

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية وزارة
التعليم العالي والبحث العلمي

Université Ferhat ABBAS Sétif 1
Faculté des Sciences



جامعة فرحات عباس سطيف 1
كلية العلوم

Département : De Chimie



Analyse de Données en Chimie

Travaux pratiques
Master chimie physique, chimie analytique, chimie de
l'environnement, chimie pharmaceutique ...

HANNACHI Douniazed

2023-2024

Analyse de Données en Chimie

« Tout ce que l'homme ignore n'existe pas
pour lui. Donc, l'univers de chacun se résume à
la taille de ses connaissances »

Albert Einstein



Avant - propos

L'analyse des données est le processus qui consiste à examiner et à interpréter des données afin d'élaborer des réponses à des questions. Les principales étapes du processus d'analyse consistent à cerner les sujets d'analyse, à déterminer la disponibilité de données appropriées, à décider des méthodes qu'il y a lieu d'utiliser pour répondre aux questions d'intérêt, à appliquer les méthodes et à évaluer, résumer et communiquer les résultats.

Dans les domaines de la chimie, de l'analyse et des processus chimiques, au laboratoire, l'acquisition de données et leur documentation deviennent toujours plus importantes. En particulier dans les processus de développement, l'acquisition de données de mesure est devenue indispensable pour identifier et optimiser par la mesure, la réaction et les caractéristiques des nouveaux produits. De plus, une surveillance en continu des produits peut ainsi s'effectuer relativement simplement.

Dans ce fascicule, nous avons présenté un ensemble de travaux pratiques permettant d'examiner de manière détaillée les données expérimentales dans différents domaines de la chimie, tels que la thermodynamique, la chimie analytique, électrochimie Dans ce fascicule, nous n'avons pas seulement révélé

des courbes graphiques qui facilitent l'exploitation des résultats expérimentaux, mais nous avons aussi présenté divers calculs de plusieurs propriétés électronique, optique et structural, et ainsi traduire les résultats sous formes de fonctions et les intégrer dans la base de donnée de l'OriginPro via le langage de programmation C. En conséquence, l'on permet à l'étudiant d'interpréter et analyser ses résultats expérimentaux par plusieurs méthodes.

Ce support est une expertise de plusieurs années, son début s'est effectué par Prof **AZIZI Amor** qui a formulé ses notions de bases. Je le remercie sincèrement. Je tient à exprimer ma profonde gratitude à Mr **LAKHFIF Abdelaziz**, professeur au département de l'informatique pour son aide remarquable dans réalisation des brochures de TP. Je remercie chaleureusement Dr. **Hamza Djamel Eddine** et Dr. **Aroui Linda** qui m'ont fourni les données expérimentales

Nous pensons que ce manuel pourra facilement être accessible aux étudiants de la chimie avec toutes ses branches, et qu'il pourra servir de document de départ pour les étudiants désireux d'analyser leurs résultats.

D. HANNACHI

Remerciement

Je tiens à exprimer ma sincère gratitude envers **Zaidi Meriem**, ma thésarde, pour son engagement exemplaire dans la réalisation de ces travaux pratiques. **Meriem**, je vous remercie chaleureusement pour votre travail exceptionnel. Votre contribution a été inestimable.

Douniazed



Table des matières

Avant - propos

Tp N°1 :	Introduction à l'utilisation du logiciel d'analyse de données "OriginPro"	1
Tp N°2 :	Régression linéaire (Linear Fit)	5
Tp N°3 :	Régression non linéaire (Nonlinear Fit)	9
Tp N°4 :	Photomètre de flamme	14
Tp N°5 :	L'équation d'Antoine	20
Tp N°6 :	Détermination des tailles de cristallites: L'équation de Scherrer	25
Tp N°7 :	Le gap optique : La relation de Tauc	31
Tp N°8 :	Le gap optique : La fonction de Kubelka-Munkl	37
Tp N°9 :	L'énergie d'activation de la conductivité électrique	43
Tp N°10 :	La concentration effective (ECx)	49
	Références	59



Tp N°1 :

*Introduction à l'utilisation du logiciel d'analyse de
données "OriginPro"*

Le but :

Offrir aux chercheurs et étudiants une formation sur l'utilisation du logiciel d'analyse de données en chimie "OriginPro"

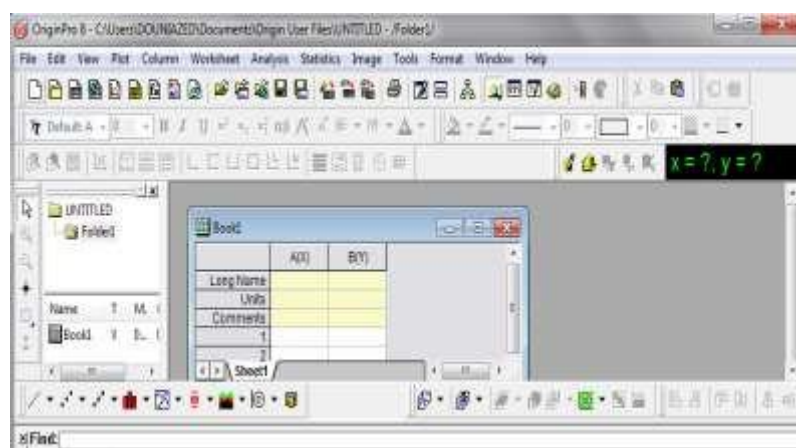
I. Introduction:

L'Origin c'est un outil complet d'analyse de données et de mise en forme graphique fournissant tout un éventail de fonctionnalités (analyse de pics, ajustement de courbes, statistiques...) permettant de satisfaire aux exigences de qualité et aux besoins spécifiques de la communauté scientifique (chercheurs, étudiants, ingénieurs, techniciens...).

1) Les bonnes raisons d'utiliser ce logiciel

- Import les données brutes de vos expérimentations avec les nombreux formats disponibles : .csv, .dat, .xls...
- Souplesse pour l'analyse de données (ajustement de courbes et de surface, analyse de pics, interpolation, traitement du signal, statistiques, ANOVA, tests paramétriques et non-paramétriques, analyse multivariée, calculs de puissance et d'effectifs d'échantillons, analyse de survie et courbes ROC. Chaque analyse est accompagnée d'un rapport qui résume les paramètres et les résultats).
- Large choix de graphiques (2D et 3D).
- Automatisation des tâches répétitives.
- Connectivité avec Excel, Matlab, LabView, Minitab, Python, ...
- Origin contient un compilateur C vous permettant d'automatiser vos procédures d'analyse et de visualisation. Le langage OriginC est compatible ANSI-C et transforme Origin en véritable environnement de développement.

2) L'interface utilisateur graphique :

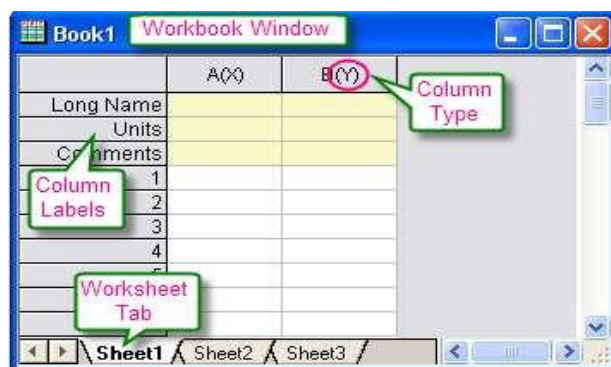


a- Menu Fichier

	Nouveau projet		Ouvrir ; Ouvrir un modèle ; Ouvrir un fichier de type Excel ; Enregistrer ; Enregistrer le modèle.
	Nouveau dossier		Importer des données
	Nouveau tableau		Éditeur de texte
	Nouveau Excel		Éditeur de graphe et de courbe
	Nouveau courbe		Éditeur de graphe et de courbe
	Pour les remarques		Insérer un graphique
	Nouveau fonction		

b- Workbook (cahier d'exercices)

Origin workbook (cahier d'exercices) est la structure fondamentale pour organiser vos données. Chaque cahier d'exercices est composé d'une feuille de travail (worksheets) ou plus. Et chaque feuille de travail, est composée (habituellement) d'un ou plus de colonnes de la feuille de travail

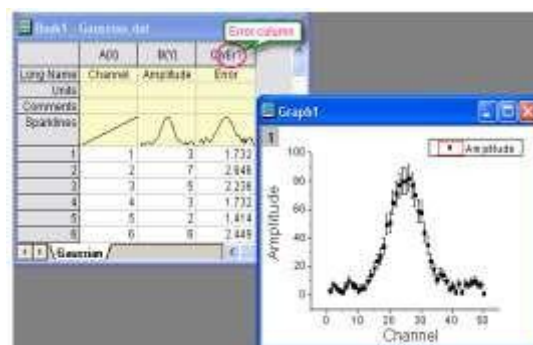


ou ensembles de données. Les colonnes dans Origin ont des types différents, tel que X, Y, Z, yError, etc, lesquels représentent la désignation du plot du graphique.

II. Application

Pour apprendre comment manipuler des cahiers d'exercices (workbook) de « Origin », essayez les étapes suivantes :

1. Choisir **File : New** à partir du menu et choisir **Workbook** pour créer un nouveau workbook.
2. Choisir **File : Import data : Aller à CD-ROW**. Glisser le fichier **Gaussian.dat**.
3. Après l'importation du fichier, sparklines est affiché automatiquement, en vous permettant de regarder rapidement la forme des données ; le



- nom de la feuille est devenu le nom du fichier ; et comme exigé une colonne supplémentaire a été ajoutée à la feuille de travail. Vous pouvez voir à partir du nom Long que la 3eme colonne représente l'erreur de donnée. Pour configurer cette colonne comme étant Error Colonne, cliquer sur le titre de la colonne pour la mise en surbrillance, cliquer sur le bouton droit pour avoir le menu contextuel, et sélectionner Set As : Y Error.
4. Traçage (Plotting) des données dans Origin est maintenant facile ; sélectionner les trois colonnes et sélectionner **Plot : Symbol : Scatter** à partir du menu pour créer un scatter (dispersé) plot.



Tp N°2 :

Régression linéaire (Linear Fit)

Le but :

- Exécutez la régression linéaire sur un ensemble de points de données.
- Examinez la table Résiduelle dans la sortie et "identifier" les points isolés.
- Utilisez l'Outil à masquer pour enlever les points isolés.
- Utilisez le mécanisme Re-calcul pour mettre à jour automatiquement le résultat après enlèvement des points isolés.

I- Introduction

Le TP décrit la tâche d'ajustement des courbes des données. Un point isolé est décrit typiquement comme un point de la donnée ou point d'une observation dans une collection de points de données qui est "très distant" des autres points et donc pourrait être dû, par exemple, à quelque faute dans la procédure de la mesure. L'Identification et l'enlèvement du point isolé est souvent controversés, et typiquement plus acceptable dans les situations où le modèle utilisé pour décrire les données est bien connu et bien accepté.

1) Définition :

L'ajustement linéaire consiste à construire une courbe qui soit située le plus près possible des points réels pour satisfaire à l'impératif de régularité. En d'autres mots, le problème de l'ajustement linéaire consiste à étudier deux variables x et y .

X est appelé variable expliquée et Y est appelé variable explicative.

Aussi les hommes de statistique s'efforcent de trouver algébriquement et graphiquement s'il existe une relation entre x et y ; à cet effet il peut utiliser : *l'ajustement graphique, l'ajustement mécanique et l'ajustement analytique.*

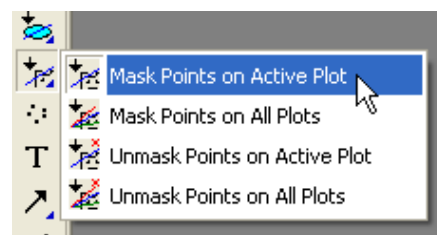
Une **régression non linéaire** consiste à ajuster un modèle, en général non linéaire.

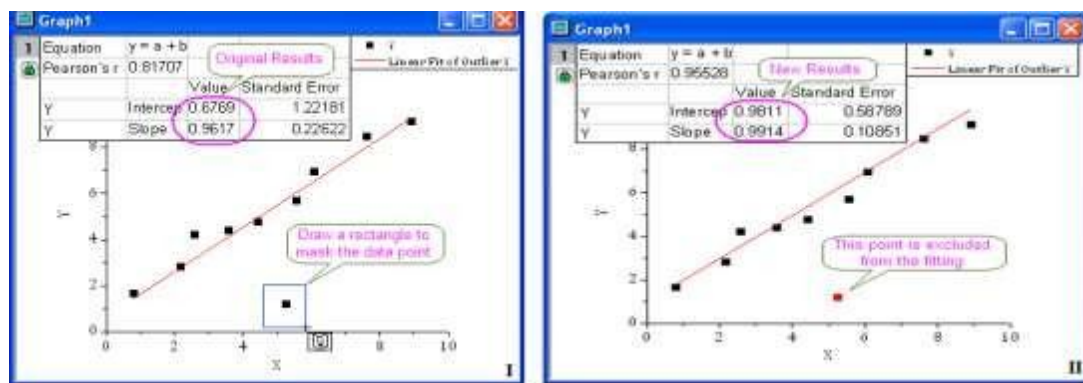
La procédure décrite dans ces travaux pratiques est aussi applicable aux autres outils d'ajustement tel que l'ajustement Polynômial et Non linéaire.

2) Ajustement Linéaire

Les étapes :

1. Commencez avec un nouveau cahier d'exercices (workbook) et importez le fichier **Outlier.dat** situé dans **CD-ROW**.
2. Tracez un graphique en nuage de points.
3. Avec le graphique actif, utilisez l'option **Analyse** dans le menu principale : → : **Fitting: Fit Linear** pour avoir la boîte de dialogue "**Linear Fit**" (ajustement linéaire). Notez que si vous avez utilisé la boîte de dialogue "**Linear Fit**" auparavant, il y aura un menu contextuel et vous avez besoin de sélectionner le sous menu de la boîte de Dialogue Ouverte.
4. Sous la branche "**Fit Options**", décochez l'option "**Apparent Fit**".
5. Étendez le nœud de l'arbre de "**Residual Analysis**" dans la boîte de dialogue, et cochez l'option "**Standardized**".
6. Changez l'option "**Recalculat**" vers la valeur "**Auto**" dans la liste déroulante et pressez le bouton **OK** au fond de la boîte dialogue. La boîte de dialogue se fermera et la régression linéaire sera exécutée sur les données.
7. Sélectionnez la feuille **FitLinearCurve1** dans les données du workbook et glissez vers la droite pour voir la colonne d'exercices de la donnée et manuscrit côté pour regarder la colonne "**Standardized Residual**". Vous noterez que la valeur dans ligne 6 de cette colonne est -2.54889 :
8. Rendez le graphique actif et alors cliquer et maintient le bouton gauche de la souris appuyé sur le bouton "**Regional Mask Tool**" dans les Outils de la barre des outils "Tools Bar". Sélectionnez le sous-menu "**Add Masked Points on Active Plot**" qui sera le premier article dans menu contextuel :
9. Avec le sous-menu sélectionné, allez au graphique et cliquez sur le 6e point de la donnée pour masquer le point.
10. Cela change les données de l'entrée à l'opération d'ajustement linéaire et le mécanisme de la mise à jour automatique sera déclenché. L'ajustement linéaire doit être répéter avec ce point masqué. La courbe ajustée dans le graphique et les paramètres collés doivent être mise à jour automatiquement. Votre nouveau graphe devrait alors apparaître comme dessous.





