

# Conditions de destruction thermique des déchets industriels





**ETUDE N° 94-0211/1A**

**CONDITIONS DE DESTRUCTION THERMIQUE  
DES DECHETS INDUSTRIELS**

**RAPPORT FINAL**

**février 1996**

**G. ANTONINI - Université de Technologie de Compiègne**

Créée en 1989 à l'initiative du Ministère en charge de l'Environnement, l'association RECORD – REseau COopératif de Recherche sur les Déchets et l'Environnement – est le fruit d'une triple coopération entre industriels, pouvoirs publics et chercheurs. L'objectif principal de RECORD est le financement et la réalisation d'études et de recherches dans le domaine des déchets et des pollutions industrielles.

Les membres de ce réseau (groupes industriels et organismes publics) définissent collégalement des programmes d'études et de recherche adaptés à leurs besoins. Ces programmes sont ensuite confiés à des laboratoires publics ou privés.

Avertissement :

Les rapports ont été établis au vu des données scientifiques et techniques et d'un cadre réglementaire et normatif en vigueur à la date de l'édition des documents.

Ces documents comprennent des propositions ou des recommandations qui n'engagent que leurs auteurs. Sauf mention contraire, ils n'ont pas vocation à représenter l'avis des membres de RECORD.

- ✓ Pour toute reprise d'informations contenues dans ce document, l'utilisateur aura l'obligation de citer le rapport sous la référence :  
**RECORD**, Conditions de destruction thermique des déchets industriels, 1996, 530 p, n°94-0211/1A.
- ✓ Ces travaux ont reçu le soutien de l'ADEME (Agence de l'Environnement et de la Maîtrise de l'Energie)  
[www.ademe.fr](http://www.ademe.fr)

© RECORD, 1996

Etude RECORD n°94-0211/1A



**ETUDE N° 94-0211/1A**

**RAPPORT FINAL  
Tome I**

**CONDITIONS DE DESTRUCTION THERMIQUE DES  
DECHETS INDUSTRIELS**

**février 1996**

**G. ANTONINI** - Université de Technologie de Compiègne

# SOMMAIRE

---

## RÉSUMÉ

### CHAPITRE 1

#### **LES BASES THERMODYNAMIQUES ET CINÉTIQUES DU PROCESSUS D'INCINÉRATION**

1- ENTHALPIE MOLAIRE DE RÉACTION - POUVOIR CALORIFIQUE (PRESSION CONSTANTE) TEMPÉRATURE ADIABATIQUE (DE FLAMME)

2- ÉQUILIBRES THERMODYNAMIQUES EN COMBUSTION ET CINÉTIQUE RÉACTIONNELLE

- a) Les équilibres
- b) Cinétique réactionnelle

### CHAPITRE 2

#### **CONDITIONS D'INFLAMMATION ET DE DESTRUCTION THERMIQUE DES GAZ OU VAPEURS ORGANIQUES**

#### **LIMITES D'INFLAMMABILITE - TEMPERATURE D'AUTO -INFLAMMATION DELAIS D'IGNITION - $T_{99,99}$ [2] - D.R.E -**

1- LIMITES D'INFLAMMATION  $L_L$ ,  $L_S$  DE MÉLANGES VAPEURS/AIR EN PRÉSENCE D'UNE SOURCE EXTERNE D'IGNITION

2- GAZ OU VAPEURS (EN MÉLANGE OU NON AVEC L'AIR) EN MODE D'INFLAMMATION SPONTANÉE. TEMPÉRATURES D'AUTO-INFLAMMATION

3- COMBUSTION DES GAZ ET VAPEURS EN SYSTÈME OUVERT - TAUX DE CONVERSION - DÉLAIS D'INFLAMMATION

4- DÉGRADATION THERMIQUE EN RÉACTEUR OUVERT SANS FLAMME. STABILITÉ THERMIQUE  $T_{99,99}$  [2] ET DRE

### CHAPITRE 3

#### **CONDITIONS D'INFLAMMATION ET DE COMBUSTION DES LIQUIDES**

#### **POINT ÉCLAIR-TEMPÉRATURES LIMITES D'INFLAMMABILITE**

#### **PULVÉRISATION-TEMPS CARACTÉRISTIQUES (VAPORISATION/COMBUSTION)**

1- INFLAMMATION DES LIQUIDES AU REPOS

- a) Point éclair - Corrélations
- b) Combustion auto-entretenu à la surface libre d'un liquide

2- INFLAMMATION DES LIQUIDES DISPERSÉS

- a) Pulvérisation des liquides - Tailles des gouttes obtenues
- b) Vaporisation/Combustion de gouttes liquides et de spray

#### **CHAPITRE 4**

##### **CONDITIONS D'INFLAMMATION ET DE COMBUSTION DES SOLIDES**

##### **TEMPERATURE D'INFLAMMATION - DELAIS D'IGNITION - PARAMETRES TRP ET CHF - TEMPS DE PYROLYSE - TEMPS DE COMBUSTION**

#### **1- PROCESSUS DE DECOMPOSITION PYROLYTIQUE. TEMPERATURE DE PYROLYSE**

- a) Cinétique de pénétration de la chaleur
- b) Temps de pyrolyse  $t_p$
- c) Nature de gaz émis et du résidu

#### **2- PROCESSUS D'INFLAMMATION, CRITERE TRP ET DELAIS D'INFLAMMATION**

#### **3- COMBUSTION/ INCINÉRATION DES SOLIDES CARBONÉS**

- a) Processus de diffusion externe
- b) Processus réactionnel chimique
- c) Cas mixte

#### **CHAPITRE 5**

##### **LES CONDITIONS REACTIONNELLES DE LA DESTRUCTION THERMIQUE**

#### **1- COMPARAISON DES PERFORMANCES D'ENCEINTES DE DESTRUCTION THERMIQUE EN ECOULEMENT PISTON OU RPA**

#### **2- CAS D'UNE HYDRODYNAMIQUE INTERNE QUELCONQUE**

#### **CHAPITRE 6**

##### **INCINERABILITE**

##### **FONCTIONNEMENTS DEGRADEES**

#### **1- PARAMETRES INTRINSEQUES DU CONSTITUANT PRINCIPAL A DETRUIRE**

#### **2- PARAMETRES EXTRINSEQUES (PARAMETRES OPERATOIRES)**

- a) Conditionnement des produits à détruire
- b) Le contrôle des conditions réactionnelles

#### **3- FONCTIONNEMENTS DEGRADEES (PATHOLOGIQUES)**

- a) Défauts d'identification des espèces à détruire
- b) Défauts de composition/ préparation du déchet entrant
- c) Défauts de fragmentation/pulvérisation
- d) Défauts dans la zone RPA
- e) Défauts dans la zone piston

#### **4- VERS DES CRITÈRES GLOBAUX D'INCINÉRABILITÉ**

## **ANNEXE 1**

### ***NOMENCLATURE DES DECHETS INDUSTRIELS***

- 1- LES DECHETS INDUSTRIELS
- 2- CLASSIFICATION SELON L'ETAT PHYSIQUE
- 3- CLASSIFICATION SELON LA NATURE CHIMIQUE
- 4- CLASSIFICATION SELON LE POUVOIR CALORIFIQUE
- 5- AUTRE CLASSIFICATION, SELON LE CARACTERE DANGEREUX
  - 5-1- Classification selon le critère de danger
  - 5-2- Constituants de base contenus dans les déchets dangereux

## **ANNEXE 2**

### ***COMPATIBILITE DES DECHETS STOCKAGE/MELANGE***

- 1- LE STOCKAGE DES DECHETS
  - 1-1- Les déchets liquides
  - 1-2- Les déchets solides
- 2- PROBLEMES POSES PAR LE STOCKAGE/MELANGE DES DECHETS
  - 2-1- Toxicité et instabilité des déchets seuls
  - 2-2- Incompatibilité des déchets/mélanges
- 3- LE CRITERE D'EXPLOSIVITE
- 4- COMPATIBILITE DES DECHETS
  - 4-1- Les groupes de réactivité
  - 4-2- Combinaison entre groupes de réactivité

## **ANNEXE 3**

### ***MECANISMES REACTIONNELS EN INCINERATION***

- 1- LE MECANISME REACTIONNEL DE LA COMBUSTION
- 2- INFLUENCE DES RADICAUX SUR LA COMBUSTION
- 3- INFLUENCE DE LA COMPOSITION REACTIFS-COMBURANT, LIMITES D'INFLAMMABILITE
- 4- INFLUENCE D'ADDITIFS SUR LA COMBUSTION
- 5- LES DIFFERENTS ELEMENTS STRUCTURAUX INFLUENÇANT LA COMBUSTIBILITE
- 6- ETUDE DE CAS SPECIFIQUES
  - 6-1- Les composés saturés
  - 6-2- Les composés insaturés

## **ANNEXE 4**

### ***FICHES DECHET***

## *RÉSUMÉ*

---



Cet ouvrage vise à faire le point des connaissances actuelles concernant les conditions de destruction thermique des déchets industriels.

Dans un premier chapitre, on passe en revue les bases thermodynamiques et cinétiques du processus de destruction thermique lui-même, c'est-à-dire les données concernant les chaleurs de réactions, les pouvoirs calorifiques des déchets, ainsi que les principales grandeurs caractéristiques des processus de combustion à savoir, demande en air (pouvoir comburivore), volume spécifique de fumées produites (pouvoir fumigène) qui conduisent à la notion de température adiabatique de flamme, caractéristique des déchets eux mêmes, c'est-à-dire de leur composition élémentaire mais aussi de leur humidité initiale.

On indique les principaux équilibres thermodynamiques applicables en combustion ainsi que les données de base concernant les cinétiques réactionnelles des réactions mises en jeu. On a en particulier reporté en annexe trois, une description plus détaillée de ces processus réactionnels en combustion, avec leurs étapes élémentaires mettant en jeu des processus radicalaires. Une attention particulière a été apportée à regrouper les études récentes concernant la combustion des composés saturés (hydrocarbures halogénés, par exemple) et insaturés (solvants chlorés, aromatiques...).

Tout processus d'incinération est précédé d'une étape de vaporisation pour les composés liquides ou de pyrolyse pour les composés solides. Cette étape conduit donc à la formation de gaz ou vapeurs organiques dont l'émission conditionne en grande partie l'inflammabilité des composés.

On étudie dans le second chapitre les limites d'inflammation  $L_i$  et  $L_s$  de mélanges vapeur/air en présence d'une source externe d'ignition ou par auto-inflammation spontanée. Une corrélation récente entre la limite inférieure d'inflammabilité et l'enthalpie de combustion ( $\Delta H_c$ ), valable pour un grand nombre de composés organiques, est fournie.

Ainsi, on pourra avoir une première indication de l'inflammabilité d'un corps solide ou liquide, si celui-ci, lors d'un traitement thermique émet des vapeurs ou des gaz (pyrolyse) à PCI élevés, donc à limite d'inflammabilité basse. En effet, très tôt lors du processus de chauffage du composé, celui ci fournira une concentration suffisante en gaz ou vapeurs dans l'air avoisinant, entraînant une inflammation du mélange en présence d'une source externe d'énergie (flamme pilote, étincelle...).

L'intervalle d'inflammabilité des gaz ou vapeurs croît avec la température. Quand on augmente encore la température cette tendance s'accroît ( $L_i$  décroît fortement et  $L_s$  croît avec la température), de sorte qu'on peut atteindre un niveau de température critique où le mélange s'enflamme quelque soit sa concentration dans l'air, il y a alors auto-inflammation ;

celle-ci ne nécessite plus de source externe d'inflammation. Cette température critique définit ainsi un critère intrinsèque du déchet, à savoir, sa température d'auto-inflammation  $T_{ai}$ . Ces données ( $\Delta H_C$ ,  $L_i$ ,  $L_s$ ,  $T_{ai}$ ) sont fournies pour un grand nombre de composés.

Dans la pratique, la destruction thermique des composés indésirables doit être réalisée en continu, en système ouvert. L'aspect cinétique des réactions mises en jeu joue donc un rôle primordial. Le rendement de dégradation des composés à détruire est directement lié au taux de conversion des espèces pendant leur temps de séjour dans l'enceinte réactionnelle.

La prise en compte des limitations cinétiques au processus permet alors de définir la notion de délai d'inflammation  $t_{ig}$ , comme limite inférieure du temps de séjour nécessaire à l'inflammation d'une espèce dans une enceinte à température donnée. Ces délais peuvent devenir particulièrement longs pour des molécules de type benzène ou propylène, par exemple.

On introduit le paramètre dit de DRE (Destruction/Removal Efficiency) équivalent à un rendement de destruction d'espèce par incinération. Ainsi, par exemple, si  $DRE = 99,99 \%$ , la concentration de l'espèce indésirable en sortie n'est plus que le 10 millième de sa valeur initiale. La notion de température minimum  $T_{99,99}$  ( $t_s$ ) nécessaire à la destruction des espèces à  $99,99 \%$  pour un temps de séjour  $t_s$  donné est précisée à partir des données cinétiques, et ce pour un grand nombre de composés.

On donne une corrélation qui permet le calcul des températures  $T_{99,90}$  et  $T_{99,99}$  pour un temps de séjour  $t_s$  variable, et ce en fonction de grandeurs caractéristiques des espèces (température d'auto-inflammation, structure moléculaire...). Il apparaît par exemple, toutes choses étant égales par ailleurs, que les composés à fortes températures d'auto-inflammation  $T_{ai}$  auront des  $T_{99,99}$  élevés, indiquant que la température d'auto-inflammation est bien un critère de classement possible des molécules vis à vis de leur aptitude à la destruction thermique.

La prise en compte de ces notions pour la définition des conditions d'inflammation des liquides est discutée au chapitre trois.

On précise en particulier le critère de point éclair, température minimale  $T_f$  à laquelle il faut porter un liquide pour que les vapeurs émises s'enflamment en présence d'une source externe. Ce critère est valable pour des liquides vaporisables au repos. Le point éclair ne peut pas être corrélé simplement à la température d'auto-inflammation  $T_{ai}$  du gaz formé par vaporisation de ce liquide. Néanmoins, bien qu'il ne définisse guère une donnée absolue caractéristique d'un liquide donné, on considère qu'il donne une échelle de comparaison entre différents liquides vis à vis du critère d'inflammabilité.

On introduit également un critère (Spalding) pour la combustion entretenue d'un liquide. Ce point désigné par  $T_{fl}$  ( $T_{fl} > T_f$ ), indique qu'une partie de l'énergie libérée par l'inflammation (à  $T_f$ ) est consommée pour vaporiser en retour le liquide et maintenir au dessus de sa surface, une concentration du mélange vapeur/air supérieure ou égale à la limite inférieure d'inflammabilité des vapeurs du composé.

Une attention particulière, concernant l'inflammation des liquides est réservée au cas où ceux-ci sont préalablement dispersés (spray) avant leur inflammation, ce qui permet d'améliorer la vitesse globale de combustion du liquide par accroissement de la surface spécifique du liquide en contact avec le gaz comburant.

Cette approche permet de préciser l'ensemble des paramètres permettant leur inflammation et en particulier les temps nécessaires à leur combustion complète jusqu'à la disparition par vaporisation/combustion des gouttes formées par pulvérisation/atomisation (mécanique ou assistée).

En outre, cette approche permet d'introduire un critère récent d'inflammation valable pour les dispersions, soit le SFP (Spray Flammability Parameter) qui met en évidence un flux critique en deça duquel l'inflammation d'une dispersion liquide/air n'est plus possible, lorsque ce spray est soumis à un flux thermique radiatif en présence d'une flamme pilote.

Dans le quatrième chapitre, on étend les données précédentes au cas de l'inflammation des solides, qui se trouve précédée d'une étape de pénétration de la chaleur, suivie d'une étape de décomposition thermique avec libération de gaz ou vapeurs (processus de pyrolyse) conduisant à leur inflammation.

L'énergie calorifique générée par l'inflammation des gaz peut entretenir le processus de pyrolyse conduisant à une combustion auto-entretenu du solide. Simultanément un front de pyrolyse se propage à l'intérieur du matériau définissant ainsi, pour un matériau de dimension finie, un temps caractéristique de pyrolyse. Le résidu carboné (coke) ainsi formé peut brûler par oxydation de surface, définissant un temps de combustion du solide carboné ainsi formé.

Des méthodes de caractérisation de l'inflammabilité de composés solides sont données. Leur point commun est de soumettre un échantillon test à un flux de chaleur externe imposé (rayonnement externe, convection externe, chauffage par une flamme impactant sur l'échantillon) et de détecter le temps nécessaire à l'inflammation de l'échantillon.

On précise les limitations diffusionnelles d'un tel processus et on introduit les critères couplés de TRP (Thermal Response Parameter) prenant en compte l'inertie thermique du matériau et celui de délai d'inflammation, ce qui permet, indépendamment du pouvoir calorifique du solide, de préciser sa combustibilité sous l'effet d'un apport externe d'énergie. Cette analyse du délai d'inflammation en fonction du flux imposé pour différentes valeurs de TRP montre l'existence d'un flux critique (CHF) en deçà duquel l'inflammation du solide n'est plus possible. Par ailleurs, de grandes valeurs du paramètre TRP indiquent des matériaux peu inflammables. Par exemple, des résines thermodurcissables ont des TRP plus élevés que des plastiques thermoformables. De même, la présence de composés halogénés augmentent le TRP.

La combustion du solide carboné résultant du processus de pyrolyse est décrite ainsi que sont précisés les temps caractéristiques de combustion complète dans les cas où les processus de diffusion externe sont dominants ou dans ceux où l'on observe une limitation réactionnelle.

Le chapitre cinq est consacré à la classification des conditions réactionnelles des processus de destruction thermique, l'ensemble des données physico-chimiques et cinétiques ayant été précisées précédemment pour les composés indésirables sous forme aussi bien gazeuse que liquide ou solide.

Cette analyse vise à montrer le rôle crucial joué par la distribution des temps de séjour (DTS) des espèces dans l'enceinte de destruction thermique. Ceci permet d'envisager, par mesure de la DTS d'une enceinte, c'est-à-dire par une caractérisation de l'hydrodynamique interne globale d'un incinérateur, de prévoir les taux de conversion des espèces à cinétiques de destruction chimique connues par ailleurs.

La détermination pratique de la DTS représentée par la fonction  $E(t)$  est réalisée par technique de traçage (injection impulsionnelle ou échelon). Cette fonction apparaît comme une densité de probabilité pour les éléments fluides qui séjournent dans l'enceinte.

Dans un réacteur réel, l'hydrodynamique interne impose une distribution des temps de séjour spécifique, intermédiaire entre deux cas idéaux : un écoulement purement piston (RP) et un réacteur parfaitement agité (RPA). Les fonctions  $E(t)$  déterminées expérimentalement peuvent être modélisées par des associations adaptées de réacteurs RPA ou RP, en parallèle et/ou en série. Ces fonctions peuvent être utilisées pour la prévision des taux de destruction des espèces à coefficients cinétiques connus.

Cette analyse doit permettre de rendre plus réaliste les conditions fixées actuellement par une règle dite des 3 T (température, turbulence, temps de séjour).

On a reporté en chapitre six une discussion sur l'ensemble des paramètres d'un déchet permettant de définir son incinérabilité en relation avec les paramètres extrinsèques (paramètres opératoires) liés au conditionnement préalable des déchets et au contrôle des conditions réactionnelles adaptées. L'ensemble de ces paramètres définit l'incinérabilité intrinsèque des composés. Ils permettent un classement des produits vis-à-vis de leurs aptitudes intrinsèques à la destruction thermique.

Il faut remarquer que, malgré de nombreuses préconisations, nous excluons le critère basé sur le pouvoir calorifique PCI du composé (ou sur la chaleur de formation  $\Delta H$ ), en tant que critère intrinsèque.

Le point flash donne plutôt une indication sur le délai d'ignition qui dépend de critères extrinsèques, mais n'est pas directement lié à la capacité de maintenir une flamme auto-entretenu.

Le meilleur critère intrinsèque semble être la température d'auto-inflammation ( $T_{ai}$ ), très bien corrélée à la destructibilité du produit par voie thermique (critère temps/température). Ce critère présente l'avantage d'être une donnée largement disponible dans la littérature, contrairement aux  $T_{99,99}$  (2). Il permet le classement des composés dangereux. On présente dans l'étude un tel classement basé sur la liste des principaux constituants dangereux.

On fait ensuite une description détaillée des principales pathologies rencontrées dans les processus de destruction thermique allant des défauts d'identification des espèces à détruire, aux manques d'homogénéisation/préparation du déchet en passant par les défauts de fragmentation/pulvérisation ainsi que par les pathologies des distributions des temps de séjour des différentes zones de destruction réactionnelle (zones mortes, poches pyrolytiques, court-circuit...).

A l'aide d'exemples, on illustre les fonctionnements dégradés ou pathologiques évoqués précédemment.

Ainsi, il apparaît que la simple prise en compte du composant majoritaire ne suffit pas à fixer les constantes de temps et température nécessaires à une destruction du déchet. C'est sur le composé le plus récalcitrant que doit être bâtie la stratégie d'incinération ; d'où l'intérêt des tentatives de hiérarchisation des composés évoquées précédemment. On voit également que la classification en taille et de pseudo-homogénéisation est susceptible d'uniformiser les conditions de combustion, minimisant ainsi la formation de composés intempestifs par "bouffées". De même, on voit que des conditions dégradées peuvent résulter d'effets souvent jugés du second ordre (quelques grosses gouttes dans le spray). On peut en voir directement, la conséquence sur l'efficacité globale de destruction, par calcul des DRE de chaque zone de l'enceinte réactionnelle, et ce pour différents composés jugés dangereux.

Enfin, on a reporté en annexe un, différentes classifications disponibles pour les déchets. On aborde en annexe deux, les questions liées au stockage des déchets avant incinération ainsi que les problèmes posés par leur instabilité (explosivité) et par leur compatibilité en mélange (combinaison entre groupes de réactivité).

L'ensemble de l'ouvrage vise à démontrer qu'une bonne maîtrise des processus de destruction thermique est liée à la connaissance d'un certain nombre de paramètres intrinsèques autres que le seul pouvoir calorifique du déchet (température d'auto-inflammation, T<sub>99,99</sub> (2) ...) représentatifs des composés à détruire en relation avec un certain nombre de critères concernant aussi bien les conditions réactionnelles, que leur mise en contact ou leur temps de séjour effectif dans le champ des températures des enceintes réactionnelles.

L'ensemble des paramètres mis en évidence dépend peu des technologies spécifiques ou de la nature des fours utilisés pour le processus de destruction thermique. C'est pourquoi nous nous sommes contentés de réunir, dans un ensemble de fiches déchet les critères intrinsèques à appliquer au cas par cas selon chaque technologie utilisée. Bien sûr, la réalité de la maîtrise des conditions réactionnelles devrait pouvoir être évaluée par mesure directe des distribution des temps de séjour dans les enceintes réactionnelles. Ces techniques, en cours de développement, ne sont malheureusement pas disponibles actuellement sur le marché et doivent faire l'objet de travaux spécifiques.

## **CHAPITRE 1**

### **LES BASES THERMODYNAMIQUES ET CINÉTIQUES DU PROCESSUS D'INCINÉRATION**

---

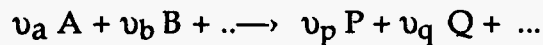
1- ENTHALPIE MOLAIRE DE RÉACTION - POUVOIR CALORIFIQUE  
(PRESSION CONSTANTE) TEMPÉRATURE ADIABATIQUE (DE FLAMME)

2- EQUILIBRES THERMODYNAMIQUES EN COMBUSTION ET CINÉTIQUE  
RÉACTIONNELLE

- a) Les équilibres
- b) Cinétique réactionnelle

## 1 - Enthalpie molaire de réaction. Pouvoir calorifique (pression constante) Température adiabatique (de flamme)

Soit une réaction complète de type :



On définira l'enthalpie de cette réaction par la relation [1] :

$$\Delta H_{298} = \sum \Delta H_{\text{produits}} - \sum \Delta H_{\text{réactifs}} \quad (\text{kJ mol}^{-1})$$

L'énergie calorifique libérée par combustion complète dans l'air normal, ramenée à l'unité de masse ou à l'unité de volume, est désignée par pouvoir calorifique du déchet ou combustible.

Pour les déchets solides ou liquides de composition élémentaire :

C, H, O, S, N, E, K

avec C, H, O, S, N représentant la teneur élémentaire du déchet respectivement en carbone, hydrogène, oxygène, soufre et azote  
E l'humidité initiale du déchet  
K sa teneur en matériaux stériles

On pourra faire une distinction fondamentale entre le pouvoir calorifique supérieur PCS et le pouvoir calorifique inférieur PCI du déchet, en considérant dans l'évaluation du PCI que la chaleur nécessaire à la formation de l'eau en phase vapeur ( $\text{H}_2 + \frac{1}{2} \text{O}_2 \rightarrow \text{H}_2\text{O}$ ) ou par la vaporisation de l'humidité initiale est perdue, de sorte que :

$$\text{PCS} - \text{PCI} = 6 (9 \text{H} + \text{E}) \quad (\text{kcal/kg})$$

Dans un grand nombre de cas, le PCS du solide peut être évalué par corrélation ou mesure directe en bombe calorimétrique.

Par exemple, signalons la formule de Vandralek, valable pour des solides fortement carbonés (kcal/kg)

$$\text{PCS} = [78,6 + 2,8 (100 - \text{C})^{0,25}] \text{C} + 215 (\text{H} - 0,10) + 25 \text{S}$$

Dans le cas des combustibles gazeux, de composition volumétrique centésimale donnée  $x_i$ , on effectuera un calcul du PCS ou du PCI par moyenne pondérée des pouvoirs calorifiques élémentaires :

$$\text{PCI} = \sum_i x_i \text{PCI}_i$$



Les demandes en air nécessaires à une combustion neutre (stoechiométrique complète) sont désignées par pouvoir comburivore  $V_A$  ( $\text{Nm}^3/\text{kg}$  ou  $\text{Nm}^3/\text{Nm}^3$ ) et se calculent à partir de la composition élémentaire du combustible.

