mulliken</i> | 12 |
| c. Définition d' <i>Allred et Rochow</i> | 12 |
| d. Définition de <i>Parr</i> | 12 |
| I.3.5. L'énergie de première ionisation..... | 13 |
| I.3.6. Le paramètre du réseau..... | 13 |
| I.3.7. nombre d'atomes par cellule..... | 13 |
| I.3.8. Le volume molaire..... | 13 |
| I.3.9. Le module de Young E | 14 |
| I.3.10. Les constants élastiques et les modules d'élasticité..... | 16 |
| I.3.11. La conductivité thermique..... | 17 |
| I.3.12. La capacité molaire..... | 17 |
| I.3.13. L'entropie standard S_0 | 17 |
| I.3.14. La différence d'enthalpie $H_{298}-H_0$ | 18 |

| | |
|--|----|
| I.3.15. La température de fusion T_m | 19 |
| I.3.16. Température d'ébullition T_b | 19 |
| Conclusion I | 20 |
| Références I | 20 |

Chapitre 2

| | |
|--|----|
| Le datamining – la méthode d'Analyse en Composantes Principales ACP..... | 22 |
| II.1. Introduction | 23 |
| II.2. Le Datamining | 23 |
| II.3. Analyse En Composantes Principales « ACP » | 23 |
| II.3.1. Formulation de l'Analyse en Composantes Principales..... | 24 |
| a. Matrice des données | 24 |
| b. Centrage et réduction des données | 25 |
| c. Distances entre objets | 25 |
| d. Inertie totale I du nuage | 25 |
| II.3.2 Réalisation de l'analyse en composantes principales | 25 |
| a. Relations de transitions | 26 |
| b. Nuage des variables | 26 |
| II.4 Calcul d'une ACP avec MATLAB | 27 |
| Conclusion II..... | 28 |
| Références II..... | 28 |

Chapitre 3

| | |
|---|----|
| III.1. Introduction..... | 30 |
| III.2. Interprétation des résultats | 30 |
| III.3. Corrélation des énergies du système atomique et électronique | 34 |
| III.3.1. Définitions | 34 |
| III.3.2. La Base de données | 34 |
| III.3.3. Analyse | 37 |
| Conclusion III..... | 39 |
| Références III..... | 39 |
| Conclusion générale | 40 |

Introduction générale

~ 1 ~

Introduction

La modernisation technologique exige de chercher de nouveaux matériaux répondant à des propriétés spécifiques. Pour cela, une approche empirique peut être mise en œuvre. Ainsi des bases de données de résultats expérimentaux peuvent être utilisées pour construire des modèles de prédictions des propriétés recherchées. Des modèles de prédictions efficaces permettent en effet de restreindre la recherche de matériaux aux cas les plus prometteurs.

La classification est une étape importante pour une analyse de données efficace. Elle consiste à regrouper les objets d'un ensemble de données en classes homogènes. Il existe deux types d'approches: la classification supervisée et la classification non supervisée. Elles se différencient par leurs méthodes et par leur but. La *classification supervisée* est basée sur un ensemble d'objet T (appelé ensemble d'apprentissage) dont la classe est connue, le but étant de découvrir la structure des classes à partir de l'ensemble T afin de pouvoir généraliser cette structure sur un ensemble de données plus large. La *classification non supervisée* consiste à diviser un ensemble de données D en sous ensembles, appelés classes, tel que les objets d'une classe sont similaires et que les objets de classes différentes sont différents, afin d'en comprendre la structure sous-jacente.

Le tableau périodique des éléments, également dit tableau de Mendeleïev correspond à des ordonnancements des éléments chimiques, définis de façon à respecter une périodicité bien spécifique. De tels ordonnancements peuvent par exemple être produits en parcourant la table périodique de haut en bas puis de gauche à droite. Des travaux récents semblent montrer que de tels ordonnancements peuvent être utilisés pour prédire efficacement la formation de composés chimiques. En réalité, le tableau de Mendeleïev est probablement le premier exemple de l'utilisation d'une technique d'analyse de données en science des matériaux.

Dans ce travail, nous nous sommes intéressés à la classification non supervisée des éléments du tableau périodique par la méthode d'analyse en composantes principales (ACP). Le but est d'analyser les corrélations entre les propriétés physiques des éléments et voir si la classification des éléments peut se faire autrement que suivant la classification de Mendeleïev.

Chapitre I

Constitution de la base de données – Le tableau périodique des éléments

Chapitre I : Constitution de la base de données – Le tableau périodique des éléments

Dans ce chapitre, nous allons présenter la base de données des propriétés physiques des éléments du tableau périodique utilisée dans notre travail.

I.1. Historique

Depuis l'antiquité, on connaît quelques corps simples comme le cuivre, l'or, le fer, l'argent ou le soufre. En 1700, seuls 12 corps simples (formés d'un seul élément) ont été isolés: l'antimoine, l'argent, l'arsenic, le carbone, le cuivre, l'étain, le fer, le mercure, l'or, le phosphore, le plomb et le soufre. Les techniques d'analyse évoluant, notamment grâce à l'apparition de la pile de Volta en 1800 permettent de faire des électrolyses, le nombre des éléments connus en 1850 sera multiplié par 5.

I.1.1. La théorie des triades

En étudiant les propriétés des éléments, les chimistes découvrent que certains d'entre eux possèdent des propriétés chimiques voisines. C'est ainsi que naît la théorie des triades. Une triade est un groupe de 3 éléments ayant des propriétés chimiques voisines.

- ⇒ En 1808 l'anglais Davy étudie la triade calcium, strontium et baryum
- ⇒ En 1818 le même Davy révèle les propriétés communes à la triade lithium, sodium et potassium
- ⇒ En 1817 le chimiste allemand Döbereiner suggère l'existence de la triade chlore, brome, iode.

Vers 1850, une vingtaine de triades sont identifiées et plusieurs tentatives de classification des éléments suivent mais sans succès.

I.1.2. La détermination du « poids atomique »

Au début du XIX^{ème} siècle, un savant de Manchester, John Dalton, introduit l'idée qu'à chaque élément correspond un atome à qui il assigne un « poids atomique ». Bien sûr il ne pouvait pas peser les atomes sur une balance. Mais, il déterminait ce « poids atomique » d'après la masse minimale de chaque élément qui entre en composition avec un autre.

Dalton choisit arbitrairement comme unité de référence le « poids atomique » de l'hydrogène égal à 1. Pour Dalton, les combinaisons chimiques (corps composés) résultaient de l'association de ces atomes en proportions fixes dont il déduisait les masses relatives expérimentalement. Pour caractériser un élément chimique, les chimistes utilisaient ce « poids atomique ».

Chapitre I : Constitution de la base de données – Le tableau périodique des éléments

- La distinction entre élément, atome et molécule est encore peu claire. Suite aux travaux de Gay-Lussac (1809) et Avogadro (1811), la distinction se fait entre atomes et molécules et dès 1814, Berzélius propose une notation à base de lettres pour représenter les éléments et détermine avec précision la masse d'un grand nombre d'éléments.
- Il faut attendre 1860, lors du premier congrès international de chimie à Karlsruhe pour que soient présentées et acceptées les notions d'atome et de molécule ainsi que la définition d'un système de masse atomique pour chaque élément. Le jeune chimiste russe Dimitri Mendeleïev assiste à ce congrès.

1.1.3. Le tableau périodique de Mendeleïev

Dimitri Ivanovitch Mendeleïev est né à Tobolsk, en Sibérie, le 8 février 1834 et est décédé à Saint-Petersbourg le 2 février 1907. Chimiste diplômé de l'Université de Saint-Petersbourg en 1856, il part pour Heidelberg et travaille avec des savants comme Robert Bunsen, Gustav Kirchhoff et le compositeur-chimiste Borodine. À Paris, ensuite, il se penche sur la densité des gaz et sur le spectroscope de Gustav Kirchhoff. En 1867, il rentre en Russie et est nommé professeur de chimie minérale à l'Université de Saint-Petersbourg.

L'histoire du tableau débute en 1817 avec Johann Dobereiner, un chimiste russe, qui établit déjà à l'époque un rapport entre la masse atomique des éléments et leurs propriétés. En 1865, John Alexander Newlands met en exergue une certaine répétition dans les propriétés des éléments. Il lance alors sa loi des octets ou des octaves : «Le huitième élément suivant un élément donné ressemble au premier comme la huitième note de l'octave ressemble à la première». Arrive ensuite la «*vis tellurique*» d'Alex Beguyer de Chancourtois, hélice ayant sur son axe vertical la suite des nombres entiers correspondant aux poids atomiques des éléments. Aucune de ces théories ne sera retenue. Mendeleïev planche sur un travail semblable, étudiant les 63 éléments chimiques connus à l'époque. Se faisant, il note qu'en rangeant ces éléments selon leur masse atomique croissante apparaît alors une nette périodicité concernant leurs propriétés. Afin de mettre en évidence cette périodicité, il range les 63 éléments verticalement selon la masse atomique croissante, changeant de colonne lorsque les propriétés particulières réapparaissent.

Présenté en 1869 à la société russe de chimie sous l'intitulé: «La dépendance entre les propriétés des masses atomiques des éléments», le tableau de l'époque est conçu au départ

Chapitre I : Constitution de la base de données – Le tableau périodique des éléments

| Symbole | Nombre atomique Z | masse atomique | Les états de l'oxydation | ELECTRONEGATIVITY % ^x | | Paramètre réseau | Nombre d'atomes par cellule | Le volume molaire | Module de Young E | S ₁₁ 'constante de élastique' | S ₄₄ | S ₁₂ | C ₁₁ module élasticité |
|---------|-------------------|----------------|--------------------------|----------------------------------|---------------------------|------------------|-----------------------------|-------------------|-------------------|--|-----------------|-----------------|-----------------------------------|
| | | | | ELECTRONEGATIVITY % ^x | 1ère énergie d'ionisation | | | | | | | | |
| H | 1 | 1.008 | 1 | 2.2 | 13. | 377.1 | 2 | 13.26 | 0.2 | 2930 | 9090 | 1240 | 0.042 |
| He | 2 | 4.003 | 1 | 3.2 | 24. | 357.7 | 2 | 32.07 | 0.1 | 2327 | 4738 | 1102 | 0.031 |
| Li | 3 | 6.939 | 1 | 0.97 | 5.3 | 350.9 | 2 | 13 | 11.5 | 315 | 104 | -144 | 13.4 |
| Be | 4 | 9.012 | 2 | 1.47 | 9.3 | 228.5 | 2 | 4.88 | 286 | 3.45 | 6.16 | -0.28 | 292 |
| O | 8 | 15.99 | 2 | 3.5 | 13. | 540.3 | 4 | 8 | 0 | 1280 | 3640 | 2.6 | 0.275 |
| Na | 11 | 22.98 | 1 | 1.01 | 5.1 | 420.9 | 2 | 0.565 | 6.8 | 549 | 233 | -250 | 7.59 |
| Mg | 12 | 24.31 | 2 | 1.23 | 7.6 | 320.9 | 2 | 1.23 | 44.4 | 22 | 60.9 | -7.8 | 59.3 |
| Al | 13 | 26.98 | 3 | 1.47 | 5.9 | 361.4 | 4 | 10 | 70.2 | 16 | 35.3 | -5.8 | 108 |
| Si | 14 | 28.09 | 4 | 1.74 | 8.1 | 543.1 | 8 | 12.06 | 112 | 12.7 | -2.15 | 165.6 | 79.6 |
| S | 16 | 32.06 | 6 | 2.44 | 10. | 540.3 | 128 | 15.49 | 17.8 | 74.6 | 121 | -13.1 | 14.22 |
| K | 19 | 39.10 | 1 | 0.91 | 4.3 | 532.1 | 2 | 0.64 | 3.52 | 1339 | 526 | -620 | 3.69 |
| Ca | 20 | 40.06 | 2 | 1.04 | 6.1 | 558.8 | 4 | 25.86 | 19.6 | 104 | 71 | -42 | 22.8 |
| Sc | 21 | 44.96 | 3 | 1.2 | 6.5 | 330.8 | 2 | 15.04 | 75.2 | 12.5 | 36.1 | -4.3 | 99.3 |
| Ti | 22 | 47.9 | 4 | 1.32 | 6.82 | 295.03 | 2 | 10.55 | 1.83E- | 9.69 | 21.5 | -4.71 | 160 |
| V | 23 | 50.94 | 5 | 0.525 | 6.7 | 302.3 | 2 | 8.34 | 127 | 6.75 | 23.2 | -2.31 | 230 |
| Cr | 24 | 52 | 6 | 1.56 | 6.7 | 288.4 | 2 | 7.23 | 145 | 3.05 | 9.98 | -0.49 | 348 |
| Mn | 25 | 54.94 | 7 | 1.6 | 7.4 | 892.1 | 58 | 7.38 | 196 | 6.25 | 7.95 | -2.23 | 336.5 |
| Fe | 26 | 55.85 | 3 | 1.64 | 7.9 | 286.6 | 2 | 7.09 | 211 | 7.67 | 8.57 | -2.83 | 230 |
| Co | 27 | 58.93 | 3 | 1.75 | 7.8 | 250.7 | 2 | 6.62 | 204 | 5.11 | 14.1 | -2.37 | 295 |
| Ni | 28 | 58.71 | 3 | 1.75 | 7.6 | 352.4 | 4 | 6.59 | 220 | 7.67 | 8.23 | -2.93 | 247 |
| Cu | 29 | 63.54 | 2 | 1.75 | 7.7 | 361.4 | 4 | 7.09 | 1.3 | 4760 | 7.02 | 128 | 46.8 |
| Zn | 30 | 65.37 | 2 | 1.66 | 9.3 | 266.4 | 2 | 9.17 | 92.7 | 8.22 | 25.3 | 0.6 | 85.6 |
| Ga | 31 | 69.72 | 3 | 1.82 | 5.9 | 451.9 | 8 | 11.81 | 9.81 | 12.2 | 28.6 | -4.4 | 100 |
| Ge | 32 | 72.59 | 4 | 2.02 | 7.8 | 565.9 | 8 | 13.64 | 79.9 | 14.9 | -2.64 | 129 | 67.1 |
| As | 33 | 74.59 | 5 | 0.81 | 9.7 | 413.2 | 2 | 12.95 | 22 | 46.71 | 44.91 | 36.94 | 123.6 |
| Kr | 36 | 83.8 | 7 | 3.1 | 13. | 564.5 | 4 | 45.28 | 1.8 | 618 | 744 | -226 | 2.85 |
| Rb | 37 | 85.47 | 1 | 0.89 | 4.1 | 570.3 | 2 | 55.79 | 2.35 | 1330 | 625 | -600 | 2.96 |
| Sr | 38 | 87.62 | 2 | 0.99 | 5.6 | 608.4 | 4 | 34.5 | 15.7 | 218 | 135 | -90 | 10.94 |
| Y | 39 | 88.91 | 3 | 1.11 | 6.2 | 364.8 | 2 | 19.89 | 66.3 | 15.4 | 41.1 | -5.1 | 77.9 |
| Zr | 40 | 91.22 | 4 | 1.22 | 6.6 | 323.1 | 2 | 14.02 | 68 | 10.1 | 30.1 | -4 | 144 |
| Nb | 41 | 92.91 | 5 | 0.893 | 6.7 | 330.0 | 2 | 10.84 | 104 | 6.56 | 35.2 | -2.29 | 245 |
| Mo | 42 | 95.94 | 6 | 1.3 | 7.0 | 314.7 | 2 | 9.39 | 330 | 2.63 | 9.2 | -0.68 | 465 |
| Tc | 43 | 99 | 7 | 0.55 | 7.2 | 273.8 | 2 | 8.6 | 407 | 5.7 | -1.1 | 433 | 177 |
| Ru | 44 | 101.1 | 8 | 1.42 | 7.3 | 270.5 | 2 | 8.14 | 432 | 2.09 | 5.53 | -0.58 | 563 |
| Rh | 45 | 102.9 | 4 | 1.35 | 7.4 | 280.3 | 4 | 8.29 | 379 | 3.46 | 5.43 | -1.1 | 413 |
| Pd | 46 | 106.4 | 4 | 1.35 | 8.3 | 389.0 | 4 | 5.23 | 121 | 13.7 | 14.1 | -6 | 221 |
| Ag | 47 | 107.8 | 1 | 1.42 | 7.5 | 408.6 | 4 | 3.62 | 80 | 23 | 22 | -9.8 | 122 |
| Cd | 48 | 112.4 | 2 | 1.46 | 8.9 | 297.8 | 2 | 13 | 62.3 | 12.4 | 53.1 | -1.2 | 114.1 |
| In | 49 | 114.8 | 3 | 1.49 | 5.7 | 459.9 | 2 | 15.71 | 10.6 | 148.8 | 153.7 | -46 | 45.1 |