II- Application : Loi d'Arrhenius : $k = Ae^{\frac{-E^{\#}}{RT}}$

La constante de vitesse de la réaction du dioxyde d'azote avec le monoxyde de carbone gazeux, d'équation :



Est déterminée à différentes températures.

T (K)	600	650	700	750	800
k (L.mol ⁻¹ .s ⁻¹)	0,028	0,22	1,3	6,0	23

1/ Déterminer l'énergie d'activation de la réaction et A.

2/ Calculer la constante de vitesse de la réaction à 685 K.

Solution

On a :

$$k = Ae^{\frac{-E^{\#}}{RT}} \Rightarrow \ln(k) = -\left(\frac{E_a}{R}\right)\left(\frac{1}{T}\right) + \ln A$$

Traçons $\ln(k)$ en fonction de $(1/T)$

Ceci doit être une droite dont la pente est : $-\left(\frac{E_a}{R}\right)$.

Les points de la courbe $\ln(k) = \left(\frac{1}{T}\right)$ sont bien alignés.

La pente vaut : $= -\left(\frac{E_a}{R}\right) = -16\,108$

$$\text{D ou : } E_a = 133\,922 \text{ J.mol}^{-1} \approx$$

134 KJ.mol^{-1}

Calculer la constante de vitesse de la réaction à 685 K.

Reprenons la modélisation : $\ln(k) = -(16\,108)\left(\frac{1}{685}\right) + 23.271$

Cela donne : $\ln(k) = -0.244 \Rightarrow \mathbf{k=0.78 \text{ L.mol}^{-1}.s^{-1}}$



Tp N°3 :

Régression non linéaire (Nonlinear Fit)

Le but :

- Exécutez la régression non linéaire sur un ensemble de points de données.
- Utilisez la base de données de l'OriginPro.
- Utilisez "Hill function".

I- Equation de Michaelis-Menten

L'équation de Michaelis-Menten permet de décrire la cinétique d'une réaction catalysée par une enzyme agissant sur un substrat unique pour donner irréversiblement un produit. Elle relie la vitesse stationnaire initiale de la réaction à la concentration initiale en substrat et à des paramètres caractéristiques de l'enzyme.

L'équation décrit un comportement cinétique très classique, observé avec de nombreuses enzymes, mais elle ne permet pas de rendre compte de certains comportements complexes, comme ceux résultant de l'existence de plusieurs sites actifs qui interagissent, ni de comprendre les propriétés cinétiques d'enzymes qui catalysent une réaction faisant intervenir plusieurs substrats. L'équation n'est pas valable si la réaction est catalysée de façon réversible et que le produit de la réaction est présent.

Selon le modèle de Michaelis et Menten, l'équation décrivant la vitesse initiale stationnaire d'une réaction enzymatique est la suivante :

$$v = \frac{V_{max}[S]}{K_m + [S]}$$

Avec :

- ✓ v : vitesse initiale (c'est-à-dire en absence de produit) stationnaire de la réaction enzymatique pour une concentration initiale en substrat $[S]$.
- ✓ V_{max} : vitesse initiale maximale, la vitesse de la réaction quand la concentration en substrat est très grande (on parle de concentration saturante), dans la même unité que v .
- ✓ $[S]$: concentration initiale en substrat (en mol/L)¹ ;
- ✓ K_m : est la Constante de Michaelis de l'enzyme. C'est la valeur de $[S]$ pour laquelle la vitesse initiale est la moitié de la vitesse initiale maximale. Son unité est celle d'une concentration (mol/L).

Application:

La boîte de dialogue **NLFit** (Non Linear Fitting) est un outil interactif qui vous permet de diriger la procédure d'ajustement pendant le processus d'ajustement non-linéaire. Ces travaux pratiques adaptent la fonction **Michaelis-Menten**, qui est un modèle de base dans la Cinétique de l'Enzyme et vous montre quelques caractéristiques de base de la boîte de dialogue **NLFit**. Pendant l'ajustement, nous illustrerons comment exécuter un ajustement global "**Global Fit**" qui vous permet d'ajuster deux ensembles de données simultanément et partager quelques valeurs de paramètre

L'article de Michaelis et Menten a été publié en 1913. Les données sont extraites dans le tableau suivant. Ce tableau donne la concentration de substrat [S] et la vitesse initiale de la réaction.

[S]	V 1	V 2
μM	μM/min	μM/min
Substrate	No inhibitor	Competitive inhibition
0.5	580	350
2	1180	690
4	1485	970
6	1630	1175
8	1740	1345
10	1810	1500
12	1860	1615
14	1895	1725
16	1935	1790
18	1940	1860
20	1960	1910

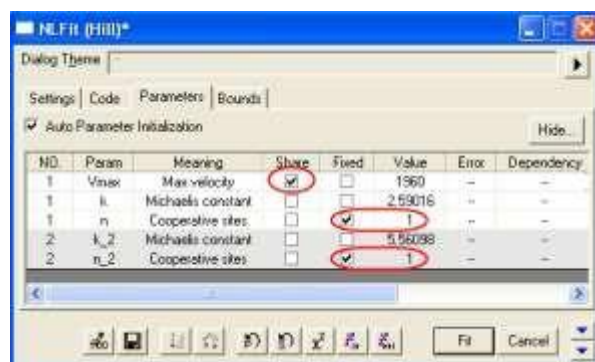
1) Ajustement

Il n'y a aucune fonction d'ajustement M-M dans Origin ; cependant, nous pouvons utiliser un modèle plus général, la fonction d'ajustement "**built-in Hill**":

$$v = V_{max} \frac{x^n}{k^n + x^n}$$

Où **n** veut dire les sites coopératifs. Pour le modèle single-substrate, nous pouvons juste fixer **n = 1** pendant l'ajustement et il deviendra la forme la plus simple, la fonction **M-M**.

- Il y a deux courbes, réaction sans Inhibiteur et réaction avec Inhibiteur Compétitif dans le graphique, et l'outil **NLFit** peut ajuster ces deux courbes simultanément. Depuis pour réaction de l'inhibition compétitive, la vitesse maximale est la même sans réaction de l'inhibition, nous pouvons partager les valeurs **V_{max}** pendant la procédure d'ajustement qui peut être implémentée par un ajustement Global "**Global Fit**".



-
- Avec le graphique actif, sélectionnez l'option Analyse du menu : Aller : **Fitting : Nonlinear Curve Fit** pour afficher la boîte de dialogue **NLFit**. Sélectionnez la Fonction "**Hill function**" à partir de la catégorie **Growth/Sigmoidal** dans la configuration.
 - Dans la configuration : Page de Sélection de données, cliquez le bouton triangulaire à côté de l'option "**Input Data**" et choisissez "**Add all plots in active page**" pour configurer les données
 - Sélectionnez "**Global Fit**" à partir de la liste déroulante "**Multi-Data Fit Mode**" dans la page **Settings : Data Selection**
 - Basculez vers l'onglet **Parameters**, Cochez la boîte **Share** dans la ligne V_{max} . Ces boîtes à cocher de partages sont disponibles seulement quand vous utilisez le mode "**Global Fit**". Cochez la case **Fixed** pour **n** et **n_2**, et assurez-vous leurs valeurs sont à la valeur **1**.
 - Après cela, cliquez le bouton "**Fit**" pour produire des rapports. L'ajustement résultat sera aussi collé sur le graphique original.
 - À partir l'ajustement résultat, nous pouvons conclure que la vitesse maximale est approximativement **2160 $\mu\text{M} / \text{mn}$** et **K_m** pour le non inhibiteur et le modèle inhibiteur compétitif est **1.78 μM** et **4.18 μM** , respectivement.

2) Ajustement du tracage de Lineweaver-Burk (Fitting Lineweaver-Burk Plot)

Comme nous savons, les paramètres du model peuvent aussi être estimés par le **Lineweaver-Burk** ou tracage double-réciproque. Le tracage **Lineweaver-Burk** prend le réciproque des deux côtés du M-M fonction et tracage par $1/v$ contre $1/[S]$:

$$\frac{1}{v} = \frac{1}{V_{max}} + \frac{K_m}{V_{max}[S]}$$

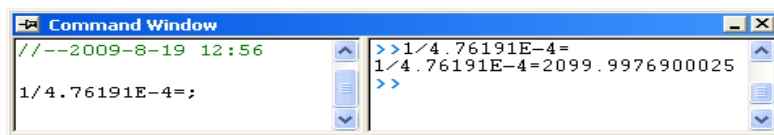
Nous utiliserons les données du non Inhibiteur pour illustrer comment calculer K_m et V_{max} par le tracage L-B.

- " Revenez à la feuille de travail des donnée brutes et ajoutez deux de colonnes de plus en cliquant le bouton . Double cliquer sur la colonne D et sélectionnez **Set As : X** à partir du menu contextuel pour la configurer comme un X colonne. Une autre fois Double cliquer sur la colonne D et sélectionnez **Set Column Values** pour affiche la boîte de dialogue Set **Values**. Dans l'éditeur de la boîte de dialogue, entrer : $1/\text{Col(A)}$ et configure le mode **Recalculate** à la valeur « *None* », car nous n'avons pas besoin à mettre à jour automatiquement les valeurs réciproques dans cet exemple. Même chose, configure la valeur de la colonne E comme $1/\text{Col(B)}$. Entrer le nom long pour les colonnes D & E comme $1/[S]$ & $1/V$, respectivement.
- Sélectionnez les colonnes D & E pour créer un tracage au nuage de points « **scatter plot** ».

- De l'équation au-dessus, nous savons qu'il y a un rapport linéaire entre $1/v$ et $1/[S]$, donc nous pouvons utiliser l'outil NLFit pour tracer une ligne droite sur ce tracé. (Vous pouvez utiliser aussi l'outil Fit Linear à partir **Analysis : Fitting : Fit Linear**)
- Afficher encore une fois la boîte de dialogue **NLFit**, sélectionnez "**Line function**" à partir « **Polynomial category** », et après cliquer sur le bouton Fit directement pour générer les résultats.
- À partir du tracé, on peut douter que ce soit le meilleur ajustement de la courbe car il ya un point isolé localisé. Réellement, le côté droit du tracé L-B est une région à basse concentrations de substrate, l'erreur de la mesure peut être grande, donc nous excluons mieux ces points pendant l'ajustement.
- Cliquez l'icône « serrure » du coin gauche supérieure du graphique, et sélectionnez « **Change Parameters** » pour fermer la boîte de dialogue NLFit.
- Dans la page **Settings: Data Selection**, cliquer sur le bouton  dans le noeud **Input Data**, et alors choisir l'option « **Reselect All Data** » à partir du Graph du menu contextuel.
- Alors la boîte de dialogue NLFit se referme et votre curseur prend la forme . Quand vous se déplacez à la page du graphique. Cliquez et dessiner un rectangle pour sélectionner les points de données à tracer. La gamme d'entrée est étiquetée par les lignes verticales. Vous pouvez cliquer aussi et déplacer ces lignes pour changer la gamme de l'entrée.
- Cliquer sur le bouton  dans la fenêtre "**Select Data in Graph**" pour retourner à la boîte de dialogue **NLFit**.
- Cliquez le bouton "Fit" dans la boîte de dialogue NLFit pour recalculer le résultat. Vous pouvez voir à partir du graphique que la table du rapport a été mise à jour.
- Puisque l'intercepte de la courbe ajustée est $1 / V_{max}$, elle est égale à 4.76191E-4 dans cet exemple. Pour avoir la valeur V_{max} , sélectionnez Window : **Command Window** pour ouvrir la fenêtre de la commande, tapez

1/4.76191E-4 =

Et presser **ENTER**



Origin rend la valeur 2099, laquelle est près de ce que nous avons obtenu 2160. (Quand on a ajusté via la fonction Hill au-dessus, nous avons partagé V_{max} quand on a fait un ajustement de deux ensembles de données. Si vous ajustez les données Non Inhibiteur seulement, cette valeur sera plus proche.)



Tp N°4 :

Dosage par photométrie de flamme

Le but :

- Exécutez la régression linéaire sur un ensemble de points de données.
- Détermination de x/y après l'ajustement des données.
- Vérification le choix de modèle.

I- Introduction

Le photomètre à flamme est un instrument de chimie analytique qui mesure la concentration de métaux alcalins dans une solution.

Les ions généralement dosés par photométrie de flamme sont : Na^+ , K^+ , Li^+ , Ba^+ et Ca^{+2} .



1) Principe:

Une partie des ions soumis à la chaleur de la flamme passent dans un état excité. Le retour à l'état fondamental des électrons de la couche externe s'effectue avec émission caractéristique de l'ion en présence.

La photométrie de flamme repose sur le fait que l'intensité de l'émission est proportionnelle au nombre d'atomes retournés à l'état initial. La lumière émise est donc proportionnelle à la concentration de l'échantillon.

La loi de Maxwell – Boltzmann permet de déterminer les rapports des populations dans un état fondamental et un état excité en fonction de la température.

$$\frac{N_1}{N_0} = g \cdot e^{\frac{-\Delta E}{kT}}$$

Avec :

g : le rapport statistiques des état 1 et 0

k : constante des Boltzmann = $1.38 \times 10^{-23} \text{ J/K}$

ΔE : écart énergétique en Joule

T : la température en K

II- Un bon modèle

- Un bon modèle est celui qui donne de bonnes prévisions
- Capacité prédictive sur de nouvelles observations «généralisation »
- Différent de l'ajustement aux données (prédire le passé)
- Un modèle trop précis sur les données se comporte de manière instable sur de nouvelles données : phénomène de surapprentissage
- Un modèle trop robuste (rigide) ne donnera pas un bon ajustement sur les données
- Modèles issus des données

1- Les critères de choix d'un modèle

a- R^2 -ajusté

Le coefficient de détermination (R^2) mesure l'adéquation entre un modèle issu d'une régression simple ou multiple et les données observées qui ont permis de l'établir. Certes, il a ses imperfections, mais son utilité n'a d'égale que sa simplicité.

Concrètement, ce coefficient se situe entre 0 (le modèle ne vaut rien) et 1 (il est parfait).

b- AIC

AIC est une mesure de la qualité d'un modèle statistique proposée par Hirotugu Akaike en 1973. Le critère d'information d'Akaike s'écrit comme suit:

$$AIC = 2k - 2\ln(L)$$

où k est le nombre de paramètres à estimer du modèle et L est le maximum de la fonction de vraisemblance du modèle.

c- BIC

BIC est un critère d'information dérivé du critère d'information d'Akaike proposé par Gideon Schwarz en 1978. À la différence du critère d'information d'Akaike, la pénalité dépend de la taille de l'échantillon et pas seulement du nombre de paramètres. Il s'écrit:

$$BIC = -2\ln(L) + k \cdot \ln(N)$$

avec L la vraisemblance du modèle estimée, N le nombre d'observations dans l'échantillon et k le nombre de paramètres libres du modèle

2- Choix d'un modèle

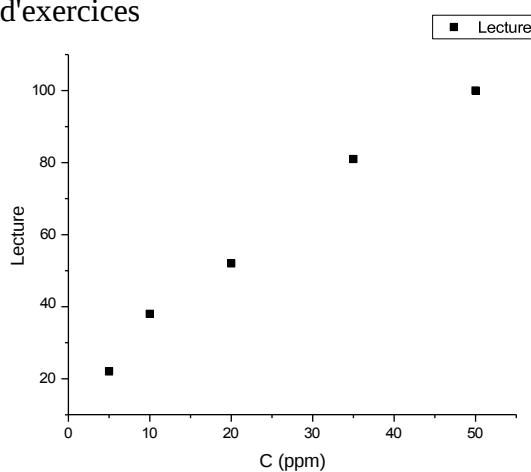
On préférera le modèle pour lequel les critères AIC et BIC ont la valeur la plus faible.