En cas d'utilisation d'excès d'air « e » on aura :

$$V'_A = V_A \left(1 + \frac{e}{100}\right)$$

De même, le volume spécifique de fumées générées par la combustion complète de l'unité de quantité de combustible sera désignée par pouvoir fumigène  $V_F$  ( $\text{Nm}^3/\text{kg}$  ou  $\text{Nm}^3/\text{Nm}^3$ ). En cas d'excès d'air, ce volume devient :

$$V'_F = V_F + \frac{e}{100} V_A.$$

Ces grandeurs permettent d'évaluer une caractéristique intrinsèque au déchet, à savoir la température adiabatique de flamme  $T_A$  par bilan d'enthalpie entre le produit et les fumées générées :

$$B \text{ PCI} = \dot{Q}_f \int_0^{T_A}$$

où  $B$  est le débit massique de combustible de PCI donné et  $\dot{Q}_f$  la puissance récupérée sur les fumées générées (conditions adiabatiques) qui dépend donc du débit de fumées et de leur chaleur spécifique moyenne.

Cette température adiabatique peut être relevée en cas de PCI faible par préchauffage de l'air comburant :

$$\dot{Q}_{\text{air}} \int_0^T + B \text{ PCI} = \dot{Q}_f \int_0^{T_A} \quad \text{avec } T_A > T_A$$

Cette température est diminuée par l'existence d'un puits radiatif  $\dot{Q}_R$  en vis à vis du foyer (tubes d'eau par exemple) :

$$B \text{ PCI} = \dot{Q}_f \int_0^{T_A} + \dot{Q}_R \quad \text{avec } T_A < T_A.$$

Cette température peut enfin être relevée par suppression du ballast azote de l'air, c'est-à-dire en combustion sous oxygène pur.

Le débit de fumées à la température  $T$  pourra être évalué comme :

$$Q_v = B \left( \frac{T}{T_0} \right) V'_F$$

permettant l'estimation d'un temps de passage  $\tau$  dans une enceinte :

$$\tau = \left( \frac{V}{Q_v} \right)$$

On a reporté dans le tableau suivant les principales caractéristiques de combustion stoechiométrique de différents composés [2] :

COMBUSTION STOECHIMÉTRIQUE						
Pouvoir calorifique ( <sup>1</sup> ) P <sub>cl</sub> (ou I <sub>p</sub> ) kJ/kg. Pouvoir comburivore m <sup>3</sup> air/kg Volume des fumées m <sup>3</sup> fumées/kg Température de flamme °C						
Corps	Formule chimique	P <sub>cl</sub> kJ/kg	Pouvoir comburivore m <sup>3</sup> /kg	Volume des fumées m <sup>3</sup> /kg	Température de flamme °C	
Hydrogène .....	H <sub>2</sub>	15 871	28,47	35,11	1 430	
Oxyde de carbone .....	CO	10 076	2,04	2,47		
Acétaldéhyde .....	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> O	24 512	6,49	7,30	2 590	
Acétate d'éthyle .....	C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> O <sub>2</sub>	23 507	6,49	7,30		
Acétate de méthyle .....	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> O <sub>2</sub>	7 870	5,40	6,21		
Acétoène .....	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> O	31 377	8,70	7,492		
Acétylène .....	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>	44 281	11,4	11,4		
Acide acétique .....	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	13 137	3,80	4,60		
Acroléine .....	C <sub>3</sub> H <sub>4</sub> O	27 518	7,14	7,78		
Alcool éthylique .....	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> O	26 982	7,45	8,48		
Alcool méthylique .....	CH <sub>3</sub> O	19 582	5,36	6,36		
Alcool propylique .....	C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> O	30 536	8,55	9,56		
Corps	Formule chimique	P <sub>cl</sub> kJ/kg	Pouvoir comburivore m <sup>3</sup> /kg	Volume des fumées m <sup>3</sup> /kg	Température de flamme °C	
Alcool isopropylique .....	C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> O	30 139	8,55	9,56	1 970 1 973	
Aniline .....	C <sub>6</sub> H <sub>7</sub> N	34 830	9,51	10,1		
Anthracène .....	C <sub>14</sub> H <sub>10</sub>	38 665	10,6	10,9		
Benzène .....	C <sub>6</sub> H <sub>6</sub>	40 226	11,0	11,4		
Butane .....	C <sub>4</sub> H <sub>10</sub>	45 060	12,8	13,8		
Isobutane .....	C <sub>4</sub> H <sub>10</sub>	45 427	12,8	13,8		
Butanol (alcool butylique) .....	C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> O	33 091	9,25	10,2		
Chloroforme .....	CHCl <sub>3</sub>	2 941	0,96	1,36		
Chlorure d'éthyle .....	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> Cl	18 839	5,75	6,00		
Chlorure de méthyle .....	CH <sub>3</sub> Cl	13 302	3,40	4,12		
Diphényls .....	C <sub>12</sub> H <sub>10</sub>	39 116	10,7	11,1	1 560 2 357	
Éthane .....	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	46 880	13,3	14,5		
Éther éthylique .....	C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> O	33 831	9,25	10,2		
Éther méthylique .....	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> O	28 709	7,45	8,48		
Éthylène .....	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	46 346	12,2	13,1		
Hexane .....	C <sub>6</sub> H <sub>14</sub>	44 502	12,6	13,6		
Corps	Formule chimique	P <sub>cl</sub> kJ/kg	Pouvoir comburivore m <sup>3</sup> /kg	Volume des fumées m <sup>3</sup> /kg		Température de flamme °C
Méthane .....	CH <sub>4</sub>	49 527	14,3	15,8		1 957
Pentane .....	C <sub>5</sub> H <sub>12</sub>	44 688	12,7	13,7		2 176 1 980 2 054 2 043
Propadiène .....	C <sub>3</sub> H <sub>4</sub>	43 394	11,4	12,0		
Propane .....	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	45 966	13,0	14,1		
Propylène (propène) .....	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub>	45 794	12,2	13,1		
Cyclo-propane .....	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub>	46 271	12,2	13,1		
Toluène .....	C <sub>7</sub> H <sub>8</sub>	35 985	11,1	11,7		
Xylène .....	C <sub>8</sub> H <sub>10</sub>	40 865	11,3	11,8		

De même on indique les pouvoirs calorifiques moyens de déchets industriels courants [2] :

POUVOIR CALORIFIQUE INFÉRIEUR DE DÉCHETS SOLIDES				
Type de déchets	Pouvoir calorifique inférieur kJ/kg	Remarques		
Déchets Caoutchouc	Elastomère pur	39 000	Suivant que la carcasse est métallique ou en tôle	
	Vieux caoutchouc	13 400		
	Déchets industriels	21 000 à 39 000		
	Pneus usés	25 000 à 31 000		
Carton	Carton ordinaire	15 500 à 16 700		Suivant source
	Emballage lait	26 300		
	Cuir (déchets)	18 400		
Feutre		16 800		
		23 000 à 23 400		
Linoléum	21 000 à 25 500			
Matières Plastiques	Polychlorure de vinyle	10 850		
	Polyuréthane	18 545		
	PVC rigide	20 900		
	PVC souple	22 000		
	Déchets de PVC	19 900		
	Néoprène	25 080		
	ABS	34 780		
	Polystyrène	41 380		
	Polypropylène	41 945		
	Polyéthylène	45 980		
Papier	Déchets	13 400		
	Papier Kraft	16 700		
	Papier goudronné	25 500		
	Papier plastifié	17 300		
	Papier ordinaire	16 400		
	Paraffine	43 500		
Textile Chiffons	Stéarine	39 700		
	Coton	16 700		
	Laine à soie	19 400 à 20 700		

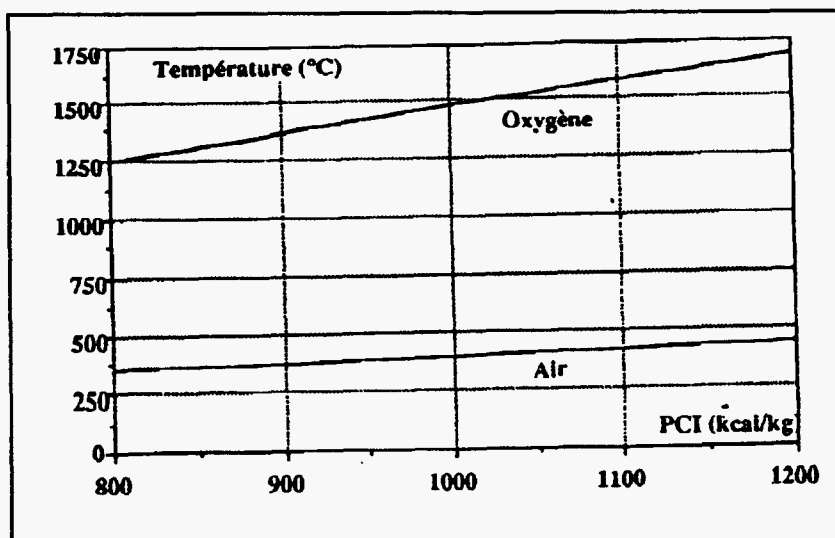
  

POUVOIR CALORIFIQUE INFÉRIEUR DE DÉCHETS LIQUIDES ET PÂTEUX		
Type de déchets	Pouvoir calorifique inférieur kJ/kg	
Cambouis	9 000	
Goudrons	39 700	
Huile	Huile récupération	27 100
	Huile usée	43 800
	Résidus de filtre	16 100
	Boues de stockage	19 600
	Huile de graissage	48 000
	Liquor noire	10 000
	Peinture à vernis (déchets)	18 800
Raffinerie	Résidus de raffinerie produits lourds	23 000 à 25 000
		41 800
Solvants	acétone	28 970
	benzène	28 970
	toluol	35 940
	triméthylamine	37 570

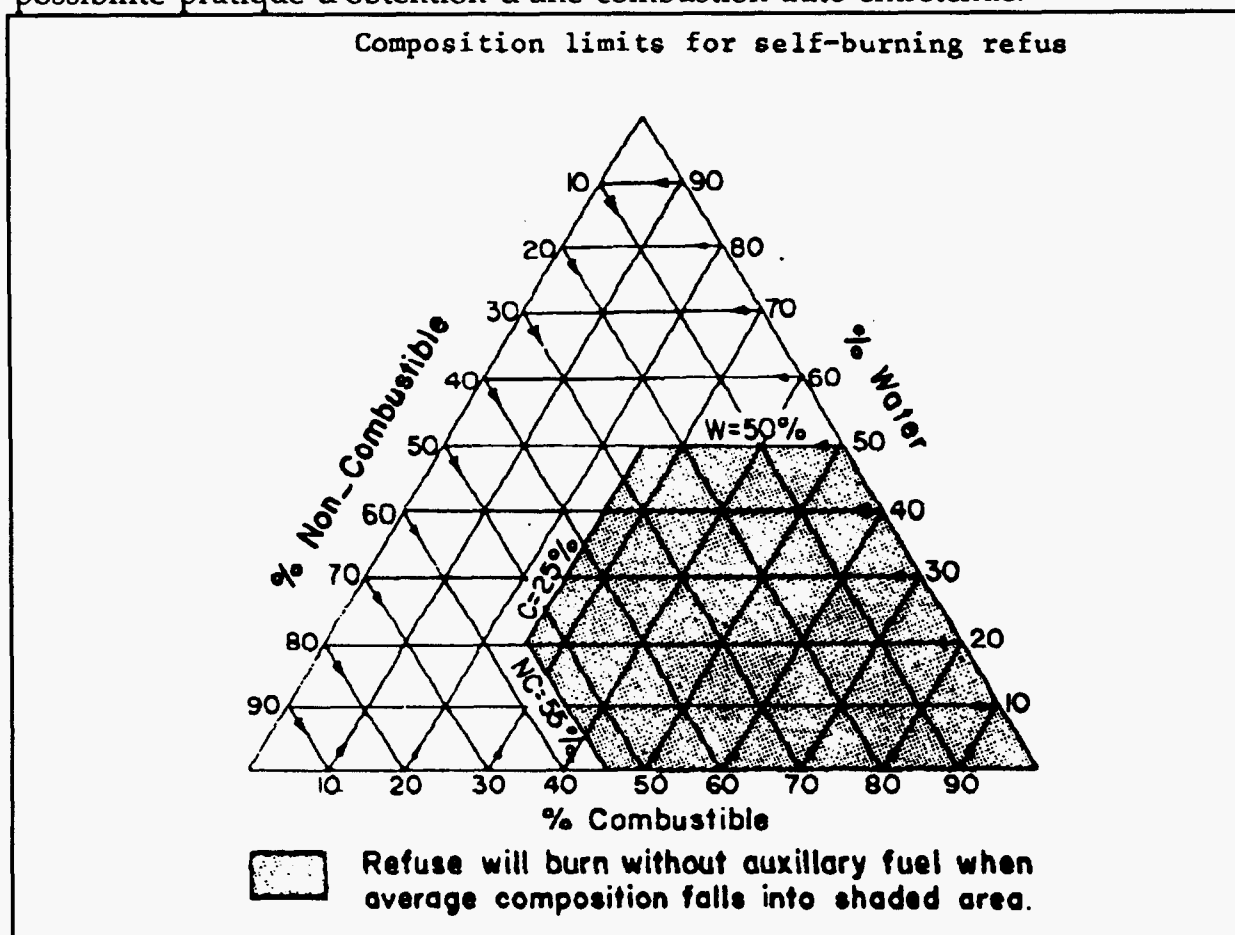
POUVOIR CALORIFIQUE DE DÉCHETS GAZEUX	
Type de déchets	Pouvoir calorifique inférieur kJ/kg
Gaz de four à coke	43 900
Gaz de haut fourneau	2 700
Gaz de raffinerie	50 100
Gaz de CO	1 670

On a représenté dans le cas de composés à faibles PCI dont les températures adiabatiques ne permettent pas leur combustion auto-entretenue dans l'air, le rôle fixé par l'oxygène dans l'élévation de la température adiabatique de combustion.



*Température de flamme en fonction du PCI ;  
comparaison à l'air et à l'oxygène*

Une classification sommaire des déchets suivant leur teneur initiale en eau, en stérile et en matière combustible peut être proposée, en ce qui concerne la possibilité pratique d'obtention d'une combustion auto-entretenue.

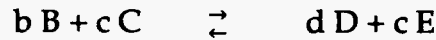


## 2- Equilibres thermodynamiques en combustion et cinétique réactionnelle

### a) Les équilibres

Les réactions sont en fait réversibles et ce, en fonction du niveau de température obtenu.

En phase gazeuse on aura :

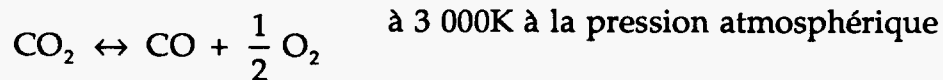
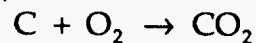


avec des constantes de vitesse  $r$  et  $r'$  :  
 $\rightarrow r = k [B]^b [C]^c$   
 $\leftarrow r' = k' [D]^d [E]^e$

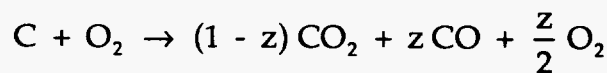
A l'équilibre,  $r = r'$  et la constante d'équilibre  $K_p$  s'écrit :

$$K_p = \frac{k}{k'} = \frac{[D]^d [E]^e}{[B]^b [C]^c}$$

Par exemple, considérons les réactions avec dissociation :



équivalente à :



On peut calculer les fractions molaires des différentes espèces :

$$y_{CO_2} = \frac{1 - z}{1 + \frac{z}{2}} ; y_{CO} = \frac{z}{1 + \frac{z}{2}} ; y_{O_2} = \frac{z/2}{1 + \frac{z}{2}}$$

A une température de 3000 K, la constante  $K_p$  vaut 0,329, soit :

$$K_p = \frac{\left( \frac{z}{1 + \frac{z}{2}} \right) \left( \frac{z/2}{1 + \frac{z}{2}} \right)^{1/2}}{\left( \frac{1 - z}{1 + \frac{z}{2}} \right)} = 0,329$$

d'où une valeur de :  $z = 0,437$

dont on déduit :

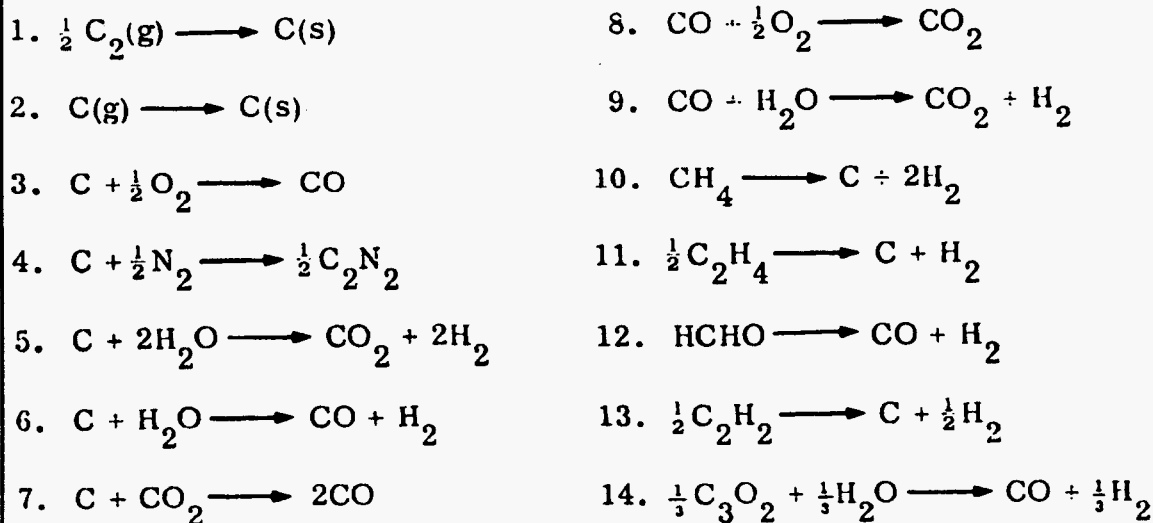
$$y_{CO_2} = 0,46$$

$$y_{CO} = 0,36$$

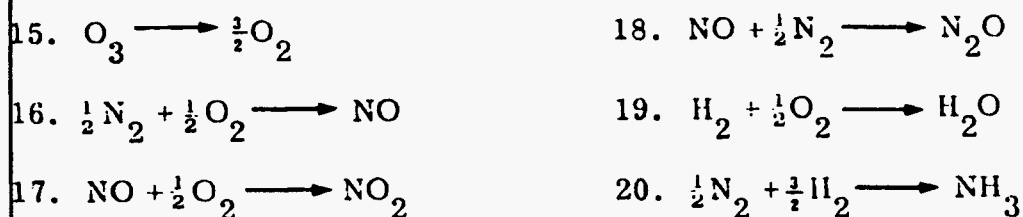
$$y_{O_2} = 0,18$$

Les valeurs des constantes d'équilibre sont disponibles pour un grand nombre de réactions.

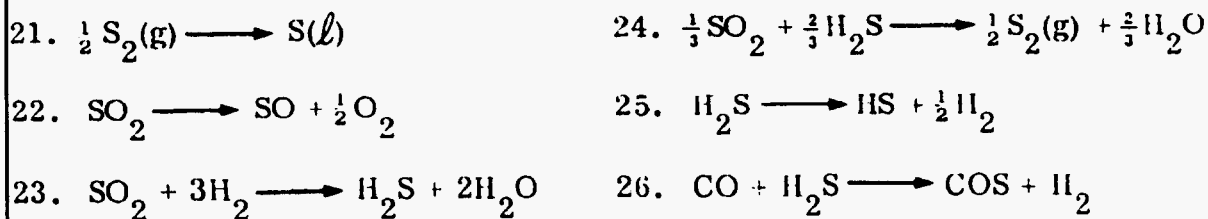
### A. Carbon Reactions



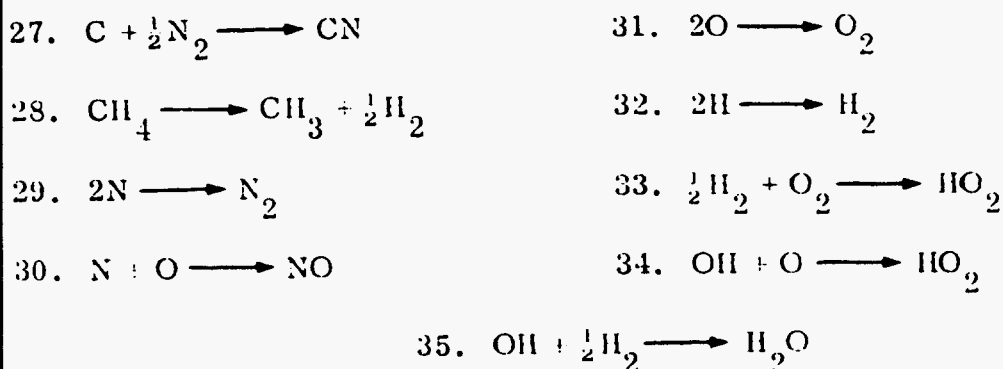
### C. Nitrogen and Oxygen Reactions



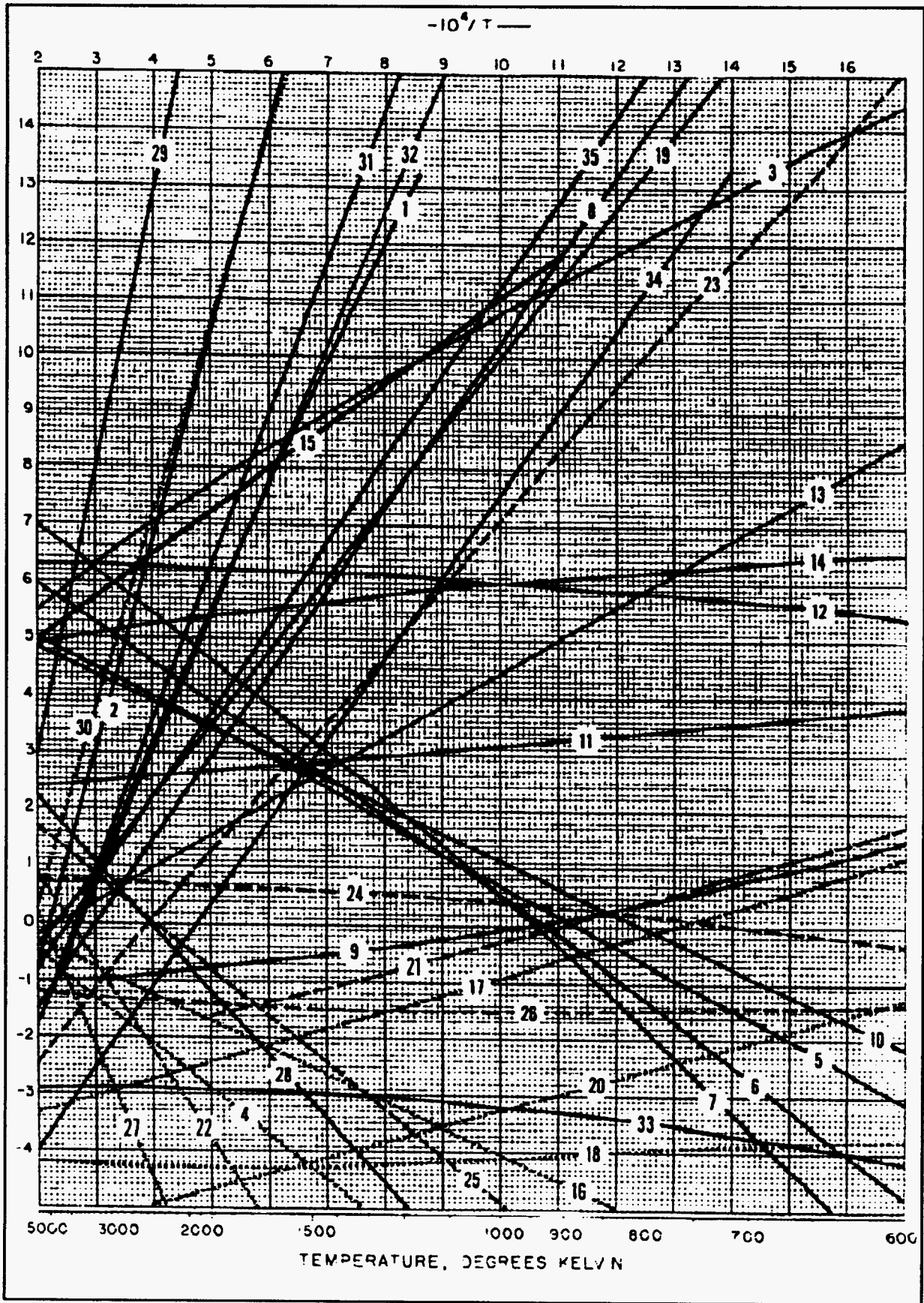
### C. Sulfur Reactions



### D. Radical Reactions



*Principaux équilibres réactionnels à haute température.*



*Constantes d'équilibre à haute température.*

## b) Cinétique réactionnelle

La loi de Vant' Hoff impose :

$$\frac{d \text{Log } K_p}{dT} = \frac{\Delta H}{R T^2}$$

où  $\Delta H$  est la chaleur de réaction.