Chapitre I : Constitution de la base de données – Le tableau périodique des éléments

| | | | | | | | | | | | | | |
|----|----|-------|---|-------|-----|-------|---|-------|--------|------|------|-------|------|
| Sn | 50 | 118.6 | 4 | 1.72 | 7.3 | 581.9 | 4 | 16.24 | 1.83E- | 0.33 | 41.6 | 45.6 | 31.2 |
| Sb | 51 | 121.7 | 5 | 1.046 | 8.6 | 450.6 | 2 | 18.2 | 54.4 | 16.1 | 38.9 | -6.1 | 101 |
| Xe | 54 | 131.3 | 0 | 2.4 | 12 | 613.2 | 4 | 33.03 | 45.32 | 690 | 708 | -271 | 2.93 |
| Cs | 55 | 132.9 | 1 | 0.86 | 3.8 | 614.1 | 2 | 70.96 | 1.69 | 1190 | 690 | -450 | 1.6 |
| Ba | 56 | 137.3 | 2 | 0.97 | 5.2 | 502.3 | 2 | 38.21 | 12.8 | 157 | 105 | -61 | 12.6 |
| La | 57 | 138.9 | 3 | 1.08 | 5.5 | 377.4 | 4 | 22.6 | 39.2 | 51.7 | 55.7 | -19.2 | 34.5 |
| Ce | 58 | 140.1 | 4 | -1.08 | 5.5 | 516.1 | 4 | 17 | 44.1 | 62.8 | 57.8 | -22.3 | 26 |
| Pr | 59 | 140.9 | 4 | -1.07 | 5.4 | 367.2 | 4 | 20.8 | 35.2 | 26.6 | 73.6 | -11.3 | 49.4 |
| Nd | 60 | 144.2 | 3 | -1.07 | 5.5 | 365.8 | 4 | 20.59 | 37.9 | 23.7 | 66.5 | -9.5 | 54.8 |
| Gd | 64 | 157.2 | 3 | 1.11 | 6.1 | 363.3 | 2 | 19.9 | 56.3 | 18 | 16.1 | 48.1 | 67.8 |
| Tb | 65 | 158.9 | 4 | -1.1 | 5.8 | 360.5 | 2 | 19.31 | 57.5 | 17.4 | 46 | -5.2 | 69.2 |
| Dy | 66 | 162.5 | 3 | -1.1 | 5.9 | 359.1 | 2 | 19 | 63.1 | 16 | 41.2 | -4.6 | 74 |
| Ho | 67 | 164.9 | 3 | -1.1 | 6.0 | 357.7 | 2 | 18.75 | 67.1 | 15.3 | 38.6 | -4.3 | 76.5 |
| Er | 68 | 167.2 | 3 | -1.11 | 6.1 | 355.9 | 2 | 18.44 | 73.3 | 14.1 | 36.4 | -4.2 | 84.1 |
| Yb | 70 | 173.0 | 3 | -1.06 | 6.2 | 548.4 | 4 | 24.84 | 18.4 | 89.2 | 56.4 | -31.9 | 18.6 |
| Lu | 71 | 174.9 | 3 | -1.14 | 5.4 | 350.5 | 2 | 17.78 | 68.4 | 14.3 | 37.3 | -4.2 | 86.2 |
| Hf | 72 | 178.4 | 4 | -1.23 | 6.8 | 319.4 | 2 | 13.41 | 138 | 7.16 | 18 | -2.48 | 181 |
| Ta | 73 | 180.9 | 5 | 0.322 | 7.5 | 330.3 | 2 | 10.87 | 185 | 6.89 | 12.1 | -2.58 | 264 |
| W | 74 | 183.8 | 6 | -1.4 | 7.8 | 316.5 | 2 | 9.53 | 407 | 2.45 | 6.24 | -0.69 | 523 |
| Re | 75 | 186.2 | 7 | 0.15 | 7.8 | 276.0 | 2 | 8.86 | 520 | 6.21 | -0.8 | 683 | 273 |
| Ir | 77 | 192.2 | 6 | 1.44 | 8.9 | 383.9 | 4 | 8.57 | 528 | 2.28 | 3.9 | -0.67 | 580 |
| Pt | 78 | 195.0 | 4 | 1.44 | 8.9 | 392.3 | 4 | 9.1 | 170 | 7.35 | 13.1 | -3.08 | 347 |
| Au | 79 | 196.9 | 3 | -1.42 | 9.2 | 407.8 | 4 | 10.19 | 78 | 23.4 | 23.8 | -10.8 | 191 |
| Hg | 80 | 200.5 | 2 | -1.44 | 10 | 300.5 | 1 | 14.81 | 25 | 154 | 151 | -119 | 36 |
| Tl | 81 | 204.3 | 3 | 1.44 | 6.1 | 345.6 | 2 | 17.24 | 7.89 | 104 | 139 | -83 | 41.9 |
| Pb | 82 | 207.1 | 4 | 1.55 | 7.4 | 405.9 | 2 | 18.26 | 0.0000 | 0.44 | 93.7 | 68 | -43 |
| Bi | 83 | 208.9 | 5 | 0.946 | 7.2 | 308.6 | 2 | 21.44 | 34 | 26 | 114 | -7.9 | 63.4 |

| C_{44} module élasticité | La conductivité thermique λ | La capacité molaire C_p | L'entropie standard S_0 | La différence d'enthalpie H298- H0 | La température de fusion T_m | Le changement d'enthalpie à la fusion ΔH_m | Température d'ébullition T_b | Le changement d'enthalpie à l'ébullition ΔH_b |
|----------------------------|-------------------------------------|---------------------------|---------------------------|---------------------------------------|--------------------------------|---|--------------------------------|--|
| 0.11 | 0.171 | 14.418 | 130.68 | 8.4684 | 13.81 | 0.12 | 20.3 | 0.46 |
| 0.0217 | 0.143 | 20.786 | 126.152 | 6.1965 | 0.95 | 0.021 | 4.215 | 0.082 |
| 9.6 | 84.7 | 24.77 | 29.12 | 4.632 | 453.69 | 3 | 1620 | 147.7 |
| 163 | 200 | 16.44 | 9.5 | 1.95 | 1560 | 7.895 | 2741 | 291.58 |
| 2.06 | 0.0245 | 14.69 | 205.147 | 8.68 | 54.361 | 0.444 | 90.18 | 6.2 |
| 4.3 | 141 | 28.24 | 51.3 | 6.46 | 370.87 | 2.597 | 1156 | 99.2 |
| 16.4 | 171 | 24.895 | 32.671 | 4.9957 | 923 | 8.4768 | 1366 | 127.4 |
| 28.3 | 237 | 24.392 | 28.3 | 4.54 | 933.47 | 10.711 | 2790 | 294 |
| 63.9 | 83.7 | 20 | 18.81 | 3.217 | 1687 | 50.208 | 3505 | 383.3 |

Chapitre I : Constitution de la base de données – Le tableau périodique des éléments