III- Application

Application N°1 : Pour Na^+ : vérifier la relation $L = f([\text{Na}^+])$

La concentration de Na^+ (ppm)	5	10	20	35	50
La lecture	22	38	52	81	100

- Commencez avec un nouveau cahier d'exercices (workbook) et importez-les data
- Tracez le graphe.
- Graphe linéaire $\Rightarrow$ Fit linéaire



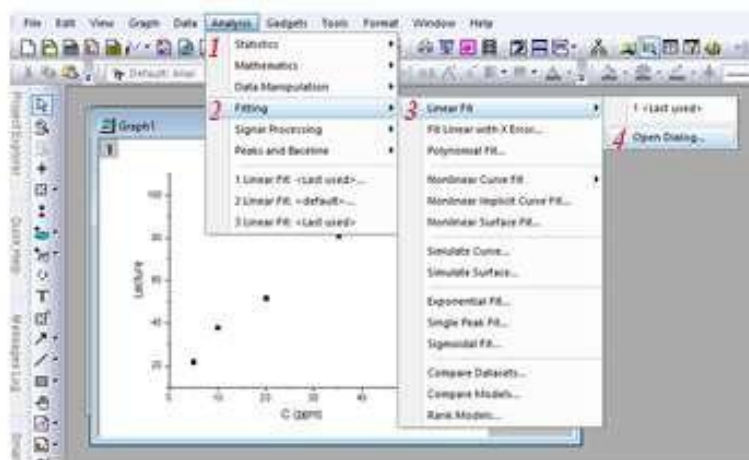
Les étapes :

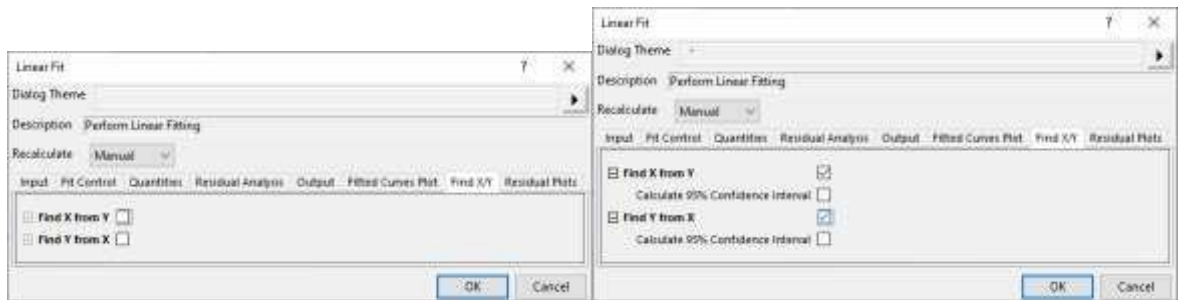
1 : Analysis $\rightarrow$

2 : Fiting $\rightarrow$

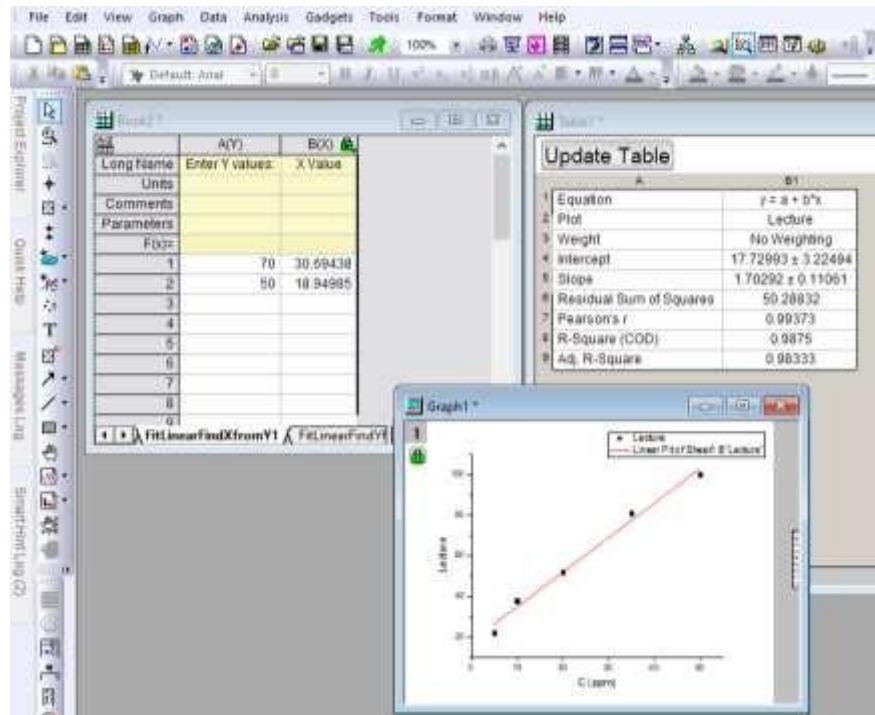
3 : linear Fit $\rightarrow$

4: Open Dialog ... $\rightarrow$ Find X/Y $\rightarrow$ cocher **Find X from Y** et **Find Y from X**





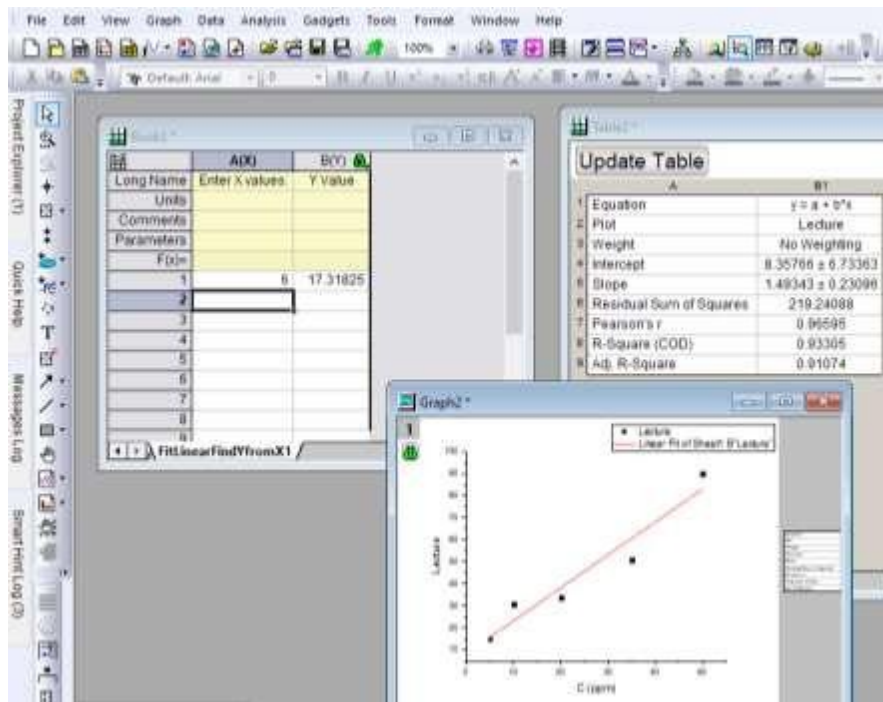
Les résultats



Application N°2 : Pour K^+ : vérifier la relation $L = f([K^+])$

La concentration de K^+ (ppm)	5	10	20	35	50
La lecture	15	31	34	51	90

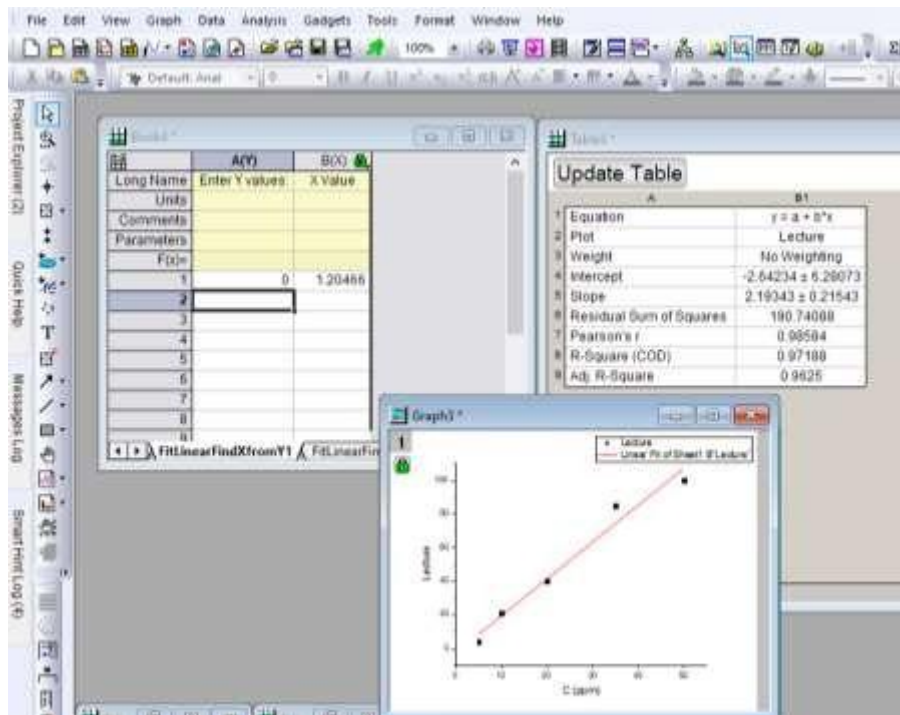
Les résultats



Application N°3 : Pour Li^+ : vérifier la relation $L = f([\text{Li}^+])$

La concentration de Li^+ (ppm)	5	10	20	35	50
La lecture	4	21	40	85	100

Les résultats





Tp N°5 :

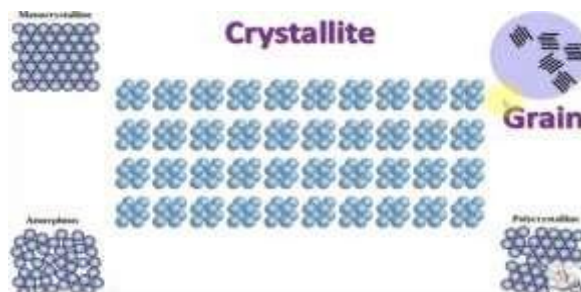
Détermination des tailles de cristallites :

L'équation de Scherrer

Le but : Détermination le diamètre des cristallites (D).

I- Cristallite

Une cristallite, également appelée « crystallite » en anglais, se réfère à une entité de matière possédant la même structure que celle d'un monocrystal. La matière cristalline est rarement trouvée sous forme de monocristaux, exception faite de certains cas particuliers tels



que les pierres précieuses, les monocristaux de silicium utilisés dans l'industrie électronique, ou encore les monocristaux d'alliages utilisés pour les aubes de turbine des moteurs d'avions militaires. Dans la plupart des cas, la matière cristalline se présente sous forme polycristalline, ce qui signifie qu'elle est constituée de monocristaux, appelés cristallites, qui sont interconnectés par des régions désordonnées. La taille d'une cristallite peut varier considérablement, allant de quelques nanomètres à plusieurs millimètres.

En métallurgie, le terme « grains » est souvent utilisé pour désigner les cristallites. Par conséquent, la limite entre deux cristallites est désignée comme une « limite de grain », et en cas de rupture, on parle de « rupture inter-granulaire » lorsque la fracture se propage le long des limites de grain, ou de « rupture trans-granulaire » lorsque la fracture traverse une cristallite.

1) Formule de Scherrer

L'équation de Scherrer, fréquemment utilisée en diffraction des rayons X et en cristallographie, permet de déterminer la taille des cristallites de dimensions sub-micrométriques dans un matériau en se basant sur l'élargissement d'un pic observé dans un diagramme de diffraction. Bien qu'elle soit couramment associée à la mesure ou à l'analyse de la taille des particules, cette appellation est en réalité incorrecte. L'équation tire son nom de Paul Scherrer et trouve son application principale dans l'estimation de la taille des cristaux sous forme de poudre. L'expression de l'équation de Scherrer est la suivante :

$$D = \frac{k\lambda}{\beta \cos \theta}$$

Dans cette équation :

- D représente la taille moyenne des domaines cristallins ordonnés, laquelle peut être égale ou inférieure à la taille des grains, qui elle-même peut être égale ou inférieure à la taille des particules.
- k est un facteur sans dimension, proche de l'unité (généralement compris entre 0.68 et 2.08). Il est lié à la forme réelle de la cristallite, avec une valeur typique d'environ 0.9, mais cette valeur peut varier en fonction de la symétrie du système cristallin (par exemple, $K = 0.94$ pour un système de symétrie cubique).
- λ désigne la longueur d'onde des rayons X, souvent exprimée en Ångströms, telle que $\lambda = 1.5406 \text{ Å}$ pour les rayons X $\text{CuK}\alpha$.
- β correspond à l'élargissement de la ligne à mi-hauteur de l'intensité maximale (FWHM), après avoir soustrait l'élargissement instrumental, et est exprimé en radians. Parfois, cette quantité est également représentée par $\Delta(2\theta)$.
- θ représente l'angle de Bragg.

En résumé, l'équation de Scherrer est un outil précieux pour estimer la taille des domaines cristallins dans un matériau en poudre à partir des données de diffraction des rayons X.

Remarque

$$D \leq 200 \text{ nm}$$

2) Principe

En situation de diffraction, les rayons X émis par chaque point du réseau cristallin se combinent de manière constructive, étant en phase les uns avec les autres. Toutefois, en s'éloignant légèrement des conditions de diffraction idéales, l'onde produite par un point du réseau peut se retrouver en opposition de phase avec celle émise par un autre point du réseau. Dans de tels cas, les points du réseau où les ondes se neutralisent sont d'autant plus éloignés les uns des autres que le déphasage entre les ondes est faible. Autrement dit, plus nous nous rapprochons des conditions idéales de diffraction, plus les points de neutralisation sont éloignés les uns des autres.

Étant donné que les cristallites ont une taille limitée, lorsque nous nous trouvons très proches des conditions idéales de diffraction, la distance entre les points du réseau où les ondes se neutralisent devient supérieure à la taille des cristallites. En conséquence, nous observons de l'intensité là où, en théorie, il ne devrait y avoir que le pic de fond.