Cette loi peut s'écrire :

$$\frac{d \text{Log } k}{dT} - \frac{d \text{Log } k'}{dT} = \frac{\Delta H}{R T^2} = \frac{(E - E')}{R T^2}$$

Dans laquelle : E représente l'énergie d'activation dans le sens  $\rightarrow$   
E' représente l'énergie d'activation dans le sens  $\leftarrow$

Ainsi : 
$$\frac{d \text{Log } k}{dT} = \frac{E}{R T^2}$$

D'où, la constante de vitesse k peut s'exprimer sous la forme de la loi d'Arrhenius :

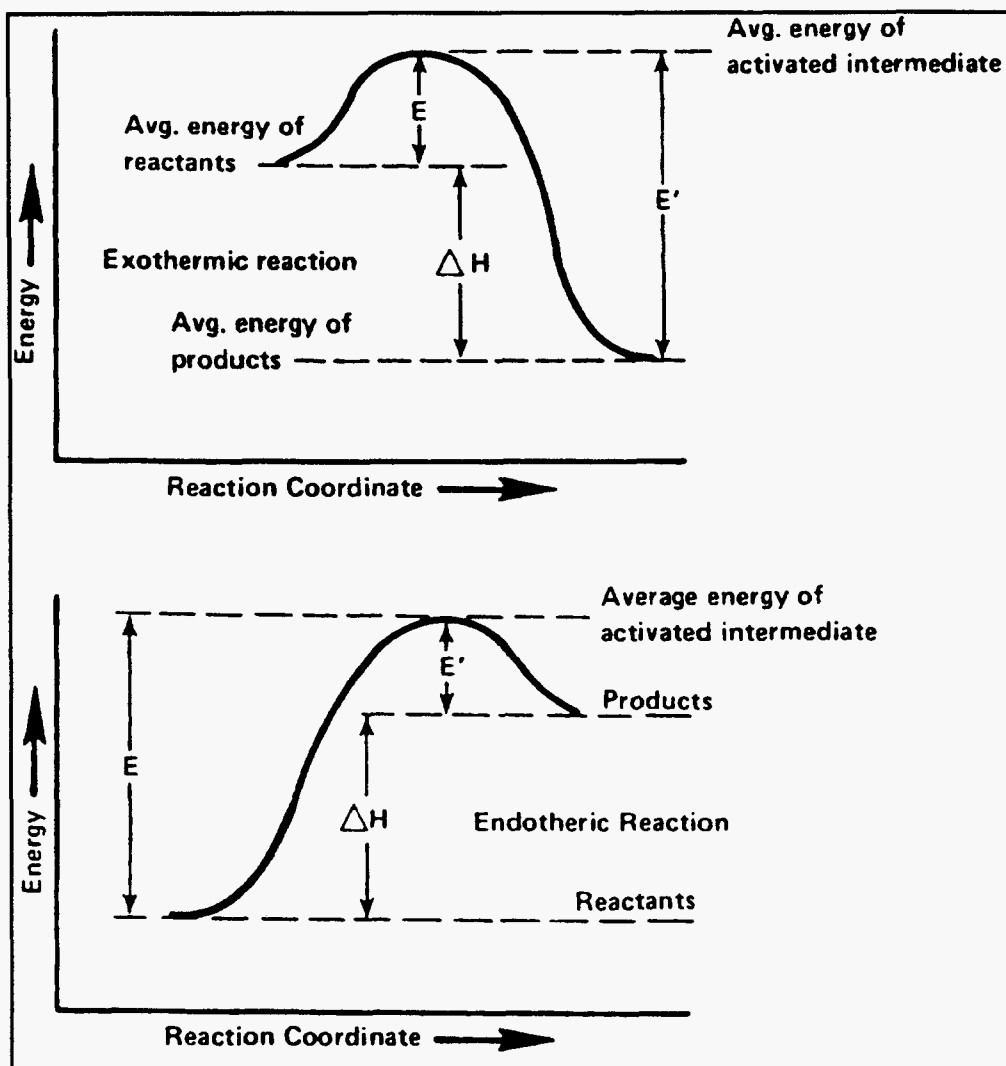
$$k = A e^{-\frac{E}{RT}}$$

introduisant deux paramètres A et E : facteur pré-exponentiel A et énergie d'activation E, et montrant le rôle d'accélération joué par une élévation de température.

Le facteur A est homogène à un facteur de fréquence collisionnel au niveau moléculaire ( $s^{-1}$ )

La constante E (énergie d'activation) joue le rôle d'une barrière de potentiel à la transformation. On illustre ce mécanisme cinétique dans le cas de réactions exothermiques (combustion) ou endothermique (pyrolyse).






---

## REFERENCES

- [1] Fundamentals of Classical Thermodynamics, G.J. Van Wylen, John Wiley, 1978
- [2] Aide Mémoire du Thermicien, IFE ed., 1982

## CHAPITRE 2

### **CONDITIONS D'INFLAMMATION ET DE DESTRUCTION THERMIQUE DES GAZ OU VAPEURS ORGANIQUES LIMITES D'INFLAMMABILITE - TEMPERATURE D'AUTO -NFLAMMATION DELAIS D'IGNITION - T 99,99 [2] - D.R.E -**

---

1- LIMITES D'INFLAMMATION  $L_L$ ,  $L_S$  DE MÉLANGES VAPEURS/AIR EN PRÉSENCE D'UNE SOURCE EXTERNE D'IGNITION

2- GAZ OU VAPEURS (EN MÉLANGE OU NON AVEC L'AIR) EN MODE D'INFLAMMATION SPONTANÉE. TEMPÉRATURES D'AUTO-INFLAMMATION

3- COMBUSTION DES GAZ ET VAPEURS EN SYSTÈME OUVERT - TAUX DE CONVERSION - DÉLAIS D'INFLAMMATION

4- DÉGRADATION THERMIQUE EN RÉACTEUR OUVERT SANS FLAMME. STABILITÉ THERMIQUE T 99,99 [2] ET DRE

Des gaz ou vapeurs peuvent être émis par les :

- liquides (pression de vapeur saturante à la température ambiante ou par chauffage);
- solides (gaz de pyrolyse provenant de la dégradation thermique du solide sous l'effet d'un chauffage).

En présence d'air, ces gaz ou vapeurs peuvent conduire à l'apparition de mélanges (air/gaz) inflammables soit :

- en présence d'une source extérieure d'énergie (flamme pilote, étincelle...) dans le mélange.
- en l'absence d'apport d'énergie complémentaire : c'est le processus d'auto-inflammation. Ce processus nécessitera des températures plus élevées pour permettre le mécanisme d'auto-inflammation assimilable à un "emballement" réactionnel des processus d'oxydation exothermique.

### **1- Limites d'inflammation $L_i$ , $L_s$ de mélanges vapeurs/air en présence d'une source externe d'ignition**

Lorsque des gaz sont émis par un processus de type évaporation, vaporisation, pyrolyse à partir d'un substrat liquide ou solide soumis à un traitement thermique, ils peuvent former, au voisinage du substrat, un mélange combustible avec l'air, c'est-à-dire un mélange qui correspond à au moins 50 à 55 % de la concentration volumique stoechiométrique pour une combustion complète de la molécule de composé gazeux dans l'air, à pression atmosphérique et en présence d'une source localisée d'énergie (étincelle, flamme pilote...).

Ainsi, partant d'un mélange air/gaz initialement à faible teneur (démarrage du processus d'émission gazeuse), lorsque cette teneur augmente, il arrive un moment où celle-ci s'approchant d'un seuil minimum, on assiste à l'inflammation du mélange en présence d'une flamme pilote externe et localisée dans le mélange. Un tel mélange, à sa concentration seuil minimale est dit à sa limite inférieure d'inflammabilité ( $L_i$ ).

Si on augmente encore la concentration volumique de vapeur en mélange avec l'air, le mélange obtenu devient progressivement sous stoechiométrique, c'est-à-dire en défaut d'air par rapport à la composition stoechiométrique du mélange pour sa combustion complète. Ce défaut d'air augmentant, il y a arrêt des conditions de propagation de la flamme dans le mélange correspondant à l'existence d'une limite supérieure de la concentration pour permettre son inflammation par une source externe. Ce seuil maximal de concentration du mélange est désigné par limite supérieure d'inflammabilité ( $L_s$ ). Il correspond à 3 ou 4 fois la concentration du mélange équilibré avec l'air, suivant la nature des vapeurs formées.

Ces deux concentrations de mélange critique avec l'air définissent l'intervalle d'inflammabilité du mélange ( $L_i$ ,  $L_s$ ) et sont habituellement exprimées en % volumique.

#### a) Détermination expérimentale des ( $L_i$ , $L_s$ ) et corrélations

La détermination expérimentale des limites d'inflammabilité est réalisée en introduisant un mélange gazeux dans un tube cylindrique de diamètre suffisant, dont l'une des extrémités est ouverte, et on applique à cette extrémité une source externe (étincelle, flamme pilote).

En fonction de la composition du mélange gazeux, une flamme peut se propager dans le tube. On cherche alors les compositions limites pour la propagation d'une flamme dans le tube. La pression dans le tube reste sensiblement constante et égale à la pression atmosphérique pendant la propagation de la flamme (extrémité ouverte).

Le tube peut être disposé horizontalement ou verticalement et l'amorçage peut être réalisé à l'une ou l'autre des extrémités du tube.

Un exemple de résultat est réporté dans le tableau ci-dessous :

Diamètre du tube (cm)	Propagation		
	ascendante	horizontale	descendante
2,5	5,8 - 13,2	6,2 - 12,9	6,3 - 12,8
5	5,4 - 14,25	5,65 - 13,95	6,12 - 13,25
7,5	5,35 - 14,85	5,4 - 13,95	5,95 - 13,35

#### *Limites d'inflammabilité du méthane dans l'air*

On constate que les limites d'inflammabilité ont des valeurs sensiblement dépendantes des conditions expérimentales. On considère aujourd'hui [1], pour retenir les valeurs obtenues dans les conditions suivantes :

- l'appareil est un tube vertical de 3 à 5 cm de diamètre intérieur et de 1,5 m de long au moins;
- le tube est ouvert en partie inférieure (mise à l'atmosphère);
- l'amorçage a lieu en partie inférieure à l'aide d'une source externe (propagation ascendante);
- le mélange est considéré comme inflammable si, après amorçage, la flamme se propage jusqu'au sommet du tube.

Il n'y a pas de relation étroite entre les limites d'inflammabilité trouvées pour un gaz ou une vapeur et la nature chimique de ce gaz. Par exemple, deux isomères peuvent avoir des limites très différentes, dans l'air :

Oxyde de propylène :  $L_i = 2,8$   $L_s = 37$

Propionaldéhyde :  $L_i = 2,9$   $L_s = 17$

Les limites d'inflammabilité dépendent du gaz comburant. En particulier, dans l'oxygène, la limite supérieure d'un gaz ou d'une vapeur est bien plus élevée que sa limite supérieure dans l'air. Par contre, sa limite inférieure reste pratiquement inchangée. Par exemple :

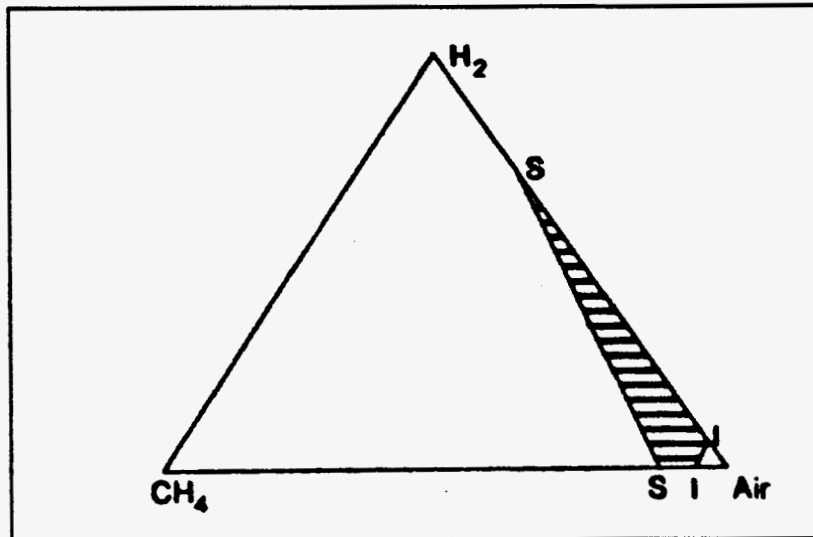
Gaz ou vapeur	Limites d'inflammabilité dans l'air	Limites d'inflammabilité dans l'oxygène
Hydrogène	4 - 75	4 - 94
Sulfure d'hydrogène	4 - 44	4 - 88,5
Monoxyde de carbone	12,5 - 74	15 - 94
Méthane	5 - 15	5,1 - 61
Propane	2,1 - 9,5	2,1 - 25
Chlorure de vinyle	3,6 - 30	4 - 70

Si on a affaire, non pas à un gaz, mais à un mélange de gaz ou de vapeurs, les limites d'inflammabilité pourront se déduire de la règle de Le Chatelier. Ainsi, en considérant un mélange de plusieurs gaz combustibles et d'air, de limites respectives  $N_i$ , et en pourcentages respectivement égaux à  $n_i$ , dans le mélange, on pourra déduire que la limite d'inflammabilité du mélange complexe est obtenue pour :

$$\sum_i \frac{n_i}{N_i} = 1$$

La limite d'inflammabilité obtenue par la relation de Le Chatelier s'applique aussi bien à la limite inférieure (alors  $N_i = (L_i)_i$ ) que supérieure ( $N_i = (L_s)_i$ ).

Dans le cas d'un mélange de deux gaz avec de l'air on peut utiliser une représentation sous forme d'un diagramme triangulaire. Les mélanges limites, quand la loi de Le Chatelier s'applique, sont représentés par des segments de droite IT' et SS'. On donne un exemple ci-dessous d'un tel diagramme pour le mélange méthane-hydrogène dans l'air.



*Domaine d'inflammabilité des mélanges hydrogène/méthane/air*

Comme on l'a indiqué plus haut, il ne semble pas y avoir de corrélation possible entre les  $L_i$ ,  $L_s$  et la constitution chimique détaillée du gaz ou de la vapeur en question.

Par contre, il existe pour les gaz et vapeurs organiques, une corrélation importante entre leur limite inférieure d'inflammabilité et leur pouvoir calorifique inférieur (à pression constante). Cette corrélation dite règle de Boudouard-Le Chatelier ou loi de Burgess-Wheeler, par les anglo-saxons se traduit par la relation :

$$\frac{L_i Q'_c}{100} = 44,3 \text{ (kJ/mole)}$$

où  $Q'_c$  est la chaleur molaire inférieure de combustion à pression constante et indique une constance du produit  $L_i Q'_c$  ; donc plus le  $Q'_c$  d'un composé gazeux ou d'une vapeur ou son PCI est élevé, plus faible est sa limite d'inflammabilité.

Ainsi, on pourra avoir une première indication de l'inflammabilité d'un corps solide ou liquide, si celui-ci, lors d'un traitement thermique émet des vapeurs ou des gaz (pyrolyse) à PCI élevés donc à limite d'inflammabilité basse. En effet, très tôt lors du processus de chauffage du composé, celui ci fournira une concentration suffisante en gaz ou vapeurs dans l'air avoisinant, pour qu'il y ait inflammation en présence d'une source externe d'énergie (flamme pilote, étincelle). On pourra alors considérer le solide ou le liquide comme très inflammable. Le seul "retard" à l'inflammation sera lié à l'importance de sa chaleur de vaporisation (liquides) ou de son enthalpie de décomposition par pyrolyse (solide). On peut donc s'attendre par exemple pour des liquides, que leur inflammation par chauffage soit d'autant plus rapide que leur chaleur de vaporisation est faible et que le PCI des vapeurs formées est fort (limite d'inflammabilité faible).

La constance du produit  $L_i Q'_c$  est bien vérifiée, seule la valeur de la constante peut varier légèrement en fonction de la nature chimique des gaz ou vapeurs.

On pourra appliquer des valeurs de :

4,3 à 48,5	pour les alcanes
47 à 48	pour les cycloalcanes
43,5 à 47	pour les carbures benzéniques
42 à 46	pour les cétones aliphatiques
43,5 à 49	pour les acétates d'alkyles

Pour des composés inorganiques, on trouve cependant des valeurs assez différentes. Par exemple pour CO on a 35 kJ et pour CS<sub>2</sub> on a 14.

Si on rapporte la chaleur de réaction des mélanges non plus à une mole mais à l'unité de masse (kg) l'amplitude des écarts obtenus diminue. On trouve :

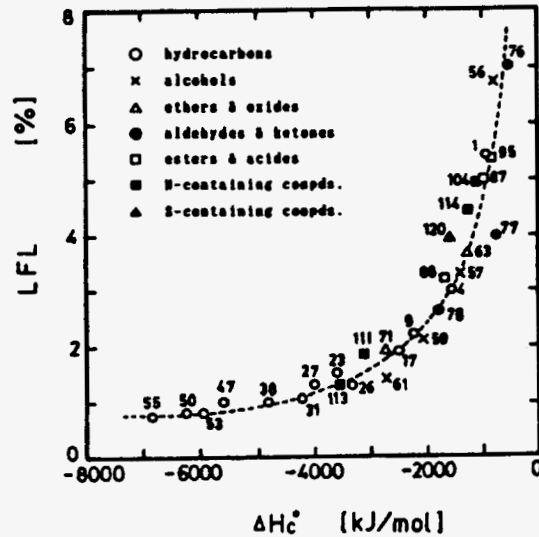
- pour les composés saturés 1530 kJ/kg (écart inférieur à 3,5 %)
- pour les composés éthyléniques 1380 kJ/kg (7 %)

Une corrélation détaillée entre la limite inférieure d'inflammabilité et l'enthalpie de combustion, pour différents composés organiques a été réétablie récemment par Suzuki [2] à partir des valeurs des  $L_i$  fournies par [3, 4] et des valeurs des enthalpies standard de combustion fournies par [5] représentées dans le tableau ci-dessous.

No.	Compound	Formula	LFL (%) <sup>a,b</sup>	$\Delta H_c^\circ$ (kJ mol <sup>-1</sup> ) <sup>c</sup>
1.	Methane	CH <sub>4</sub>	5.3	-890.3
2.	Acetylene*	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>	2.5	-1299.6
3.	Ethylene	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	2.7	-1411.2
4.	Ethane	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	3.0	-1559.8
5.	Allene*	C <sub>3</sub> H <sub>4</sub>	1.7	-1941.4
6.	Propyne	C <sub>3</sub> H <sub>4</sub>	2.2	-1935.8
7.	Cyclopropane	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub>	2.4	-2091.3
8.	Propene	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub>	2.0	-2057.8
9.	Propane	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	2.2	-2219.9
10.	2-Butyne*	C <sub>4</sub> H <sub>6</sub>	1.4	-2576.7

*Limites d'inflammabilité inférieures et enthalpies standard de combustion [3,4,5] pour différents composés organiques*

Cette corrélation, exprimée sous forme graphique, est représentée dans la figure suivante :



*Corrélation entre les limites inférieures d'inflammabilité et les chaleurs standards de combustion pour différents composés organiques correspondants au tableau de classification (1 à 123).*

La corrélation correspondante peut s'écrire sous la forme [2] :

$$L_i = -3,42 \Delta H_{c^{\circ}}^{-1} + 0,569 \Delta H_{c^{\circ}} + 0,0538 \Delta H_{c^{\circ}}^2 + 1,8$$

avec  $L_i$  en %

$\Delta H_{c^{\circ}}$  en  $10^3$  kJ/mole ( $L_0$ )

de sorte qu'en première approximation on a :

$$L_i \sim \frac{3,42 \cdot 10^3}{\Delta H_{c^{\circ}}}$$

soit : 
$$\frac{L_i \Delta H_{c^{\circ}}}{100} \sim 34,2 \frac{\text{kJ}}{\text{mole}}$$

traduit ainsi l'allure hyperbolique de la dépendance  $L_i/\Delta H_{c^{\circ}}$  déductible de la règle de Boudouard-Le Chatelier.

### b) Dépendance des limites d'inflammabilité à la température

Les gaz ou vapeurs émises par un liquide ou un solide le sont en général à des températures ambiantes élevées (température de vaporisation ou de pyrolyse), c'est-à-dire que leur mélange avec l'air est réalisé à température supérieure à la température ordinaire. Il est donc important de déterminer l'évolution des limites d'inflammabilité avec la température.



Si on désigne par  $L'_i$  la limite d'inflammabilité à la température  $T' > T_a$ , alors le mélange apporte, avant sa combustion une chaleur spécifique supplémentaire égale à :

$$[L'_i \bar{c}_v + (100 - L'_i) \bar{c}_{v, \text{air}}] (T' - T)$$

où  $\bar{c}_v$  et  $\bar{c}_{v, \text{air}}$  sont respectivement les chaleurs spécifiques moyennes des gaz combustibles et de l'air entre 20°C et 500°C (plage de variation usuelle suffisante à la génération de gaz ou de vapeurs combustibles par des liquides ou des solides).

Cette énergie supplémentaire peut s'écrire sous la forme :

$$[L'_i (\bar{c}_v - \bar{c}_{v, \text{air}}) + 100 \bar{c}_{v, \text{air}}] (T' - T)$$

Dans cette expression le terme  $L'_i (\bar{c}_v - \bar{c}_{v, \text{air}})$  reste faible dans la pratique (de 40 à 160 J) alors que avec  $\bar{c}_{v, \text{air}} = 30 \text{ J/mole}^\circ\text{C}$  le deuxième terme domine avec une valeur voisine de  $3000 \text{ J} = 3 \text{ kJ}$ .

La chaleur de combustion variant très peu avec la température (entre 20 et 500°C), on peut écrire grâce à un bilan d'énergie simplifié au moment de l'inflammation :

$$L'_i Q'_c = L_i Q'_c - 3 (T' - T)$$

soit

$$L'_i (T') = L_i (T) - \frac{3}{Q'_c} (T' - T)$$

où  $Q'_c$  est la chaleur molaire de combustion (kJ/mole).

On constate que la limite inférieure d'inflammation d'un gaz décroît quand sa température augmente, et ce, de façon linéaire.

Un raisonnement identique conduirait à une croissance linéaire de sa limite supérieure d'inflammabilité avec la température.

L'intervalle d'inflammabilité des gaz ou vapeurs croît donc avec la température.

On reporte ci-dessous un exemple des variations des limites d'inflammabilité  $L_i$  et  $L_s$ , dans l'air, de quelques vapeurs organiques.

Température (°C)	Benzène		Toluène	
	Limite inférieure	Limite supérieure	Limite inférieure	Limite supérieure
100	1,37	5,32	1,26	4,44
150	1,26	5,41	1,17	4,50
200	1,20	5,47	1,03	4,61
250	1,13	5,58	0,92	4,57

Température (°C)	Cyclohexane		Cyclohexène	
	Limite inférieure	Limite supérieure	Limite inférieure	Limite supérieure
100	1,16	4,34	1,22	4,81
150	1,10	4,56	1,12	4,96
200	1,01	4,77	1,03	5,06
250	0,95	4,98	0,96	5,20

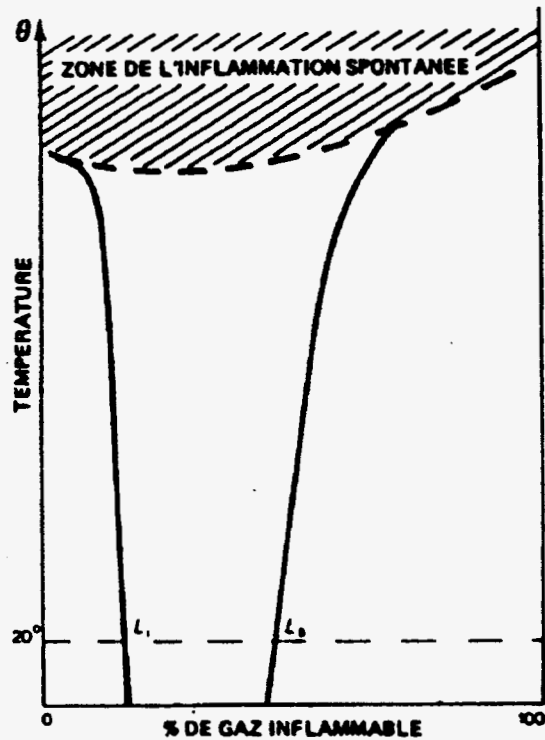
Température (°C)	Acétone		Méthanol	Ethanol
	Limite inférieure	Limite supérieure	Limite inférieure	Limite inférieure
100	2,78	8,70	6,65	3,55
150	2,61	8,95	6,15	3,15
200	2,50	9,35	5,80	3,00
250	2,33	9,75	5,45	2,75

*Variation avec la température des limites d'inflammabilité des vapeurs organiques dans l'air*

Quand on augmente encore la température cette tendance à l'augmentation de l'intervalle d'inflammabilité s'accroît (L<sub>i</sub> décroît fortement et L<sub>s</sub> croît avec la température) de sorte qu'on peut atteindre un niveau de température critique où le mélange s'enflamme quelque soit sa concentration dans l'air (de 0 à 100 %) : il y a alors auto-inflammation. Celle-ci ne nécessite plus de source externe d'inflammation; il n'y a plus de propagation et la dégradation de molécule a lieu en volume, par inflammation spontanée.

Cette température critique, relativement peu dépendante de la concentration du mélange dans l'air, est désignée par température d'auto-inflammation T<sub>ai</sub>.

On représente, dans la figure ci-dessous l'évolution de l'intervalle d'inflammabilité en fonction de la température jusqu'à, l'apparition du processus d'auto-inflammation.



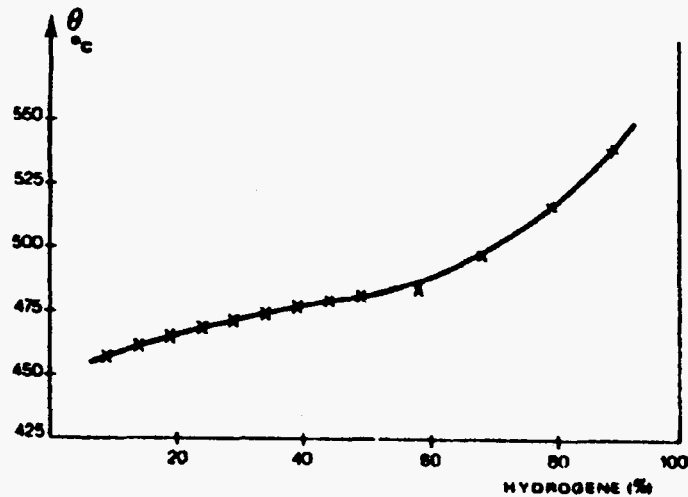
*Domaine d'inflammabilité en fonction de la température de mélanges de gaz ou vapeurs combustibles avec l'air*

**2- Gaz ou vapeurs (en mélange ou non avec l'air) en mode d'inflammation spontanée. Températures d'auto-inflammation**

Lorsqu'un mélange de gaz ou de vapeurs avec l'air atteint une température suffisante, il y a inflammation spontanée du mélange, sans nécessité de source externe (flamme pilote, étincelle...). Cette température est désignée par température d'auto-inflammation  $T_{ai}$ .

La température d'auto-inflammation  $T_{ai}$  dépend relativement peu de la composition du mélange dans l'air.