| | | | | | | | | |
|------|----------|--------|---------|--------|---------|---------|--------|--------|
| 8.27 | 0.269 | 22.7 | 32.07 | 4.412 | 388.36 | 1.721 | 882 | 9.62 |
| 1.9 | 102.4 | 29.58 | 64.68 | 7.088 | 336.86 | 2.3208 | 1040 | 79.1 |
| 14 | 200 | 25.94 | 41.588 | 5.736 | 1115 | 8.5395 | 1773 | 153.6 |
| 27.7 | 15.8 | 25.52 | 34.644 | 5.2174 | 1814 | 14.0959 | 3104 | 314.2 |
| 46.5 | 21 | 25.02 | 30.72 | 4.824 | 1941 | 14.146 | 3631 | 410 |
| 43.1 | 30.7 | 24.9 | 30.89 | 4.507 | 2183 | 21.5 | 3690 | 451.8 |
| 100 | 93.7 | 23.44 | 23.543 | 4.05 | 2180 | 21.004 | 2952 | 344.3 |
| 115 | 29.7 | 26.28 | 32.22 | 4.9957 | 1519 | 12.9089 | 2335 | 226.7 |
| 117 | 80.2 | 25.1 | 27.28 | 4.489 | 1811 | 13.806 | 3139 | 349.6 |
| 71 | 100 | 24.811 | 30.04 | 4.7655 | 1768 | 16.2 | 3184 | 376.6 |
| 122 | 83 | 26.07 | 29.796 | 4.787 | 1728.3 | 17.4798 | 3157 | 369.24 |
| 0.34 | 1401 | 24.443 | 33.15 | 5.004 | 1357.77 | 13.263 | 2843 | 300.7 |
| 39.6 | 121 | 25.44 | 41.631 | 5.657 | 692.68 | 7.322 | 1180 | 115.3 |
| 35 | 33.5 | 26.15 | 40.727 | 5.572 | 302.91 | 5.5898 | 2478 | 258.7 |
| 48.3 | 58.6 | 33.347 | 31.09 | 4.636 | 1211 | 36.9447 | 3107 | 331 |
| 22.6 | 50 | 24.65 | 35.689 | 5.117 | 1090 | 24.4429 | 61.3 | 34.8 |
| 1.35 | 9.49E-03 | 20.786 | 164.085 | 6.1965 | 115.765 | 1.64 | 119.8 | 9.05 |
| 1.6 | 58.2 | 31.062 | 76.776 | 7.489 | 312.47 | 2.1924 | 970 | 75.7 |
| 7.41 | 35.3 | 26.4 | 55.694 | 6.568 | 1050 | 7.431 | 1685 | 137.19 |
| 24.3 | 17.2 | 26.53 | 44.788 | 5.9835 | 1795.15 | 11.3942 | 3611 | 363.3 |
| 33.4 | 22.7 | 25.36 | 39.181 | 5.5663 | 2127.85 | 20.9978 | 4203 | 561.3 |
| 28.4 | 59 | 24.69 | 36.27 | 5.22 | 2750 | 30 | 5017 | 683.2 |
| 109 | 142 | 23.932 | 28.56 | 4.589 | 2893 | 37.4798 | 4952 | 582.2 |
| 199 | 185 | 23.56 | 32.985 | 4.356 | 2430.01 | 33.2912 | 4538 | 592.9 |
| 181 | 117 | 24.06 | 28.614 | 4.6024 | 2607 | 38.589 | 4423 | 595.5 |
| 184 | 150 | 24.98 | 31.556 | 5.36 | 2237 | 26.5935 | 3970 | 493.3 |
| 70.8 | 71.8 | 25.98 | 37.823 | 5.4685 | 1828 | 16.736 | 3237 | 357.6 |
| 45.5 | 429 | 25.36 | 42.551 | 5.7446 | 1234.93 | 11.297 | 2436 | 250.6 |
| 19 | 96.8 | 25.98 | 51.8 | 6.247 | 594.22 | 6.1923 | 1040 | 97.4 |
| 6.51 | 81.6 | 26.732 | 57.65 | 6.61 | 429.75 | 3.283 | 2346 | 231.45 |
| 72.3 | 66.6 | 27.17 | 51.18 | 6.323 | 505.08 | 7.0194 | 2876 | 295.8 |
| 39.5 | 25.9 | 25.23 | 45.522 | 5.8702 | 903.78 | 19.874 | 1860 | 165.8 |
| 1.41 | 0.0051 | 20.744 | 169.575 | 6.197 | 161.391 | 3.1 | 165.03 | 12.65 |
| 1.44 | 35.9 | 32.18 | 85.23 | 7.711 | 301.59 | 2.096 | 947 | 67.7 |
| 9.5 | 18.4 | 28.09 | 62.5 | 6.91 | 1000 | 7.119 | 2118 | 141.5 |
| 18 | 13.5 | 27.11 | 56.902 | 6.6651 | 1193 | 6.1965 | 3730 | 413.7 |
| 17.3 | 11.4 | 26.4 | 69.454 | 7.2002 | 1072 | 5.4601 | 3699 | 414.2 |
| 13.6 | 12.5 | 27.2 | 73.931 | 7.4182 | 1204 | 6.8869 | 3785 | 296.8 |
| 15 | 16.5 | 27.45 | 71.006 | 7.1337 | 1289 | 7.1421 | 3341 | 273 |
| 20.8 | 10.6 | 37.02 | 68.009 | 9.0076 | 1506.15 | 9.668 | 3569 | 359.4 |
| 21.8 | 11.1 | 28.91 | 73.8 | 9.4266 | 1632 | 10.1504 | 3496 | 330.9 |
| 24.3 | 10.7 | 28.16 | 74.956 | 8.8659 | 1685.15 | 11.3505 | 2835 | 230 |
| 25.9 | 16.2 | 27.15 | 75.019 | 7.9956 | 1745 | 11.757 | 2968 | 242.5 |
| 27.4 | 14 | 28.12 | 73.178 | 7.3923 | 1802 | 19.9033 | 3136 | 261.4 |
| 17.7 | 38.5 | 26.74 | 59.831 | 6.7111 | 1097 | 7.6567 | 1467 | 128.83 |
| 26.8 | 16.4 | 26.86 | 50.961 | 6.389 | 1936 | 18.6481 | 3668 | 355.9 |
| 55.7 | 23 | 25.3 | 43.56 | 5.845 | 2506 | 27.196 | 4963 | 575.5 |
| 82.6 | 60.7 | 25.3 | 41.472 | 5.6819 | 3290 | 36.5682 | 5778 | 743.1 |
| 160 | 164 | 24.27 | 32.618 | 4.97 | 3693 | 52.3137 | 5828 | 806.8 |

Chapitre I : Constitution de la base de données – Le tableau périodique des éléments

| | | | | | | | | |
|------|------|--------|--------|--------|---------|---------|------|--------|
| 1.16 | 71.2 | 25.31 | 36.482 | 5.333 | 3458 | 34.075 | 5869 | 714.8 |
| 256 | 147 | 24.98 | 35.505 | 5.2677 | 2719 | 41.124 | 4701 | 604.1 |
| 76.5 | 71.6 | 25.85 | 41.631 | 5.7237 | 2041.5 | 22.175 | 4100 | 509.8 |
| 42.2 | 317 | 25.42 | 47.488 | 6.0166 | 1337.33 | 12.552 | 3130 | 334.4 |
| 12.9 | 8.34 | 27.983 | 75.9 | 9.342 | 234.32 | 2.2953 | 629 | 59.2 |
| 7.2 | 46.1 | 26.32 | 64.3 | 6.832 | 577 | 4.1422 | 1746 | 164.1 |
| 14.8 | 35.2 | 26.51 | 64.8 | 6.87 | 600.61 | 4.7739 | 2019 | 177.58 |
| 11.5 | 7.87 | 25.52 | 56.735 | 6.4266 | 544.55 | 11.2968 | 1837 | 174.1 |

I.3. Définitions :

I.3.1. Le nombre atomique

Le numéro atomique (Z) est le terme employé en chimie et en physique pour représenter le nombre de protons du noyau d'un atome. Un atome peut être schématisé en première approche par une agglomération compacte (noyau atomique) de protons (p^+) et de neutrons (n), autour de laquelle circulent des électrons (e^-). Dans un atome de charge électrique neutre, le nombre d'électron est lui aussi égal au numéro atomique (Z protons de charge $+e$, plus Z électrons de charge $-e \Rightarrow$ charge totale = 0 Coulomb).

À l'origine, ce numéro déterminait la position d'un élément chimique dans le tableau périodique. Quand Dimitri Mendeleïev ordonna les corps chimiques connus en fonction de leurs propriétés, il s'aperçut que le classement dans l'ordre strict de masse atomique pouvait conduire à des situations illogiques : par exemple, l'iode et le tellure doivent être inversés par rapport à leur masse atomique. Ce classement selon les propriétés chimiques détermine le numéro atomique et transmissible tout de suite, approximativement proportionnel à la masse de l'atome, mais comme le prouvent les quelques inversions relevées, représentatif d'autres propriétés que la masse.

I.3.2. La masse atomique

La masse atomique est un nombre sans dimension qui est assez proche du nombre de nucléons dans le noyau de l'atome.

La masse d'un atome s'exprime le plus souvent en UMA, unité de masse des atomes qui équivaut à la masse de l'isotope léger de l'Hydrogène.

La masse molaire d'un atome est en fait la masse d'une mole d'un élément chimique donné et vaut autant de grammes que la valeur de la masse atomique : c'est la masse d'une mole, soit de $6,022 \times 10^{23}$ atomes du même élément.

Chapitre I : Constitution de la base de données – Le tableau périodique des éléments

La masse atomique est également définie pour un élément chimique, c'est alors la moyenne pondérée des masses atomiques des isotopes au prorata de la fréquence de ces isotopes tels qu'on les trouve dans la nature.

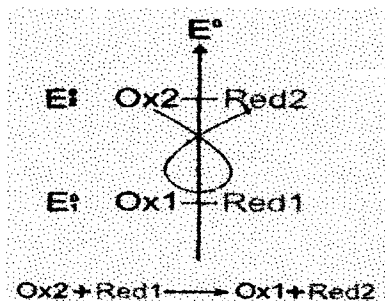
I.3.3. Les états d'oxydation

Une réaction d'oxydoréduction est une réaction chimique au cours de laquelle se produit un transfert d'électrons. On appelle *oxydant* l'atome qui capte les électrons et *réducteur* l'atome qui les cède au cours de la réaction.

Dans une oxydoréduction,

- l'élément qui perd un ou des électron(s) est appelé réducteur,
- l'élément qui capte un ou des électron(s) est appelé oxydant.

Le réducteur s'oxyde (réaction d'oxydation), l'oxydant se réduit (réaction de réduction).



L'oxydoréduction se compose donc de deux demi-réactions : une oxydation et une réduction.

- *Oxydation*
réducteur(1) = oxydant(1) + ne
- *Réduction*
oxydant(2) + ne^- = réducteur(2)

Oxydoréduction (« somme » de l'oxydation et de la réduction)
oxydant(2) + réducteur(1) \rightarrow oxydant(1) + réducteur(2)

I.3.4. L'électronégativité

L'électronégativité d'un élément est une grandeur qui caractérise sa capacité à attirer les électrons lors de la formation d'une liaison chimique avec un autre élément (À titre d'exemple, le fluor est l'élément le plus électronégatif tandis que le francium est le moins électronégatif). La différence d'électronégativité entre ces deux éléments détermine la nature de la liaison chimique : covalente lorsque la différence est faible (inférieure à 1,7), ionique lorsque cette différence est plus importante.

- Les gaz inertes n'ont pas d'électronégativité
- Plus un atome est petit, plus son électronégativité est grande

Chapitre I : Constitution de la base de données – Le tableau périodique des éléments

L'électronégativité est notée χ_A où A est le symbole de l'élément considéré. Plus χ_A est grand et plus l'élément est susceptible d'attirer des électrons en lui.

1.3.4.1 Définitions

Il existe plusieurs définitions de l'électronégativité (*Pauling, Mulliken, Parr, Allred et Rochow*) ce qui a conduit à construire plusieurs échelles.

a. Définition de Pauling

La différence d'électronégativité entre les éléments A et B a pour expression

$$\Delta\chi_{AB} = 0,102 * ((E_{AB} - 1/2(E_{AA} + E_{BB}))^{1/2} \quad (1.1)$$

où E_{AB}, E_{AA} et E_{BB} sont les énergies de liaison des molécules diatomiques A-B, A-A et B-B.

Cette définition ne donne que la différence entre deux électronégativités. On a donc besoin d'une origine qui a été fixée arbitrairement en donnant la valeur de 4 à l'électronégativité du fluor (élément le plus électronégatif de la classification).

b. Définition de Mulliken

L'électronégativité d'un élément est la moyenne de son affinité électronique A_e et de son énergie d'ionisation E_I

$$\chi = \frac{A_e + E_I}{2} \quad (1.2)$$

c. Définition d'Allred et Rochow

L'électronégativité d'un élément a pour expression

$$\chi = \frac{Z_{eff} \cdot e^2}{r_{cov}^2} \quad (1.3)$$

où Z_{eff} est la charge effective du noyau, e la charge élémentaire et r_{cov} le rayon covalent de l'élément.

d. Définition de Parr

L'électronégativité est l'opposée de la dérivée de l'énergie de l'atome par rapport au nombre d'électrons.

$$\chi = -\left(\frac{\partial E}{\partial n}\right) \quad (1.4)$$

Les échelles d'électronégativité les plus utilisées sont l'échelle de *Mulliken*, l'échelle d'*Allred-Rochow* et l'échelle de *Pauling*.

Les électronégativités des atomes impliqués dans une liaison tendent à être égales (principe d'égalisation des électronégativités de *Sanderson*, 1951). L'égalisation des électronégativités est réalisée par le transfert de densité électronique vers l'atome le plus électronégatif.

L'électronégativité permet d'estimer le caractère ionique d'une liaison à l'aide de la relation de *Pauling*

$$I_{AB} = 100(1 - e^{-\Delta\chi^2/4}) \quad (1.5)$$

Ou de celle de Haney et Smith

$$I_{AB} = 16\Delta\chi + 3.5\Delta\chi^2 \quad (1.6)$$

L'électronégativité est également la notion à l'origine de la polarité de certaines molécules. En effet, dans une molécule, lorsque les atomes de part et d'autre de la liaison covalente ont des électronégativités différentes, l'atome le plus électronégatif attire davantage les électrons. Les éléments dont l'électronégativité est faible sont fréquemment dits électropositifs.

I.3.5. L'énergie de première ionisation

C'est l'énergie nécessaire pour extraire le premier électron (c'est-à-dire l'électron dont l'énergie de liaison est la plus faible) de la structure atomique.

Formule générique décrivant l'ionisation à un électron : $X \rightarrow X^+ + e^-$

& (I.5.1, I.5.2, I.5.3, I.5.4, I.5.5) Réf : [12-13-14]

I.3.6. Le paramètre du réseau

Le paramètre du réseau est une grandeur caractéristique de la structure cristalline de l'élément. Il représente la distance entre deux nœuds consécutifs constituant la maille et qui sont l'image l'un de l'autre par translation du réseau.

I.3.7. nombre d'atomes par cellule

Le nombre d'atomes par cellule dépend de la structure cristalline. Autant ce nombre est important, autant le matériau est plus dense et plus compact.

& (I.5.6, I.5.7) Réf : [5-10]

I.3.8. Le volume molaire

En chimie, le volume molaire d'une substance est le volume occupé par une mole de cette substance. Son unité est le litre par mole ($L \cdot mol^{-1}$).