Ce phénomène est responsable de la largeur du pic résultant de l'analyse par diffraction des rayons X. Il est important de noter que les cristallites ne présentent pas tous la même taille, ce qui engendre une distribution de tailles au sein de l'échantillon cristallin

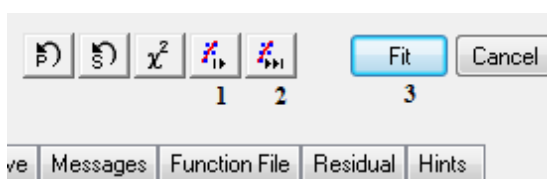
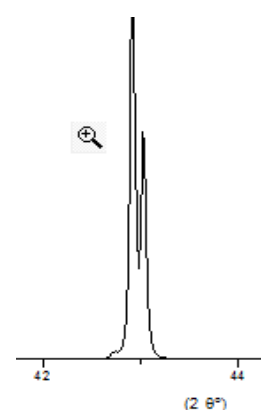
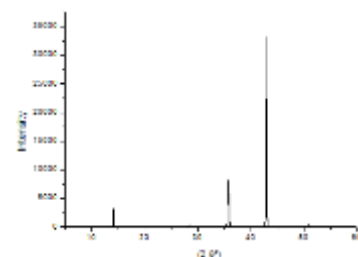
3) Limites de la méthode

Pour une distribution unimodale, il est nécessaire d'utiliser au moins deux paramètres pour décrire cette distribution de manière complète, à savoir la moyenne et la largeur. Cependant, la formule de Scherrer fournit une seule valeur. La question se pose donc de savoir à quelle caractéristique de la distribution cette valeur unique correspond-elle : à l'espérance mathématique, à la médiane ou au maximum de la distribution (le mode) ?

En réalité, la formule de Scherrer est davantage utilisée à des fins qualitatives, notamment pour la comparaison d'échantillons entre eux ou comme critère de sélection. Elle n'est pas nécessairement adaptée à une analyse quantitative stricte. Il est essentiel de noter que la notion de taille de cristallite est distincte de celle de granulométrie. Un grain de poudre peut être constitué de plusieurs cristallites, ce qui rend la relation entre ces deux caractéristiques plus complexe.

II- Application:

- a. Commencer avec un nouveau cahier d'exercices (workbook) et importer les datas **sbn.dat** situé dans **CD-ROW**.
- b. Tracer le graphe.
- c. Sélectionner le pic le plus élevé
- d. Avec le pic actif, sélectionnez l'option Analyse du menu : Aller : **Fitting : Nonlinear Curve Fit** pour afficher la boîte de dialogue **NLFit**. Sélectionnez la Fonction "**Gauss**" à partir de la catégorie **Origin Basic Function** dans la configuration.
- e. Presser les boutons
 - 1) Iteration
 - 2) Fit till converged
 - 3) Le bouton **OK**



- f. Les résultats sont $x_c(2\theta)$ et FWHM (largeur à mi-hauteur) (β)

Parameters			
		Value	Standard Error
B	y0	61.53712	12.73078
	x_c	42.94584	0.00126
	w	0.1526	0.00252
	A	4389.5021	62.82133
	sigma	0.0763	
	FWHM	0.17967	
	Height	22951.61749	

- g. Calculer D

On a : 1 radian = 57.2958°

$\beta = 0.17967$; $2\theta = 42.94584$

$$D = \frac{0.94 \times 1.5406}{\text{radian} (0.17967) \cos \left(\frac{42.94584}{2} \right)} = \frac{1.448164}{(0.00313583) \cos (21.47292)}$$

$$= \frac{1.448164}{0.0029181} = 496.2568 \text{ \AA}$$

Donc **D= 49.625 nm**

Exercice

Recalculer la valeur de D mais la avec **Command Window** dans le programme OriginPro.





Tp N°6 :

L'équation d'Antoine

Le but :

- Ajouter une nouvelle fonction à la base de données de l'OriginPro.
- Les paramètres de l'équation d'Antoine
- La température d'ébullition d'une molécule

I- La loi d'Antoine.

Antoine Lavoisier (1743 - 1794) était un chimiste, philosophe français. Il a mis au point la première loi de la conservation de la matière : « Rien ne se perd, rien ne se crée, tout se transforme. »

Il a aussi simplifié l'équation de Kirchhoff - Rankine ce qui a donné l'équation d'Antoine :

$$\log_{10} (P^0_s) = A - \frac{B}{T + C}$$

Cette équation donne la pression de vapeur saturante (la tension de vapeur P^0_s) d'une substance à une température donnée (T). Les coefficients de l'équation (A, B et C) ne sont valables que pour un intervalle de température.

Exemple

Pour l'eau les coefficients d'Antoine sont : A = 10.23, B = 1750 et C = 235

Cette équation nous permet ainsi de calculer approximativement la température d'ébullition de l'eau en fonction de la pression atmosphérique. Nous avons effectué quelques calculs :



Pour une pression de 101 325 Pa, soit la pression atmosphérique normale, l'eau bout à une température de 100°C.

$$T_s = \frac{1750}{10,23 - \log_{10}(101\,325)} - 235 = 99,97 \text{ °C} \approx 100 \text{ °C}$$

- Pour une pression de 60 000 Pa, soit la pression en haut du Mont Blanc, l'eau bout à 85,9°C.
- Pour une pression de 34 000 Pa, soit la pression en haut du Mont Everest, l'eau bout à 72°C
- Pour une pression de 607,97 Pa, soit la pression au point triple, l'eau bout à 0,02°C
- Pour une pression de $2,212 \cdot 10^7$ soit la pression au point critique, l'eau bout environ à 371,5°C.

II- Application

En 1958 **V.Vaněček** et ses collaborateurs ont mesuré les valeurs des tensions de vapeur de l'alcool méthylique en fonction de la température ; les résultats sont groupés dans le tableau suivant :

$T(^{\circ}C)$	$P(mm\ Hg)$
49.4	399.3
45.9	345.5
43.1	303.3
32.1	180.4
26.3	134.9
18.65	90.6
15	73.7
8	49.5

Les chercheurs ont calculé les constantes **A**, **B** et **C** à l'aide de la méthode de **Moindres carrés** ont utilisant le code **Matlab**. Dans ce TP nous voulons calculer les même constante mais de manière différente que celle de groupe **V.Vaněček** ; et on comparant leurs résultats avec les nôtres.

À l'aide de l'équation **d'ANTOINE** et la technique de **NLFit** (déjà incluse dans le code **ORIGIN**) calculez les valeurs des constantes **A**, **B** et **C** de l'alcool méthylique.

Les étapes

Ce TP contient trois principales étapes qui sont comme suit :

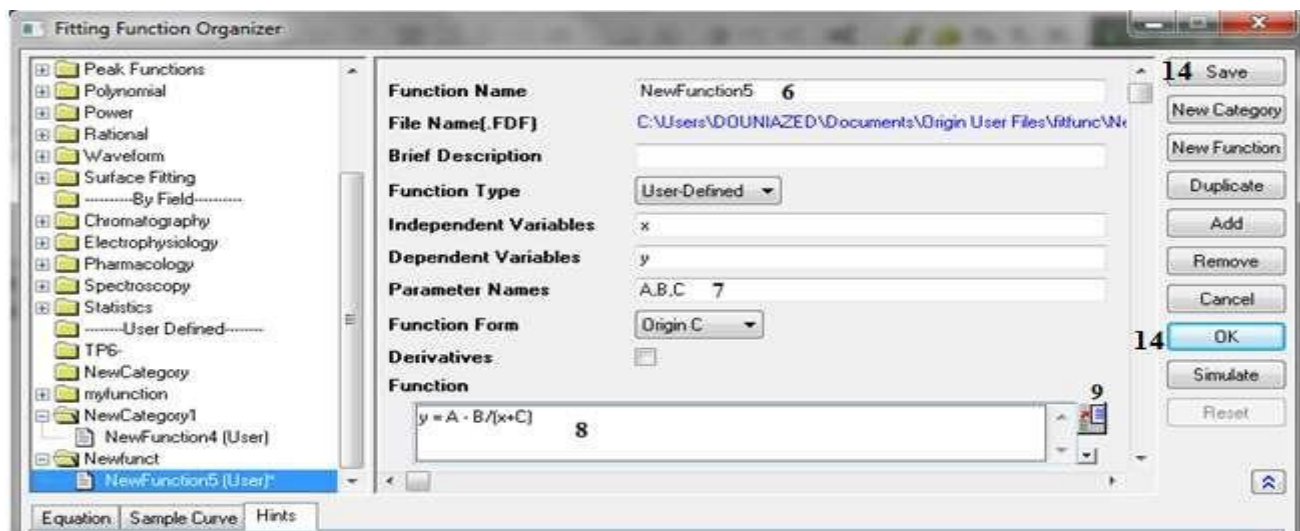
1) Création une nouvelle fonction

- Commencez avec un nouveau projet **New project**.
- Sélectionnez : **Tools** → **Fitting Function Organizer** (ou cliquer sur le bouton **F9**).
- Sélectionnez new **category**.
- Ecrivez le nom de votre **category** (par exemple **MyFunction**).
- Cliquer sur **New Function**.



- Ecrivez le nom de la fonction (par exemple : **MyExp**).
- Déterminez les constantes.
- Ecrivez l'équation (respectez le langage de programmation **C**).

9. Pour vérifier l'écriture de votre équation cliquer sur le bouton 

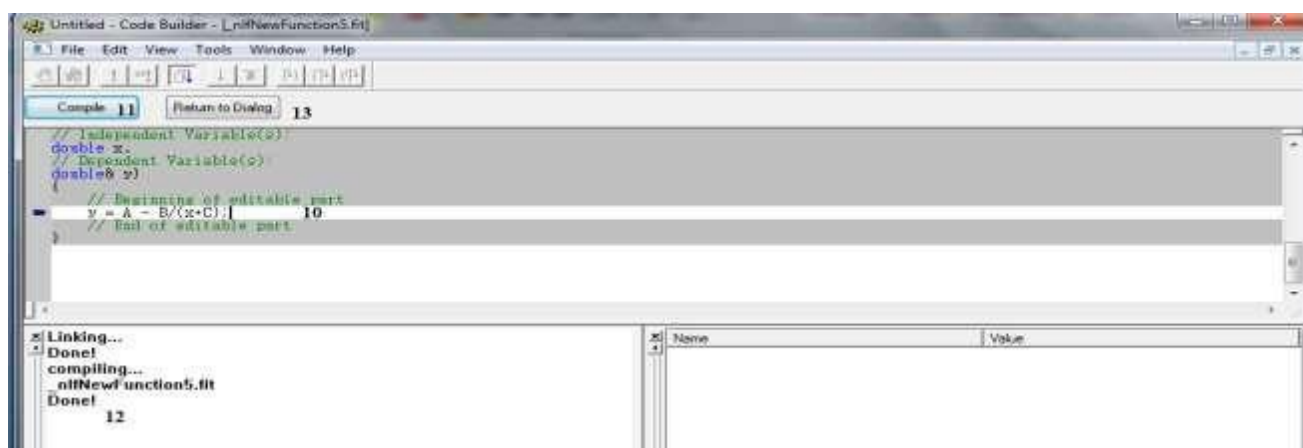


10. Sélectionnez l'équation

11. Compilez le programme

12. S'il affiche à la fin **Done !** donc l'écriture est juste

13. Pour fermer cette boîte de dialogue cliquer sur la commande **Return Dialog**.



14. Finalement cliquer sur les boutons **Save** et **OK**.

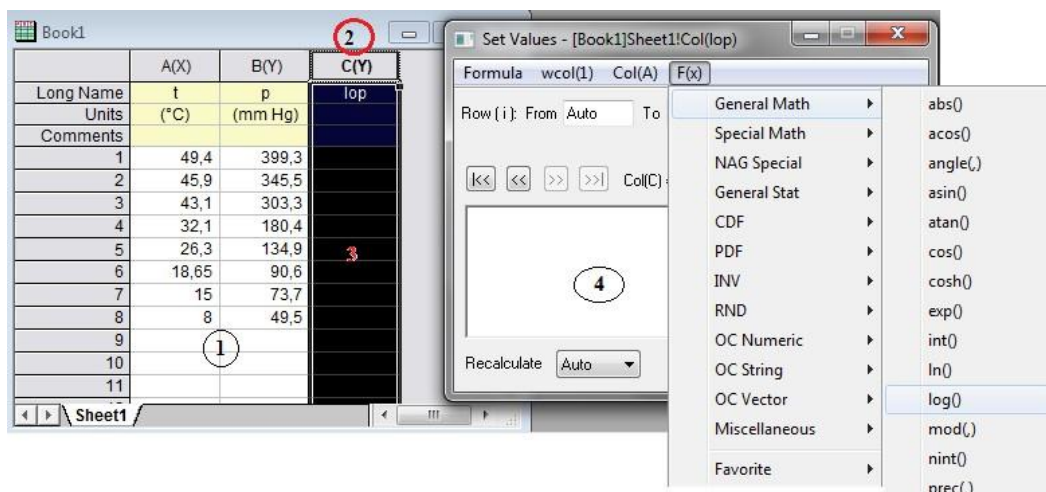
Avec cette méthode nous avons ajouté une nouvelle fonction à la base des données de l'Origin qui est l'équation d'ANTOINE

2) traitement des données

Nous allons préparer le Book qui contient les données de V. Vaněček et les étapes sont comme suit :

1- Revenez à la feuille de travail et importez les données (**P** et **T**)

- 2- Ajoutez une colonne (cliquer sur le bouton .
- 3- Cliquez deux fois sur la colonne C et sélectionnez **Set Column Values** pour avoir l'affichage de la boîte de dialogue **Set Values**.
- 4- Dans l'éditeur de la boîte de dialogue, entrer la commande : **$\log(\text{Col(B)})$** .
- 5- Sélectionnez les colonnes A & D et cliquer sur le bouton  pour créer un traçage au nuage de points « **scatter plot** ».

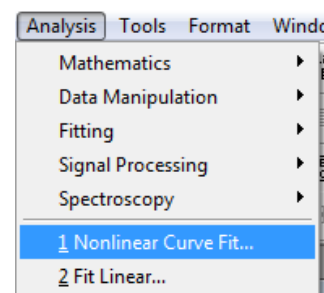


3) le calcul des constantes

Pour calculer les constantes **A**, **B** et **C** en utilisant la technique de **NLFit** et on utilise l'équation d'Antoine qu'on vient de l'écrire et l'ajouter à la base des données.