On représente ci-dessous ses variations en fonction de la composition pour le cas d'un mélange hydrogène/air.



*Variation de la température d'auto inflammation pour un mélange  $H_2$ /air en fonction de la composition du mélange*

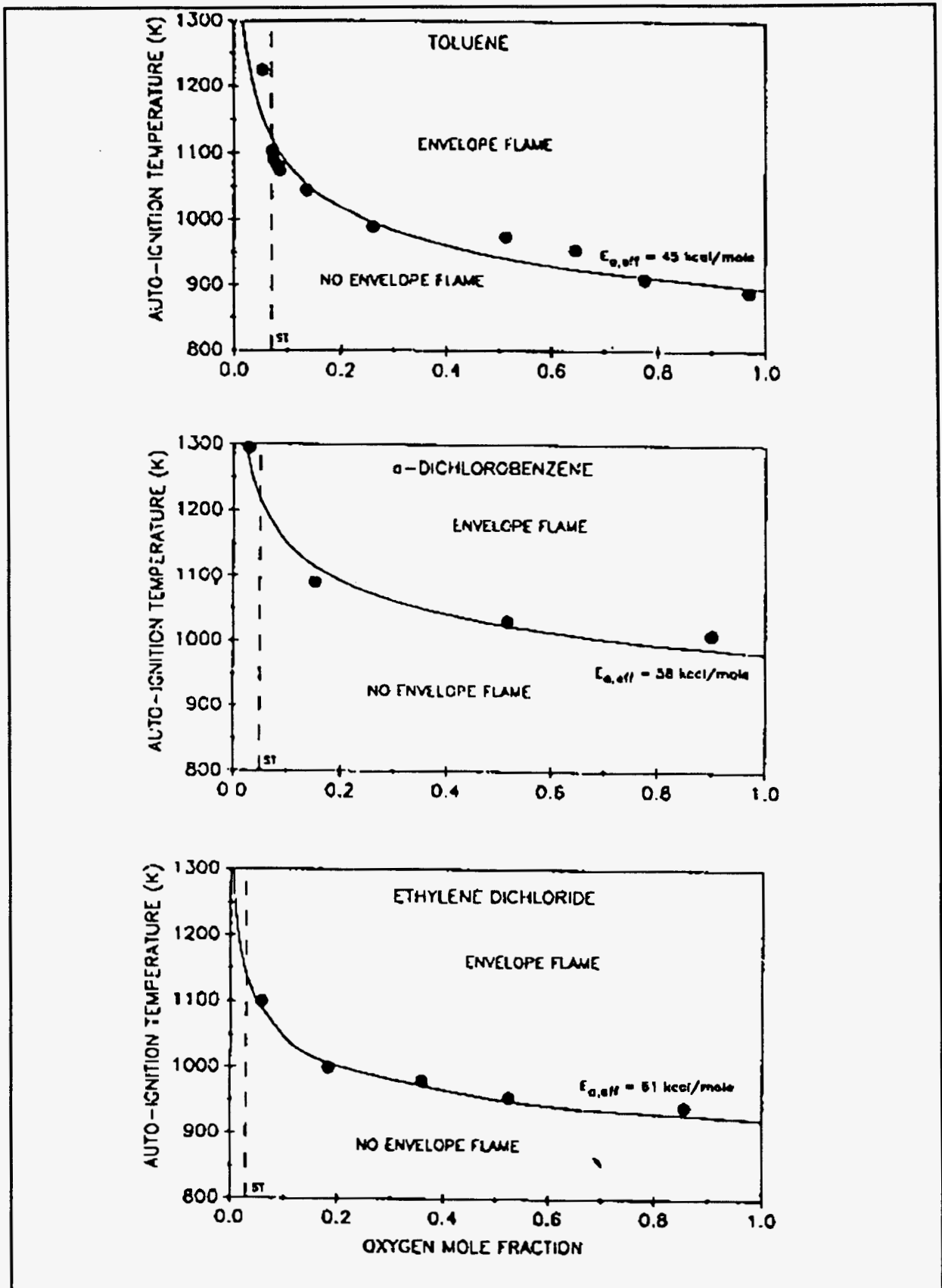
Cette courbe correspond à la limite supérieure du domaine d'inflammation provoquée (évoqué précédemment) et délimité, dans sa partie inférieure, par les droites  $L_i(T)$  et  $L_s(T)$ .

On constate une augmentation de la courbe  $T_{ai}$  aux fortes concentrations (mélanges sous-stoechiométriques) et une asymptote aux faibles concentrations (mélanges sur stoechiométriques) et ce, autour de la concentration stoechiométrique.

On peut donc définir la température  $T_{ai}$ , comme la température la plus basse pour laquelle il y a auto-inflammation, celle-ci étant obtenue pour des mélanges largement sur-stoechiométriques.

On reporte dans la figure suivante des exemples [6] de telles courbes enveloppes obtenues pour des solvants chlorés préalablement vaporisés.

Ces résultats montrent la possibilité de définir une température limite d'auto-inflammation aux fortes teneurs en oxygène, c'est-à-dire en atmosphère largement sur-stoechiométrique.



Températures d'auto-inflammation  $T_{ai}$ , pour différents composés, en fonction de la teneur en oxygène du mélange (la ligne verticale en pointillé correspond au mélange stœchiométrique).

On a reporté les valeurs de  $T_{ai}$  pour différents composés dans les deux tableaux suivants :

C A Z	FORMULE	Chaleur de formation		Pourcentage dans le mélange oxygénéquilibré (X)	Limites d'inflammabilité dans l'air		Température minimale d'auto-inflammation ordinaire (°C)
		à sc.Cc	à vol.Cc		Li (Z)	Lc (X)	
		$H_f$ kJ/mol	$H_v$ kJ/mol				
<b>CORPS INORGANIQUES (général)</b>							
Hydrogène	$H_2$	0	0	29,53	4,0	75	450
Deutérium	$D_2$	—	—	29,53	3,0	70	—
Sulfure d'hydrogène	$H_2S$	20,5	20,5	12,25	4,0	44	212
Séléniure d'hydrogène	$H_2Se$	-33	-33	12,75	(4)	(50)	—
Ammoniac	$NH_3$	45,8	43,3	21,83	15	28	650
Phosphine	$PH_3$	-5,5	-6,5	9,48	(2,5)	(45)	—
Arène	$AsH_3$	-63	-66	12,25	4,5	(50)	—
Cyanogène	$C_2N_2$	-308	-309	9,48	6	32	800
Monoxyde de carbone	$CO$	110,5	111,8	29,53	12,5	74	650
Sulfure de carbone	$CS_2$	138,5	140	12,25	12	30	250
Silane	$SiH_4$	-30,5	-33	9,48	1	100	—
Dichlorosilane	$SiH_2Cl_2$	(330)	(320)	20,95	4	98	100
Diaéthane	$Si_2H_6$	-71	-76	5,65	—	—	—
Diborane	$B_2H_6$	-41	-46	6,52	0,8	98	50
Germane	$GeH_4$	-90	-92	9,48	(1,8)	(55)	—
<b>HYDROCARBURES</b>							
Méthane	$CH_4$	74,7	72,0	9,48	5	15	600
Ethane	$C_2H_6$	83,8	74,8	5,65	3	12,4	500
Propane	$C_3H_8$	104,7	97,2	4,82	2,1	9,5	480
Butane	$C_4H_{10}$	125,6	115,6	3,12	1,8	8,4	420
Isobutane (méthyl-2 propane)	$CH_3 - CH - CH_3$   $CH_3$	134,2	124,2	3,12	1,8	8,4	460
Métopentane (diméthyl-2,2 propane)	$C(CH_3)_4$	168,5	156	2,55	1,4	7,5	450
Cyclopropane	$C_3H_6$	-53,5	-58,5	4,45	2,4	17,4	500
Ethylène	$CH_2 = CH_2$	-52,5	-55	6,53	2,7	36	480
Propylène (propène)	$CH_2 = CH - CH_3$	-20,5	-24,5	4,45	2,4	11	460
Butène 1	$CH_3 - CH_2 - CH = CH_2$	-0,8	-A	3,37	1,4	10	380
Butène 2 (moyenne de cis et trans)	$CH_3 - CH = CH - CH_3$	11	3,5	3,37	1,7	9,7	320
Méthyl-2 propène (isobutylène)	$CH_2 = C - CH_3$   $CH_3$	1A	10,5	3,37	1,8	9,6	460
Propadiène (allène)	$CH_2 = C = CH_2$	-192	-193,5	4,98	2,1	—	—
Bucadiène-1,3	$CH_2 = C = CH - CH_2$	-117	-112	3,67	2	12	420
Acétylène	$HC \equiv CH$	-226,5	-226,5	7,73	2,2	85	360
Propyne (méthylacétylène)	$HC \equiv C - CH_3$	-185,5	-188	6,98	1,7	11	—
Butyne-1 (éthylacétylène)	$HC \equiv C - CH_2 - CH_3$	-165	-168	3,67	1,2	—	—
<b>HYDROCARBURES HALOGENES</b>							
Fluorure de méthyle	$CH_3F$	234	232	12,25	—	—	—
Chlorure de méthyle	$CH_3Cl$	84	81	12,25	7,5	18	630
Bromure de méthyle	$CH_3Br$	38	37	12,25	10	15	530
Fluorure d'éthyle	$C_2H_5F$	255	250	6,52	—	—	—
Chlorure d'éthyle	$C_2H_5Cl$	111	104	6,52	3,8	16	520
Fluorure de vinyle	$CH_2 = CHF$	(152)	(140)	7,73	3,5	28	460
Fluorure de vinylidène	$CH_2 = CF_2$	326	323	9,48	4,9	25	—
Chlorure de vinyle	$CH_2 = CHCl$	-34	-36,5	7,73	3,6	30	470
Bromure de vinyle	$CH_2 = CHBr$	-78	-79,5	7,73	—	—	—
Difluoro-1,1 éthane (R.152 a)	$CH_3 - CCl_2$	(301)	(497)	7,73	5	70	—
Chlorodifluoroéthane (R.142 b)	$CH_3 - CClF_2$	(123)	(518)	9,48	6,5	18	—
<b>COMPOSES C, H, O, N, (général)</b>							
Formaldéhyde	$H - CHO$	114	117	20,95	—	—	—
Oxyde de méthyle	$CH_3 - O - CH_3$	184	177	6,53	3,4	27,3	350
Oxyde de méthyle et éthyle	$CH_3 - O - C_2H_5$	216	208	4,45	2	10	190
Oxyde de méthyle et vinyle	$CH_3 - O - C_2H_3$	(97)	(90)	4,98	2,6	39	—
Oxyde d'éthylène (oxyde)	$CH_2 = O$	52,5	49	7,73	3,6	100	420
<b>AUTRES COMPOSES ORGANIQUES</b>							
Méthylamine	$CH_3 - NH_2$	22,5	17,5	6,52	4,6	21	430
Diméthylamine	$(CH_3)_2 NH$	20	12,5	5,29	2,8	14,5	400
Triméthylamine	$(CH_3)_3 N$	24,5	14,5	3,84	2	12	—
Ethylamine	$C_2H_5 - NH_2$	49,5	42	5,29	3	14	380
Méthanethiol (mercaptan méthylique)	$CH_3 - SH$	23	20,5	6,57	4	22	—

Inflammabilité dans l'air de gaz combustibles

Inflammabilité dans l'air de vapeurs organiques


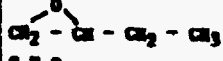
N° d'ordre	CORPS	SYNONYMES	FORMULE
1	Pentane	Pentane normal	$CH_3 - (CH_2)_3 - CH_3$
2	Méthyl-butane	Isopentane	$CH_3 - CH_2 - CH(CH_3)_2$
3	Hexane	Hexane normal	$CH_3 - (CH_2)_4 - CH_3$
4	Méthyl-2 pentane	Isohexane	$CH_3 - CH_2 - CH_2 - CH(CH_3)_2$
5	Heptane	Heptane normal	$CH_3 - (CH_2)_5 - CH_3$
6	Octane	Octane normal	$CH_3 - (CH_2)_6 - CH_3$
7	Triaéthyl-2, 2, 4 pentane	(dit "isooctane")	$(CH_3)_3 C - CH_2 - CH(CH_3)_2$
8	Nonane	Nonane normal	$CH_3 - (CH_2)_7 - CH_3$
9	Décane	Décane normal	$CH_3 - (CH_2)_8 - CH_3$
10	Dodécane	Dodécane normal	$CH_3 - (CH_2)_{10} - CH_3$
11	Pentène-1	Propyléthylène ; amyène normal	$CH_2 = CH - CH_2 - CH_2 - CH_3$
12	Méthyl-2 butadiène-1,3	Isoprène	$CH_2 = \underset{CH_3}{\overset{ }{C}} - CH = CH_2$
13	Cyclopentane		$C_5H_{10}$
14	Cyclohexane	Hexahydrobenzène	$C_6H_{12}$
15	Méthylcyclohexane	Hexahydrotoluène	$C_6H_{11} - CH_3$
16	Ethylcyclohexane	—	$C_6H_{11} - C_2H_5$
17	Benzène	—	$C_6H_6$
18	Toluène	—	$C_6H_5 - CH_3$
19	Orthoxylène	-	
20	Métoxylène	.	$C_6H_6(CH_3)_2$
21	Paraxylène	-	
22	Ethylbenzène	—	$C_6H_5 - C_2H_5$
23	n-Propylbenzène	—	$C_6H_5 - CH_2 - CH_2 - CH_3$
24	Isopropylbenzène	Cumène	$C_6H_5 - CH(CH_3)_2$
25	Paraéthyl-isopropyl-benzène	Cymène	$CH_3 - C_6H_4 - CH(CH_3)_2$
26	Vinylbenzène	Styrène	$C_6H_5 - CH = CH_2$
27	Cyclohexène	Tétrahydrobenzène	$C_6H_{10}$
28	Naphtalène	—	$C_{10}H_8$
29	Tétrahydro-1,2,3,4 naphtalène	Tétraline	$C_{10}H_{12}(CH_2)_4$
30	Décahydronaphtalène	Décaline	$C_{10}H_{18} \quad (4)$
<b>ALCOOLS ACYCLIQUES</b>			
31	Méthanol	Alcool méthylique	$CH_3OH$
32	Ethanol	Alcool éthylique	$CH_3 - CH_2OH$
33	Propanol 1	Alcool propylique (normal)	$CH_3 - CH_2 - CH_2OH$
34	Propanol 2	Alcool isopropylique	$CH_3 - CHOH - CH_3$
35	Butanol 1	Alcool butylique (normal)	$CH_3 - CH_2 - CH_2 - CH_2OH$
36	Butanol 2	Alcool butylique secondaire	$CH_3 - CH_2 - CHOH - CH_3$
37	Méthyl 2 propanol 1	Alcool isobutylique	$(CH_3)_2 CH - CH_2OH$
38	Méthyl 2 propanol 2	Alcool butylique tertiaire	$(CH_3)_3 COH$
39	Pentanol-1	Alcool amylique normal	$CH_3 - (CH_2)_3 - CH_2OH$
40	Propène-ol 1	Alcool allylique	$CH_2 = CH - CH_2OH$

N° d'ordre	Point d'ébullition normal (°C)	Chaleur de formation à vol. Ct (kJ/mol)	Pourcentage dans le mélange équilibré avec l'air	Limites d'inflammabilité dans l'air		Température-limite inférieure d'inflammabilité (°C)	Température d'inflammation (°C)
				inférieure	supérieure		
1	26,1	125	2,55	1,4	7,8	- 49	240
2	27,9	142	2,55	1,4	—	- 56	—
3	68,7	152	2,16	1,2	7,4	- 26	225
4	60,3	160	2,16	1,2	—	- 33	—
5	98,4	170	1,87	1,05	6,7	- 6	215
6	125,7	189	1,65	0,9	6,3 (a)	13	220
7	99,2	204	1,65	0,95	6,3 (a)	- 2,3	415
8	150,8	207	1,47	0,85	5,9 (a)	31	220
9	174,1	225	1,33	0,75	5,6	46	210
10	216,3	261	1,12	0,6	—	78,5	205
11	30	12	2,72	1,4	8,7	- 54	275
12	34,1	- 83	2,90	1,4	—	- 51	220
13	49,3	64	2,72	1,5 (a)	—	- 39	—
14	80,7	113	2,27	1,3	7,8	3 (c)	245
15	100,9	141	1,96	1,1	6,7	- 6	230
16	131,8	154	1,72	1,15	6,6	19	260
17	80,1	- 87	2,72	1,3	7,8	- 12	540
18	110,6	- 57	2,27	1,25	7,1	5,5	580
19	144,4	- 29	1,96	1,1	6,4	20	440
20	139,1	- 26	1,96	1,2	6,3	24	530
21	138,4	- 27	1,96	1,2	6,3	25,5	530
22	136,2	- 39	1,96	1,0	6,7	21,5	430
23	159,2	- 20	1,72	0,9	—	37	—
24	152,4	- 15	1,72	0,9	6,5	31	425
25	177	15	1,53	0,85	6,5	49	435
26	145,1	- 156	3,37	1,1	—	28	470
27	83	0	2,40	1,3	—	- 16	—
28	217,9	- 158	1,72	0,9	5,9 (b)	79	520
29	207,5	- 41	1,59	0,86	5 (b)	70	385
30	191,7	151	1,42	0,75	4,9	56	250
31	64,7	194	12,25	6,7	36	9	305
32	78,3	730	0,53	3,3	19	11	345
33	97,2	247	4,45	2,3	14	22	440
34	82,3	264	4,45	2,2	13	10	480 (a)
35	117,6	265	3,37	1,8	12	33	360
36	99,5	283	3,37	1,7	10	20	400
37	107,7	274	3,37	1,8	11	27	390 (b)
38	82,4	302	3,37	1,9	9	18 (a)	480
39	137,8	287	2,72	1,4	10	42	350
40	97,1	118	4,97	2,5	18	21	—



N° d'ordre	CORPS	SYNONYMES	FORMULE
<b><u>ETHERS ET ACETALS CYCLIQUES</u></b>			
41	Oxyde d'éthyle	Ether éthylique	$C_2H_5 - O - C_2H_5$
42	Oxyde de propyle	Ether propylique (normal)	$C_3H_7 - O - C_3H_7$
43	Oxyde d'isopropyle	Ether isopropylique	$(CH_3)_2CH - O - CH(CH_3)_2$
44	Oxyde de vinyle	Ether vinylique	$CH_2 = CH - O - CH = CH_2$
45	Diméthoxyméthane	Méthylal	$CH_3 - O - CH_2 - O - CH_3$
46	Diéthoxy-1,1 éthane	Acétal (ordinaire)	$C_2H_5O - \underset{\text{CH}_3}{\text{C}} - OC_2H_5$
<b><u>ALDÉHYDES, CÉTONES</u></b>			
47	Acétaldéhyde	—	$CH_3 - CHO$
48	Acryaldéhyde	Propéanal ; Acroléine	$CH_2 = CH - CHO$
49	Crotonaldéhyde	Aldéhyde crotonique	$CH_3 - CH = CH - CHO$
50	Acétone	—	$CH_3 - CO - CH_3$
51	Butanone	Méthyl éthylicétone	$CH_3 - CO - C_2H_5$
52	Pentanone-3	Diéthylicétone	$C_2H_5 - CO - C_2H_5$
53	Méthyl-4 pentanone 2	Méthyl isobutylicétone	$CH_3 - CO - CH_2 - CH(CH_3)_2$
54	Cyclohexanone	—	$C_6H_{10}O$
<b><u>ACIDES ; ANHYDRIDES D'ACIDES</u></b>			
55	Acide formique	—	$H - CO_2H$
56	Acide acétique	—	$CH_3 - CO_2H$
57	Anhydride acétique	—	$CH_3 - CO - O - CO - CH_3$
<b><u>ESTERS</u></b>			
58	Formiate de méthyle	—	$H - CO - OCH_3$
59	Formiate d'éthyle	—	$H - CO - O - C_2H_5$
60	Formiate de propyle (n)	—	$H - CO - O - C_3H_7$
61	Formiate de butyle	—	$H - CO - O - CH_2 - CH_2 - CH_2 - CH_3$
62	Formiate d'isobutyle	—	$H - CO - O - CH_2 - CH(CH_3)_2$
63	Acétate de méthyle	—	$CH_3 - CO - O - CH_3$
64	Acétate d'éthyle	—	$CH_3 - CO - O - C_2H_5$
65	Acétate de propyle	—	$CH_3 - CO - O - CH_2 - CH_2 - CH_3$
66	Acétate d'isopropyle	—	$CH_3 - CO - O - CH(CH_3)_2$
67	Acétate de butyle	—	$CH_3 - CO - O - CH_2 - CH_2 - CH_2 - CH_3$
68	Acétate d'isobutyle	—	$CH_3 - CO - O - CH_2 - CH(CH_3)_2$
69	Acétate de pentyle	—	$CH_3 - CO - O - (CH_2)_4 - CH_3$
70	Propionate de méthyle	—	$CH_3 - CH_2 - CO - O - CH_3$
71	Propionate d'éthyle	—	$CH_3 - CH_2 - CO - O - C_2H_5$
72	Propionate de propyle (n)	—	$CH_3 - CH_2 - CO - O - CH_2 - CH_2 - CH_3$
73	Acrylate d'éthyle	—	$CH_2 = CH - CO - O - C_2H_5$
74	Méthacrylate de méthyle	—	$CH_2 = \underset{\text{CH}_3}{\text{C}} - CO - O - CH_3$
75	Nitrate de propyle	—	$HO_2 - O - CH_2 - CH_2 - CH_3$
76	Nitrate d'isopropyle	—	$HO_2 - O - CH(CH_3)_2$
<b><u>DÉRIVÉS NITRÉS CYCLIQUES</u></b>			
77	Nitrométhane	—	$CH_3 - NO_2$
78	Nitroéthane	—	$C_2H_5 - NO_2$
79	Nitro-1 propane	—	$CH_3 - CH_2 - CH_2NO_2$
80	Nitro-2 propane	—	$CH_3 - CHNO_2 - CH_3$

N° d'ordre	Point d'ébullition normal (°C)	Chaleur de formation à vol. Ct (kJ/mol)	Pourcentage dans le mélange équilibré avec l'air	Limites d'inflammabilité dans l'air		Température limite inférieure d'inflammabilité (°C)	Température d'inflammation (°C)
				inférieure	supérieure		
41	36,6	241	3,37	1,9	37	- 66	160
42	89,6	275	2,27	1,4	—	- 7	—
43	68,3	300	2,27	1,4	0	- 22	400
44	28,3	4	4,02	1,7	27	—	360
45	42,3	360	4,97	2,9	—	- 30	230
46	103,6	440	2,40	1,3	10,5	4	230
47	20,4	163	7,73	4,0	60	- 43	175
48	52,7	67	5,65	2,8	31	- 27	240
49	104,1	98	4,02	2,1	18	10	—
50	36,3	211	4,97	2,6	13	- 22	460
51	79,6	230	3,67	1,9	10	- 10	—
52	102	248	2,90	1,6	—	5	450
53	117	268	2,40	1,35	8	14	—
54	153,6	216	2,05	1,1	—	35	430 (a)
55	100,6	377	29,53	18	58	50	600
56	117,9	430	9,48	5,4 (b)	17 (a)	42	465
57	140	578	4,97	2,7	10	47	390
58	31,5	340	9,48	5	23	- 39	460
59	54,1	(a) 364	5,65	2,8	16	- 22	455
60	80,8	(a) 390	4,02	2,3 (a)	12 (a)	- 6	—
61	106,3	(a) 407	3,12	1,7	8,2	10	320
62	102,1	(a) 430	3,12	1,8	9	2	—
63	56,3	(a) 404	5,65	3,2	16	- 16	500 (f)
64	77,1	431	4,02	2,2	11	- 6	410 (f)
65	101,5	452	3,12	1,8	8	9,5	—
66	88,2	478	3,12	1,8	—	- 3	—
67	126,1	(a) 471	2,35	1,4	8	23	425
68	118	(a) 478	2,55	1,5	—	15	—
69	149,2	(a) 490	2,16	1,1	7	35	360
70	79,8	(a) 436	4,02	2,4	13	- 2	—
71	99,1	491	3,12	1,8	11	7,5	440
72	122,4	(a) 471	2,55	1,4	—	20	—
73	99,8	331	3,37	1,9 (a)	—	—	—
74	100,3	365	3,37	2 (a)	12,5 (a)	9	—
75	110,3	164	6,05	1,9	—	17	175
76	102	180	6,05	1,9	—	9	—
77	101,2	70	21,83	7,3	33	33	420 (f)
78	114,1	93	8,52	3,4	30	29	410 (f)
79	131,2	114	5,29	2,2	34	34	400 (f)
80	120,2	132	5,29	2,5	28	27	420 (f)