Dans les unités du système international, le volume molaire s'exprime en mètres cubes par mole ($m^3 \cdot mol^{-1}$). Il est souvent exprimé dans les conditions normales de température et de pression (CNTP).

Le volume molaire est une entité physico-chimique qui augmente avec l'élévation de la température. ; Il Peut se calculer en utilisant la formule :

$$V_m = \frac{V}{n} \quad (1.7)$$

Cette formule s'applique aux gaz uniquement avec

V le volume en litres et ;

n la quantité de matière en moles.

En utilisant la formule de calcul de la masse molaire M :

$$n = \frac{m}{M} \quad (1.8)$$

On peut déterminer une seconde formule :

$$m = \frac{V \times M}{V_m} \quad (1.9)$$

On peut aussi utiliser la relation des gaz parfaits :

$$PV = nRT \quad (1.10)$$

Afin de déterminer :

$$V_m = \frac{RT}{P} \quad (1.11)$$

I.3.9. Le module de Young E Le module de Young ou module d'élasticité longitudinale est la constante qui relie la contrainte de traction et la déformation longitudinale pour un matériau isotrope.

Le physicien britannique Thomas Young (1773-1829) avait remarqué que le rapport entre la contrainte de traction appliquée à un matériau et la déformation qui en résulte (un allongement relatif) est constant, tant que cette déformation reste petite et que la limite d'élasticité du matériau n'est pas atteinte. La loi d'élasticité est la loi de Hooke :

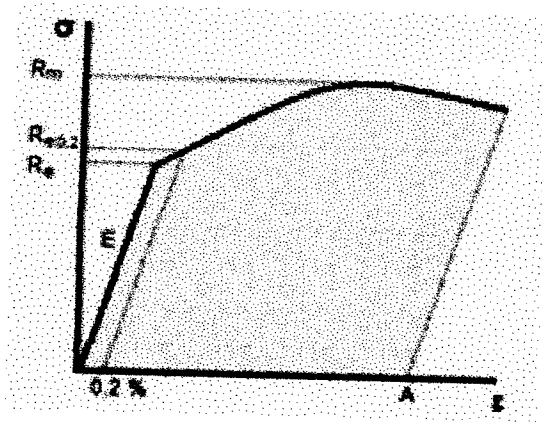


Diagramme contrainte déformation

$$\sigma = E\varepsilon \quad (1.12)$$

Où :

- σ est la contrainte (en unité de pression),
- E est le module de Young (en unité de pression),
- ε est l'allongement relatif (sans dimensions).

Le module de Young est la contrainte mécanique qui engendrerait un allongement de 100% de la longueur initiale d'un matériau (il doublerait donc de longueur), si l'on pouvait l'appliquer réellement : dans les faits, le matériau se déforme de façon permanente, ou se rompt, bien avant que cette valeur soit atteinte.

D'après l'équation aux dimensions, le module de Young est homogène à une pression, ou plus précisément une contrainte. L'unité internationale est donc le pascal (Pa). Cependant, en raison des valeurs élevées que prend ce module, il est en général donné en mégapascal (MPa) ou Newton par millimètre carré (N/mm²).

Dans le cas d'un matériau cristallin et certains matériaux amorphes, le module de Young exprime la « force de rappel » électrostatique qui tend à maintenir les atomes à distance constante. Il peut s'exprimer en fonction de la dérivée seconde du potentiel interatomique.

1.3.10. Les constants élastiques et les modules d'élasticité

La loi de Hooke établit que la déformation est directement proportionnelle à la contrainte pour des déformations suffisamment faibles. Par conséquent, les composantes de la déformation sont des fonctions linéaires des composantes de la contrainte.

$$\begin{aligned}
 e_{xx} &= s_{11}X_x + s_{12}Y_y + s_{13}Z_z + s_{14}Y_z + s_{15}Z_x + s_{16}X_y \\
 e_{yy} &= s_{21}X_x + s_{22}Y_y + s_{23}Z_z + s_{24}Y_z + s_{25}Z_x + s_{26}X_y \\
 e_{zz} &= s_{31}X_x + s_{32}Y_y + s_{33}Z_z + s_{34}Y_z + s_{35}Z_x + s_{36}X_y \\
 e_{yz} &= s_{41}X_x + s_{42}Y_y + s_{43}Z_z + s_{44}Y_z + s_{45}Z_x + s_{46}X_y \\
 e_{zx} &= s_{51}X_x + s_{52}Y_y + s_{53}Z_z + s_{54}Y_z + s_{55}Z_x + s_{56}X_y \\
 e_{xy} &= s_{61}X_x + s_{62}Y_y + s_{63}Z_z + s_{64}Y_z + s_{65}Z_x + s_{66}X_y
 \end{aligned}
 \tag{1.13}$$

Inversement, les composantes de la contrainte sont des fonctions linéaires des composantes de déformation :

$$\begin{aligned}
 X_x &= C_{11}e_{xx} + C_{12}e_{yy} + C_{13}e_{zz} + C_{14}e_{yz} + C_{15}e_{zx} + C_{16}e_{xy} \\
 Y_y &= C_{21}e_{xx} + C_{22}e_{yy} + C_{23}e_{zz} + C_{24}e_{yz} + C_{25}e_{zx} + C_{26}e_{xy} \\
 Z_z &= C_{31}e_{xx} + C_{32}e_{yy} + C_{33}e_{zz} + C_{34}e_{yz} + C_{35}e_{zx} + C_{36}e_{xy} \\
 Y_z &= C_{41}e_{xx} + C_{42}e_{yy} + C_{43}e_{zz} + C_{44}e_{yz} + C_{45}e_{zx} + C_{46}e_{xy} \\
 Z_x &= C_{51}e_{xx} + C_{52}e_{yy} + C_{53}e_{zz} + C_{54}e_{yz} + C_{55}e_{zx} + C_{56}e_{xy} \\
 X_y &= C_{61}e_{xx} + C_{62}e_{yy} + C_{63}e_{zz} + C_{64}e_{yz} + C_{65}e_{zx} + C_{66}e_{xy}
 \end{aligned}
 \tag{1.14}$$

Les quantités S_{ij} sont appelées constantes d'élasticité ; les quantités C_{ij} sont appelées constantes de rigidités élastique ou modules d'élasticités. Les S_{ij} ont la dimension : [surface] / [force] ou [volume] / [énergie]. Les C_{ij} ont la dimension [force] / [surface] ou [énergie] / [volume].

& (1.5.8, 1.5.9, 1.5.10) Réf : [5-6-7]

1.3.11. La conductivité thermique

La conductivité thermique est une grandeur physique caractérisant le comportement des matériaux lors du transfert thermique par conduction. Elle représente la quantité de chaleur transférée par unité de surface et par une unité de temps sous un gradient de température.

Mathématiquement, la conductivité thermique λ peut donc s'écrire comme la somme de deux contributions :

$$\lambda = \lambda_e + \lambda_p \quad (1.15)$$

Où

- λ_e est la contribution des électrons
- λ_p est la contribution des vibrations des atomes (phonons)

1.3.12. La capacité molaire

La capacité thermique (ou capacité calorifique) d'un corps est une grandeur permettant de quantifier la possibilité qu'a un corps d'absorber ou restituer de l'énergie par échange thermique au cours d'un changement de température. La capacité calorifique est l'énergie qu'il faut apporter à un corps pour augmenter sa température de un Kelvin. Elle s'exprime en Joule/Kelvin. C'est une grandeur extensive : plus la quantité de matière est importante plus la capacité calorifique est grande. Toute chose étant égale par ailleurs, plus la capacité thermique d'un corps est grande, plus grande sera la quantité d'énergie échangée au cours d'une transformation s'accompagnant d'une variation de la température de ce corps.

On appelle capacité calorifique molaire à volume constant $C_{Vm}(V, T)$, le rapport de la quantité d'énergie transmise par chaleur Q_v nécessaire pour faire monter la température d'une mole de corps pur d'un degré.

1.3.13. L'entropie standard S_0

Le troisième principe de la thermodynamique stipule que l'entropie d'un corps pur est nulle à la température de 0°K. Donc on peut calculer l'entropie molaire d'un corps pur de façon absolue. Ce calcul permet de dresser des tables thermodynamiques où sont reportées les

Chapitre I : Constitution de la base de données – Le tableau périodique des éléments

entropies molaires standards de la plupart des composés, définies à la température de référence de 298°K, notée S_{289}^0 ou plus simplement S_0 .

I.3.14. La différence d'enthalpie $H_{298}-H_0$

L'enthalpie (du préfixe *en-* et du grec *thalpein* : « chauffer ») est une fonction d'état extensive de la thermodynamique, dont la variation permet d'exprimer la quantité de chaleur mise en jeu pendant la transformation à pression constante (isobare) d'un système thermodynamique au cours de laquelle celui-ci reçoit ou fournit un travail mécanique.

Considérons une transformation isobare au cours de laquelle le système passe d'un état A à un état B d'équilibres en échangeant de la chaleur Q_p et du travail uniquement par l'intermédiaire des forces de pression $W_{f,p}$.

Le premier principe permet d'écrire :

$$\Delta U = U_B - U_A = Q_p + W_{f,p} \quad (1.16)$$

U étant la fonction d'état énergie interne

À pression constante le travail des forces de pression est égal à :

$$W_{f,p} = -p\Delta V = -p(V_B - V_A) \quad (1.17)$$

$$U_B - U_A = Q_p - p(V_B - V_A) \quad (1.18)$$

D'où :

$$Q_p = (U_B + pV_B) - (U_A + pV_A) \quad (1.19)$$

On définit ainsi une nouvelle fonction d'état, la fonction enthalpie $H(U,p,V)$

$$H = U + pV = ST + pV \quad (1.20)$$

Il s'ensuit que :

$$Q_p = H_B - H_A = \Delta H \quad (1.21)$$

Par conséquent, à pression constante, la chaleur mise en jeu, qui n'est pas une fonction d'état, devient égale à la variation de la fonction d'état enthalpie H. La variation de cette

Chapitre I : Constitution de la base de données – Le tableau périodique des éléments

fonction ne dépend que de l'état final et de l'état initial du système et est indépendante du chemin suivi par la transformation.

C'est l'intérêt de l'application de la fonction enthalpie dans les cas très courants de transformations effectuées à l'air libre, à pression atmosphérique constante.

Cette propriété est à la base de la calorimétrie à pression constante. Par abus de langage on confond souvent les termes chaleur et enthalpie.

L'enthalpie a la dimension d'une énergie, et s'exprime en joules dans le Système International.

La propriété mathématique induite pour toute fonction d'état implique que sa différentielle est totale exacte c'est-à-dire qu'elle est égale à la somme des différentielles partielles par rapport à chaque variable.

I.3.15. La température de fusion T_m

Le point de fusion d'un corps représente la température à laquelle coexistent son état solide et son état liquide. Il s'agit d'une constante pour une substance pure donnée.

T_m est habituellement calculée sous pression atmosphérique normale (1 atmosphère).

Il est donc souvent possible, en connaissant son point de fusion, de déterminer la nature d'une substance (identification), bien que cette information ne soit pas suffisante pour permettre une identification complète d'une nouvelle molécule.

I.3.16. Température d'ébullition T_b

La température la plus élevée que peut atteindre un corps avant de s'évaporer, sous forme gazeuse, librement, se nomme le *point d'ébullition*. Cette température se calcule à la pression atmosphérique de 1 atmosphère (101.3 kPa).

Il est possible de définir de façon équivalente le point d'ébullition comme étant la température à laquelle la pression de vapeur du liquide est de 1 atmosphère.

& (I.5.11, I.5.12, I.5.13, I.5.14, I.5.15, I.5.16) Réf : [8-9-10]

Conclusion I

La détermination des propriétés physique des éléments métallique et non métallique est une étape incontournable du développement de nouveaux matériaux non seulement pour l'identification, et la caractérisation des matériaux mais aussi et surtout pour la compréhension, donc l'optimisation, des phénomènes physiques mis en jeu.

Dans ce chapitre nous avons présenté quelques propriétés physiques des matériaux, qui nous allons présenter leurs valeurs expérimentales dans le chapitre II, comme une base de donnés.

Références I

- [1]. W. Martienssen (Ed.): *Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology, Landolt–örnstein, New Series III and IV* (Springer, Berlin, Heidelberg 1970–2003).
- [2]. R. Blachnik (Ed.): *Elemente, anorganische Verbindungen und Materialien, Minerale, D'Ans-Lax, Taschenbuch für Chemiker und Physiker, Vol. 3, 4th edn.* (Springer, Berlin, Heidelberg 1998).
- [3]. D. R. Lide (Ed.): *CRC Handbook of Chemistry and Physics, 80th edn.* (CRC Press, Boca Raton 1999).
- [4]. Lehrstuhl für Werkstoffchemie, T.H. Aachen: *Thermodynamic Properties of Inorganic Materials, Landolt– Börnstein, New Series IV/19* (Springer, Berlin, Heidelberg 1999).
- [5]. Charles Kittel (trad. Nathalie Bardou, Évelyne Kolb), *Physique de l'état solide (Solid state physics)*, (1998).
- [6]. H.B Huntington, « Elastic constants of crystal » *Solid state physics* 7, 213 ,(1958).
- [7]. A.E.HLOVE, *A treatise on the mathematical theory of elasticity*, Dover Paperbak,(1944).
- [8]. *Thermodynamique, fondements et applications*, J.Ph. Pérez, A.M. Romulus, p155 édition Masson .
- [9]. Harris Benson. *Physique 1 : mécanique. 3^e édition.* Éditions du Renouveau Pédagogique, Saint-Laurent, Québec , p. 519 , (2004) .
- [10]. David R .Lideh ; *Handbook of chemistry and Physics 88th Edition* ,Editor-in-Chief;(2007-2008).