Les étapes de travail seront :

Sélectionnez : **Analysis** → **Nonlinear Curve Fit...**

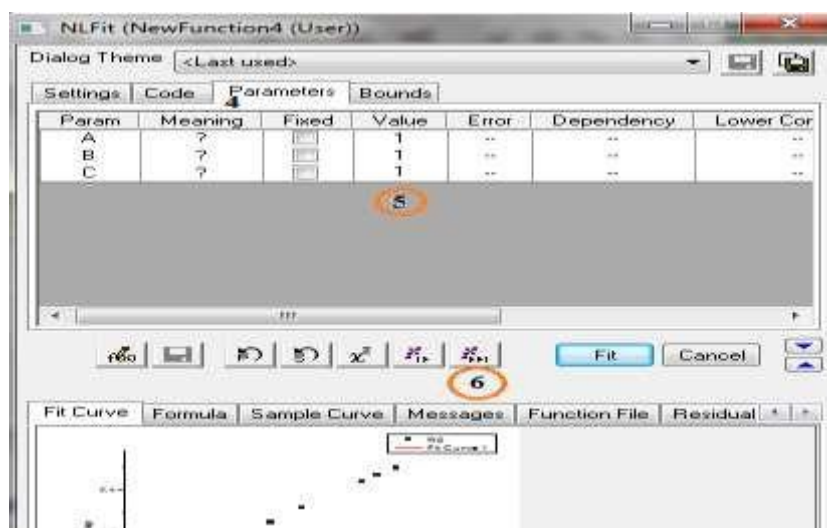


Une boîte de dialogue **NLFit** s'ouvrira dans laquelle appliquer les commandes si dessous

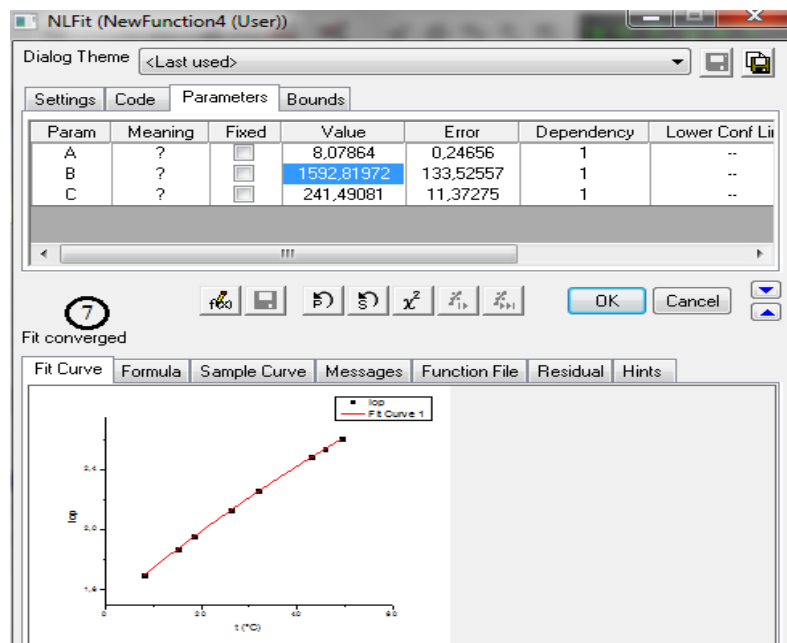
- 1- sélectionnez : **Setting** → **Function Selection**
- 2- Dans la commande : **Category Sélectionnez** → **MyFunction** (le nom de category)
- 3- Et dans la commande : **Function sélectionnez** → **Myexp** (le nom de la fonction).
- 4- Basculez vers l'onglet **Parameters**.



- 5- Toujours commencez le calcul avec les valeurs les plus petites possibles des constantes. Dans notre cas les paramètres **A**, **B** et **C** sont positifs donc on commence par la valeur la plus petite qui est **0** ou **1**.
- 6- pour lancer le calcul de convergence cliquer sur la commande **fit till converged** 



- 7- Le calcul se termine quand l'origine affiche le message **Fit converged**.
- 8- Cliquer sur **ok**.
- 9- Voir les résultats et écrire l'équation finale **d'Antoine**.



Exercice : Écrire l'équation finale **d'Antoine** Pour C=230. Commenter.



Tp N°7 :

Le gap optique : Relation de Tauc

Le but :

La détermination du gap optique (ZnO)

I- Notion de base

1) Coefficient d'absorption

En optique, le coefficient d'absorption ou absorptivité (noté en général α) est une quantité locale définie à partir de la dérivée de l'absorbance A par rapport au chemin optique d parcouru par un rayonnement électromagnétique dans un milieu donné¹ (exprimé en m^{-1} ou en cm^{-1}) :

$$\alpha = 2.303 \frac{A}{d}$$

2) Relation de Tauc

La largeur du gap optique (E_g) des couches déposées a été calculée en utilisant la formule de Tauc donnant, la relation entre le coefficient d'absorption α et l'énergie des photons $h\nu$:

$$(\alpha h\nu)^n = B(h\nu - E_g)$$

B est un paramètre dépendant de la probabilité de transition (est une constante)

h : est la constante de Planck

ν , est la fréquence des photons incidents

n : présente la nature de transition (gap direct : $n=2$) et (gap indirect $n=1/2$)

$h\nu$: est l'énergie de photon donné par la loi de Max Plank.

α : Le coefficient d'absorption donné par la loi de Beer-Lambert

La loi de Max Planck

l'énergie de photon E:

$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda} = \frac{6.62 \times 10^{-34} (J.s) \times 2.999 \times 10^8 (m/s)}{\lambda (nm)} = \frac{19.85 \times 10^{-26} (J.m)}{\lambda (nm)}$$

$$E = \frac{1.602 \times 10^{-19} J}{1.602 \times 10^{-19} \times \lambda (nm)} = \frac{19.85 \times 10^{-26} (eV) \times 10^{+9}(nm)}{1.602 \times 10^{-19} \times \lambda (nm)}$$

$$E = \frac{1240 (eV.nm)}{\lambda (nm)}$$

La loi de Beer-Lambert

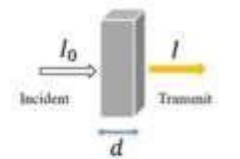
$$\frac{I}{I_0} = e^{-\alpha d} \rightarrow \log\left(\frac{I}{I_0}\right) = \log(e^{-\alpha d}) = -\alpha d \log(e)$$

$$\rightarrow \log\left(\frac{I_0}{I}\right) = \alpha d \log(e) \quad \text{Avec } \log\left(\frac{I_0}{I}\right) = A$$

$$\rightarrow A = \alpha d \log(e)$$

$$\rightarrow \alpha = \frac{A}{d \cdot \log e}$$

$\log(e) = 0.4343$

$$\alpha = 2.303 \frac{A}{d}$$


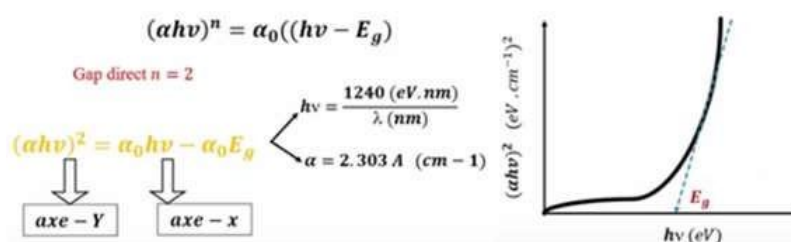
Incident I_0 Transmitt I

Épaisseur de matériau à travers lequel la lumière se déplace : d

$d = 1 \text{ cm de la carte}$

$\rightarrow \alpha = 2.303 \text{ Å}$

Le diagramme de Tauc



Remarque

Le coefficient d'absorption a été calculé en utilisant la relation suivante :

$$\alpha = \frac{1}{d} \ln\left(\frac{1-R}{T}\right)$$

Où d est l'épaisseur du film, T est la transmittance et R est le facteur de réflexion.

3) L'oxyde de zinc

L'oxyde de zinc est un composé chimique d'oxygène et de zinc, corps ionique de formule chimique ZnO

L'oxyde de zinc est blanc à froid, mais il devient jaune à chaud. La coloration est réversible avec la température.

L'oxyde de zinc est un semi-conducteur de largeur de bande 3,3 eV. Il n'absorbe donc pas la lumière visible, ce qui explique sa transparence. Sous la forme de poudre, la lumière est réfléchiée à la surface de chaque cristal, et le matériau est donc perçu comme blanc. Néanmoins, des lacunes d'oxygène peuvent se former dans ce matériau, surtout à haute température, ce qui explique que l'oxyde de zinc vire au jaune lorsqu'il est chauffé. Cet effet est appelé thermochromie.

Par ailleurs, l'oxyde de zinc présente un effet piézoélectrique.

II- Application

Calculer le gap optique de ZnO

Les étapes :

1- Importer les data dans le fichier Excel (ZnO)

Long Name	Wavelength (nm)	T	C(Y1)	D(Y1)	E(Y1)	F(Y1)
1	200	12.84	0.011	0.07	33.212	35.352
2	200.5	12.849	0.009	0.064	33.215	35.304
3	201	12.856	0.008	0.064	33.247	35.373
4	201.5	12.862	0.011	0.058	33.25	35.387
5	202	12.873	0.009	0.058	33.27	35.416
6	202.5	12.882	0.012	0.061	33.292	35.437
7	203	12.888	0.014	0.06	33.299	35.434
8	203.5	12.895	0.011	0.063	33.293	35.461
9	204	12.899	0.011	0.061	33.289	35.46
10	204.5	12.902	0.012	0.058	33.315	35.488
11	205	12.903	0.009	0.063	33.344	35.512

2- Choisir la colonne B (t=2min)

3- L'Absorbance

$$A = \log\left(\frac{100}{T}\right)$$

- Ajouter une colonne
- Bouton droit sur la colonne C
- Cliquer sur : **set column Values ...**
- Écrire : **log(100/Col(B))**
- Apply → Ok

4- Changer les longueurs d'onde (nm) en valeurs d'énergie (eV) :

Les étapes :

- Ajouter une colonne
- Renommer la colonne « énergie $(h\nu)^2$ » + l'unité eV
- Bouton droit sur la colonne D « énergie »
- Cliquer sur : **set column Values ...**
- Écrire: **1240/Col(A)**
- Apply → Ok

On a

$$(\alpha h\nu)^2 = A(h\nu - E_g)$$

5- Calculer : $(\alpha h\nu)^2$

Les étapes :

- Ajouter une colonne
- Renommer la colonne « $(\alpha h\nu)^2 + 1^{\text{e}} \text{ unité (eV.cm}^{-1}\text{)}^2$
- Bouton droit sur la colonne E
- Cliquer sur : **set column Values ...**
- Écrire : $(2.303*\text{col(C)}*\text{col(D)})^2$
- Apply → Ok

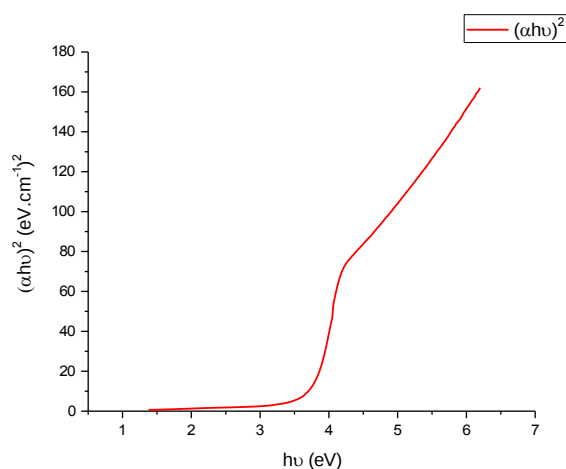
6- Tracer le graphe

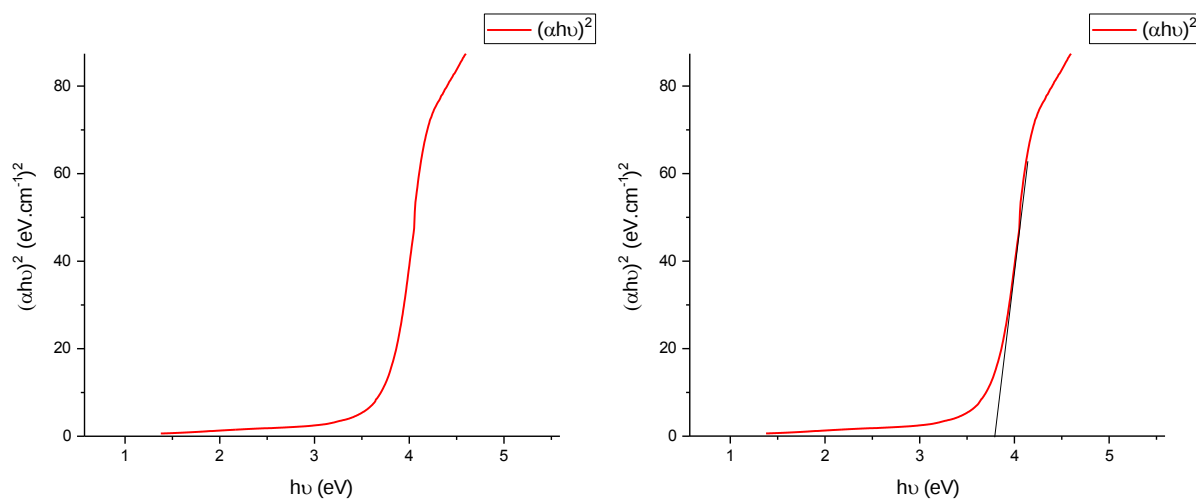
- a- L'axe de x : $\rightarrow \{h\nu\}$ (Col(D))
- b- L'axe de y $\rightarrow \{(\alpha h\nu)^2\}$ (Col(E))

Bouton droit sur la colonne D : **Set As → X**

	A(X1) Wavelength nm	B(Y1) T %	C(Y1) A log10(100/col(B))	D(X2) hν eV	E(Y2) (αhν) ² (eV.cm ⁻¹) ²
1	200	12.84	0.89143	6.2	162.01327
2	200.5	12.846	0.89123	6.18454	161.13280
3	201	12.856	0.89080	6.16915	160.21063
4	201.5	12.842	0.89137	6.15385	159.58592
5	202	12.823	0.89201	6.13861	158.92806
6	202.5	12.852	0.89069	6.12346	157.77413
7	203	12.868	0.89048	6.10837	156.92848
8	203.5	12.865	0.89050	6.09337	156.19181
9	204	12.849	0.89113	6.07843	155.61056
10	204.5	12.852	0.89103	6.06357	154.82054
11	205	12.853	0.89095	6.04878	153.93776

Le graphe





Sélectionner « Screen Reader »

X = 3.78181105, Y = 0.173122988

Donc le gap optique est : $E_g = 3.78 \text{ eV}$



Tp N°8 :

Le gap optique : la fonction de Kubelka-Munkl

Le but :

La détermination du gap optique des cristallites de TiO_2 par la fonction de Kubelka Munkl

I- Notion de base

1) L'équation de Kubelka-Munk

L'approximation de Kubelka-Munk constitue un modèle fondamental pour décrire le comportement de l'absorption lumineuse et de la réflexion diffuse dans des milieux hétérogènes. Ce modèle offre la capacité de prédire, à partir de la mesure des propriétés optiques de deux couches de différentes épaisseurs, comment des couches de dimensions variées influencent le comportement de la lumière incidente.

Cette relation de Kubelka-Munk revêt une importance significative pour l'industrie des revêtements, permettant aux fabricants d'estimer la quantité de pigment nécessaire pour conférer à un matériau une opacité spécifique à une épaisseur donnée. De plus, elle offre la possibilité de prédire la couleur résultante d'un mélange de deux colorants, sous réserve de connaître les paramètres d'absorption spectrale de chacun des composants. Cette prédiction est notablement plus précise que l'approche naïve basée sur le modèle de synthèse soustractive des couleurs.

Bien que l'approximation de Kubelka-Munk ait été initialement développée pour l'industrie de la peinture, son applicabilité s'étend bien au-delà de ce domaine. Elle trouve des applications dans des secteurs variés tels que les encres, les papiers, les textiles colorés, ainsi que dans l'analyse de peintures artistiques, parmi d'autres domaines. En somme, cette approximation constitue un outil précieux pour comprendre et manipuler les interactions de la lumière avec des matériaux hétérogènes.