N° d'ordre	CORPS	SYNONYMES	FORMULE
<b><u>AMINES, ANIDES ET NITRILES</u></b>			
81	Diéthylamine	—	$(C_2H_5)_2 NH$
82	Triéthylamine	—	$(C_2H_5)_3 N$
83	Aniline	—	$C_6H_5 - NH_2$
84	Diméthylformamide	—	$H - CO - N(CH_3)_2$
85	Butyronitrile	Cyanure de propyle	$CH_3 - CH_2 - CH_2 - CN$
86	Acrylonitrile	Cyanure de vinyle	$CH_2 = CH - CN$
87	Méthacrylonitrile	Cyanure d'isopropyle	$CH_2 - \underset{\begin{array}{c}   \\ CH_3 \end{array}}{C} - CN$
<b><u>COMPOSES HÉTÉROCYCLIQUES</u></b> (oxygène et azote)			
88	Méthylloxirane	Oxyde de propylène	
89	Ethylloxirane	Oxyde de butylène : Epoxy-1,2 butane	
90	Oxolane	Tétrahydrofurane	$C_4H_8O$
91	Dioxane	Diéthylèneoxyde	$C_4H_8O_2$
92	Furyl-2 méthanol	Alcool furylique	$(C_4H_3O) - CH_2OH$
93	Furaldéhyde 2	(Furfural)	$(C_4H_3O) - CHO$
94	Triméthyl-2,4,6 trioxane-1,3,5	Paraldéhyde	$(CH_2 - CH - O -)_3$
95	Pyrrrole	—	$C_4H_4.NH$
96	Pyridine	—	$C_5H_5N$
97	Quinololine	—	$C_9H_7N$
98	Diaza-1,4 bicyclo [2,2,2]-octane	Triséthylène diamine	$N(CH_2-CH_2)_3.N$
<b><u>COMPOSES CHLORÉS</u></b>			
99	Chloro-1 propane	Chlorure de propyle (normal)	$CH_3 - CH_2 - CH_2Cl$
100	Chloro-2 propane	Chlorure d'isopropyle	$CH_3 - CHCl - CH_3$
101	Dichloro-1,2 propane	Chlorure de propylène	$CH_3 - CHCl - CH_2Cl$
102	Chloro-1 butane	Chlorure de butyle (normal)	$CH_3 - CH_2 - CH_2 - CH_2Cl$
103	Chloro-1 pentane	Chlorure d'amyle (normal)	$CH_3 - (CH_2)_3 - CH_2Cl$
104	Dichloro-1,1 éthylène	Chlorure de vinylidène	$CCl_2 - CH_2$
105	Chloro-3 propène-1	Chlorure d'allyle	$CH_2 = CH - CH_2Cl$
106	Chlorobenzène	—	$C_6H_5Cl$
107	Orthodichlorobenzène	—	$C_6H_4Cl_2$
<b><u>COMPOSES SOUFRES</u></b>			
108	Sulfure de carbone	Dissulfure de carbone	$CS_2$
109	Sulfure de méthyle	—	$(CH_3)_2S$
110	Ethanethiol	Mercaptan éthylique	$CH_3 - CH_2SH$
111	Thiolane	Tétrahydrothiophène	$C_4H_8S$

N° d'ordre	Point d'ébullition normal (°C)	Chaleur de formation à vol. Ct (kJ/mol)	Pourcentage dans le mélange équilibré avec l'air	Limites d'inflammabilité dans l'air		Température limite inférieure d'inflammabilité (°C)	Température d'inflammation (°C)
				inférieure	supérieure		
81	53,5	61	3,01	1,8	10	- 20	—
82	89,5	80	2,10	1,2	8	- 12	—
83	184,4	- 94	2,63	1,3	8,3	62	615
84	153	185	4,70	2,2	15	51	430
85	117,9	- 39	3,51	1,9	—	16	—
86	77,3	- 106	3,29	2,9	17	- 6	—
87	90,3	- 153	3,84	2 (a)	—	- 1 (a)	—
88	34	85	4,97	2,8	37	- 38	—
89	63,2	109	3,67	2 (a)	—	- 8,5 (a)	—
90	66	176	3,67	2	12	- 21	300 (f)
91	101,3	310	4,02	2	22	7	265
92	170	222	3,67	1,8	16	74	390
93	161,8	138	4,02	2,1	—	54	310 (f)
94	124	630	2,72	1,5	—	28	—
95	129,7	-113	3,84	2,2 (a)	—	36	—
96	115,3	-145	3,24	1,8	12,5	17	580 (f)
97	237,1	-225	1,90	1,8	—	95	530 (f)
98	174	- 65	2,27	1,2	—	65	—
99	46,6	125	6,45	2,4	13,4	- 32	—
100	35,7	137	4,45	2,5	11 (a)	- 42	—
101	95	162	4,97	3,1	14,5 (a)	7	—
102	78,5	145	3,37	1,8	10	- 14	265
103	108,2	164	2,72	1,6	8,6	6	260
104	31,6	- 1	9,48	6 (a)	13 (a)	—	—
105	45	2	4,97	2,9	14	- 30	485
106	131,7	- 58	2,90	1,4	7	22	640
107	180,5	- 36	3,24	2 (a)	10 (a)	67	620
108	46,2	-119	6,53	1,3	50	- 40	90
109	37,3	33	6,45	2,2 (a)	20 (a)	- 40	210 (f)
110	35	42	4,45	2,8	16	- 38	300 (f)
111	120,9	28	2,90	1,7 (a)	—	18 (a)	—

(a) Valeur calculée ou estimée

(b) Valeur à 100 °C ou à une température supérieure à la température-limite d'inflammation concernée.

(c) En présence du cyclohexane (P.F. : 6,5°C) solide.

(d) Les valeurs indiquées concernent le mélange usuel des deux isomères : CIS (P.Eb 195,8°C) et TRANS (P.Eb: 187,3°C).

(e) Valeur relative au liquide en surfusion (le P.F. de l'alcool butylique tertiaire est 25,8 °C).

(f) Valeur pouvant présenter une incertitude de 20 à 40 °C.

Une étude récente pour l'estimation de la température d'auto-inflammation a été proposée par Suzuki et al [7], pour le cas des composés hydrocarbonés à partir de leurs propriétés moléculaires. Ils fournissent une corrélation sous la forme :

$$T_{ai} = - 1,52 T_c + 7,67 P_c - 2,64 PA - 47,6 A_w + 300,6 \text{ }^\circ X + 501,3 \quad (r = 0,941)$$

où  $T_c$  est la température critique du composé [K]

$P_c$  sa pression critique

$PA$  son parachore [  $(\text{cm}^{-3} \cdot \text{mol}^{-1}) (\text{dyn} \cdot \text{cm}^{-1})^{1/4}$  ]

$A_w$  sa surface moléculaire [ $10^9 \text{ cm}^2 \cdot \text{mol}^{-1}$ ]

$^\circ X$  son indice de connectivité moléculaire [-]

L'ensemble de ces grandeurs peut être déterminé séparément à partir de la structure moléculaire du composé [8, 9, 10, 11]. L'erreur absolue fournie sur la base de 50 composés (alcanes, naphthalènes, alcènes, cyclooléfines, aromatiques) est de 28,8°C.

### 3- Combustion des gaz et vapeurs en système ouvert - Taux de conversion - Délais d'inflammation

La destruction continue de composés doit être réalisée dans la pratique en système ouvert.

Si on désigne par  $V$ , le volume de l'enceinte réactionnelle, et  $T_0$  les débits de gaz et température d'entrée, on impose donc un temps de séjour moyen  $\tau = \frac{\rho V}{m}$  pour les molécules à détruire, entrant dans l'enceinte.

L'aspect cinétique des réactions mises en jeu intervient donc, le rendement de dégradation des composés à détruire étant directement lié au taux de conversion des espèces pendant leur temps de séjour dans le réacteur.

Nous étudions ici le cas de gaz ou de vapeurs combustibles provenant de processus de vaporisation ou de pyrolyse de liquides ou solides soumis à un traitement thermique.

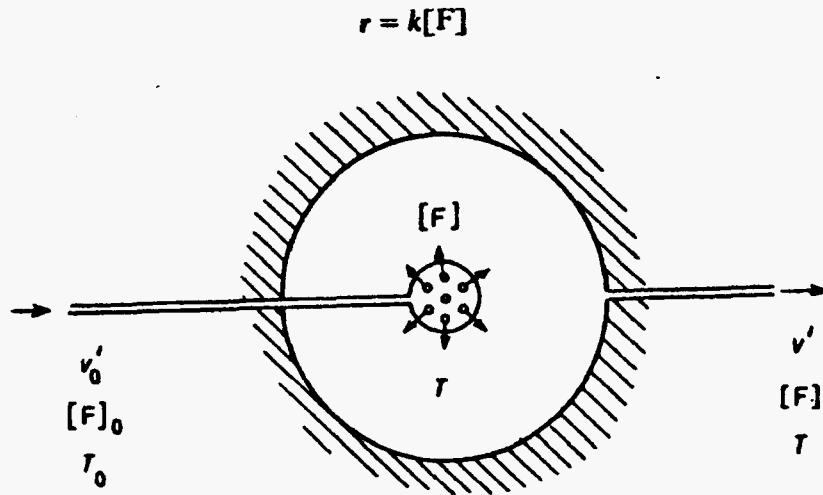
#### **a) conversion d'espèce en réacteur ouvert. Inflammation**

On peut décrire le processus réactionnel d'incinération, en considérant le modèle simplifié suivant [12].

On considère un mélange gaz/air parfaitement mélangé initialement et à la température  $T_0$ . On introduit ce mélange dans un réacteur parfaitement agité, adiabatique, de volume  $V$ , maintenu à la température  $T > T_0$ .

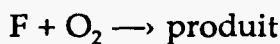
La concentration du mélange initial du mélange à l'entrée est  $[F]_0$  et celui-ci pénètre dans le R.P.A (réacteur parfaitement mélangé) avec un débit volumique  $v'_0$ .

Si on désigne par  $[F]$  la concentration du mélange en sortie, l'hypothèse RPA permet de supposer qu'à tout instant, au sein du réacteur, la concentration du mélange est  $[F]$  égale à sa concentration en sortie. On désigne par  $v'$  le débit volumique de sortie.



*Hypothèse du réacteur parfaitement agité (RPA)*

On considère ici une transformation du composé entrant de type :



assimilable à une réaction du premier ordre :

$$r = k [F]$$

indépendante de  $[O]$  du fait de l'excès d'oxygène supposé ici, avec :

$$k = A e^{-\frac{E}{RT}}$$

ou  $E$  est l'énergie d'activation du composé,  $T$  sa température et  $A$  le facteur d'activation de l'espèce considérée.

Alors, en écrivant le bilan d'espèces entre l'entrée et la sortie du RPA, on a :

$$v'_0 [F_0] - V r = v' [F]$$

soit

$$v'_0 [F_0] - kV [F] = v' [F]$$

d'où une concentration en sortie égale à :

$$[F] = \frac{v'_o [F]_o}{(v' + kV)}$$

La chaleur dégagée dans le processus réactionnel est :

$$\dot{q}_+ = (-\Delta H) V r = (-\Delta H) V k [F] :$$

où  $\Delta H$  est l'enthalpie de combustion du composé. Alors :

$$\dot{q}_+ = (-\Delta H) kV \frac{v'_o [F]_o}{v' + kV}, \text{ soit}$$

$$\dot{q}_+ = (-\Delta H) v'_o [F]_o \frac{e^{-E/RT}}{e^{-E/RT} + \frac{v'}{A V}}$$

L'allure de cette courbe est sigmoïdale comme on peut s'en rendre compte en cherchant les limites en fonction de la température.

1° cas : faibles températures :

Aux faibles températures, on a au dénominateur de l'expression de  $\dot{q}_+$  :  
 $e^{-E/RT} \ll v'/A V$  et l'expression de  $\dot{q}_+$  prend la forme :

$$\dot{q}_+ \underset{T \text{ faibles}}{=} (-\Delta H) \frac{v'_o}{v'} [F]_o A V e^{-E/RT}$$

Cette expression indique, qu'aux faibles températures l'énergie libérée croît exponentiellement avec la température.

La concentration du mélange en sortie correspondante est :

$$[F] \underset{T \text{ faibles}}{=} \frac{v'_o [F]_o}{v' + kV} = \frac{v'_o [F]_o}{A V \left( \frac{v'}{A V} + e^{-E/RT} \right)} \sim \frac{v'_o [F]_o}{v'}$$

indiquant un faible taux de conversion de l'espèce considérée.

## 2e cas : aux fortes températures

La situation inverse se produit et  $e^{-E/RT} \gg v'/AV$ , soit une génération de chaleur  $\dot{q}_+$  de la forme :

$$\dot{q}_+ = (-\Delta H) v'_o [F]_o$$

qui traduit le dégagement maximum de chaleur par combustion complète de l'espèce.

La concentration correspondante du mélange en sortie est :

$$[F]_{T \text{ fort}} = \frac{v'_o [F]_o}{A V e^{-E/RT}}$$

qui tend vers zéro quand T augmente, traduisant la disparition complète de l'espèce considérée.

Dans les deux cas la température des gaz en sortie (ou dans le réacteur) peut s'obtenir en écrivant la puissance  $\dot{q}_-$  évacuée par les gaz après combustion (le réacteur est supposé adiabatique), soit :

$$\dot{q}_- = \rho C_p v' (T - T_o) = \dot{m} C_p (T - T_o)$$

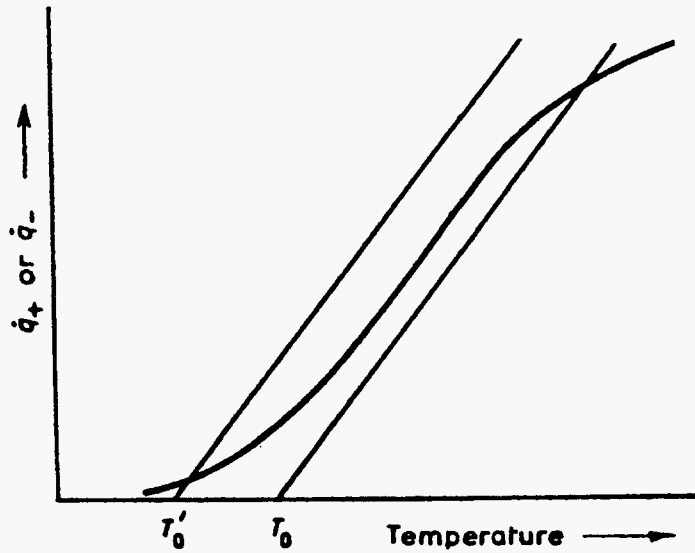
Comme  $\rho$  et  $C_p$  ne dépendent que peu de la température, la chaleur évacuée dépend essentiellement du débit de sortie  $\dot{m} = \rho v'$  et de la température initiale  $T_o$ .

En représentation graphique en fonction de la température T l'expression donnant  $\dot{q}_-$  est une droite, d'ordonnée à l'origine  $T_o$  et de pente proportionnelle à  $\dot{m}$ .

A l'équilibre on a :  $\dot{q}_- = \dot{q}_+$  traduisant la conservation de l'énergie dans le système.

On a reporté dans la figure suivante la solution graphique de cette équation, pour un débit  $\dot{m}$  fixé et deux températures initiales  $T_o$  tel que  $T_o > T'_o$ .



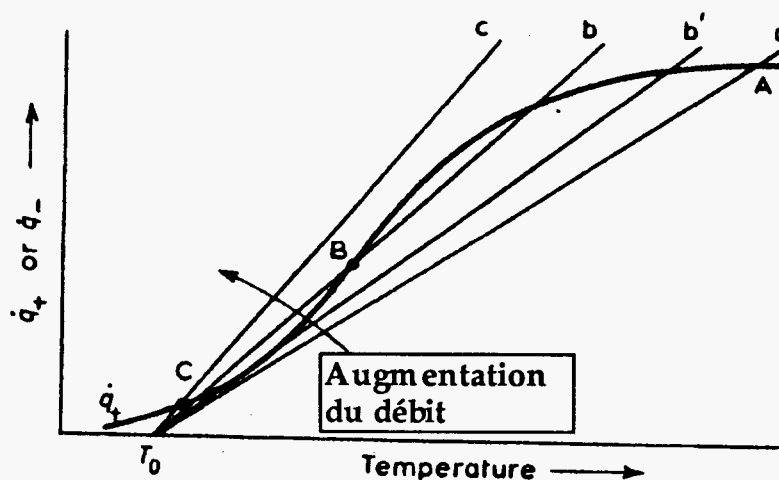


Fonctions  $\dot{q}_+$  et  $\dot{q}_-$  à débit constant, pour deux températures d'entrée

On constate qu'à forte température d'entrée ( $T_0$ ), la solution de  $\dot{q}_+ = \dot{q}_-$  indique un régime à fort taux de conversion, tandis qu'à faible température d'entrée ( $T'_0$ ) le régime atteint correspond à de faibles taux de conversion.

On voit l'intérêt pratique qu'il y a à préchauffer le mélange à l'entrée du réacteur pour atteindre une grande efficacité de destruction.

On a représenté dans la figure suivante ci-dessous, les solutions graphiques de l'équation  $\dot{q}_+ = \dot{q}_-$ , correspondant à l'intersection de la droite  $\dot{q}_-(T)$  avec la sigmoïde  $\dot{q}_+(T)$ , pour une température d'entrée  $T_0$  fixée et un débit  $\dot{m}$  croissant (temps de séjour décroissant)



Représentation graphique des fonctions  $\dot{q}_-$  et  $\dot{q}_+$

La droite des  $\dot{q}_-(T)$ , pour un  $T_0$  donné, a une pente qui augmente avec le débit  $\dot{m}$ , indiquant différentes solutions d'intersection ( $\dot{q}_+ = \dot{q}_-$ ) en fonction du débit  $\dot{m}$ .

A faibles débits  $\dot{m}$  (courbe a) on rencontre le point A définissant le régime conventionnel, à haute température et forte conversion, correspondant à la combustion complète du mélange soit par écriture de  $\dot{q}_+ = \dot{q}_-$  à forte température on a :

$$(-\Delta H) v'_0 [F]_0 = \dot{m} C_p (T - T_0)$$

$$\text{soit } T - T_0 = \frac{(-\Delta H) v'_0 [F]_0}{\dot{m} C_p}$$

A forts débits  $\dot{m}$  (courbes b,c), on rencontre le point C ou B définissant un régime à faible taux de conversion et faible température, soit avec  $\dot{q}_+ = \dot{q}_-$  :

$$\dot{m} C_p (T - T_0) = (-\Delta H) [F] A V e^{-E/RT}$$

On a alors en général deux solutions par  $\dot{m}$  de type :

$$\dot{m} = \frac{(-\Delta H) [F] A V e^{-E/RT}}{C_p (T - T_0)}$$

définissant deux températures  $T$ .

On peut, à ce stade faire la remarque [6], que le point de tangence (obtenue par b') définit une température unique que l'on identifie avec la température  $T_{ig}$  d'inflammation.

$$\frac{d\dot{m}}{dT} = 0 \quad \text{quand } T = T_{ig}$$

Alors en remarquant qu'autour de cette valeur,  $[F]$  et  $C_p$  varient peu, on pourra écrire :

$$\dot{m} = K \frac{e^{-E/RT}}{(T - T_0)}$$

En écrivant  $\frac{d\dot{m}}{dT}$  et en cherchant son zéro, on voit que :

$$\frac{E}{R T_{ig}} \equiv \frac{T_{ig}}{T_{ig} - T_0}$$

En résolvant cette équation pour  $T_{ig}$ , on trouve :

$$T_{ig} = \frac{1}{2} \frac{E}{R} \left[ 1 - \left( 1 - \frac{4 R T_0}{E} \right)^{1/2} \right]$$

Ainsi, la température  $T_{ig}$  d'inflammation dépend essentiellement de  $E$  (c'est-à-dire de la nature chimique du composé et en moindre mesure de sa température initiale  $T_0$ ).

Par exemple pour  $E = 50$  kcal/mol et  $T_0 = 1000$  K, la température trouvée est égale à 1050 K.

Au moment de l'inflammation, avec  $RT < E$ , on voit par un développement de l'expression ci-dessus que :

$$T_{ig} = T_0 + \frac{RT_0^2}{E}$$

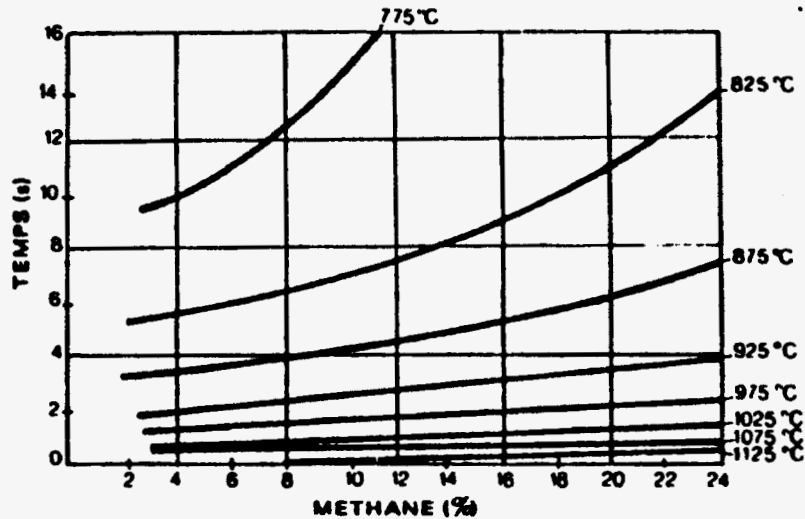
soit un écart de température :

$$T_{ig} - T_0 = \frac{RT_0^2}{E}$$

### b) Délais d'inflammation $t_{ig}$

Une autre caractéristique importante du processus d'inflammation est le délai nécessaire pour obtenir l'inflammation du mélange à la température  $T_{ig}$ , assimilable à une période d'induction de la réaction. On désigne cette période par délai d'inflammation  $t_{ig}$ .

Les variations du délai d'inflammation d'un mélange de composition variable sont reportés à titre d'exemple dans la figure suivante pour le cas du mélange  $CH_4$ /air paramétré en température du mélange [1].



Délais d'inflammation du méthane ( $T_{ai} = 660^\circ\text{C}$ )  
en fonction de sa composition

Ce délai  $t_{ig}$  peut être estimé à l'aide du modèle du réacteur parfaitement agité décrit précédemment.

Le temps de séjour moyen du mélange dans le réacteur est :

$$\tau = \frac{\rho V}{\dot{m}} = \frac{\rho V C_p (T_{ig} - T_0)}{(-\Delta H) [F] A V} e^{E/RT} \text{ soit :}$$

$$\tau = \frac{\rho C_p}{(-\Delta H) [F] A} (T_{ig} - T_0) e^{E/RT}$$

A l'inflammation, on a vu que  $T_{ig} - T_0 \sim \frac{RT_{ig}^2}{E}$ , ce qui nous conduit par substitution à :

$$t_{ig} = \frac{\rho C_p R}{(-\Delta H) [F] A E} T_{ig}^2 e^{\frac{E}{RT_{ig}}}$$

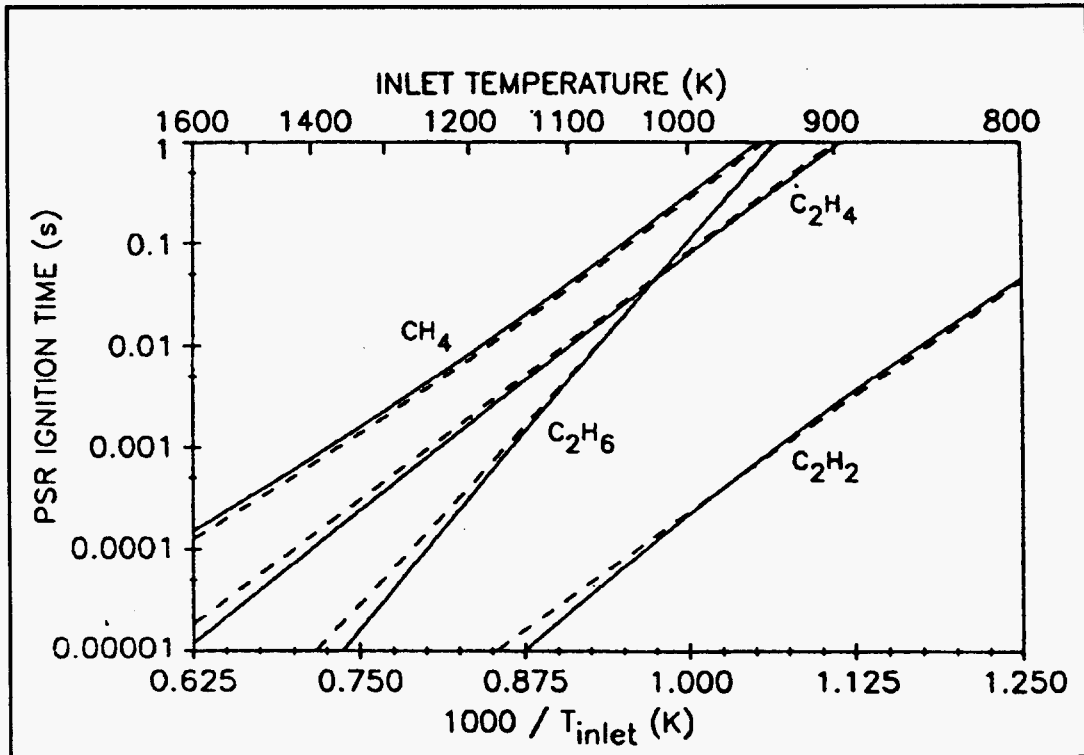
ou, sous forme logarithmique :

$$\text{Log } t_{ig} = \frac{E}{RT_{ig}} - 2 \text{Log } \frac{1}{T_{ig}} + K$$

Au moment de l'inflammation on a  $T_{ig} \sim T_0$  pour les composés tels que  $E > RT$ . Alors, en portant le résultat en représentation  $\text{Log } t_{ig}$  en fonction de  $\frac{1}{T_{ig}}$ , on a :

$$\frac{d(\text{Log}t_{ig})}{d\left(\frac{1}{T_{ig}}\right)} \cong \frac{E}{R} - 2 T_{ig}$$

On a représenté dans la figure suivante, ce type de résultat obtenu par Mulholland et al [13] pour différents composés :



*Délag d'inflammation pour différents composés, en fonction de la température initiale du mélange*

On constate qu'en représentation  $\text{Log} t_{ig}$  en fonction de  $\frac{1}{T}$  on obtient sensiblement des droites de pente pratiquement égales à  $\frac{E}{R}$ .

Les valeurs des pentes  $\frac{E}{R}$  déduites de ces résultats sont reportés ci-dessous :

Composé	E (kcal/mole)
CH <sub>4</sub>	52 ± 2
C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	76 ± 5
C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	51 ± 3
C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>	45 ± 5

valeurs en bon accord avec les données disponibles par ailleurs, pour ces composés.

On constate, sur ces résultats que, par exemple, pour du méthane dans l'air à la pression atmosphérique, le délai d'inflammation qui est de 1 ms pour un  $T_0$  de 1350 K tombe à 0,1 s pour une température de 1050 K et atteint des valeurs de 1 s pour une température de 950 K.

On voit ici l'importance de la température du gaz ambiant sur le délai. Pour des températures inférieures à 950 K il faudra, par exemple, dans le cas du méthane, assurer des temps de séjour supérieurs à 1 s pour obtenir l'inflammation et donc la dégradation thermique du composé.