- [11]. Henry Guerlac (1961) *Lavoisier — the crucial year. The background and origin of his first experiments on combustion in (1772)* .
- [12]. Schüring, J., Schulz, H. D., Fischer, W. R., Böttcher, J., Duijnisveld, W. H. (editors)(1999). *Redox: Fundamentals, Processes and Applications*, Springer-Verlag, Heidelberg, 246 pp. ISBN 978-3540665281.
- [13]. *Thermoelectric Handbook*, Ed. Rowe DM - Chemical Rubber Company, Boca Raton (Floride) (1995).
- [14]. GS Nolas (et al.), *Thermoelectric, basic principles and new materials developments*, Springer (2001).
- [15]. GD Mahan (et al.), *Thermoelectric materials: new approaches to an old problem*, *Physics Today*, Vol. 50, p42, (1997).

Chapitre II

Le datamining – la méthode d'Analyse en Composantes Principales ACP

Chapitre II : Le datamining – la méthode d'Analyse en Composantes Principales ACP

II.1. Introduction

La classification est une étape importante pour l'analyse des données, elle consiste à regrouper les objets d'un ensemble de données en classes homogènes [1-2].

Pour estimer le potentiel de prédiction de la classification des éléments du tableau périodique, on s'intéresse à l'une des méthodes du Datamining, c'est la méthode d'Analyse en Composante Principale « ACP ».

II.2. Le Datamining

Le datamining est apparu dans les années 90, pour extraire des connaissances nouvelles à partir d'une base de données. Le datamining tire, à partir d'une vaste base de données, des conclusions nouvelles quant aux données entrées [6-7-8].

Il existe de nombreux logiciels de datamining tels que Statistica, XLSTAT, SPSS, Clémentine, SAS ou Oracle... Tous ont la méthodologie en commun : il faut trouver un domaine, construire une base (data warehouse), définir des questions ouvertes et le problème général. Une fois ces étapes accomplis, en rentrant (input) dans le logiciel les requêtes de la base, il en sortira, en principe, les réponses aux questions posées (après une brève analyse des résultats - output).

Dans ce travail, nous avons programmé la méthode de classification ACP par le langage Matlab.

II.3. Analyse En Composantes Principales « ACP »

L'Analyse en Composante Principale (ACP) fait partie des analyses descriptives multivariées.

Le but de cette analyse est de résumer le maximum d'informations possibles en perdant le moins possible pour :

- Faciliter l'interprétation d'un grand nombre de données initiales ;
- Donner plus de sens aux données réduites ;

L'ACP permet donc de réduire des tableaux de grandes tailles en un petit nombre de variables tout en conservant un maximum d'information. Les variables de départ sont dites 'métriques'.

Plusieurs méthodes sont préconisées dans la littérature pour réduire la taille de dimension de la grande base de données [3].

Chapitre II : Le datamining – la méthode d'Analyse en Composantes Principales ACP

Le nombre de données recueillies pour d'écrire un phénomène peut être trop important pour permettre un traitement direct de toute l'information disponible. Bien souvent l'information totale, constituée de p variables (mesures, observations, ...), est redondante et le but de l'algorithme de l'ACP est d'extraire $q < p$ "facteurs" (qui sont des combinaisons linéaires des p variables) contenant tout ou une grande partie de l'information contenue dans les p variables de départ.

L'idée de base de l'ACP est de réduire la dimension de la matrice des données, en retenant le plus possible les variations présentes dans le jeu des données de départ. Cette réduction ne sera possible que si les variables initiales ne sont pas indépendantes et ont des coefficients de corrélation entre elles non nuls. Ces variables initiales sont transformées en de nouvelles variables, appelées composantes principales. Elles sont obtenues par combinaisons linéaires des précédentes et sont ordonnées et non corrélées entre elles. L'analyse en composantes principales cherche à identifier les vecteurs propres orthonormaux et leurs valeurs propres correspondantes de la matrice de dispersion des variables originelles.

Les vecteurs propres orthonormaux sont utilisés pour construire les composantes principales et les valeurs propres sont les variances des composantes principales correspondantes [4].

II.3.1. Formulation de l'Analyse en Composantes Principales [9]

a. Matrice des données

La matrice suivante représente la forme générale d'une classe (cluster) des données.

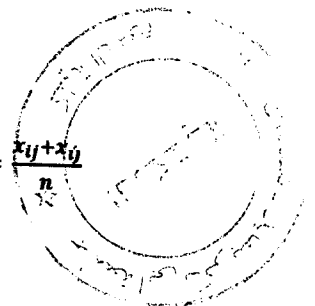
$$\begin{pmatrix} x_{11} & \dots & x_{1p} \\ \vdots & x_{ij} & x_{ij} & \vdots \\ x_{m1} & x_{ij} & x_{mp} \end{pmatrix} \quad (2.1)$$

$$\begin{pmatrix} \bar{x}_1 & \bar{x}_i & \bar{x}_p \\ s_1 & s_i & s_p \end{pmatrix}$$

m objets (ou individus), p descripteurs (ou variables)

s Coefficient de simple concordance (Sokal et Michener, 1958)

$$s(i, i) = \frac{x_{ij} + x_{ij}}{n}$$



b. Centrage et réduction des données

Pour centrer les données d'une matrice on utilise la formule suivante :

$$X_{jj} = \frac{(x_{jj} - \bar{x}_i)}{s_i} \quad (2.2)$$

c. Distances entre objets

L'écart ou la distance entre les individus ou les objets est donnée par l'expression suivante :

$$d(i, \ell)^2 = \sum_{j=1}^p p_j (x_{ij} - x_{\ell j})^2 \quad (2.3)$$

ou p_j est une pondération qui est en général égale à 1.

d. Inertie totale I du nuage

On note I le moment d'inertie du nuage des individus

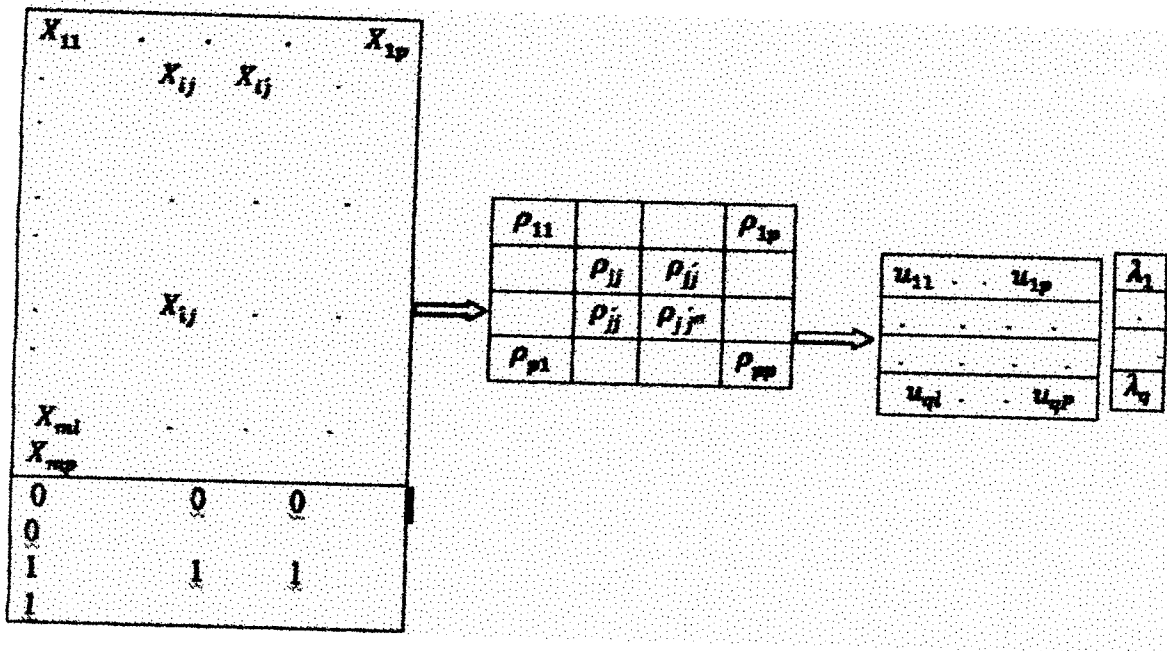
$$I = \frac{1}{m} \sum_{j=1}^p \sum_{i=1}^m \left(\frac{x_{ij} - \bar{x}_j}{s_j} \right)^2 = p \quad (2.4)$$

Ce moment d'inertie totale est intéressante car c'est une mesure de la dispersion du nuage des individus par rapport à son origine. Si ce moment d'inertie est grand, cela signifie que le nuage est très dispersé, tandis que s'il est petit, cela signifie que alors le nuage est très concentré sur son centre de gravité.

II.3.2 Réalisation de l'analyse en composantes principales

Le but : trouver des axes orthogonaux (indépendants) qui ont la propriété d'extraire le maximum de la variance projetée (ou inertie projetée) des individus ou objets.

- calcul de la matrice des données centrées-réduites ;
- calcul de la matrice des corrélations variables/variables ;
- calcul de la matrice des vecteurs propres et du vecteur des valeurs propres ;



Avec $q \leq p$

a. Relations de transitions

$$F_q(i) = \frac{1}{\sqrt{\lambda_q}} \sum_{j=1}^p \left(\frac{x_{ij} - \bar{x}_j}{s_j} \right) G_q(j) \quad (2.5)$$

ou F est la projection de l'individu i sur l'axe factoriel q , G les projections des p variables sur q , et λ la valeur propre associée à la composante q .

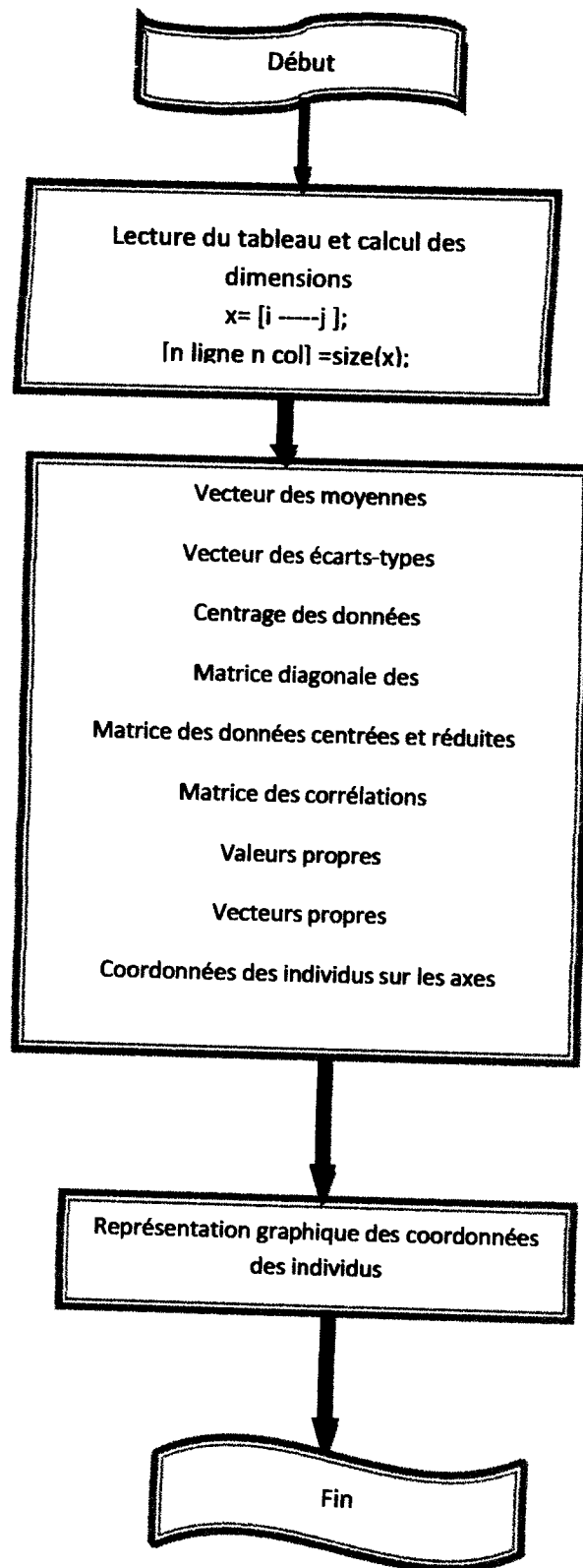
$$G_q(j) = \frac{1}{\sqrt{\lambda_q}} \sum_{i=1}^m \left(\frac{x_{ij} - \bar{x}_j}{s_j} \right) F_q(i) \quad (2.6)$$

b. Nuage des variables

On peut alors définir l'angle $(\widehat{j, j})$ entre deux vecteurs par son cosinus :

$$\cos(j, j) = \sum_{i=1}^m \left(\frac{x_{ij} - \bar{x}_j}{s_j} \right) \left(\frac{x_{ij} - \bar{x}_j}{s_j} \right) = \text{cor}(j, j) \quad (2.7)$$

II.4 Calcul d'une ACP avec MATLAB



Algorithme de base de la méthode ACP

Conclusion II

Dans ce chapitre nous avons présenté la technique utilisée dans la classification des éléments du tableau périodique, on a montré que la méthode de l'ACP permet de trouver un axe u , issu d'une combinaison linéaire des X_n , tel que la variance du nuage autour de cet axe soit maximale. Les nouvelles variables, appelées composantes principales (PC), sont non corrélées, et sont ordonnées par fraction de l'information totale que chacune contient [1-5].