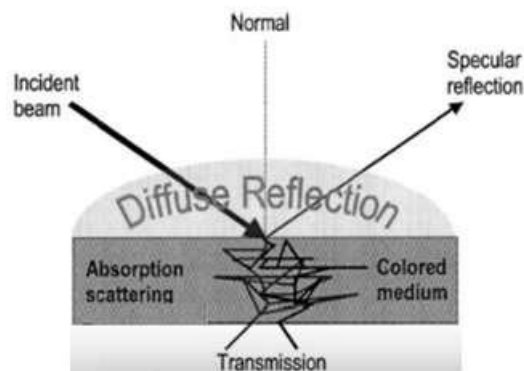
2) Présentation d'équation

Lorsque les dimensions des particules dépassent considérablement la longueur d'onde du rayonnement, les principes de la diffusion de Rayleigh ne sont plus applicables, et la diffusion de Mie devient difficile à utiliser pour décrire les particules de pigment au sein d'une peinture. Dans ce contexte, la théorie développée par Kubelka et Munk s'écarte des calculs traditionnellement fondés sur la physique des rayonnements. Au lieu de cela, leur modèle s'appuie sur des grandeurs photométriques mesurables (PRV).

Le modèle de Kubelka-Munk repose sur la considération d'une couche élémentaire du matériau, d'une épaisseur dx , située entre la surface et le support. Dans cette couche, un flux lumineux diffus provenant de la surface arrive. À la limite de la couche, du côté de la surface, deux flux lumineux diffus se propagent : un flux I en direction du support et un flux J en direction de la surface. Le modèle introduit deux constantes matérielles importantes, à savoir le coefficient de diffusion S et le coefficient d'absorption K , et établit les relations suivantes :

$$F(R) = \frac{K}{S} = \frac{(1 - R)^2}{2R}$$

R représente la quantité de lumière réfléchie par un film dont l'épaisseur est suffisamment grande pour que toute variation de cette épaisseur n'altère pas le résultat obtenu



$$R = \frac{\%R}{100}$$

L'équation de Kubelka-Munk est :

$$(F(R) h \nu)^n = B(h \nu - E_g)$$

L'équation de Tauc (**Tp N° 7**) : $(\alpha h \nu)^n = A(h \nu - E_g)$

3) Évaluation critique

- Le modèle présente une certaine imprécision, notamment en ce qui concerne le paramètre S , qui affiche des variations en fonction des conditions de mesure, notamment la concentration de pigment. Cependant, il est à noter que malgré l'introduction de valeurs approximatives dans des formules établies sur des hypothèses similaires, les résultats obtenus restent satisfaisants, en tenant compte du degré de précision recherché. Une étude menée par Dupuis en 2008 a révélé une erreur relative moyenne de seulement 3 %, ce qui atteste de la robustesse du modèle dans certaines situations.

- La validité générale de l'approximation de Kubelka-Munk a été remise en question. Bien que les coefficients K et S semblent correspondre respectivement à la lumière en réflexion diffuse et à la lumière absorbée, leur relation précise avec les propriétés optiques n'est pas toujours clairement définie. Le modèle repose sur une hypothèse de linéarité, mais il est désormais évident que cette linéarité ne s'applique pas systématiquement. Plus spécifiquement, l'approximation ne se confirme pas dans les cas où un système combine un matériau diffusant à faible capacité d'absorption, tel que le papier, avec un autre matériau peu diffusant mais absorbant.

4) Le dioxyde de titane

Le dioxyde de titane, également connu sous le nom d'oxyde de titane (IV), est une substance chimique composée d'oxygène et de titane, dont la formule est TiO_2 . On le trouve à l'état naturel, mais il est également produit industriellement. Ce composé occupe la position de pigment blanc PW6 dans l'Index des Couleurs (Colour Index) et est largement utilisé comme agent opacifiant dans la fabrication de peintures et de divers autres produits.

Le dioxyde de titane présente des propriétés de photocatalyseur, ce qui le rend utile pour déclencher des réactions chimiques dans le cadre de processus de dépollution. Bien qu'il ne soit pas toxique, il peut être préjudiciable aux organismes vivants sous forme de nanoparticules, par exemple dans les crèmes solaires. Il est autorisé comme ingrédient dans les produits cosmétiques et alimentaires, à l'exception de la France où son utilisation dans les denrées alimentaires a été interdite pendant une période d'un an à partir du 1er janvier 2020.

5) Applications de TiO_2

5-1. Utilisation comme Pigment

Le dioxyde de titane est couramment employé en tant que pigment dans diverses applications, notamment la composition de peintures, ainsi que la fabrication de produits tels que papier, plastiques, céramiques, médicaments, dentifrices, chewing-gums, fromage industriel, produits de pâtisserie, confiserie, crèmes solaires, cosmétiques, et bien d'autres.

5-2. Fonction en tant que Catalyseur

Le dioxyde de titane trouve également des applications en catalyse, notamment pour :

- Faciliter la dégradation de pesticides présents dans l'eau, en réponse à l'exposition aux rayons ultraviolets.
- Favoriser l'oxydation du NO₂ (un polluant provenant des émissions de pots d'échappement) en NO₃ (nitrates), par exemple, lorsqu'il est incorporé dans les revêtements routiers.
- Collaborer avec le platine pour provoquer la réduction du dioxyde de carbone dissous dans l'eau en méthane, avec émission de monoxyde de carbone, sous l'effet des rayons ultraviolets.

II- **Application** : Calculer le gap optique de TiO₂

Pour TiO₂ on a un gap direct (n=2)

L'axe de x : $\rightarrow \{h\nu\}$

L'axe de y $\rightarrow \{(F(R) h\nu)^2\}$

Les étapes :

- 1- Importer les data dans le fichier **TiO₂** situé dans **CD-ROW**.
- 2- Changer les longueurs d'onde (nm) en valeurs d'énergie (eV)

Les étapes :

- Ajouter une colonne
- Renommer la colonne « énergie » + l'unité eV
- Bouton droit sur la colonne C « énergie »
- Cliquer sur : **set column Values ...**
- Écrire : **1240/Col(A)**
- Apply → Ok

- 3- Calculer les valeurs de réflectance R

On : $R = \frac{\%R}{100}$

Les étapes :

- Ajouter une colonne (D)
 - Renommer la colonne D « R réflectance »
 - Bouton droit sur la colonne D « R réflectance » → Cliquer sur : **set column Values ...**
 - Écrire : **Col(B)/100**
 - Apply → Ok
- 4- Calculer le coefficient d'absorption K

On a : $K = (1 - R)^2$

Les étapes :

- Ajouter une colonne (E)
- Renommer la colonne E « absorption K »
- Bouton droit sur la colonne E « absorption K » → Cliquer sur : **set column Values** ...
- Écrire : **(1-Col(D)) ^2**
- Apply → Ok

5- Calculer le coefficient de diffusion S

On a : $S=2R$

Les étapes :

- Ajouter une colonne (F)
- Renommer la colonne F « coefficient de diffusion S »
- Bouton droit sur la colonne E « coefficient de diffusion S » → Cliquer sur : **set column Values ...**
- Écrire : **2*Col(D)**
- Apply → Ok

7- La fonction de Kubelka-Munk : $F(R) = \frac{K}{S}$

Les étapes :

- Ajouter une colonne (G)
- Renommer la colonne G « $F(R) = \frac{K}{S}$ »
- Bouton droit sur la colonne G « $F(R) = \frac{K}{S}$ » → Cliquer sur : **set column Values ...**
- Écrire : **Col(E)/ Col(F)**
- Apply → Ok

8- Calculer $[F(R) * h\nu]^2$

$h\nu$ = l'énergie en eV (étape N°2)

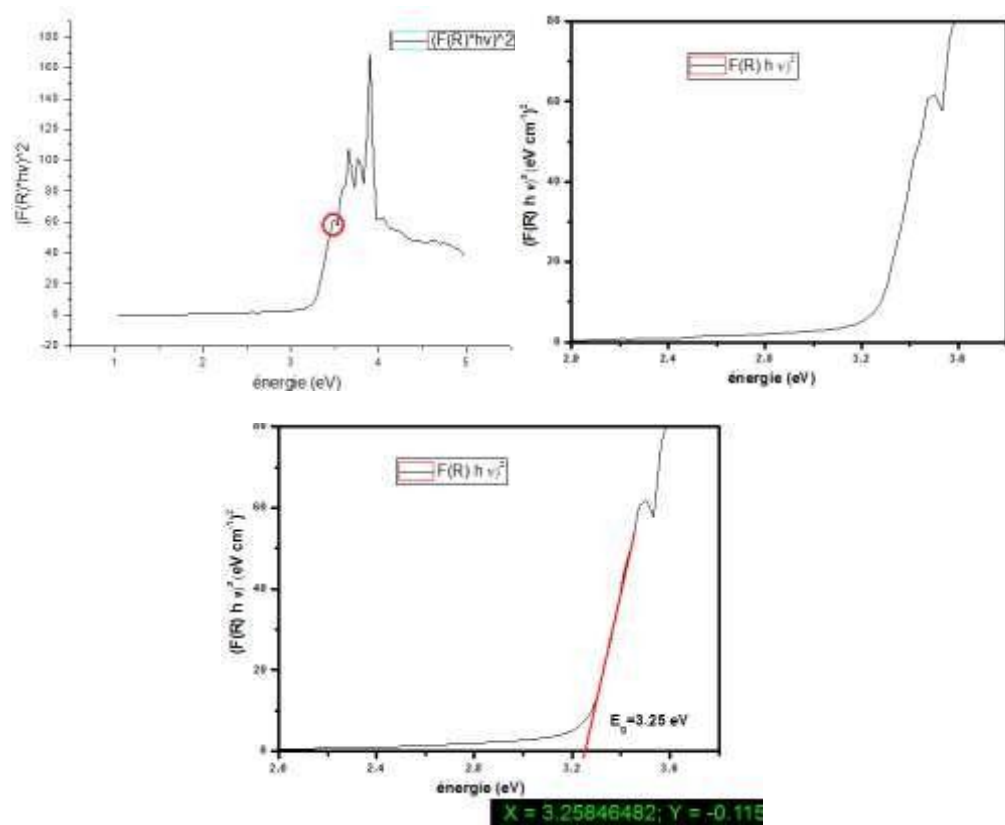
Les étapes :

- Ajouter une colonne (H)
- Renommer la colonne H « $(F(R) * h\nu)^2$ »
- Bouton droit sur la colonne H « $(F(R) * h\nu)^2$ » → Cliquer sur : **set column Values**
- Écrire : **(Col(G)*Col(C)) ^2**

- Apply → Ok
- 9- Tracer le graphe
- c- L'axe de x : $\rightarrow \{ h\nu \}$ (Col(C))
- d- L'axe de y $\rightarrow \{ (F(R) h\nu)^2 \}$ (Col(H))

Bouton droit sur la colonne C : **Set As** → X

Le graphe



Donc le gap optique est : $E_g = 3.25$ eV



Tp N°9 :

L'énergie d'activation de la conductivité électrique

Le but : Estimation de l'énergie d'activation de la conductivité électrique

I- Notion de base

1) La conductivité électrique

La conductivité électrique quantifie la capacité d'un matériau à permettre le passage du courant électrique. Plus la conductivité d'un système est élevée, plus le courant électrique circule aisément, tandis qu'une conductivité plus faible entraîne une résistance accrue à la circulation de l'électricité, indiquant ainsi un pouvoir isolant plus fort de la matière.

2) Résistance

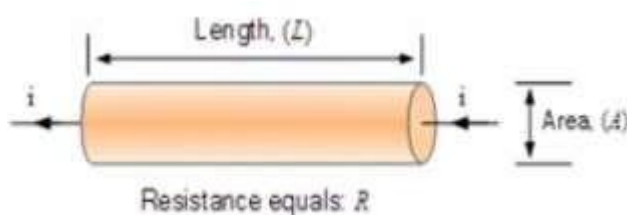
La résistance électrique constitue l'un des concepts fondamentaux en physique, définissant la capacité d'un matériau à s'opposer au passage du courant électrique. Elle joue un rôle essentiel dans les pertes d'énergie lors du transport de l'électricité sur de longues distances.

La résistance est généralement représentée par la lettre R et s'exprime en ohms. Cette grandeur physique obéit à la célèbre loi d'Ohm, qui établit une relation entre la résistance (R) en ohms, la tension (U) en volts et l'intensité (I) en ampères :

$$U = R \times I$$

Si on isole la résistance R , on obtient :

$$R = U/I$$



Il convient de noter que la valeur de la résistance dépend des dimensions spécifiques d'un matériau, à savoir sa taille et sa forme, qui ont une influence directe sur le résultat obtenu. Par exemple, si l'on prend deux fils présentant des caractéristiques parfaitement identiques à l'exception de leur longueur, une différence de résistance se manifestera entre les deux : le fil plus long affichera une résistance supérieure. De même, lorsque le diamètre du fil est réduit, la résistance augmente proportionnellement. On peut envisager le courant électrique dans un fil de manière similaire à une foule dans un couloir : plus le couloir est étroit, plus le passage est entravé, ce qui se traduit par une résistance accrue.

3) Conductance

La conductance électrique, habituellement symbolisée par G et exprimée en siemens (S), constitue l'inverse de la résistance, ce qui peut être formulé comme suit :

$$G = 1/R$$

En outre, si l'on préfère exprimer la conductance en termes de tension et d'intensité, on peut utiliser l'équation suivante :

$$G = I/U$$

De manière similaire à la résistance, la conductance subit des variations significatives en fonction des dimensions spécifiques d'un composant composé du même matériau. La conductance et la résistance peuvent également être mesurées pour une solution, où ces deux

grandeurs évoluent en fonction de la taille des électrodes immergées dans le liquide et de l'espace qui les sépare.

4) Conductivité

La conductivité électrique est une propriété intrinsèque d'un matériau qui est calculée à partir de la conductance, mais elle reste constante indépendamment des dimensions ou de la forme spécifiques du composant considéré. Cela permet de comparer des matériaux sans prendre en compte leur taille. La conductivité est généralement symbolisée par la lettre sigma (σ) et son unité de mesure est le siemens par mètre (S/m). Dans le cas d'un conducteur parfait, σ tend vers l'infini, ce qui signifie que ce matériau offre une résistance insignifiante, voire nulle, au passage du courant électrique.

La formule de la conductivité électrique est la suivante :

$$\sigma = G/k$$

Dans cette équation, G représente la conductance en siemens, tandis que k est exprimée en mètres et représente la constante de cellule. Cette constante englobe les données relatives aux dimensions du matériau utilisé pour mesurer la conductance, ou dans le cas d'une solution, elle prend en compte la surface des électrodes et la distance qui les sépare.

5) Résistivité

La résistivité électrique, notée ρ et mesurée en ohms-mètres ($\Omega \cdot m$), est l'inverse de la conductivité électrique. Elle permet de comparer la capacité d'isolation électrique de divers matériaux, indépendamment des dimensions de l'échantillon utilisé, sans que celles-ci n'affectent le résultat.

$$\rho = (R \cdot A) / L \quad [(\text{ohms} \cdot \text{m}^2) / \text{m}]$$

$$\sigma = 1/\rho$$

Quels sont les facteurs qui exercent une influence sur la conductivité électrique ?