On remarque également que dans ce type de représentation, les délais qui seraient obtenus par extrapolation pour des températures  $T_0$  correspondant à la température d'auto-inflammation  $T_{ai}$  ( $= 873$  K pour  $CH_4$ ), seraient supérieurs à 1 s (voisin de 2 - 3 s pour du méthane). On voit donc que la condition  $T_0 = T_{ai}$  conduit à des temps trop longs, incompatibles avec les temps de séjour moyens pratiqués ( $\sim 2$  s). Un bon respect du niveau de température de destruction (réacteur de post-combustion) voisin de 1200 K conduit à l'inverse à des temps faibles de l'ordre de un centième de seconde pour du méthane par exemple.

Mulholland et al [13] ont étendu leur étude expérimentale au cas de réacteur piston.

On présente ci-dessous leurs résultats concernant la température critique  $T_0 = T_{ig}$  nécessaire à l'inflammation du composé gazeux pour des délais d'inflammation de 1s.

Composé	$T_{ig}$ (1s) modèle RPA (K)	$T_{ig}$ (1s) modèle Piston (K)	$T_{ai}$ (K)
$CH_4$	950	990	813
$C_2H_6$	940	980	788
$C_2H_4$	890	950	763
$C_2H_2$	700	750	578

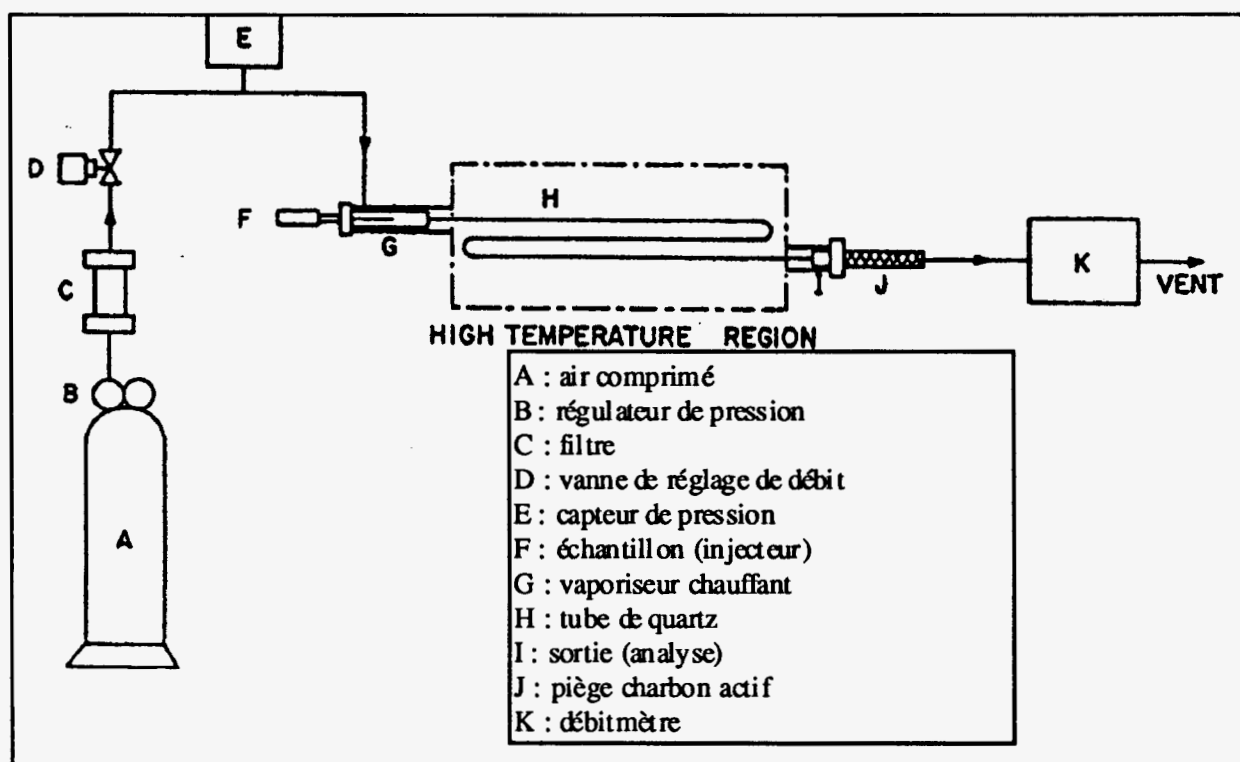
On constate que les valeurs obtenues pour  $T_{ig}$  diffèrent peu entre les cas RPA et piston. Dans les deux cas, la température d'ignition à 1 s est nettement supérieure aux valeurs connues des températures d'auto-inflammation  $T_{ai}$ , en respectant cependant le classement des composés par ordre de niveau de température d'auto-inflammation.

#### 4- Dégradation thermique en réacteur ouvert sous flamme. Stabilité thermique T<sub>99,99</sub> [2] et DRE

Une série d'études conduites essentiellement au centre de recherche de l'Université de Dayton (UDRI, US) [14,15] et dans la Société Union Carbide (Virginia, US) [16,17,18] a été développée pour étudier le taux de conversion d'espèces organiques pré-sélectionnées, en réacteur ouvert de type piston.

Ce type de réacteur ("sans flamme") consiste en un tube de quartz de diamètre voisin de 1 à 2 mm de diamètre intérieur, de 80 à 150 cm de long, chauffé extérieurement par un four assurant une zone de chauffage uniforme le long du tube. Les gaz ou vapeurs à caractériser sont injectés en amont de la zone de chauffe et analysés en sortie.

On présente dans la figure ci-dessous ce type de dispositif.



*Schéma général du dispositif TDAS (Thermal Decomposition Analytical System)*

Ces auteurs considèrent des réactions d'oxydation, avec excès d'air, de sorte que les réactions sont de type premier ordre, indépendantes de la concentration en oxygène, soit, comme précédemment :



$$\text{avec } r = k [F] = - \frac{d[F]}{dt} \text{ et } k = A e^{-E/RT}$$

En désignant par  $C_A$  la concentration massique de l'espèce, on a également :

$$-k C_A = \frac{dC_A}{dt}$$

Pour une concentration en entrée de  $C_{A,0}$ , celle-ci sera ramenée au bout du temps  $t$ , correspondant à un temps de passage, à :

$$C_A = C_{A,0} e^{-kt}$$

$$\text{soit } \log_{10} \frac{C_A}{C_{A,0}} = - \frac{k}{2,303} t$$

Compte tenu, des délais d'inflammation, les résultats expérimentaux sont mieux représentés [8,9] par une équation de type :

$$\log_{10} \left( \frac{C_A}{C_{A,0}} \right) = \frac{k}{2,303} (t - t_1) \quad \text{si } t > t_1$$

$$\log_{10} \left( \frac{C_A}{C_{A,0}} \right) = 0 \quad \text{si } t < t_1$$

Avec  $t_{ig} \text{ (s)} = X_1 - X_2 T \text{ (°F)}$ , représentant un délai apparent d'inflammation ( $t_{ig}$ ) avec  $X_1$  et  $X_2$  des constantes dépendantes du composé et  $T$  la température considérée (°F). Ce délai diminue ici linéairement avec la température.

Par exemple, avec  $T \text{ (°F)} (T \text{ (°C)} = \frac{5}{9} (T \text{ (°F)} - 32))$  on a :

Composé	$X_1$	$X_2$	$T_{ig} \text{ (°F)}$	$T_{ai} \text{ (°F)}$
Méthane	1,9	0,00117	1200	999
Benzène	2,59	0,00178	1275	1044
Propylène	4,54	0,00323	1200	851
Toluène	1,35	0,000922	1275	997
Ethanol	2,10	0,0015	1250	793
Chlorure de vinyle	0	0	1250	882
Acroléine	0	0	800	453

Cela indique, par exemple, pour le méthane au dessus de sa température d'ignition, une expression du délai sous forme :



$$t_{ig} (s) = 1,9 - 0,00117 T (^\circ F)$$

soit à 1200 °F (649°C = 922 K) un délai d'inflammation égal à :

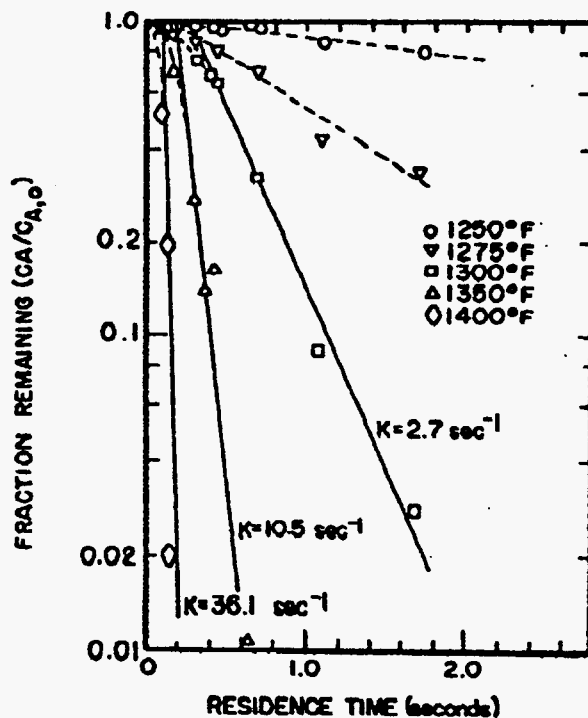
$$t_{ig} (s) = 1,9 - 0,00177 \times 1200 = 0,5 s.$$

On voit à titre de comparaison avec [2] qu'à la température de 1050 K (777°C = 1431°F) ( $^\circ F = \frac{9}{5} ^\circ C + 32$ ), on trouve un délai de 0,2 s à comparer avec les 0,1 s de [6].

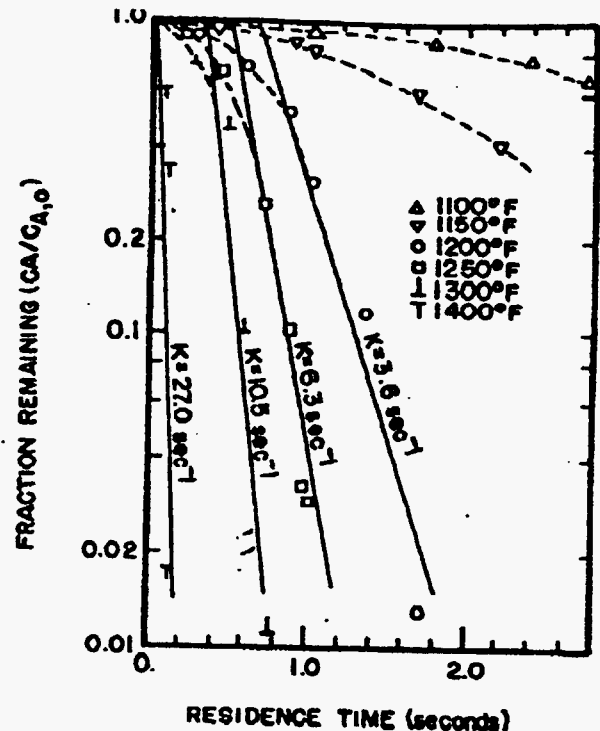
Ces délais peuvent devenir particulièrement longs pour des molécules de type benzène ou propylène.

Pour des temps supérieurs aux délais d'inflammation ( $t > t_1$ ), on peut représenter, par les lois donnant le rapport  $C_A/C_{A0}$  (fraction résiduelle après le temps de passage) par des droites de pentes négatives égales à  $k/2,303$ . Pour des droites  $t < t_1$ , les courbes s'écartent des droites pour rejoindre l'origine.

On montre dans la figure suivante, un exemple de tels tracés [17] pour deux composés à forts délais d'inflammation.



Fraction restante  $C_A/C_{A0}$  pour du benzène en fonction de la température et du temps de séjour



Fraction restante  $C_A/C_{A0}$  pour du propylène en fonction de la température et du temps de séjour

On voit que les constantes de vitesse  $k$  dépendent du composé et de la température.

Leur détermination expérimentale par la mesure des pentes permet de remonter aux valeurs des paramètres  $A$  et  $E$  (facteur de fréquence, énergie d'activation) des composés avec :

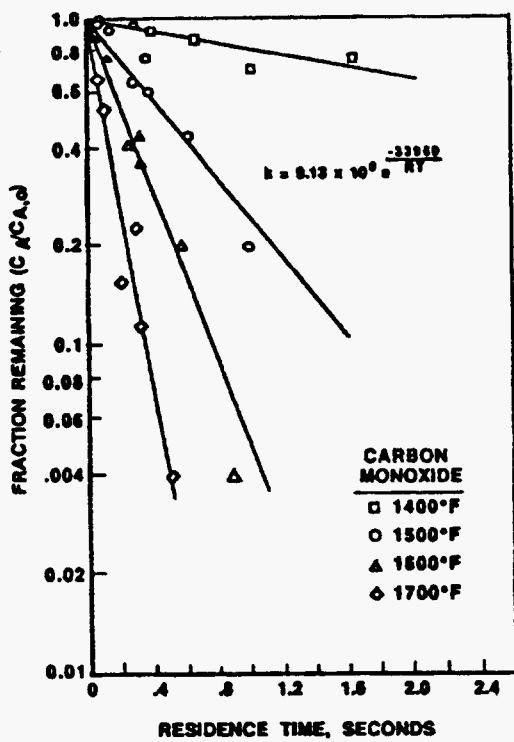
$$\text{Log } k = -\frac{E}{RT} + \text{Log } A.$$

en représentation  $\text{Log } k$  en fonction de  $\frac{1}{T}$ .

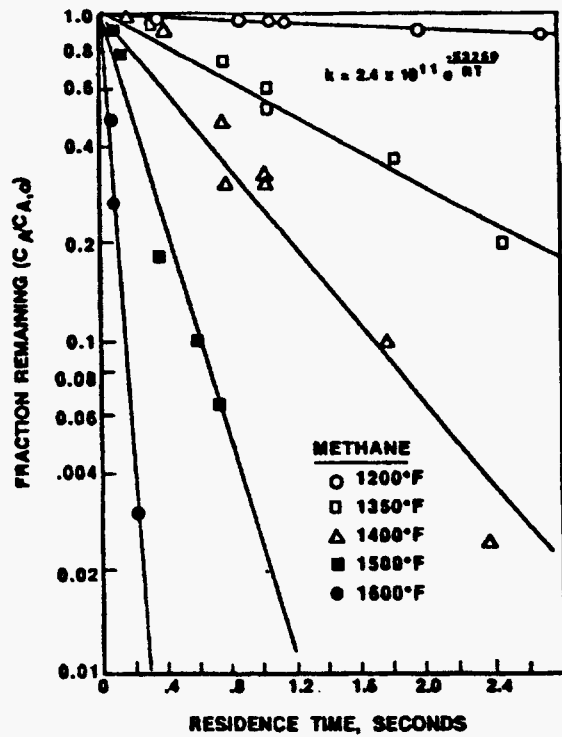
Les valeurs trouvées pour  $E'$  (cal/g. mol) et  $A$  ( $s^{-1}$ ) sont reportées ci-dessous pour les composés évoqués plus haut.

Composé	$A$ ( $s^{-1}$ )	$E$ (Cal/g.mol)
Méthane	$1,68 \times 10^{11}$	52100
Benzène	$7,43 \times 10^{21}$	95900
Propylène	$4,63 \times 10^8$	34200
Toluène	$2,28 \times 10^{13}$	56500
Ethanol	$5,37 \times 10^{11}$	48100
Chlorure de vinyle	$3,57 \times 10^{14}$	63330
Acroléine	$3,3 \times 10^{10}$	35900

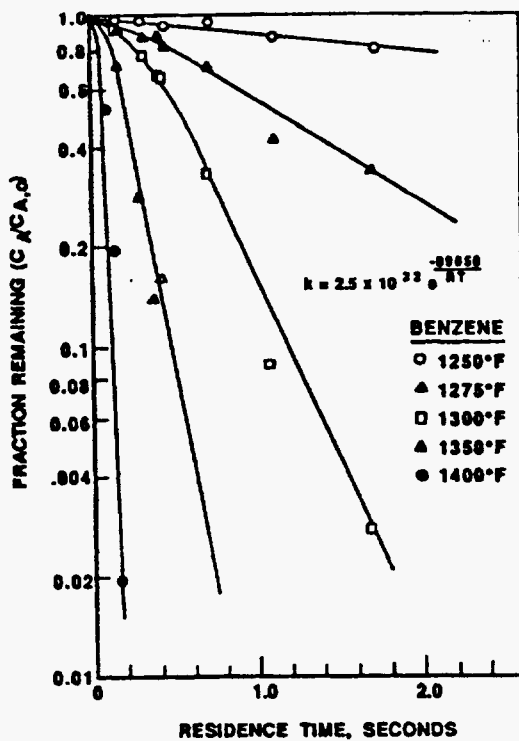
On reporte dans la figure suivante les résultats obtenus sur 4 composés, incluant le monoxyde de carbone.



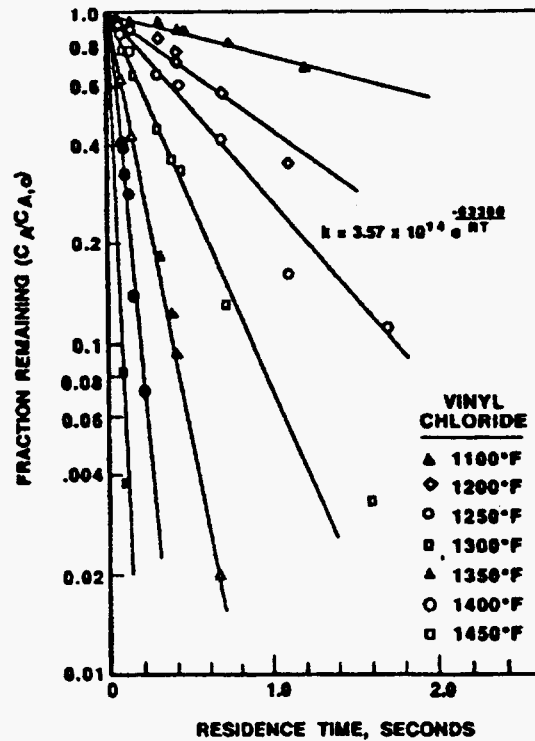
(a) Carbon Monoxide



(b) Methane



(c) Benzene



(d) Vinyl chloride

*Exemple de vitesse d'oxydation en fonction de la température*

Ces résultats permettent d'introduire une nouvelle température caractéristique des composés, à savoir la  $T_{99,99}(t)$  définie comme la température nécessaire pour obtenir un taux de conversion de l'espèce considérée de 99,99 %, au bout du temps de séjour  $t_s$ .

Ce taux de conversion est égal à :

$$\frac{C_{A,0} - C_A(t_s)}{C_{A,0}} = 1 - e^{-k t_s}$$

Il est désigné dans la littérature anglo-saxonne par DE ou DRE (Destruction Efficiency, Destruction/Removal Efficiency), soit :

$$DRE = 100 \left( 1 - \frac{C_A(t_s)}{C_{A,0}} \right)$$

Le paramètre DRE, équivalent à un rendement de destruction d'espèce doit être élevé. Ainsi, par exemple, si  $DRE = 99\%$ , on a  $C_A/C_{A,0} = 0,01$ , signifiant que la concentration de l'espèce en sortie n'est plus que le centième de sa valeur initiale.

De même par un  $DRE = 99,9\%$  on aura  $C_A/C_{A,0} = 1/1000$  et pour un  $DRE$  de  $99,99\%$  on aura  $C_A/C_{A,0} = 1/10000$ , correspondant au 10 millième de la concentration d'entrée.

Alors,

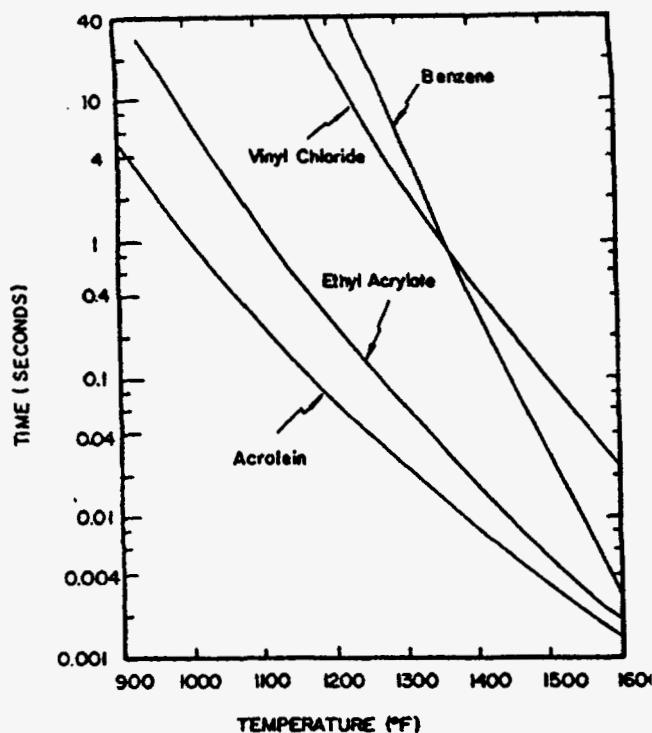
$$DRE = 100 (1 - e^{-k t_s})$$

Alors,

$$e^{-k t_s} = 1 - \frac{DRE}{100}$$

$$t_s = \frac{1}{A} \text{Log} \frac{1}{\left(1 - \frac{DRE}{100}\right)} e^{E/RT}$$

On a représenté dans la figure suivante [18] la dépendance  $t_s(T)$  pour différents composés pour une DRE égale à 99,9 %.



*Relation temps de séjour/température pour une DRE de 99 %*

On constate, dans le cas du benzène (forte énergie d'activation), qu'une élévation de température de 1200°F (648,9°C) à 1450°F (787,8°C) soit 138,9°C d'augmentation entraîne une réduction du temps de séjour de 100 s à seulement 0,1 s (un facteur 1000).

Par contre, dans le cas de l'acroléine (faible énergie d'activation), cette dépendance à la température est moins sensible. Pour le même écart de température, (1200 - 1450°F) le temps de séjour nécessaire pour une destruction à 99,9 % passe de 0,07 s à 0,005 s, soit une réduction d'un facteur 14 seulement.

On voit que pour une espèce considérée (E, A) ce temps décroît exponentiellement quand la température croît.

En prenant  $t_s = 1$  s on définira la température  $T_{99,99}$  (1s) comme la température qui permet une dégradation du composé à 99,99 % au bout d'une seconde (réduction de 1/10000 ème)

$$1 = \frac{1}{A} \text{Log} \frac{1}{(1 - 0,9999)} e^{\frac{E}{RT_{99,99}(1s)}} = \frac{9,21}{A} e^{\frac{E}{RT_{99,99}(1s)}}$$

$$\text{soit } T_{99,99} (1s) = \frac{(E/R)}{\text{Log } A - 2,22} = T_{99,99}/1$$

De même, on aura en prenant  $t_s = 2$  s :

$$T_{99,99}(2s) = \frac{(E/R)}{\text{Log } A - 1,527} = T_{99,99}/2$$

Ainsi, par exemple, pour du chlorure de vinyle ( $E = 63300$  Cal/g.mol et  $A = 3,57 \cdot 10^{14} \text{ s}^{-1}$ ), on trouve :

$$T_{99,99}(1s) = 1018 \text{ K} = 745^\circ\text{C} = 1373 \text{ (}^\circ\text{F)}$$

$$T_{99,99}(2s) = 996 \text{ K} = 723^\circ\text{C} = 1333 \text{ (}^\circ\text{F)}$$

L'ensemble des résultats obtenus par Lee et al [17,18] est reporté dans le tableau ci-dessous, en incluant les valeurs de A, E, les délais d'inflammation  $T_{ig}$  (s) et les valeurs calculées des températures pour un DRE de 99,99 à 1 et 2 s ( $T_{99,99/1s}$ ,  $T_{99,99/2s}$ ).

Compound	A	E cal/g-mole	$Z_1$	$Z_2$	Lower Limiting Temperature ( $^\circ\text{F}$ )	Auto- Ignition Temperature ( $^\circ\text{F}$ )	Calculated Destruction <sup>(a)</sup> Temperature from Eq. 4	
							$T_{99,99}$ at 1 sec. ( $^\circ\text{F}$ )	$T_{99,99}$ at 2 sec. ( $^\circ\text{F}$ )
Methane	$1.68 \times 10^{11}$	52100	1.90	0.00117	1200	999	1542	1403
Ethane	$5.65 \times 10^{14}$	63600	7.33	0.0052	1275	959	1366	1326
Propane	$5.25 \times 10^{19}$	85200	1.02	0.000686	1200	871	1328	1298
Ethylene	$1.37 \times 10^{12}$	50800	0	0	1200	842	1323	1278
Propylene	$4.63 \times 10^8$	34200	4.54	0.00323	1200	851	1318	1246
Butene	$3.74 \times 10^{14}$	58700	2.12	0.00157	1150	723	1231	1197
Benzene	$7.43 \times 10^{21}$	95900	2.59	0.00178	1275	1044	1350	1321
Toluene	$2.28 \times 10^{13}$	96500	1.35	0.000922	1275	997	1337	1292
Acrolein	$3.30 \times 10^{10}$	39900	0	0	800	453	1018	973
Ethanol	$5.37 \times 10^{11}$	48100	2.10	0.0015	1250	793	1306	1256
Ethyl Acrylate	$2.19 \times 10^{12}$	46000	0	0	1000	721	1131	1090
Acrylonitrile	$2.13 \times 10^{12}$	52100	0.375	0.00025	1250	898	1342	1296
Triethylamine	$8.10 \times 10^{11}$	43200	1.20	0.0010	950	450	1101	1059
Vinyl Chloride	$3.57 \times 10^{14}$	63300	0	0	1250	882	1373	1333
1,2-Dichloroethane	$4.82 \times 10^{11}$	45600	0.948	0.00073	1050	775	1214	1174

(a) Assuming plug-flow reaction conditions.  
Backmixing could increase the temperatures required, substantially, as shown in Table II.