Références II

- [1] H. Hotelling, "Analysis of a complex of statistical variables into principal components", *Journal of Educational Psychology*, vol.24, pp.417-441, 1933.
- [2] L. Ferre, "Selection of components in principal component analysis: A comparison of methods", *Computational Statistics and Data Analysis*, pp.669-682, 1995.
- [3] Minami K., Nakajima H., Mark, R., and Toyoshima, T., "Realtime discrimination of ventricular tachyarrhythmia with fourier-transform neural network", *IEEE Trans. Biomed. Eng.*, vol. 46, no 2, 1999.
- [4] Jolliffe I.T., "Principal component analysis", Springer-Verlag, New York, 1986
- [5] Besse, P., and Ferre, L., "Sur l'usage de la validation croisée en analyse en composantes principales", *Revue de Statistique Appliquée*, XLI (1), pp. 71-76, 1993.
- [6] Pieter Adriaans and Dolf Zantinge _ *Data Mining* _ Addison _ Wesley, 1996.
- [7] Jean-Michel Franco and EDS-Institut Prometheus. *Le Data Warehouse. Le Data Mining.* yrolles, 1997.
- [8] J- Han and M-Kamber. *Data Mining: Concepts and Techniques.* Morgan Kaufmann, 2000.
- [9] Rapport, 'Statistiques et Probabilités', Tome 2, A.I.D.E.P, Dunod.

Chapitre III

Chapitre III : Datamining des propriétés physiques des éléments du tableau périodique

III.1. Introduction

Dans ce chapitre nous allons présenter les résultats graphiques des corrélations entre les individus, obtenues à partir des calculs numériques sous Matlab effectués sur la base de la théorie présentée dans le chapitre précédent.

La première étape consiste à déterminer la signification physique des axes de projection (PC1, PC2). La seconde étape consiste en l'interprétation des corrélations entre les éléments, qui peut être tirée des deux diagrammes : loadings, ou diagramme des variables, et scores, ou diagramme des propriétés.

III.2. Interprétation des résultats

La figure 1 présente le diagramme des propriétés (loadings plots). Il permet de déceler les corrélations entre les 22 propriétés physiques des éléments, que nous avons noté Var1... Var22 pour une meilleure lisibilité du schéma. La liste des variables est la suivante :

| | |
|---|--|
| Var1 : Nombre atomique Z | Var12 : La constante d'élasticité S_{12} |
| Var2 : Masse atomique | Var13 : Le module d'élasticité C_{11} |
| Var3 : Les états de l'oxydation | Var14 : Le module d'élasticité C_{44} |
| Var4 : L'électronégativité | Var15 : La conductivité thermique |
| Var5 : L'énergie de 1 ^{ère} l'ionisation | Var16 : La capacité molaire C_p |
| Var6 : Le paramètre réseau | Var17 : L'entropie standard S_0 |
| Var7 : Le nombre d'atomes par cellule | Var18 : La différence Enthalpie $H_{298}-H_0$ |
| Var8 : Le volume molaire | Var19 : La température de fusion |
| Var9 : Le module de Young | Var20 : Le changement d'enthalpie à la fusion |
| Var10 : La constante d'élasticité S_{11} | Var21 : La température d'ébullition |
| Var11 : La constante d'élasticité S_{44} | Var22 : Le changement d'enthalpie à l'ébullition |

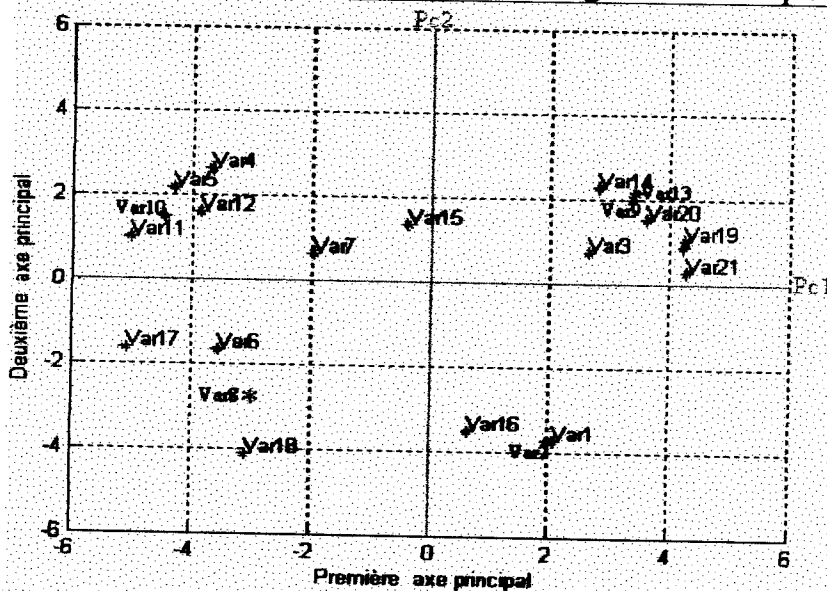


Figure 1 Corrélation entre les propriétés physiques – Scores plot

Chapitre III : Datamining des propriétés physiques des éléments du tableau périodique

Nous pouvons remarquer un certain nombre de corrélations et d'anti corrélations. Certaines de ces corrélations sont triviales et assez simples à expliquer. D'autres sont le reflet de principes et relations physiques intrinsèques.

Dans la liste des corrélations, nous trouvons :

- Var1 corrélé à Var2 : le nombre atomique est corrélé à la masse atomique. Ceci est assez normal du moment que la masse atomique comprend la somme des masses des neutrons et des protons. Le nombre de ces derniers étant justement le nombre atomique Z .
- Var 1 et Var2 corrélés à Var 16 : c'est à dire le nombre et la masse atomiques sont corrélés à la capacité calorifique. Ceci peut s'expliquer comme suit : La capacité calorifique exprime l'aptitude du matériau à assimiler la chaleur. Le mode principale d'assimilation étant les phonons, ou vibrations du réseau. Autant la masse atomique est importante, autant il faudra de l'énergie pour exciter les phonons ; autrement dit autant la chaleur absorbée pour une augmentation de température donnée est plus importante.
- Var21 est corrélé à Var 19 : la température de fusion est corrélée à la température d'ébullition. Ceci est encore trivial du moment que l'ébullition se produit après la fusion.
- Var19 et Var 21 corrélés à Var20 : les températures de fusion et d'ébullition sont corrélées au changement d'enthalpie à la fusion. Cette dernière grandeur exprime l'énergie qu'il faut fournir pour que le matériau passe complètement de l'état solide à l'état liquide. Elle est de plus en plus importante que les liaisons interatomiques sont plus fortes. Ceci explique sa corrélation avec la température de fusion qui est toujours plus importante lorsque les liaisons interatomiques sont plus rigides.
- Var13 et Var14 corrélés à Var 9 : les constantes élastiques C_{11} et C_{12} sont corrélées au module de Young. Les deux constantes expriment la réponse du matériau à une déformation à l'échelle atomique. Elles sont autant plus importantes que les liaisons interatomiques sont plus fortes. Le module de Young est la réponse macroscopique du matériau à une déformation de traction. Indiscutablement le comportement mécanique macroscopique est une expression du déplacement des atomes à plus petite échelle lors de l'application d'une contrainte externe.
- Var4 corrélé à Var5 : l'électronégativité est corrélé à l'énergie de 1^{ère} l'ionisation. Un matériau électronégatif a tendance à attirer les électrons des autres atomes dans une liaison. A plus forte raison, les électrons de sa dernière couche sont fortement liés et ne sont que très difficilement cédés. Ceci s'exprime par une énergie d'ionisation élevée.
- Var6 corrélé à Var8 : le paramètre du réseau est corrélé au volume molaire. Ceci est tout à fait normal vue que le volume est fonction de l'espacement interatomique.

Chapitre III : Datamining des propriétés physiques des éléments du tableau périodique

- Var17 corrélé à Var6 et Var8 : l'entropie est corrélée au paramètre du réseau et par conséquent au volume molaire. Ceci implique que l'augmentation du volume molaire augmente le désordre dans le système.
- Var10 corrélé à Var11 et Var12 : les constantes d'élasticité S_{11} , S_{12} et S_{44} sont toutes corrélées. Ce fait est cohérent du moment que toutes ces grandeurs sont liées directement à la manière dont varie la structure lorsqu'une contrainte externe est appliquée. Autrement dit, elles découlent toutes de la liaison interatomique.

D'un autre côté, nous trouvons les anti-corrélations :

- Var14 inversement corrélés à Var6 et Var8 : le module de Young est inversement corrélé au paramètre du réseau et au volume molaire. On sait d'expérience que le module de Young est proportionnel au module de compression qui lui est mesure de la compressibilité du réseau. Donc autant il est important autant c'est difficile de comprimer le réseau. Lorsque le paramètre du réseau et donc le volume molaire diminuent, le volume par atome diminue également, et donc la possibilité de rapprocher les atomes diminue. Ceci explique qu'autant le paramètre de réseau diminue autant le module de compression, et donc le module de Young augmente.
- Var1 et Var2 inversement corrélés à Var4 et Var5 : le nombre et la masse atomiques sont inversement proportionnels à l'électronégativité et l'énergie de première ionisation. Autant le nombre d'électrons augmente dans l'atome, autant la distance entre les électrons de valence et le noyau augmente, et donc autant ces électrons sont moins liés et l'énergie nécessaire pour les arracher (énergie de première ionisation) diminue. Aussi, autant le nombre d'électrons augmente, autant l'atome est moins électronégative car son noyau est de plus en plus écranté par les électrons et n'attire plus fortement les électrons des atomes voisins.

La figure 2 représente le diagramme des variables, c'est-à-dire les éléments dans ce cas (Loading plot). Il permet de voir comment sont distribués les éléments sur les axes PC1 et PC2 lorsque toutes leurs propriétés sont prises en compte.

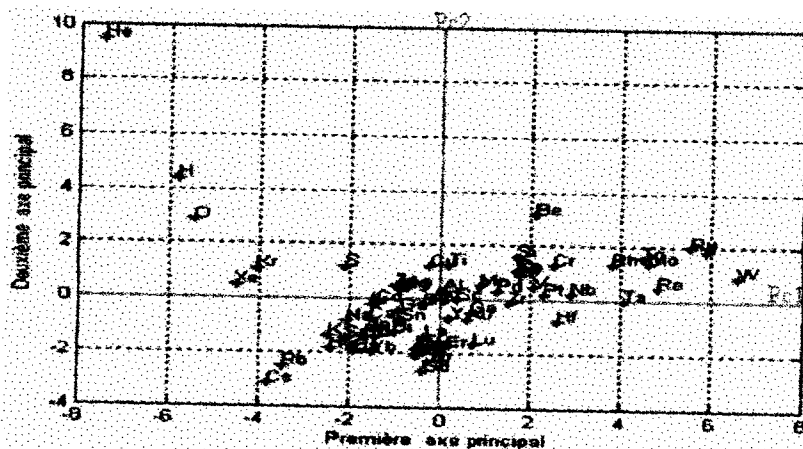


Figure 2 Corrélation entre les éléments – Loading plot

Chapitre III : Datamining des propriétés physiques des éléments du tableau périodique

Vue sous cette forme, la classification des éléments n'est pas très constructive. En effet, autant le diagramme des propriétés reflète un grand nombre de corrélations physiques, autant le diagramme des variables semble condensé et peu lisible.

Nous pouvons voir que l'hélium, l'hydrogène, l'oxygène et quelques gaz rares (Xe, Kr) sont bien visibles sur le côté du diagramme. Aussi, le tungstène occupe une position particulière et se distingue avec quelques éléments métalliques (Ru, Rh, Ta...). Le reste des éléments, c'est-à-dire la majeure partie sont concentrés au centre du diagramme au point que la lisibilité est quasi nulle.

Pour y voir plus clair, nous avons tracé ce diagramme d'une manière astucieusement différente. La figure 3 est la représentation tridimensionnelle du diagramme des variables sur laquelle chaque élément est représenté par un cube plus ou moins éloigné dans la direction perpendiculaire pour permettre d'apercevoir tous les éléments.