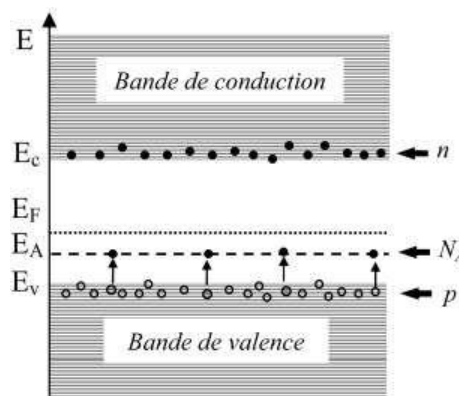
Contrairement à la conductance, la conductivité n'est pas affectée par la taille ou la forme de la substance étudiée. Cependant, d'autres paramètres peuvent la modifier, notamment :

- ✓ La température : La température joue un rôle significatif dans la conductivité, avec des effets différents selon les cas. Dans le contexte des solutions, l'augmentation de la température accroît la conductivité, car les ions ou les molécules en solution deviennent plus mobiles, facilitant ainsi le passage du courant électrique.
- ✓ La pureté du matériau : Cela est particulièrement important pour les métaux. Par exemple, même si l'argent pur est un meilleur conducteur que l'or, il est moins utilisé

en électricité en raison de sa tendance à s'oxyder rapidement, ce qui entrave le flux d'électrons et réduit sa conductivité.

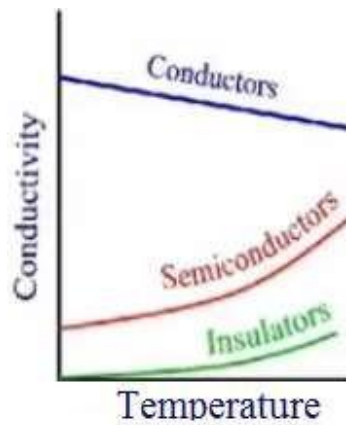
- ✓ Les champs électromagnétiques : Lorsqu'un courant traverse un conducteur, il génère son propre champ électromagnétique. Inversement, l'application d'un champ électromagnétique à un matériau peut altérer sa capacité à conduire le courant.
- ✓ La fréquence du courant : Le courant alternatif, qui est couramment utilisé pour le transport et la distribution de l'électricité, est caractérisé par une fréquence en hertz. Lorsque cette fréquence est élevée, le courant tend à circuler principalement en surface du conducteur, ce qui diminue considérablement sa conductivité. Cet effet est connu sous le nom d'effet de peau ou effet pelliculaire.

Propriétés électriques



Pour les semi-conducteurs amorphes, la présence d'états étendus dans les bandes de conduction (E_C) et de valence (E_V), ainsi que divers types d'états localisés dans la bande interdite, engendre trois modes distincts de conduction :

- Conduction à travers les états étendus des bandes de conduction (E_C) et de valence (E_V). Ce mode de conduction prévaut principalement à des températures relativement élevées.
- Conduction par le biais des états localisés dans les queues des bandes. Ce mode de conduction prédomine à des températures moyennes.
- Conduction par saut entre les états localisés en profondeur, situés à proximité du niveau de Fermi (E_F). Ce mode de conduction est prédominant à très basses températures.
- La conduction est réalisée à travers les états étendus, et la conductivité peut être exprimée par l'intermédiaire de l'équation suivante :



$$\sigma(T) = \sigma_0 \exp\left(-\frac{E_a}{KT}\right)$$

- σ_0 : conductivité électrique à $T \rightarrow \infty$
- k : la constante de Boltzmann
- E_a : représente l'énergie d'activation de la conductivité électrique, elle représente l'écart énergétique $E_F - E_V$ pour un semiconducteur de type n et $E_C - E_F$ pour un semi-conducteur de type p.

II- Application



Le tableau suivant présente la variation de la température en fonction de la résistance (R) d'un système de longueur :

T (C)	R (Ω)
172	5.10E+06
167	5.82E +06
162	7.60E +06
157	1.040E +07
152	1.35E +07
147	1.85E +07
142	2.41E+07
137	3.29E+07
132	4.48E+07
127	6.40E+07
122	8.73E+07
117	1.24E+08
112	1.78E+08
107	2.53E+08
102	3.61E+08
97	4.13E+08

$L = 0.0000113$ m et de rayon $r = 1$ m.

- Calculer l'énergie d'activation de la conductivité électrique de ce système.

On a :

$$K = 1,380649 \times 10^{-23} \text{ m}^2 \text{ kg s}^{-2} \text{ K}^{-1}$$

Et

$$K = 0.00008617 \text{ eV/K}$$

Solution

On a :

$$\sigma(T) = \sigma_0 \exp\left(\frac{-E_a}{KT}\right)$$

Donc :

$$\log \sigma = \log \sigma_0 + \frac{-\Delta E}{2.30kT}$$

Les étapes

1- Calculer la température en k

$$\text{Col}(C) = 1000/(\text{Col}(A) + 273)$$

2- Calculer $\log \sigma$

$$\sigma = \frac{1}{\rho} = \frac{1}{\{(R \times A)/L\}}$$

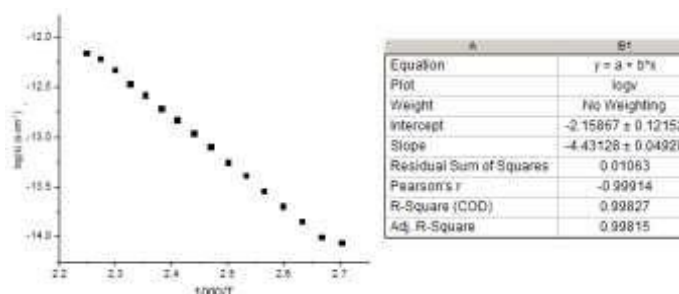
Donc :

$$\log(\sigma) = \log \frac{1}{\{(R \times (3.14 \times r^2)/L\}}$$

$$\log(\sigma) = \log \frac{1}{\{(Col(B) \times (3.14 \times 1^2)/0.0000113)\}}$$

	A(X1)	B(Y1)	C(X2)	D(Y2)
Long Name	T (C°)	R	1000/T	logv
Units				
Comments				
F(x)=			1000/(col(A)+273)	1/(col(b)*3.14/0.0000113)
1	172	5.1E6	2.24719	-12.15142
2	167	5.82E6	2.27273	-12.20877
3	162	7.6E6	2.29885	-12.32466
4	157	1.04E7	2.32558	-12.46088
5	152	1.35E7	2.35294	-12.57418

3- Tracer le graphe : $\log(\sigma) = f(1000/T)$



4- Fitting linéaire de la courbe $\log(\sigma)$ en fonction de la température (1000/T).

5- calculer l'énergie d'activation de la conductivité électrique ;

On a :

$$\log \sigma = \log \sigma_0 + \frac{-\Delta E}{2.30 kT}$$

$$\Rightarrow \Delta E = k \times 2.303 \times slope$$

$$\Rightarrow \Delta E = 0.0000861 \times 2.303 \times 4.43$$

$$\Rightarrow \Delta E = 0.88 \text{ eV}$$



Tp N°10 :

La concentration effective (EC_x)

Le but :

La détermination de la Concentration Effective d'une substance toxique.

I- Principe

1) Définitions

La concentration efficace médiane, abrégée CE50 ou EC50 en anglais, est une mesure de la concentration d'une substance telle qu'un médicament, un anticorps ou un agent toxique, qui provoque une réponse se situant à mi-chemin (médiane) entre la réponse de base et l'effet maximal après une certaine période d'exposition à cette substance. Cette mesure est fréquemment utilisée pour évaluer l'efficacité d'un médicament.

Dans le contexte d'une courbe dose-effet, la CE50 représente la concentration à laquelle 50 % de l'effet maximal est observé. Quant à la CE50 dans le contexte d'une courbe dose-effet quantitative, elle indique la concentration à laquelle 50 % de la population présente une réponse après une période d'exposition spécifiée.

La CE50 est également associée à la CI50, qui mesure l'inhibition de l'effet (50 % d'inhibition). Pour les tests de l'effet d'un antagoniste et les tests de liaison concurrente, la CI50 est la mesure la plus couramment utilisée dans la courbe dose-effet. En revanche, pour les tests impliquant des agonistes ou des agents de stimulation, la CE50 est préférée.

Les données de concentration sont généralement représentées par une courbe sigmoïde, où l'effet augmente rapidement en réponse à de faibles variations de concentration. Le point de transition, où l'effet commence à diminuer malgré une augmentation continue de la concentration, correspond à la CE50. Cette valeur peut être calculée mathématiquement à l'aide d'une régression linéaire. Bien qu'il soit pratique de s'appuyer sur un graphique pour estimer la CE50, cette méthode peut entraîner une moindre précision et exactitude des résultats.

2) Équation

Différentes équations peuvent être utilisées pour calculer la CE50. En voici une :

$$Y = Base + \frac{Sommet - Base}{1 + \left(\frac{X}{EC_{50}}\right)^{coefficient de Hill}}$$

Dans cette équation, Y représente la valeur observée, la base correspond à la plus faible valeur observée, et le sommet à la plus haute valeur observée. Le coefficient de Hill quantifie la pente maximale de la courbe dose-réponse.

Cette équation peut être formulée comme suit :

$$y = A_1 + \frac{A_2 - A_1}{1 + 10^{(LOGx_0 - x)p}}$$

Où : $EC50 = 10^{LOGx_0}$

3) Limites

Les effets induits par un médicament ou un agent stressant sont généralement influencés par la durée de l'exposition à celui-ci. En conséquence, la CE50 (et des mesures similaires) variera en fonction du temps d'exposition. La forme précise de cette dépendance temporelle dépendra de plusieurs facteurs, tels que la nature de l'agent stressant (comme un produit toxique spécifique), son mécanisme d'action, l'organisme exposé, etc. Cette variation dans le temps complique la comparaison de la puissance ou de la toxicité entre différents composés et organismes.

4) EC20:

EC20 : correspond à la concentration de médicament produisant 20 % de l'effet maximal observé.

$$\begin{aligned} A_1 + 0.2(A_2 - A_1) &= A_1 + \frac{A_2 - A_1}{1 + 10^{(LOGx_0 - x)p}} \\ \frac{1}{5} &= \frac{1}{1 + 10^{(LOGx_0 - x)p}} \\ 10^{(LOGx_0 - x)p} &= 4 \\ (LOGx_0 - x)p &= \log 4 \\ x &= LOGx_0 - \frac{\log 4}{p} \\ x &= LOGx_0 + \frac{\log 0.25}{p} \end{aligned}$$

Donc : $EC20 = 10^x$

5) Cas général

Dans le cas général, vous pouvez calculer les paramètres EC/IC à l'aide de cette équation :

$$\log(ECF) = \log x_0 + \frac{\log\left(\frac{F}{100-F}\right)}{p}$$

Où F est le pourcentage de réponse. Par exemple, pour EC80, nous avons :

$$\log(EC80) = \log x_0 + \frac{\log\left(\frac{80}{100-80}\right)}{p} = \log x_0 + \frac{\log(4)}{p}$$

$$EC80 = 10^{\log x_0 + \log(4)/p}$$

II- Application

Pour les dates suivantes, calculer EC20, EC50, EC80 et EC90.

Substrat μM	Inhibiteur (100 n M)	Inhibiteur (200 n M)	Inhibiteur (300 n M)	Inhibiteur (400 n M)
concentration	Vitesse 1	Vitesse 2	Vitesse 3	Vitesse 4
0.13	0.9	2.5	4.6	7.4
0.22	2.2	4.9	8.9	13.8
0.37	4	9.2	15.7	23.7
0.67	8	17.2	27.4	38.5
1.28	15.1	29.2	42.8	55.7
2.52	26.2	45.5	60.3	71.4
4.99	41.5	62.5	75.1	83.4
9.95	58.8	76.9	85.8	90.8

Les étapes de travail

- les relations de ECx

$$EC80 = 10^{(\log x_0 + \log(4))/p}$$

$$\log(EC20) = \log x_0 + \frac{\log\left(\frac{20}{100-20}\right)}{p} = \log x_0 + \frac{\log\left(\frac{1}{4}\right)}{p}$$

$$EC20 = 10^{(\log x_0 + \log(0.25))/p}$$

$$\text{Log}(EC90) = \text{log}x_0 + \frac{\log\left(\frac{90}{100-90}\right)}{p} = \text{log}x_0 + \frac{\log(9)}{p}$$

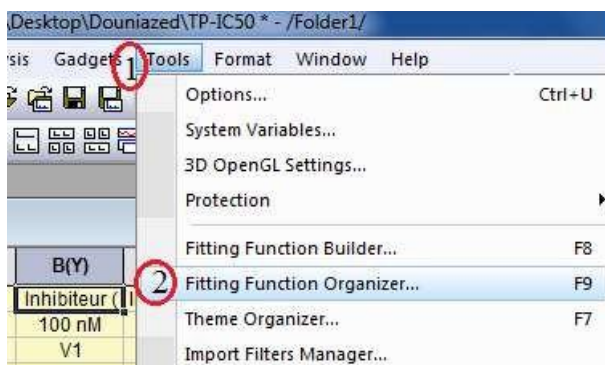
$$EC90 = 10^{(\text{log}x_0 + \log(9))/p}$$

- Vérifier les relations dans la base de données de l'OriginPro

Les étapes de la vérification

1 : Tools →

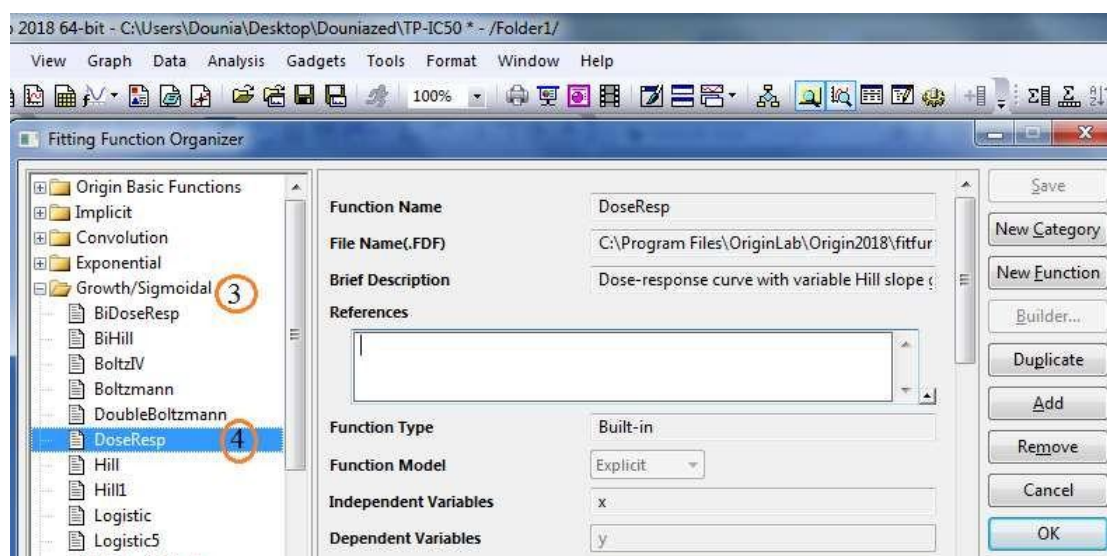
2 : fitting function organizer (ou cliquer sur F9) →