### Résumé des grandeurs caractéristiques pour la destruction thermique de composés organiques

On aurait également pu définir des critères  $T_{99,0}$ ,  $T_{99,90}$  correspondant respectivement à des DRE de 99 % et 99,9 %. On peut montrer que ces critères peuvent se déduire du critère  $T_{99,99}$  par les relations simples [8].

$$T_{99,9} \text{ (}^\circ\text{F)} = T_{99} \text{ (}^\circ\text{F)} + 25 \text{ (}^\circ\text{F)}$$

$$T_{99,99} \text{ (}^\circ\text{F)} = T_{99} \text{ (}^\circ\text{F)} + 50 \text{ (}^\circ\text{F)}$$

à 1 ou 2 secondes.

Ceci correspond en degrés Celsius à :

$$T_{99,9} \text{ (}^\circ\text{C)} = T_{99} \text{ (}^\circ\text{C)} + 14 \text{ }^\circ\text{C}$$
$$T_{99,99} \text{ (}^\circ\text{C)} = T_{99} \text{ (}^\circ\text{C)} + 27,8 \text{ }^\circ\text{C}$$

On voit qu'une augmentation d'une dizaine de degrés suffit, au dessus de la température limite d'inflammation, à faire descendre la concentration résiduelle de l'espèce en sortie au millième puis au dixmillième de sa valeur à l'entrée.

Une corrélation a été établie par Lee [17] qui permet le calcul des températures  $T_{99,9}$  et  $T_{99,99}$  pour un temps de séjour  $t_s$  variable, et ce en fonction de grandeurs caractéristiques des espèces, à savoir :

- $V_1$  = nombre de carbones par molécule
- $V_2$  = aromaticité (non = 0 ; oui = 1)
- $V_3$  = double liaison carbone (non = 0 ; oui = 1)
- $V_4$  = nombre d'atome d'azote
- $V_5$  = nombre d'atome d'oxygène
- $V_6$  = rapport hydrogène/carbone
- $V_7$  = double liaison carbone avec interaction avec un chlore (non=0, oui=1)
- $V_8$  = température d'auto-inflammation  $T_{ai}$  ( $^\circ\text{F}$ )
- $V_9$  = Logarithme népérien du temps en (s)

Ces corrélations s'écrivent :

$$T_{99,9} \text{ (}^\circ\text{F)} = 650 - 17,9 V_1 + 165 V_2 + 75,1 V_3 + 88,7 V_4 - 22,7 V_5 + 89,7 V_6 + 69,9 V_7 + 0,523 V_8 - 64,0 V_9$$

$$T_{99,99} \text{ (}^\circ\text{F)} = 660 - 19,3 V_1 + 176 V_2 + 82,2 V_3 + 95,7 V_4 - 17,8 V_5 + 93,1 V_6 + 69,9 V_7 + 0,522 V_8 - 63,3 V_9$$

Dans chacune de ces corrélations, le poids des termes en  $V_8$  et  $V_9$  est dominant, montrant l'importance du critère de température d'auto-inflammation ( $V_8$ ) et du temps de séjour ( $V_9$ ) viennent ensuite par ordre d'importance dans leur contribution les termes  $V_6$  (rapport hydrogène/carbone),  $V_4$  (nombre d'atome d'azote) et à même niveau  $V_3$  (double liaison carbone).

En résumé on aura, dans ces corrélations :

$$V_8, V_9 > V_6 > V_4, V_3 > V_2 > V_7, V_1 > V_5$$

On constate par ailleurs que, en fonction du signe sous lequel apparaissent les différentes contributions dans la corrélation, que certains facteurs ont tendance à augmenter les  $T_{99,99}$  ( $V_2, V_3, V_4, V_6, V_7, V_8$ ) et d'autres ont tendance à les diminuer ( $V_1, V_5, V_9$ ).

Par exemple, toutes choses étant égales par ailleurs, les composés à fortes températures d'auto-inflammation  $T_{ai}$  ( $V_8$ ) auront des  $T_{99,99}$  élevés, indiquant

que la température d'auto-inflammation est bien un critère possible de classement des molécules vis à vis du critère de destruction thermique. De même, mais en moindre mesure pour le rapport hydrogène/carbone de la molécule ( $V_6$ ). Les auteurs ont signalé [18] que la présence de soufre dans les composés, non prise en compte dans les corrélations précédentes, est susceptible d'influer directement le résultat (avec un poids identique à  $V_8$ ,  $V_9$ ) en abaissant les  $T_{99,99}$ . Ce résultat reste à confirmer.



## REFERENCES

- [1] MEDARD, L. Les explosifs occasionnels, tome 1, 2<sup>e</sup> éd., p. 162, Technique et Documentation Lavoisier, 1987.
- [2] SUZUKI, T. Empirical relationship between Lower Flammability Limits and Standard Enthalpies of Combustion of Organics Compounds, *Fire and Materials*, 18, p. 333-336, 1994.
- [3] BRETHERICK, L. Handbook of Reactive Chemical Hazards, 3rd edn, Butterworths, London, 1976.
- [4] National Fire Protection Association, Fire Protection Hand book, 14th edn, Boston, 1976.
- [5] PEDLEY, J.B., R.D. NAYLOR and S.P. KIRBY. Thermochemical Data of Organic Compounds, 2nd edn, Chapman and Hall, New York, 1986.
- [6] MULHOLLAND, J.A., A.F. SAROFIM and J.M. BEER. Chemical Effects of fuel chlorine on the Envelope Flame Ignition of droplet streams. Proceedings of the 2nd Int. Congress on Toxic Combustion by products, Salt Lake City, 26-29 March 1991, p. 405-417.
- [7] SUZUKI, T., K. OHTAGUCHI and K. KOIDE. Correlation and prediction of autoignition temperature of hydrocarbons using molecular properties, *J. of Chem. Eng. of Japan*, 25, n°5, p. 606-608, 1992.
- [8] LYMAN W.J., W.J. REEHL and D.H. ROSENBLATT. Handbook of Chemical Estimation Methods, Mc Graw Hill, New-York, 1982.
- [9] REID, R.C., J.M. PRAUSNITZ and T.K. SHERWOOD. The Properties of Gases and Liquids, 3rd edn, Mac Graw Hill, New-York, 1977
- [10] BONDI, A. *J. Phys. Chem.*, 68, p. 441, 1964.
- [11] KIER, L.B. and L.H. HALL. Molecular Connectivity in Structure-Activity Analysis, Research Studies Press, 1986.
- [12] BARNARD J.A. and N. BRADLEY. Flame and Combustion, 2nd edn, Chapman and Hall, New-York, p. 78, 1985.
- [13] MULHOLLAND, J.A., A.F. SAROFIM and J.M. BEER. On the derivation of global Ignition Kinetics from a detailed mechanism for single Hydrocarbon Oxidation, *Comb. Sci. and Tech.*, 87, p. 139-156, 1992.
- [14] CARNES R.A., D.S. DUVALL and W.A. RUBEY. A laboratory approach to thermal degradation of Organics Compounds.

Proceedings of the 70th Annual Meeting of the Air Pollution Control Association, Toronto, Canada, June 20-24, 19-3, 1977.

- [15] DUVALL D.S., W.A. RUBEY and J.A. MESCHER. Application of the Thermal Decomposition Analytical System (TDAS).  
Proceedings of the 73rd Annual Meeting of the Air Pollution Control Association, Montreal, Quebec, June 22-27, 8-1, 1980.
- [16] LEE K.C., H.J. JAHNES and D.C. MACAULEY. Thermal Oxydation of Selected Organic Compounds.  
Proceedings of the 71st Annual Meeting of the Air Pollution Control Association, Houston, Texas, June 25-30, 58-6, 1978.
- [17] LEE K.C., J.L. HANSEN and D.C. MACAULEY. Predictive model of time-temperature requirements for thermal destruction of dilute organic vapors.  
Proceedings of the 72nd Annual Meeting of the Air Pollution Control Association, Cincinnati, Ohio, June 24-29, 10-1, 1979.
- [18] LEE K.C., N.MORGAN, J.L. HANSEN and G.M. WHIPPLE. Revised Model for the prediction of the time-temperature requirements for thermal destruction of dilute organic vapors and its usage for predicting compound destructability.  
Proceedings of the 75th Annual Meeting of the Air Pollution Control Association, New Orleans, Louisiana, June 20-25, 5-3, 1982.

## **CHAPITRE 3**

### **CONDITIONS D'INFLAMMATION ET DE COMBUSTION DES LIQUIDES POINT ECLAIR - TEMPERATURES LIMITEES D'INFLAMMABILITE PULVERISATION - TEMPS CARACTERISTIQUES (VAPORISATION/COMBUSTION)**

---

#### **1- INFLAMMATION DES LIQUIDES AU REPOS**

- a) Point éclair - Corrélations
- b) Combustion auto-entretenu à la surface libre d'un liquide

#### **2- INFLAMMATION DES LIQUIDES DISPERSÉS**

- a) Pulvérisation des liquides - Tailles des gouttes obtenues
- b) Vaporisation/Combustion de gouttes liquides et de spray

## 1- Inflammation des liquides au repos

### a) Point éclair - Corrélations

Si on chauffe un liquide plus ou moins volatil à partir de sa température initiale  $T_0$ , celui-ci émet des vapeurs qui peuvent s'enflammer au contact d'une source externe (flamme pilote, étincelle ...).

On définira le point éclair (flash point) d'un liquide comme suit : c'est la température minimale  $T_f$  à laquelle il faut porter ce liquide pour que les vapeurs émises s'enflamment en présence d'une flamme dans des conditions normalisées. [1]

La détermination expérimentale du point éclair d'un liquide est basée sur le chauffage de liquide en coupelle ouverte ou fermée, la température obtenue étant de 5 à 10°C plus élevée en creuset ouvert qu'en creuset fermé. Différentes méthodes ont été proposées, compte tenu de répétabilité modérée des résultats. Ceux-ci dépendant, en effet, du mode de chauffage et surtout de sa "vitesse", de l'agitation ou non du liquide, de la position de la flamme pilote au dessus de la surface libre du liquide.

Dans un cas idéal, on peut dire que le point flash correspond à la température du liquide pour lequel l'équilibre liquide-vapeur au dessus de l'interface liquide/air, entraîne une concentration du mélange air/vapeur égale à la concentration limite inférieure permettant son inflammation en présence d'une source externe d'énergie.

Considérons une enceinte, renfermant un liquide volatil en équilibre avec sa vapeur dans l'air, le tout à une température  $T_0$  et sous une pression  $P_0$ . La concentration de la vapeur dans le mélange avec l'air (en supposant celui-ci homogène) est donnée par la pression de vapeur saturante du liquide à la température considérée. Si on admet que cette vapeur se comporte comme un gaz parfait, alors la fraction molaire de cette vapeur dans l'air est égale à  $P/P_0$ , où  $P$  est la pression partielle de la vapeur. Cette pression partielle est une fonction rapidement croissante avec la température.

Pour la plupart des liquides on peut écrire (corrélation d'Antoine) :

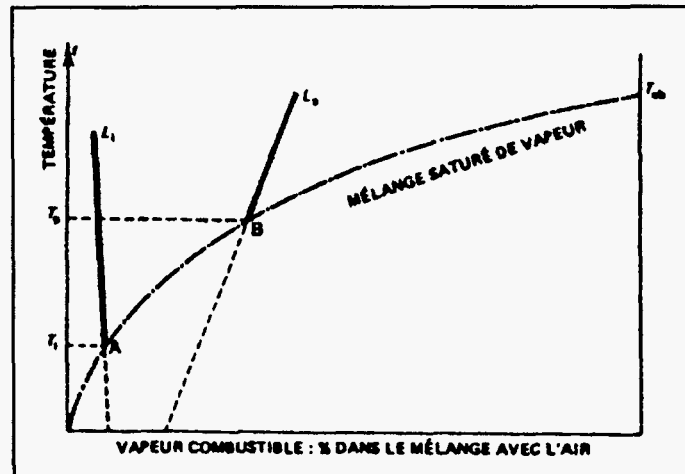
$$\log P = A - \frac{B}{C+T}$$

où  $A$ ,  $B$  et  $C$  sont des constantes caractéristiques du liquide et  $T$  la température (°C).

A basse température la concentration volumique correspondant à la fraction molaire  $P/P_0$  reste faible; inférieure à la limite d'inflammabilité  $L_i$  du mélange vapeur/air.

A des températures élevées la concentration volumique peut dépasser la limite supérieure  $L_S$  d'inflammabilité. Il y a donc en toute rigueur deux températures limites pour lesquelles le mélange formé avec l'air au dessus de l'interface est susceptible de s'enflammer en présence d'une source externe. Ces deux températures sont désignées par températures limites d'inflammabilité, notées  $T_i$  et  $T_s$  (chapitre 2).

On a représenté dans la figure ci-dessous ces deux solutions limites correspondant à l'intersection de la courbe de pression de vapeur saturante avec les courbes limites définissant le domaine d'inflammabilité ( $L_i$ ,  $L_s$ ) du liquide considéré en représentation concentration/température.

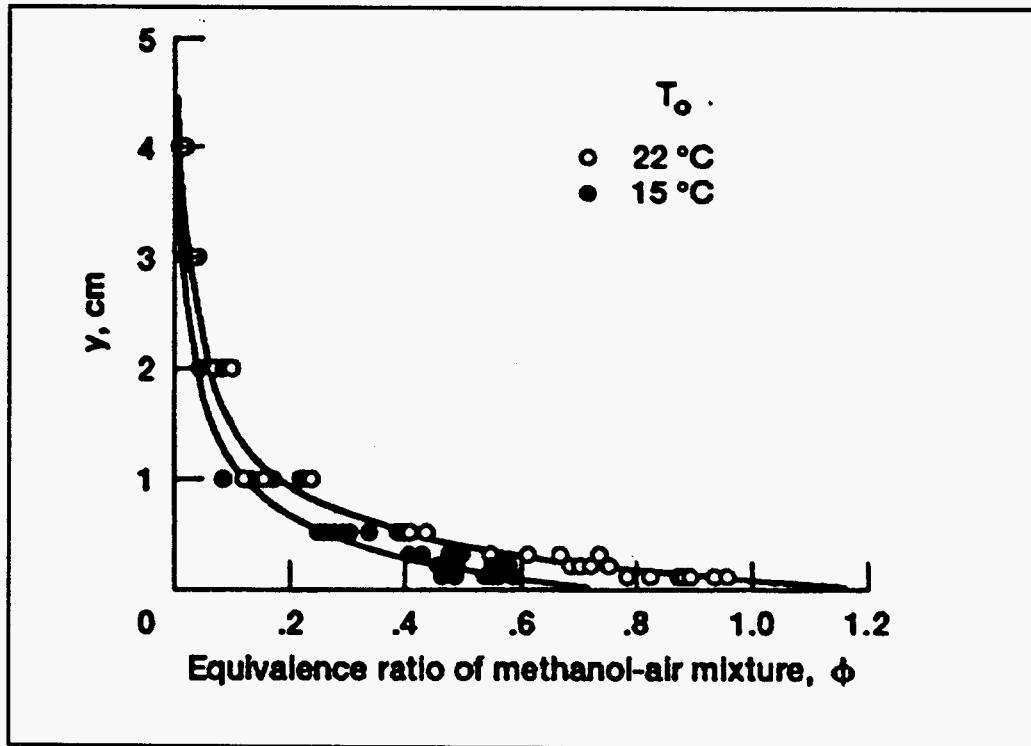


*Températures limites d'inflammabilité d'un liquide au repos dans l'air*

On voit que la limite inférieure  $T_i$ , par exemple, s'obtient en déterminant la température du liquide pour laquelle la pression partielle devient égale à  $\frac{L_i}{100} P_0$ .

Compte tenu des hypothèses effectuées, le point flash mesuré dans la pratique ne coïncide pas avec la température limite inférieure  $T_i$  ; il en est évidemment voisin, mais reste légèrement supérieur, particulièrement dans les méthodes de détermination en coupelle ouverte.

En effet, la définition de la température limite inférieure suppose l'existence d'un mélange air/vapeur parfaitement homogène au dessus de l'interface air-liquide. Dans la pratique, il n'en est pas de même. Hirano et al [2] ont mesuré la répartition de concentration verticale de la vapeur en mélange avec l'air sur l'interface. Leurs résultats sont reportés dans la figure suivante.

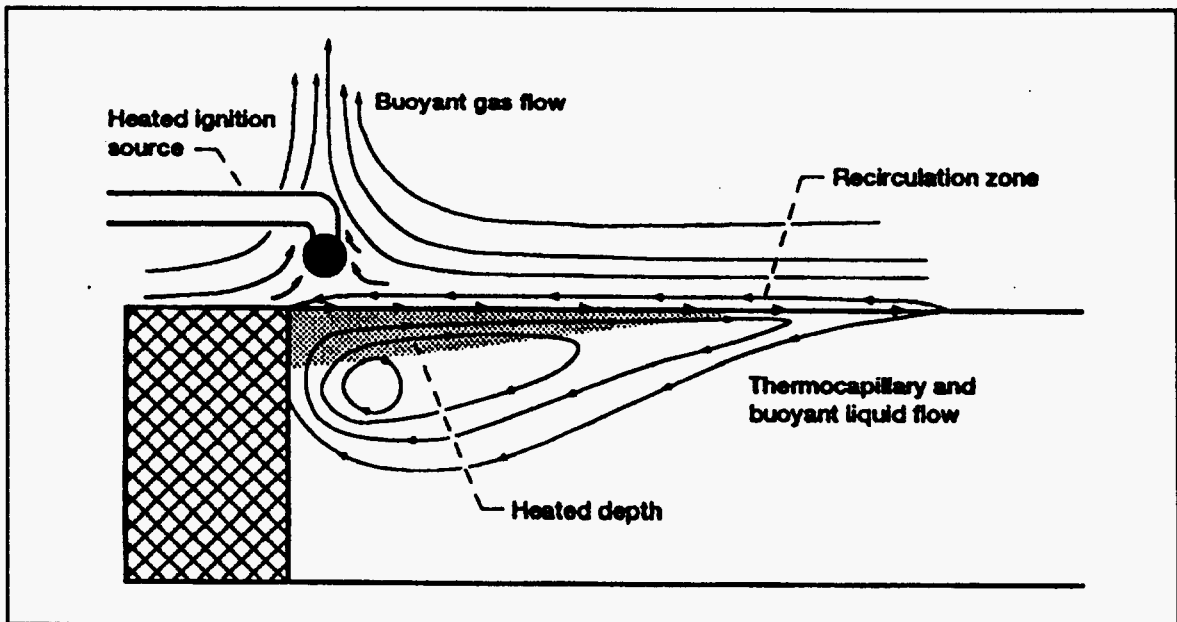


*Répartition de la concentration en vapeur de méthanol à la surface d'un liquide*

On voit que la valeur de la concentration du mélange varie avec la distance à l'interface et la limite d'inflammation dépendra de la position de la source d'ignition. Le mélange étant plus dilué qu'en enceinte fermée à l'équilibre, on aura de plus toujours  $T_f > T_i$ .

Ainsi, le point éclair d'un liquide ne peut pas s'identifier avec sa température limite inférieure d'inflammabilité : il sera toujours supérieur à celle-ci. ( $T_i < T_f < T_s$ )

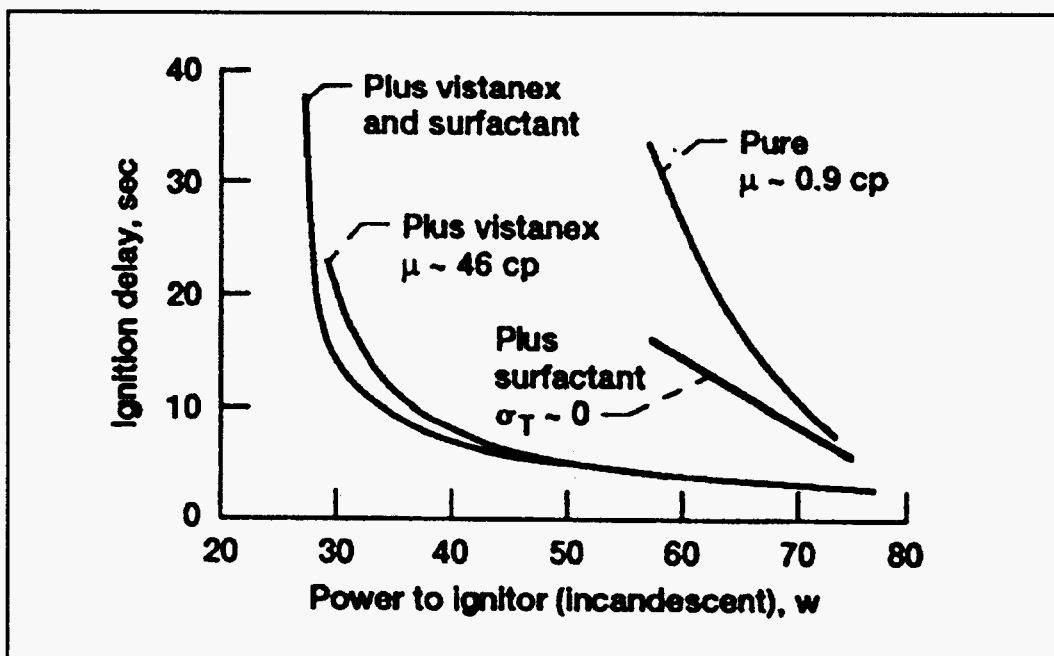
De même, la présence de courants de convection (naturelle et thermo capillaires) sur le liquide et à l'interface, lors du chauffage du liquide est susceptible de justifier ce type d'écart. On a représenté dans la figure suivante une représentation schématique des courants de convection dans le liquide et au dessus de l'interface, dans l'air, du fait de la présence d'une source de chaleur, nécessaire à l'inflammation des vapeurs. [3]



*Courants de convection avant ignition*

La présence de ces écoulements modifie la cinétique d'apparition des concentrations limites des mélanges et donc les délais d'inflammation.

En particulier, l'addition d'agents viscosifiants ou d'agents tensio-actifs permet la réduction des délais nécessaires pour obtenir l'inflammation avec une source d'énergie fixée d'un facteur 2 pour les surfactants et d'un facteur 10 pour des agents viscosifiants [4]. On a représenté dans la figure ci-dessous ce type de résultats.



*Effet de l'addition d'agents surfactant et viscosifiant sur les délais d'inflammation*

Ainsi, bien que le point éclair ne définisse guère une donnée absolue caractéristique d'un liquide donné, on considère qu'il donne une échelle de comparaison entre différents liquides vis à vis du critère d'inflammabilité.

En général, on considère comme :

- très inflammables les liquides pour lesquels  $0 < T_f < 32^\circ\text{C}$
- inflammables les liquides pour lesquels  $32^\circ\text{C} < T_f < 60^\circ\text{C}$
- combustibles les liquides pour lesquels  $T_f > 60^\circ\text{C}$ .

Cette classification est directement suivie par la classification des liquides en fonction de leur température d'ébullition à pression atmosphérique.

Composé	Point d'ébullition normal (°C)	Point éclair (creuset fermé) (°C)
Hexanol 1	157	67
Ethyl-2 butanol 1	147	50
Méthyl-4 pentanol 2	132	40

#### *Température d'ébullition et point éclair*

Kamury [5], en utilisant la relation pression/température des vapeurs saturantes du liquide dans l'air, a montré que la température d'ébullition  $T_e$  du liquide peut être liée au point éclair du liquide considéré par la relation :

$$\text{Log} \left( \frac{100}{L_i} \right) = \frac{L_v}{R T_e} \left( \frac{T_e}{T_f} - 1 \right)$$

- où  $L_v$  est la chaleur latente de vaporisation du liquide à la pression  $P_0$   
 $T_e$  est la température d'ébullition du liquide à la pression  $P_0$   
 $L_i$  est la limite inférieure d'inflammabilité (%)

Cette relation indique que pour un composé donné ( $L_i$  fixé) on a :

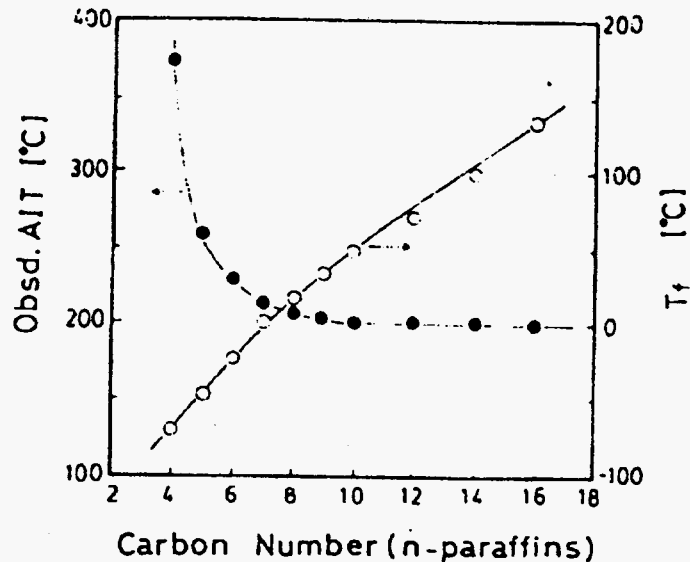
$$T_f = \frac{1}{A + \frac{1}{T_e}}$$

où  $A = \frac{R}{L_v} \text{Log} \left( \frac{100}{L_i} \right)$

On vérifie que lorsque les températures d'ébullition prennent des valeurs croissantes, les températures éclairs croissent corrélativement.



Par ailleurs, le point éclair d'un liquide ne peut pas être corrélé simplement à la température d'autoinflammation  $T_{ai}$  du gaz formé par vaporisation de ce liquide. On illustre ce fait en représentant simultanément les points flash et les températures d'autoinflammation pour des composés hydrocarbonés, en fonction du nombre d'atomes de carbone de la molécule. [6]



*Tentative de corrélation entre les points éclairs et les températures d'auto-inflammation, en fonction du nombre d'atomes de carbone des composés*

Dans un travail récent, Suzuki et al [7], ont montré que la prédiction des points éclairs dépendait de deux facteurs structuraux des molécules du liquide concerné. Ils ont proposé la relation, basée sur 400 composés :

$$T_f = 25,57 ({}^1X) + \sum n_i G_i - 86$$

où  $({}^1X)$  est l'indice de connectivité moléculaire de premier ordre [8]. Cet indice peut-être calculé à partir de la relation :  $({}^1X) = \sum (\delta_i \delta_j)^{-1/2}$  où la somme est étendue à toutes les liaisons au sein de la molécule et  $\delta_i$  est le nombre d'atomes dans la liaison.

et  $G_i$  est un terme de contribution par atome ou groupe d'atomes apparaissant  $n_i$  fois. Ce terme peut être estimé au moyen du tableau suivant :

Atom or Group	$G_i$	Atom or Group	$G_i$
C (aromatic)	3.1	-NH	20.4
-OH(alcohols)	55.8	>N-(aliphatic)	6.0
-OH(phenols)	31.4	N (aromatic)	15.9
-O-	2.8	F	-7.4
-CHO	21.4	Cl	21.7
>C=O	25.3	Br	46.4
>COOH	85.7	I	63.0
-COO-	13.3	-CONH-	112.7
-CN	52.8	-CON<	41.3
-SH	27.3	-SO <sub>2</sub> -	102.3
-S-	30.8	-NCS	57.9
-NO <sub>2</sub>	41.3	-NCO	21.1
-NH <sub>2</sub>	32.5		

Valeurs des  $G_i$  par atomes ou groupe [7]

Leurs résultats sont reportés dans le tableau suivant [7] pour l'ensemble des 400 composés testés.