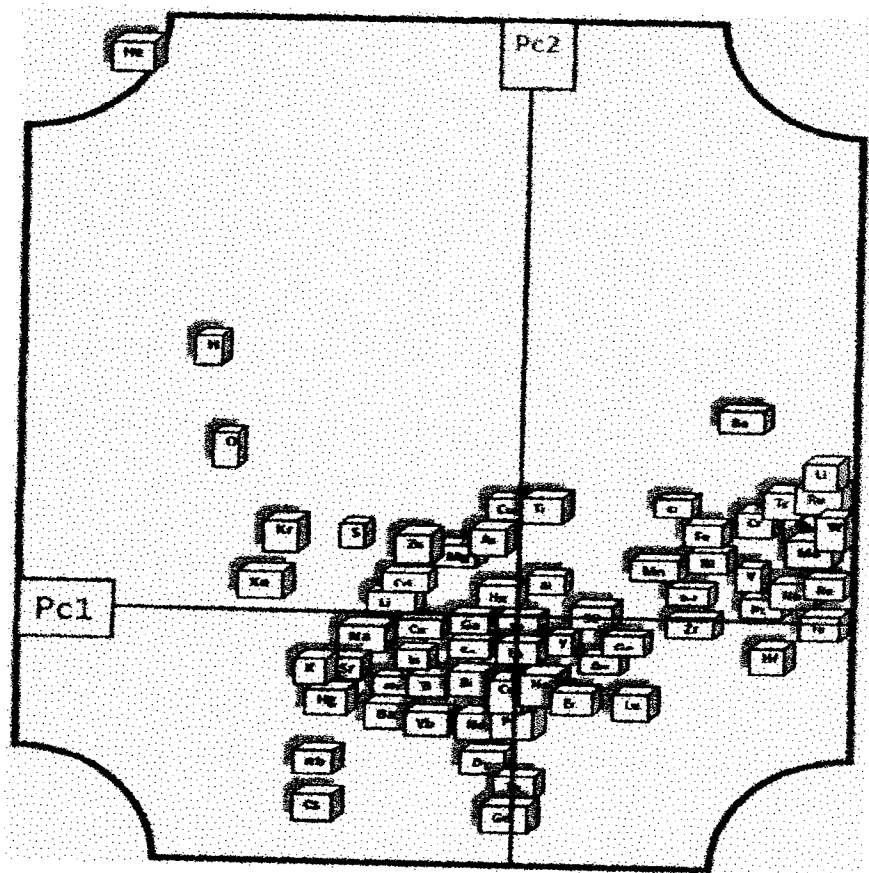


Figure 3 Représentation tridimensionnelle du diagramme des variables

Bien que la figure soit suffisamment claire, il reste à noter que la distribution des éléments dans le graphe ne suit pas une logique particulière. Il est très probable que le grand nombre de propriétés utilisées dans notre analyse est responsable de la variabilité des résultats et du fait que cette classification des éléments, aussi originale soit elle n'est pas très avantageuse.

Chapitre III : Datamining des propriétés physiques des éléments du tableau périodique

Suite à cette introspection, nous avons décidé de refaire une analyse sur l'ensemble des éléments de la classification périodique en incluant cette fois dans notre base de données un ensemble plus restreint de propriétés et qui sont des propriétés intrinsèques de base. Plus particulièrement, nous avons inclus cette fois : l'énergie totale de l'atome, l'énergie cinétique des électrons, l'énergie de l'interaction coulombiennes et l'énergie d'échange et corrélation du système électronique.

III.3. Corrélation des énergies du système atomique et électronique

III.3.1. Définitions

Un système solide est un ensemble d'atomes composés de noyaux et d'électrons. Leurs interactions sont décrites par l'équation de Schrödinger qui doit être résolue suivant les lois de la mécanique quantique.

Cette résolution étant difficile, on a trouvé des moyens de la résoudre pour un système solide cristallin avec un ensemble d'approximations. Ces approximations s'inscrivent toutes dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de densité DFT.

L'énergie totale du système est calculée en évaluant l'énergie d'interaction coulombienne, l'énergie cinétique des électrons et un terme d'énergie dite d'échange et corrélation qui est ajouté pour restituer l'énergie mise en œuvre par les électrons pour respecter le principe de Pauli (énergie d'échange) et l'énergie des interactions complexes entre les électrons et qui ne sont pas incluses dans le terme coulombien (énergie de corrélation).

III.3.2. La Base de données :

Les valeurs de ces énergies pour l'ensemble des éléments du tableau périodique ont été déterminées par l'Institut National des Standards et Technologies (NIST) aux états unies et sont disponibles pour consultations sur le web.

Nous avons collecté dans notre base de données les énergies totale, coulombienne, cinétique et d'échange et corrélation pour 93 éléments allant de l'hydrogène à l'uranium. Le tableau 1 donne les valeurs que nous avons utilisées et qui sont issue de la référence [2].

Tableau 1 Base de données des énergies électroniques [2]

| Élément | Energies totales | Energies cinétiques | Energies coulombiennes | Energies d'échange et corrélation |
|----------------|-------------------------|----------------------------|-------------------------------|--|
| H | -0.445671 | 0.425027 | 0.282827 | -0.920999 |
| He | -2.834836 | 2.767922 | 1.99612 | -6.625564 |
| Li | -7.335195 | 7.237484 | 3.990755 | -16.911041 |
| Be | -14.447209 | 14.309424 | 7.115257 | -33.357034 |
| B | -24.344198 | 24.161047 | 11.503002 | -56.484587 |
| C | -37.425749 | 37.190391 | 17.627997 | -87.515412 |
| N | -54.025016 | 53.731727 | 25.799845 | -127.416229 |
| O | -74.473077 | 74.116881 | 36.331102 | -177.152578 |

Chapitre III : Datamining des propriétés physiques des éléments du tableau périodique

| | | | | |
|----|--------------|-------------|-------------|--------------|
| F | -99.099648 | 98.676131 | 49.535385 | -237.688846 |
| Ne | -128.233481 | 127.738667 | 65.726488 | -309.988206 |
| Na | -161.44006 | 160.896571 | 79.732497 | -388.546372 |
| Mg | -199.139406 | 198.541505 | 95.67329 | -477.899149 |
| Al | -241.315573 | 240.663489 | 112.670733 | -577.205757 |
| Si | -288.198397 | 287.48774 | 131.767814 | -687.900675 |
| P | -339.946219 | 339.173459 | 153.065007 | -810.4001 |
| S | -396.716081 | 395.878143 | 176.68795 | -945.141155 |
| Cl | -458.664179 | 457.758293 | 202.772337 | -1092.568993 |
| Ar | -525.946195 | 524.969812 | 231.458124 | -1253.131982 |
| K | -598.20059 | 597.17213 | 257.381524 | -1421.104115 |
| Ca | -675.742283 | 674.657334 | 285.20613 | -1601.463209 |
| Sc | -758.679275 | 757.5252 | 318.555762 | -1797.853811 |
| Ti | -847.277216 | 846.050533 | 355.232355 | -2008.740849 |
| V | -941.678904 | 940.377057 | 395.162964 | -2234.347114 |
| Cr | -1042.030238 | 1040.642716 | 441.867987 | -2478.305541 |
| Mn | -1148.449372 | 1146.990867 | 485.085158 | -2731.133992 |
| Fe | -1261.093056 | 1259.553429 | 535.295832 | -3003.082484 |
| Co | -1380.091264 | 1378.468819 | 589.169216 | -3291.260194 |
| Ni | -1505.580197 | 1503.873332 | 646.833302 | -3596.066045 |
| Cu | -1637.785861 | 1635.9828 | 713.928477 | -3923.329381 |
| Zn | -1776.57385 | 1774.693645 | 774.056522 | -4257.166094 |
| Ga | -1921.846456 | 1919.894783 | 833.754978 | -4603.576824 |
| Ge | -2073.807332 | 2071.782093 | 895.945638 | -4965.789424 |
| As | -2232.534978 | 2230.434545 | 960.716547 | -5344.04275 |
| Se | -2398.11144 | 2395.934307 | 1028.192719 | -5738.619928 |
| Br | -2570.6207 | 2568.365427 | 1098.492305 | -6149.802515 |
| Kr | -2750.14794 | 2747.813142 | 1171.723688 | -6577.865761 |
| Rb | -2936.337293 | 2933.940454 | 1239.168864 | -7013.68955 |
| Sr | -3129.453161 | 3126.990706 | 1308.954372 | -7465.641817 |
| Y | -3329.520604 | 3326.984254 | 1384.603788 | -7937.187681 |
| Zr | -3536.737751 | 3534.12421 | 1464.236106 | -8426.900586 |
| Nb | -3751.196175 | 3748.49657 | 1551.501122 | -8938.494135 |
| Mo | -3973.013235 | 3970.231601 | 1638.977454 | -9465.024542 |
| Tc | -4202.188857 | 4199.331793 | 1724.900741 | -10004.79062 |
| Ru | -4438.981228 | 4436.031047 | 1824.80092 | -10573.32364 |
| Rh | -4683.301031 | 4680.264572 | 1923.261557 | -11155.54306 |
| Pd | -4935.368406 | 4932.234516 | 2031.645838 | -11762.87581 |
| Ag | -5195.031215 | 5191.8186 | 2131.618463 | -12377.29448 |
| Cd | -5462.390982 | 5459.099922 | 2233.419308 | -13008.90242 |
| In | -5737.309064 | 5733.94412 | 2334.432447 | -13654.87065 |
| Sn | -6019.953353 | 6016.512431 | 2438.225987 | -14319.01448 |

Chapitre III : Datamining des propriétés physiques des éléments du tableau périodique

| | | | | |
|----|--------------|-------------|-------------|--------------|
| Sb | -6310.376268 | 6306.85786 | 2544.726589 | -15001.36474 |
| Te | -6608.631413 | 6605.034216 | 2653.969369 | -15702.06148 |
| I | -6914.773092 | 6911.09591 | 2766.012734 | -16421.26955 |
| Xe | -7228.856107 | 7225.097817 | 2880.919348 | -17159.15943 |
| Cs | -7550.55771 | 7546.734488 | 2988.242134 | -17904.90606 |
| Ba | -7880.111578 | 7876.220134 | 3098.114585 | -18668.85311 |
| La | -8217.57523 | 8213.607378 | 3215.018109 | -19455.49476 |
| Ce | -8563.360285 | 8559.301423 | 3351.833535 | -20278.17841 |
| Pr | -8917.664369 | 8913.501128 | 3508.213147 | -21136.96521 |
| Nd | -9280.311037 | 9276.05444 | 3654.948015 | -22003.0647 |
| Pm | -9651.484134 | 9647.133137 | 3806.516511 | -22890.9423 |
| Sm | -10031.25909 | 10026.81273 | 3962.921783 | -23800.75332 |
| Eu | -10419.71078 | 10415.16816 | 4124.189856 | -24732.67422 |
| Gd | -10816.65388 | 10812.02673 | 4273.725204 | -25670.16534 |
| Tb | -11222.94198 | 11218.20435 | 4461.481521 | -26663.60914 |
| Dy | -11637.86966 | 11633.03335 | 4637.607532 | -27663.02195 |
| Ho | -12061.77055 | 12056.8348 | 4818.79662 | -28685.33803 |
| Er | -12494.7183 | 12489.6824 | 5005.110005 | -29730.76571 |
| Tm | -12936.78649 | 12931.64974 | 5196.611124 | -30799.51525 |
| Yb | -13388.04859 | 13382.8103 | 5393.365097 | -31891.7984 |
| Lu | -13848.23038 | 13842.90353 | 5575.225315 | -32987.4068 |
| Hf | -14317.49372 | 14312.0769 | 5760.587419 | -34104.62931 |
| Ta | -14795.8842 | 14790.37645 | 5949.357668 | -35243.46006 |
| W | -15283.44882 | 15277.84931 | 6141.634533 | -36404.0875 |
| Re | -15780.23602 | 15774.54396 | 6337.535878 | -37586.72292 |
| Os | -16286.29541 | 16280.51003 | 6537.173416 | -38791.57439 |
| Ir | -16801.67747 | 16795.79805 | 6740.648988 | -40018.84238 |
| Pt | -17326.57638 | 17320.59285 | 6958.348706 | -41279.08998 |
| Au | -17860.79094 | 17854.71137 | 7170.546095 | -42552.58722 |
| Hg | -18404.27422 | 18398.10839 | 7374.994996 | -43837.04718 |
| Tl | -18956.95763 | 18950.71039 | 7576.942724 | -45137.45422 |
| Pb | -19518.99315 | 19512.66268 | 7781.994459 | -46459.62774 |
| Bi | -20090.41445 | 20083.99952 | 7989.999458 | -47803.48411 |
| Po | -20671.25654 | 20664.75611 | 8200.970142 | -49169.10374 |
| At | -21261.55522 | 21254.96835 | 8414.956548 | -50556.60634 |
| Rn | -21861.34687 | 21854.6727 | 8632.016039 | -51966.12038 |
| Fr | -22470.31965 | 22463.57381 | 8837.303934 | -53382.42581 |
| Ra | -23088.68808 | 23081.86753 | 9045.587062 | -54820.47465 |
| Ac | -23716.49695 | 23709.59435 | 9262.611883 | -56286.01651 |
| Th | -24353.83223 | 24346.84566 | 9483.654939 | -57774.56758 |
| Pa | -25001.29138 | 24994.2006 | 9743.171707 | -59321.16943 |
| U | -25658.41789 | 25651.23118 | 9991.594178 | -60876.21062 |

III.3.3. Analyse

La figure 4 représente le diagramme des propriétés (score plot) obtenu avec la base de données présentée plus haut.