3 : Growth/Sigmoidal →

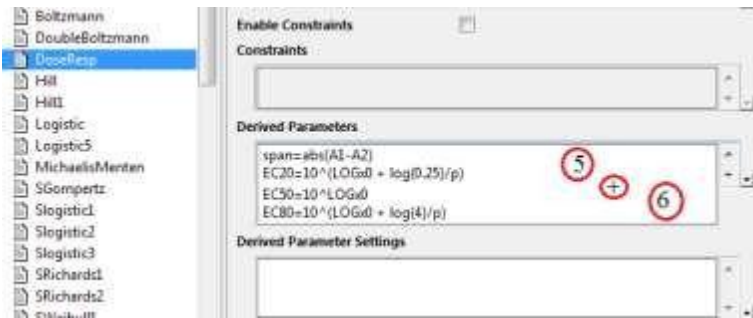
4 : DoseResp →

5 : Derived parameters



Dans cette fenêtre on a trouvé : EC20, EC50, EC80,

Il manque : EC90



5 : Ajouter l'équation de EC90 (Langage de programmation C)

Écrire :

$$EC90 = 10^{(\log(9)/p)}$$

7 : Save →

8 : Ok

Tracer le graphe :

La relation de DoseResp

$$y = A1 + \frac{A2 - A1}{1 + 10^{(\log x_0 - x)p}}$$

Pour cet exemple on a :

y → vitesse (V1 jusqu'à V4)

x → concentration de substrat (log (concentration))

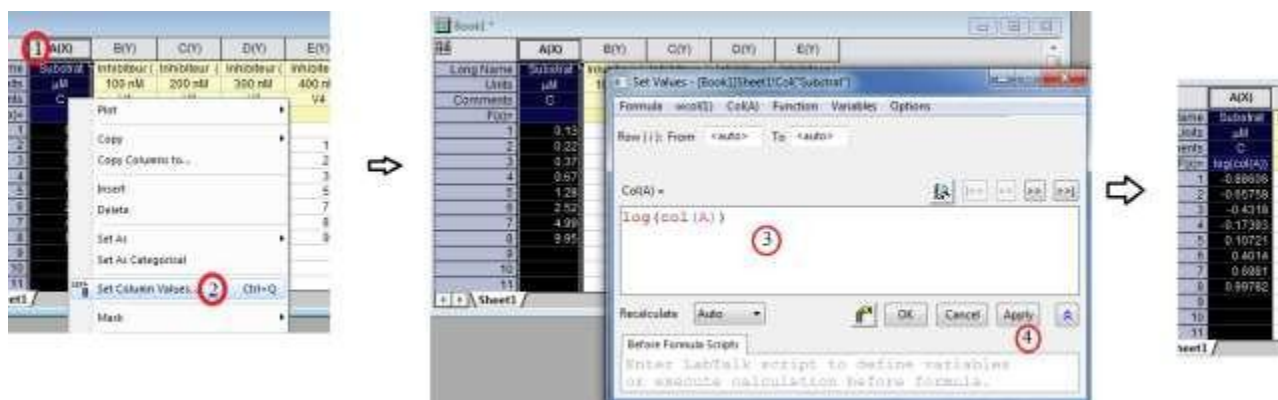
Calculer log(x)

1 : cliquer avec le bouton droit sur le colon A →

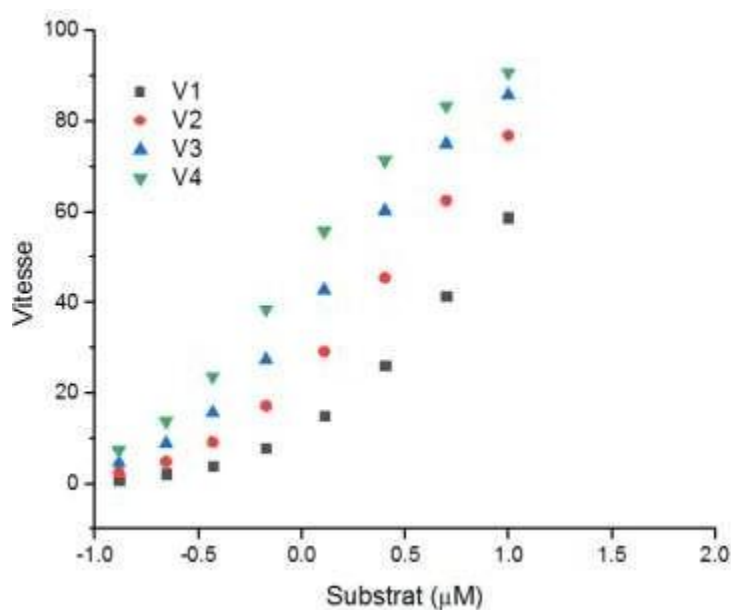
2 : set column values ... →

3 : taper : log(Col(A)) →

4 : apply et OK



Tracer le graphe



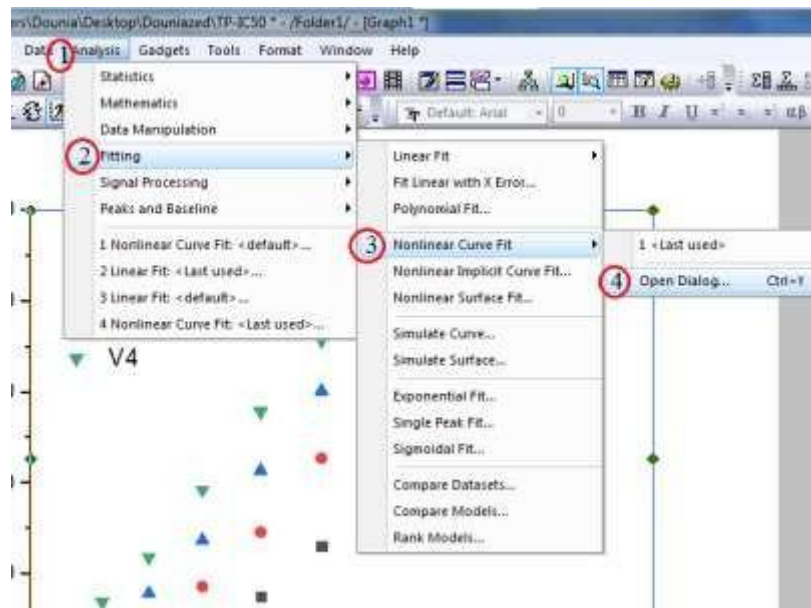
Graphique non linéaire $\Rightarrow$ Fit non linéaire

Les étapes :

1 : Analysis $\rightarrow$

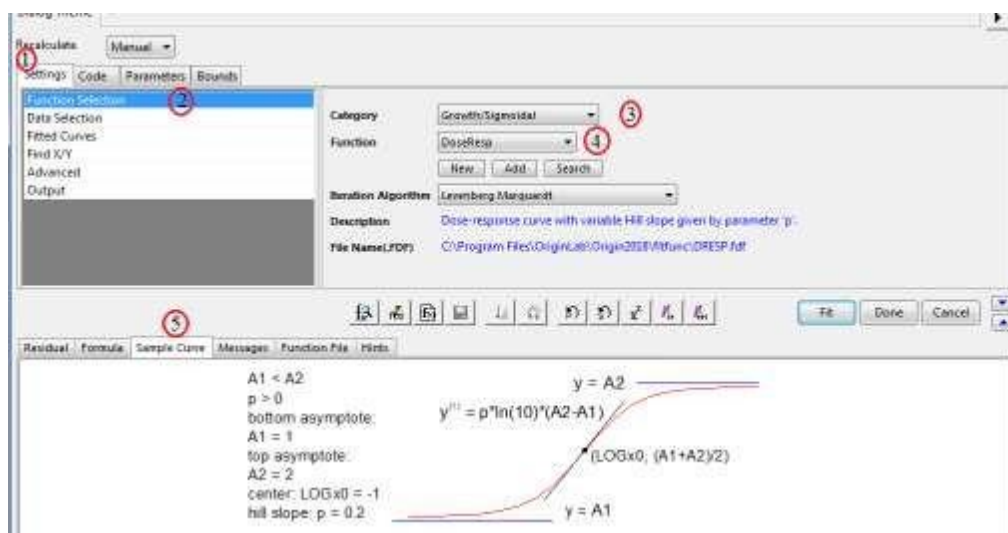
2 : Fitting $\rightarrow$

3 : Nonlinear curve Fit $\rightarrow$: Open Dialog ...



La fonction

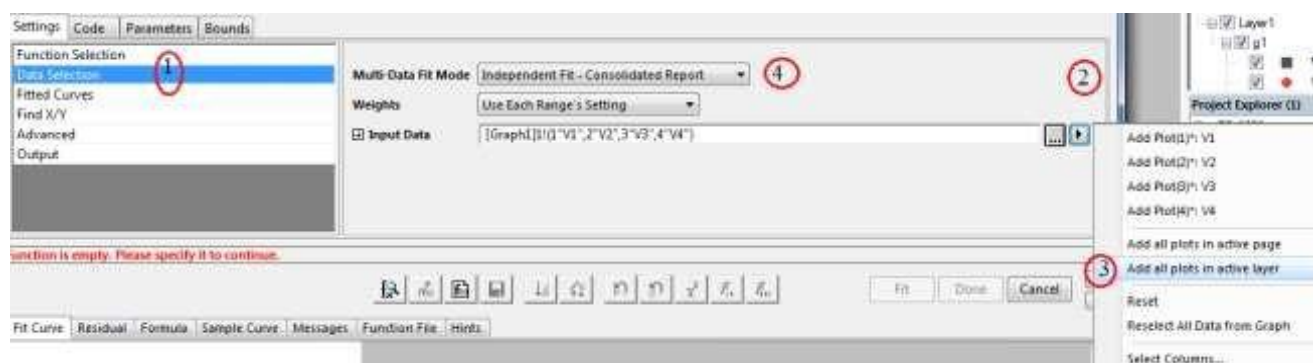
- 1) setting →
- 2) function selection →
- 3) Category: Growth/Sigmoidal →
- 4) Function: DoseResp →
- 5) Sample curve



Data

- 1 : Data Selection →
- 2 : dans la fenêtre : input Data →
- 3 : cliquer sur : add all plots in active layer →

4 : dans la fenêtre Multi-Data Fit Mode cliquer sur : Global Fit



Paramètres

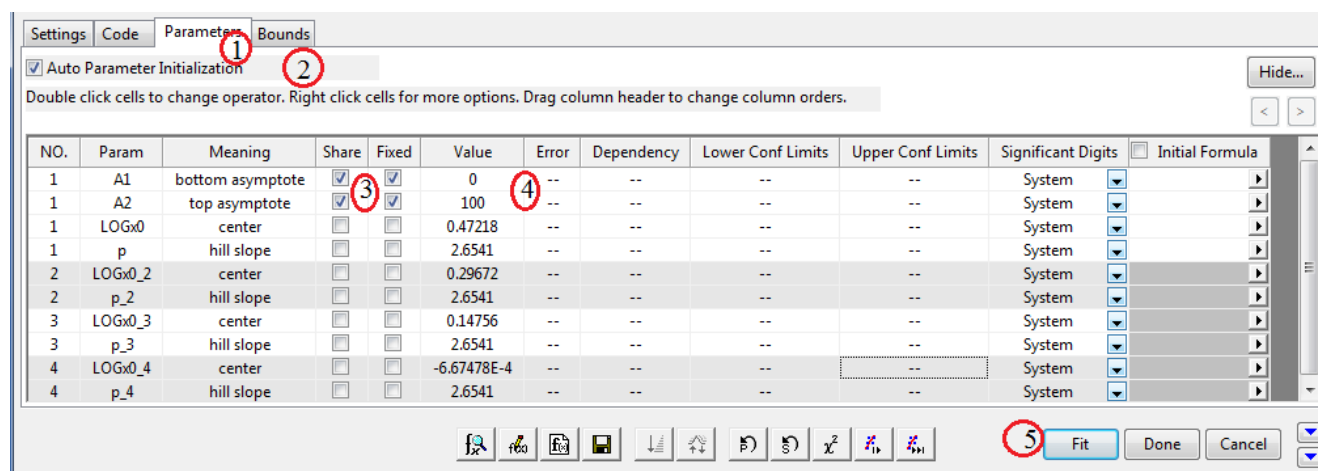
1 : parameters →

2 : Recalculate (Auto)→

3: pour A1 at A2 cocher Share et Fixed →

4 : écrire 0 pour A1 et 100 pour A2 →

5 : Fit



Les résultats

		Value	Standard Error	t-Value	Prob> t	Dependency
Inhibiteur (100 nM)	A1*	0	0	—	—	0
	A2*	100	0	—	—	0
	LOGi0	0.8433	0.01022	82.53494	—	0.25918
	p	1.036	0.02602	38.81321	—	0.25918
	span	100	0	—	—	0
	EC20	1.82678	0.05419	—	—	0
	EC50	5.97107	0.16401	—	—	0
Inhibiteur (200nM)	A1*	0	0	—	—	0
	A2*	100	0	—	—	0
	LOGi0	0.4847	0.00797	60.79803	0	0.04252
	p	1.05206	0.02015	52.22085	0	0.04252
	span	100	0	—	—	0
	EC20	0.0174	0.02297	—	—	0
	EC50	3.05283	0.05604	—	—	0
Inhibiteur (300 nM)	A1*	0	0	—	—	0
	A2*	100	0	—	—	0
	LOGi0	0.2377	0.00751	31.83991	0	0.01258
	p	1.07027	0.0188	56.92783	0	0.01258
	span	100	0	—	—	0
	EC20	0.47334	0.01278	—	—	0
	EC50	1.72962	0.0299	—	—	0

	A	B1	B2	B3	B4
1 Model	DoseResp				
2 Equation	$y = A1 + (A2-A1)/(1 + 10^{(LOGi0-x)^p})$				
3 Plot	Inhibiteur (100 nM)	Inhibiteur (200nM)	Inhibiteur (300 nM)	Inhibiteur (400 nM)	
4 A1*	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0	0 ± 0	
5 A2*	100 ± 0	100 ± 0	100 ± 0	100 ± 0	
6 LOGi0	0.8433 ± 0.01022	0.4847 ± 0.00797	0.2377 ± 0.00751	0.03244 ± 0.00725	
7 p	1.036 ± 0.02602	1.05206 ± 0.02015	1.07027 ± 0.0188	1.09441 ± 0.01891	
8 Reduced Chi-Sqr*	0.78424				
9 R-Square (COD)	0.99954	0.99934	0.99921	0.99883	
10 R-Square (COD)*	0.99928				
11 Adj. R-Square*	0.99907				



Références

1. <https://www.originlab.com/>
2. <https://www.originlab.com/doc/Origin-Help/DoseResp-FitFunc>
3. https://fr.wikipedia.org/wiki/Concentration_efficace_m%C3%A9diane
3. Aroui Linda, Tp Photomètre de flamme M1
4. Azizi Amor, Hamza Djamel Eddine, Tp-gap optique M2
5. Jean Vidal, Thermodynamique: application au génie chimique et à l'industrie pétrolière, Technip, 1997
6. Marc Heider, Jean Néel, « Propriétés électriques de quelques colorants appartenant au groupe des cyanines », J. Chim. Phys., Vol. 70, 1973, pp. 553-555
7. Fouad Sabry, « Nanomatériaux: Les nanoparticules seront capables de tuer des cellules cancéreuses individuelles, laissant les saines seules », One Billion Knowledgeable, 2022.
8. J. Mendham, « Analyse chimique quantitative de Vogel », De Boeck Supérieur, 2005
9. Jacques C. Védrine, « Les Techniques physiques d'étude des catalyseurs », Editions TECHNIP, 1988