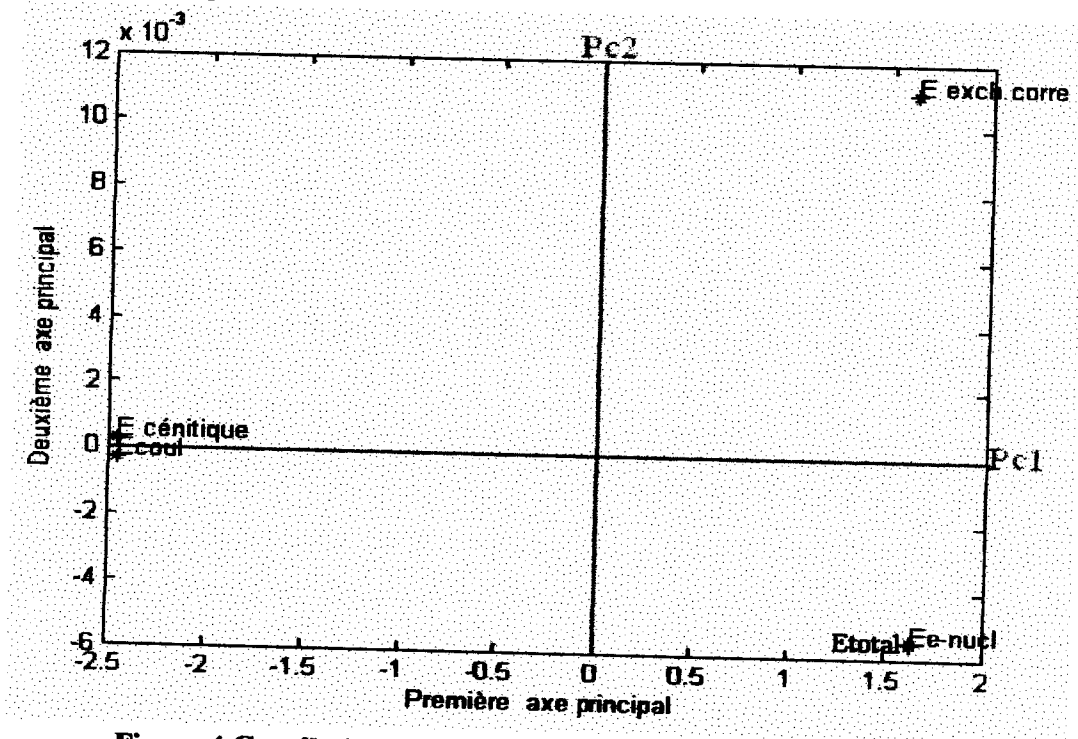


Figure 4 Corrélation entre les propriétés physiques – Scores plot

Nous pouvons voir que les énergies sont réparties pratiquement uniquement suivant l'axe PC1. L'énergie d'interaction électrostatique électron noyau et l'énergie totale sont du côté positif de PC1 alors que l'énergie cinétique et l'énergie d'interaction électrostatique électron-électron sont du côté négatif. L'énergie d'échange et corrélation est également du côté droit, mais avec une petite composante suivant PC2.

La figure 5 représente le diagramme des variables (loadings plot) qui comporte l'ensemble des éléments du tableau périodique. A cause du nombre élevé des éléments, nous sommes amenés à zoomer sur quelques zones pour mieux observer la disposition des éléments.

Nous pouvons voir sur le graphe que les éléments du tableau périodique sont alignés suivant leur numéro atomique, à partir de l'hydrogène et jusqu'à l'uranium dans le sens inverse de l'axe PC1. Aussi, suivant PC2, ils forment une sorte de cloche vers la direction positive de PC2. Nous pouvons expliquer ceci comme suit : la direction négative de l'axe PC1 est corrélée avec l'énergie d'interaction électrons-électron et avec l'énergie cinétique des électrons, ainsi, les éléments avec plus d'électrons évoluent dans cette direction.

Pour la courbure de la distribution des éléments, nous pouvons dire que pour les éléments les plus lourds, l'énergie d'interaction coulombienne compte plus que l'énergie d'échange et corrélation car il y a trop d'électrons, et c'est également le cas des éléments les plus légers où il n'y a pas assez d'électrons pour que l'échange et corrélation soient importants. Pour les

Chapitre III : Datamining des propriétés physiques des éléments du tableau périodique

éléments du milieu, l'énergie d'échange et corrélation compte plus que l'énergie de coulomb, ce qui fait que les positions des éléments sont décalées vers le haut.

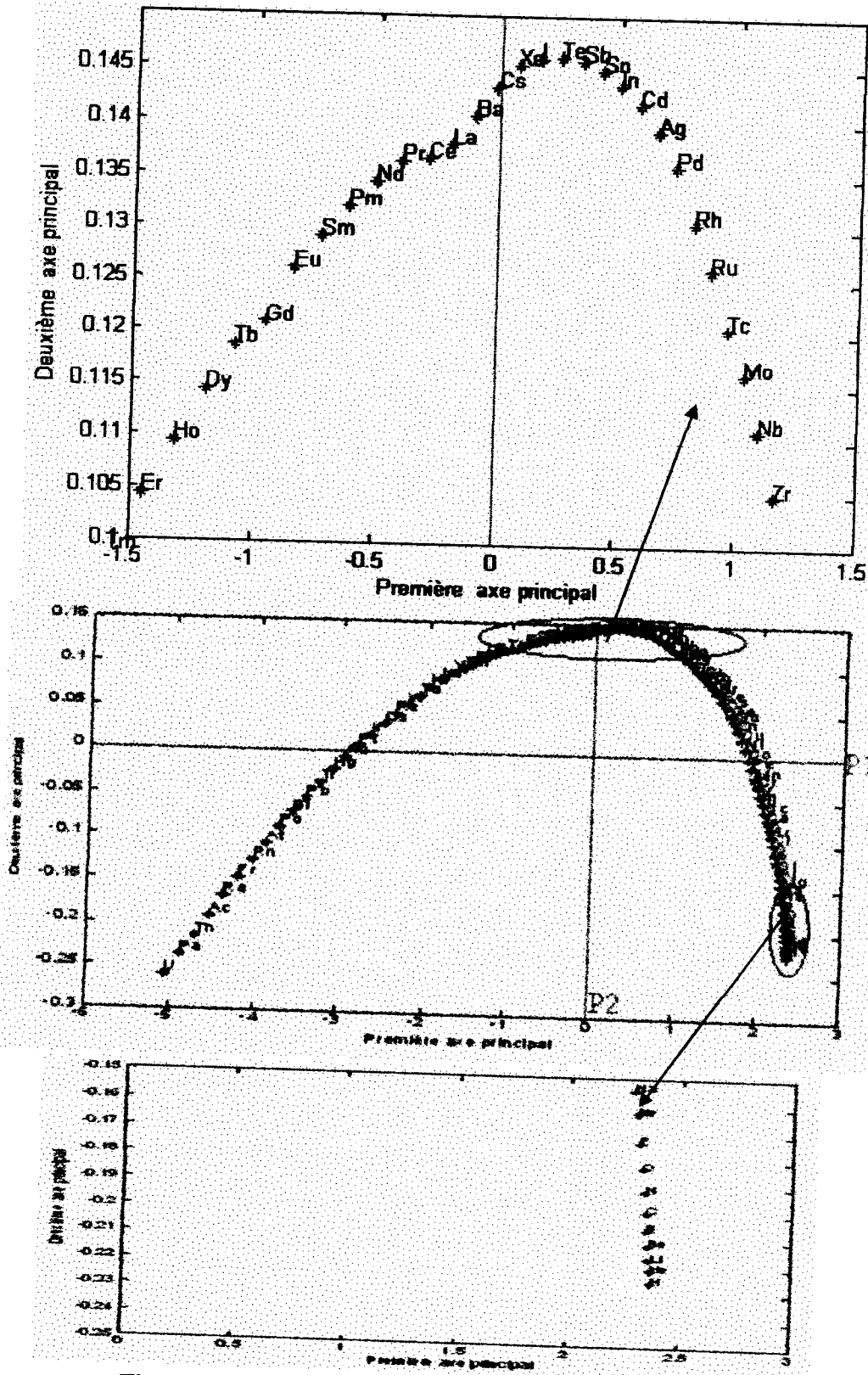


Figure 5 Corrélation entre les éléments – Loading plot

Conclusion III

- ✓ Nous avons présenté l'utilisation d'une méthode d'exploitation de données connus sous le nom de l'Analyse en Composantes Principales ACP.
- ✓ Nous avons constitué une base de données d'un grand nombre de propriétés physiques des éléments du tableau périodique.
- ✓ L'ACP nous a permis de visualiser cette base de données sur des graphiques et d'examiner les relations qui existent entre ces propriétés.
- ✓ Nous avons appliqué l'ACP sur une base de données des énergies totale, cinétique, électrostatique et d'échange et corrélation de tous les éléments du tableau périodique
- ✓ Les éléments lourds sont caractérisés par l'énergie cinétique et l'énergie d'interaction électron-électron.
- ✓ Les éléments légers sont caractérisés par L'énergie d'interaction électron noyau et l'énergie totale.
- ✓ l'énergie d'échange et corrélation a un impact particulier sur la distribution des éléments sur le loading plot.

Références III

- [1]. *W. Martienssen (Ed.): Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology, Landolt-örnstein, New Series III and IV (Springer, Berlin, Heidelberg 1970-2003).*
- [2]. *Svetlana Kotochigova, Zachary H. Levine, Eric L. Shirley*, Mark D. Stiles, and Charles W. Clark, " Atomic Reference Data for Electronic Structure Calculations", NIST Standard Reference Database 141 Inquiries or comments: charles.clark@nist.gov.*

Conclusion générale

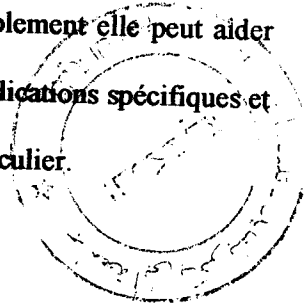
Le mémoire que nous présentons comprend l'utilisation de l'une des techniques de Datamining pour analyser des tableaux de données sur un ensemble de matériaux, en l'occurrence l'ensemble des éléments du tableau périodique.

L'idée de base était de repérer et représenter les corrélations qui existent entre les propriétés physiques des éléments, et éventuellement voir la classification des éléments sous un lumière différente que celle de la classification de Mendeleïev.

Nous avons rassembler une base de données comprenant certaines des propriétés cristallographiques, mécaniques, thermodynamiques, moléculaires, ioniques, atomiques, électromagnétiques, optiques et électroniques des éléments du tableau périodique. Cette base nous a servit pour appliquer la technique d'extraction de données dite ACP ; Analyse en Composantes Principales.

La technique d'analyse en composantes principales nous a permis de visualiser notre base de données sur des graphiques et d'examiner les relations qui existent entre les variables qui forment cette base de données, elle nous a également permis d'identifier des corrélations et des anti-corrélations entre les propriétés physiques.

Notre conclusion principale est que l'analyse en utilisant les outils de datamining peut être très utile pour percevoir les inter-relations entre les propriétés, et probablement elle peut aider significativement à analyser les informations dont on dispose en vue d'applications spécifiques et ce en dévoilant les bonnes questions à poser et les cas dignes d'intérêt particulier.



ANNEXE

| Propriété .physique | Unité |
|-------------------------------------|---------------------------|
| Nombre atomique Z | |
| masse atomique | " g.mol ⁽⁻¹⁾ " |
| Les états de l'oxydation | |
| Electronégativité χ_a | |
| 1ère énergie de l'ionisation | eV |
| Paramètre réseau | pm |
| Numéro d'atomes par cellule | |
| Le volume molaire | V.mol |
| Module élasticité E | GPa |
| S11 de l'acquiescement | 1/TPa |
| S44 de l'acquiescement élastique | 1/TPa1/TPa |
| S12 de l'acquiescement élastique | GPa |
| C11 de la raideur élastique | GPa |
| C44 de la raideur élastique | W/(mK) |
| La conductivité thermique λ | J/(molK) |
| La capacité molaire c p | J/(molK) |
| L'entropie standard S0 | kJ/mol |
| La différence Enthalpie H298- H0 | K |
| La température de fusion Tm | kJ/mol |
| Enthalpie changent ΔH_m | K |
| Température d'ébullition Tb | kJ/mol |
| Enthalpie changent ΔH_b | microHartree |
| Energies totales | microHartree |
| Energies cinétiques | microHartree |
| Energies coulombiennes | microHartree |
| Energies d'échange et corrélation | microHartree |

1 microHartree = 0.03 meV = 0.0006 kcal/mole