Chemical Class	Number of Compounds	Flash Point Range (°C)	Estimated $T_f$ (°C)	
			Av. Error <sup>a)</sup>	Bias <sup>b)</sup>
Aliphatic hydrocarbons	33	-54.0-168.0	12.2	-1.1
Aromatic hydrocarbons	26	-11.0-140.6	6.1	2.0
Alcohols	30	11.0-110.0	6.8	1.0
Phenols	10	79.0-153.0	21.5	-11.8
Ethers	23	-45.0-135.0	9.1	1.4
Aldehydes	10	-27.0-63.0	7.3	1.4
Ketones	17	-20.0-77.0	8.1	-5.1
Acids	11	39.0-121.0	7.4	1.0
Esters	38	-20.0-148.0	5.8	0.3
Nitriles	8	0.0-71.0	10.5	10.5
Amines and Anilines	31	-29.0-153.0	14.5	6.5
N-containing ring compounds	4	20.0-99.0	7.0	0.0
Amides and Anitides	6	107.2-173.0	7.7	0.0
Nitro compounds	8	24.0-179.0	8.7	-8.7
Isocyanates	4	-18.0-55.0	4.6	2.8
Thiols	10	-20.0-87.0	7.7	0.0
Sulfides and Thiophenes	7	-36.0-76.0	12.9	1.3
Sulfones	2	126.0-143.0	4.3	0.0
Isothiocyanates	4	32.0-87.0	8.7	0.0
Halogenated hydrocarbons	35	-43.0-143.9	9.9	1.3
Multifunctional compounds	83	-15.0-196.0	14.2	-1.2
Total	400	-54.0-196.0	10.3	0.2

a) Av. Error =  $\sum |T_f(\text{estd}) - T_f(\text{obsd})| / \text{number of compounds}$   
b) Bias =  $\sum (T_f(\text{estd}) - T_f(\text{obsd})) / \text{number of compounds}$

Evolution statistique des résultats par [7]

## b) Combustion auto-entretenu à la surface libre d'un liquide

Notons, enfin que l'inflammation d'une surface libre de liquide chauffé ayant lieu à  $T = T_f$ , n'entraîne pas en général de combustion entretenue. Le point éclair correspond à la température d'inflammation des vapeurs mais ne correspond pas à des conditions d'auto-entretien de la flamme. Ce point est désigné par  $T_{fl}$ , avec  $T_{fl} > T_f$ . Il indique qu'une partie de l'énergie libérée par l'inflammation (à  $T_f$ ) et consommée pour vaporiser en retour le liquide et maintenir au dessus de la surface, une concentration du mélange supérieure ou égale à la limite d'inflammabilité inférieure des vapeurs du liquide en mélange avec l'air.

L'écart est de 10 à 20°C pour la plupart des liquides [9]. Il a été suggéré [10] d'introduire un nombre critique B critique tel que l'inflammation soit entretenue si  $B > 1$ , avec :

$$B = \frac{1}{L_v} \left[ \frac{m_{O_2}}{r} \Delta H_C + C_p (T_\infty - T_0) \right]$$

$\Delta H_C$  : est la chaleur de combustion du liquide à pression constante

$m_{O_2}$  est la fraction massique d'oxygène dans l'air ambiant

$r$  : est le rapport la demande en oxygène pour une combustion stoechiométrique avec le liquide

$C_p$  : chaleur spécifique de l'air à la température T.

$T_0$  : température du liquide

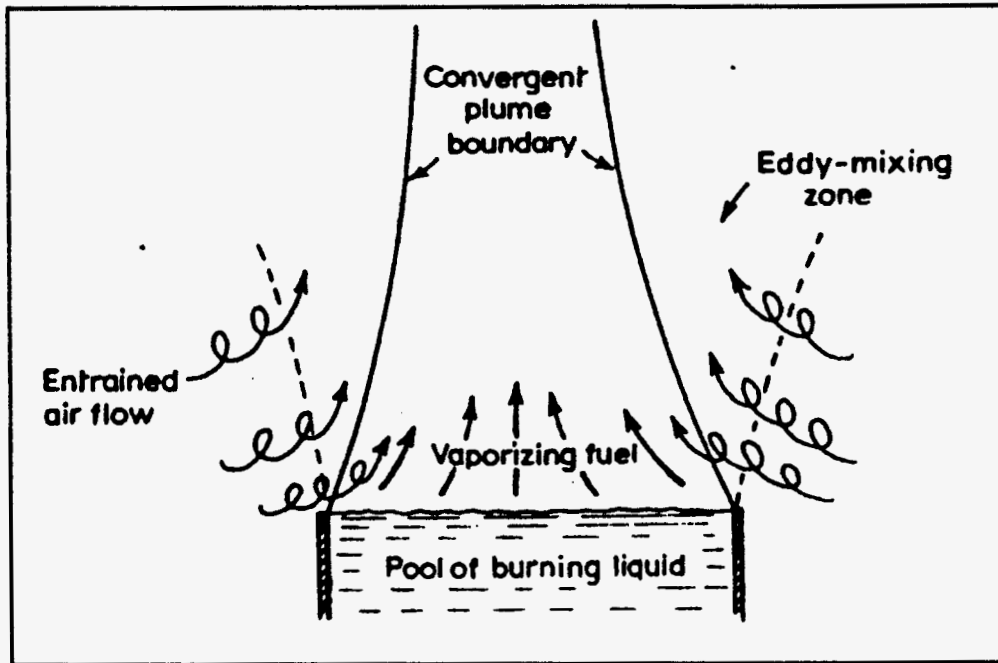
$T_\infty$  : température de l'air ambiant

$L_v$  : chaleur latente de vaporisation du liquide à la température  $T_0$

Ainsi, pour  $B > 1$ , ( $T_0 > T_f$ ), on pourra avoir une combustion entretenue à la surface du liquide.

Ce processus est complexe et sa théorie complète n'est pas établie. Compte tenu du grand nombre d'hypothèses simplificatrices que l'on est susceptible de faire pour une résolution analytique (présence de convection libre, processus transitoires,...).

On représente dans la figure suivante, schéma décrivant qualitativement les processus mis en jeu.



*Processus de combustion d'un liquide en surface libre*

La vitesse spécifique de combustion  $\dot{m}$  (kg/s m<sup>2</sup>) par unité de surface libre du liquide peut être estimée par la corrélation de Deries et Orloff [11].

$$\dot{m} = 0,15 \left( \frac{\lambda_1}{C_{p1}} \right) \frac{g(\rho_\infty - \rho_3)^{1/3}}{\mu_2 D_2} B \left[ \frac{\text{Log}(1+B)}{B} \right]^{2/3} ; B > 1$$

avec  $B = \frac{1}{L_v} \left( \frac{\Delta H_C}{\theta} - H_s \right)$ , (défini précédemment)

avec  $\Delta H_C$  : chaleur de combustion (kcal/kg)

$\theta$  : kilogramme d'air par kg de liquide

$H_s$  : chaleur sensible de 1 kg d'air à la température du liquide  $T_0$

$L_v$  : chaleur latente de vaporisation (kcal/kg)

$\rho_\infty$  : masse volumique de l'air à la température ambiante  $T_\infty$  (kg/m<sup>3</sup>)

$g$  : accélération de la pesanteur (m/s<sup>2</sup>)

$\lambda_1$  : conductivité thermique (kcal m<sup>-1</sup> s<sup>-1</sup> °C<sup>-1</sup>)

$\rho_1$  : masse volumique (kg/m<sup>3</sup>)

$\mu_1$  : viscosité dynamique (kg m<sup>-1</sup> s<sup>-1</sup>)

$D_1$  : coefficient de diffusivité thermique (m<sup>2</sup> s<sup>-1</sup>)

Les indices 1, 2 et 3 se réfèrent aux valeurs des coefficients  $\lambda$ ,  $C_p$ ,  $\mu$  et  $D$  du mélange gazeux formé entre l'air ambiant et respectivement 25, 50 et 100 % du volume des fumées de combustion stoechiométrique du liquide.

Lorsque les dimensions de la surface croissent (> 20 - 30 cm de diamètre), le processus de re-radiation de la flamme vers la surface contrôle le taux d'évaporation du liquide et donc la vitesse de combustion  $\dot{m}$ . Dans ce cas, la vitesse spécifique de combustion  $\dot{m}$  du liquide prend une forme simple :

$$\dot{m} = 0,076 \rho_l \frac{\Delta H_C}{L_v} \text{ (kg m}^{-2} \text{ s}^{-1}\text{)}$$

où  $\rho_l$  est la masse volumique ( $\text{g/cm}^3$ ) du liquide, les autres quantités étant définies plus haut.

D'une façon générale, la vitesse spécifique de combustion est d'autant plus élevée que l'enthalpie de combustion du liquide est grande, entraînant des températures de flamme élevées et donc un fort rayonnement sur la surface. A l'inverse, les liquides à forte chaleur latente de vaporisation auront des vitesses spécifiques de combustion faibles.

## 2- Inflammation des liquides dispersés

Dans la pratique, la plupart des liquides doivent être brûlés après leur mise en forme préalable sous forme d'une fine dispersion gaz/liquide (spray) réalisée par pulvérisation. Ceci permet, comme on l'a vu, d'améliorer la vitesse globale de combustion du liquide par accroissement de la surface spécifique du liquide ( $\text{m}^2/\text{kg}$ ) en contact avec le gaz comburant (air).

### **a) Pulvérisation des liquides- Tailles des gouttes obtenues**

La pulvérisation des liquides est réalisée dans la pratique suivant deux principes :

#### - la pulvérisation mécanique

Elle consiste à forcer le liquide à travers un orifice calibré de faible dimension en le mettant sous forte pression (5 - 20 bars) à l'aide d'une pompe volumétrique (pompe à piston, pompe Moineau...) placée en amont. Il y a conversion de l'énergie spécifique de transvasement ( $e = P/\rho$ ) en énergie cinétique spécifique ( $e = V^2/2$ ) et la vitesse de sortie croît comme le carré de la pression imposée.

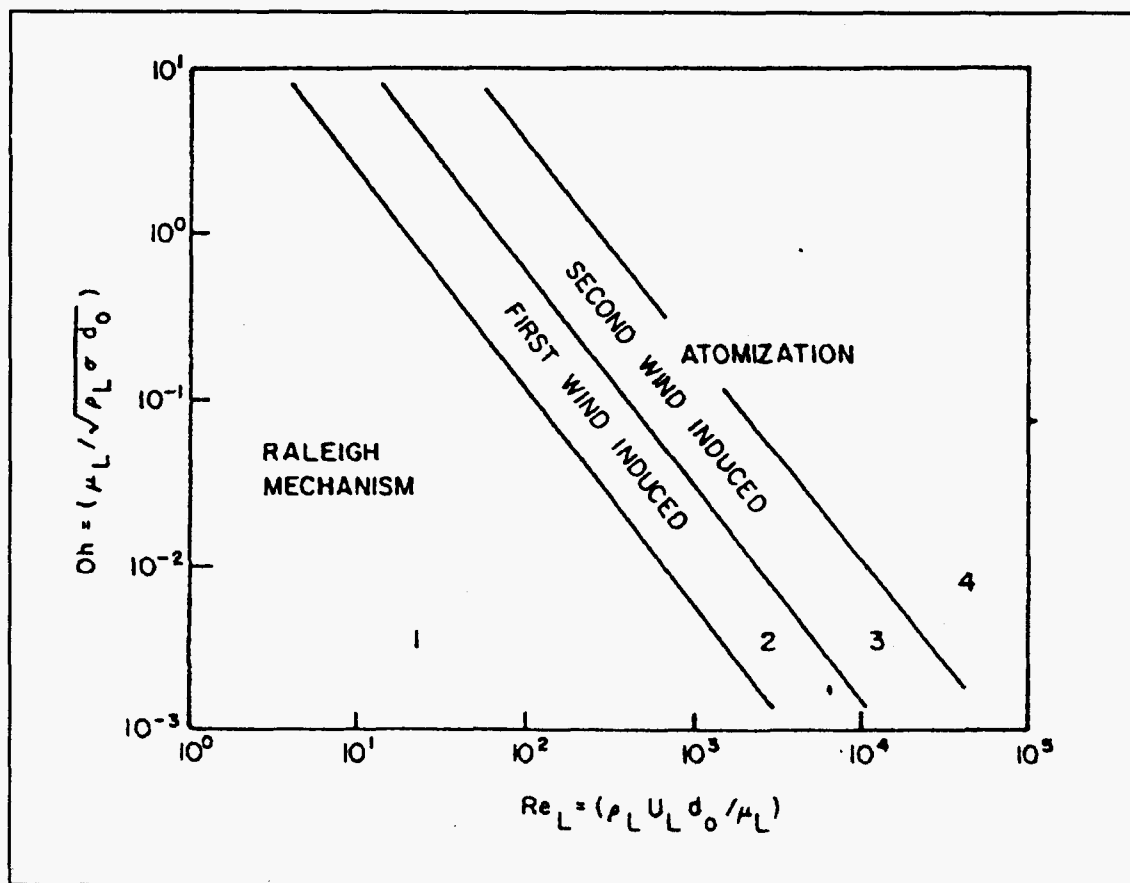
Ainsi, pour un fluide de masse volumique  $\rho = 1000 \text{ kg/m}^3$ , en négligeant la perte de charge singulière de l'orifice on aurait une vitesse de sortie de l'ordre de 20 m/s pour une pression de 2 bars qui passerait à 45 m/s pour une pression de 10 bars.

A ces vitesses le jet liquide interagit fortement avec l'air ambiant au repos de la chambre dans lequel il pénètre. Il en résulte par le biais des forces de cisaillement tangentielles (instabilités Rayleigh), un processus de rupture du jet, conduisant à

une formation de grosses gouttes (atomisation primaire), suivie, en fonction de la vitesse relative des gouttes par rapport à l'air, à leur désintégration en gouttes de plus petites tailles (atomisation secondaire).

Alors que l'atomisation primaire conduit à des diamètres de gouttes de l'ordre de grandeur du diamètre de l'orifice, le processus d'atomisation secondaire permet d'obtenir des tailles de gouttes beaucoup plus petites que celle de l'orifice.

Ces processus sont résumés quantitativement dans le diagramme ci-dessous



Classification des modes de désintégration de jet

Ce diagramme utilise les nombres sans dimension suivants :

$$Oh = \frac{\mu_l}{\sqrt{\rho_l \sigma d_{os}}} : \quad \text{nombre de Ohnesorge}$$

- où  $\mu_l$  est la viscosité dynamique du liquide
- $\rho_l$  sa masse volumique
- $\sigma$  son coefficient de tension superficielle (N m<sup>-1</sup>)
- $d_{os}$  le diamètre de l'orifice de sortie

$$Re_l = \rho_l \frac{V_{ol} d_{os}}{\mu_l} : \text{ nombre de Reynolds de sortie du liquide}$$

où  $V_{ol}$  est la vitesse de sortie

On a bien quatre régions (régime de Rayleigh (1), atomisation primaire (2), atomisation secondaire (3) et atomisation dès la sortie de l'orifice (4)).

Si la dépendance au nombre de Reynolds permet de prendre en compte l'influence de la vitesse de sortie sur le régime d'atomisation, on voit que le nombre d'Ohnesorge est caractéristique des propriétés du liquide. En particulier, ce nombre met en évidence l'importance de la viscosité  $\mu_l$  du liquide, mais aussi de son coefficient de tension superficielle  $\sigma$  (interface liquide/air) ( $\text{kg s}^{-2} = \text{N m}^{-1}$ ).

On peut d'ailleurs mettre ce nombre sous la forme :

$$Oh = \frac{\pi}{4} \frac{\tau}{(\sigma/d)}$$

où  $\tau$  est la contrainte de cisaillement tangentielle ( $\text{N m}^{-2}$ )  $\sigma/d$  est la force de tension superficielle sur une goutte de diamètre  $d$  (force de rappel) montrant le processus de compétition entre ces deux forces lors de la rupture du jet.

Un abaissement du coefficient de tension superficielle (à viscosité constante) par ajout d'un agent tensio-actif par exemple, facilitera la pulvérisation (Oh augmente).

La taille des gouttes obtenues en pulvérisation mécanique est elle même dépendante des propriétés du fluide.

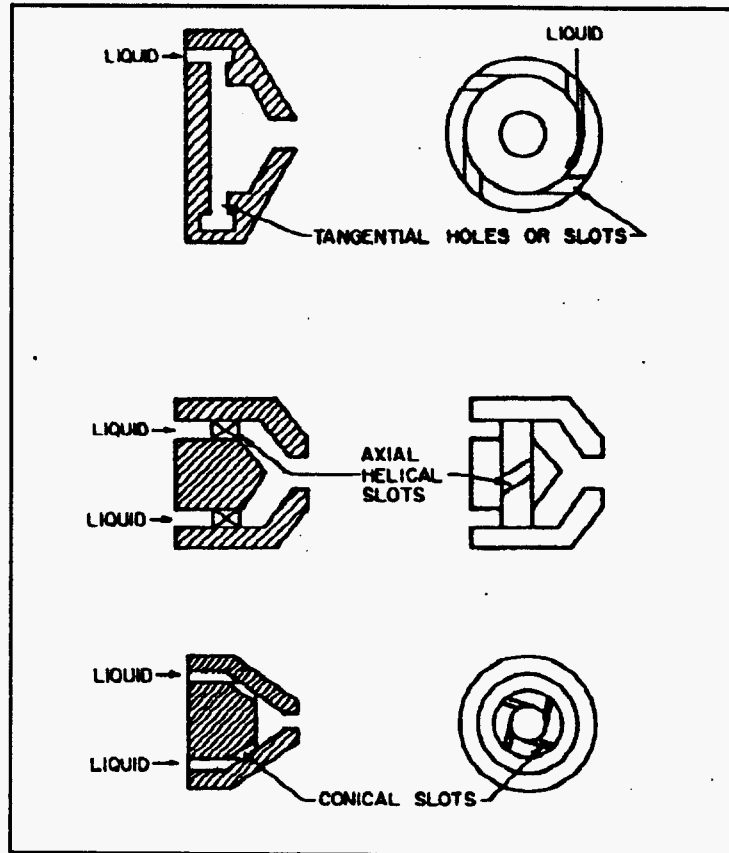
Citons la corrélation de Tanasawa et Toyoda [13] pour le cas de la pulvérisation mécanique :

$$SMD = 47 d_{os} V_{ol}^{-1} \left( \frac{\sigma}{\rho_a} \right)^{0,25} \left[ 1 + 331 \frac{\mu_l}{(\rho_l \sigma d_{os})^{0,5}} \right]$$

donnant le diamètre moyen de sortie sous la forme du diamètre de Sauter (SMD), en fonction des grandeurs définies précédemment, avec la masse volumique de l'air. On voit qu'une diminution du coefficient de tension superficielle  $\sigma$  du liquide permettra une réduction de la taille des gouttes, de même qu'un abaissement de sa viscosité dynamique.

La pulvérisation mécanique est souvent réalisée, non pas par un simple jet débouchant d'un orifice, mais par la mise en rotation préalable du liquide dans une chambre débouchant sur l'orifice de sortie. Cette disposition constructive est destinée à faciliter l'atomisation du liquide.

On montre dans la figure ci-dessous des exemples de telles dispositions.

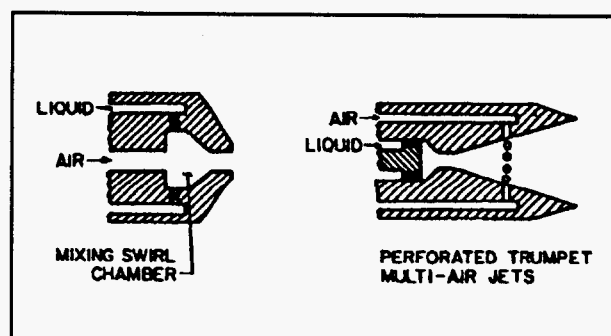


*Dispositifs de pulvérisation mécanique à Swirl*

- la pulvérisation assistée à l'air (ou à la vapeur)

Dans ce cas on utilise de l'air pressurisé pour faciliter la pulvérisation au niveau de l'injecteur. On distingue deux cas :

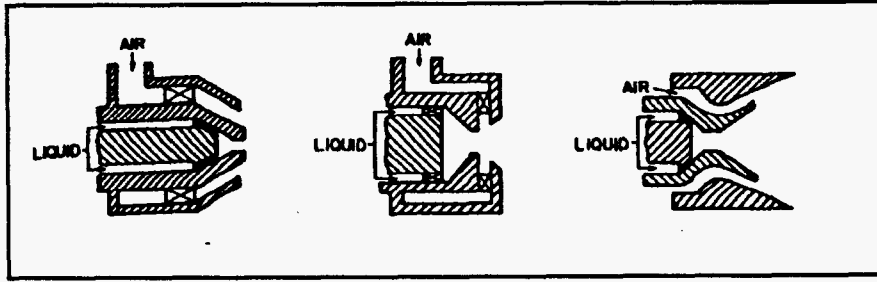
\* l'air d'assistance est mélangé au liquide à l'intérieur de l'injecteur dans une chambre de pré-mélange. On parle d'injecteurs à pré-mélange interne :



*Pulvérisateurs assistés à l'air avec pré-mélange interne*

\* l'air est mélangé au liquide en sortie en réalisant des écoulements adjacents air/liquide à co-courant ou présentant un angle (par exemple Y-jet). On parle d'injecteurs à mélange externe :





*Pulvérisation assistée à l'air avec mélange externe*

Dans le cas d'écoulements air/liquide adjacents, on pourra estimer le diamètre moyen des gouttes obtenues par la relation [14] suivante exprimée en diamètre de Sauter (SMD) :

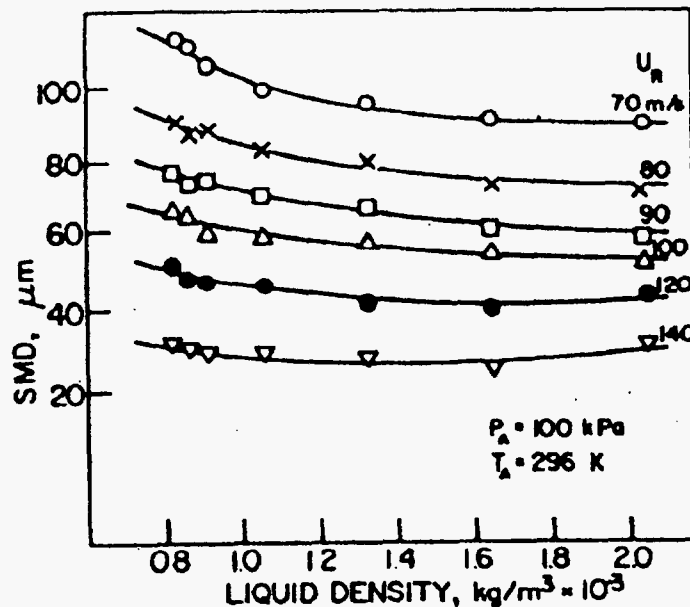
$$SMD = \left[ 0,95 \frac{(\sigma m_l)^{0,33}}{V_r \rho_l^{0,37} \rho_a^{0,3}} + 0,13 \left( \frac{\mu_l^2 d_{or}}{\sigma_l} \right)^{0,5} \right] \left( 1 + \frac{m_l}{m_a} \right)^{1,7}$$

où  $V_r$  est la vitesse relative du liquide et de l'air au nez de l'injecteur.

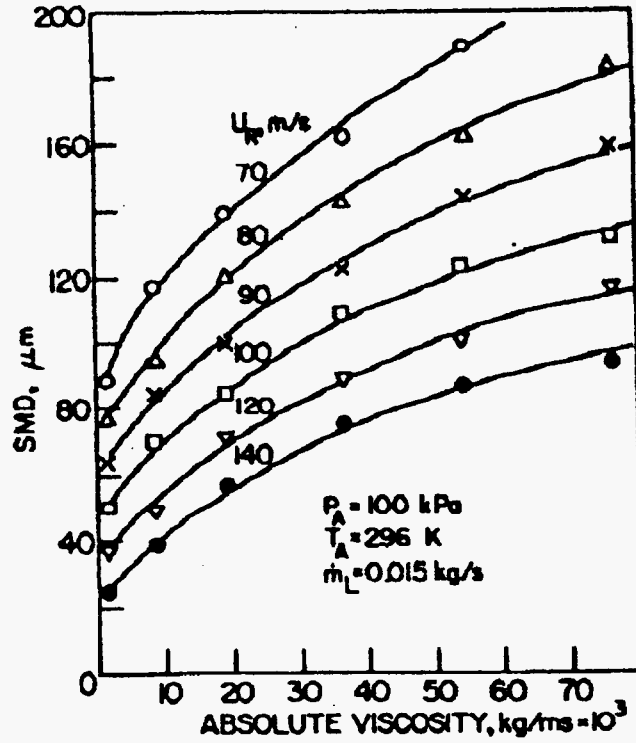
$\frac{m_l}{m_a}$  est le rapport des débits massiques de liquide et d'air

On voit que si le débit d'air  $m_a$  augmente, le diamètre moyen des goutte à  $m_l$  fixé, décroît. De même, une augmentation de la vitesse relative  $V_r$  entre les deux fluides améliore la pulvérisation.

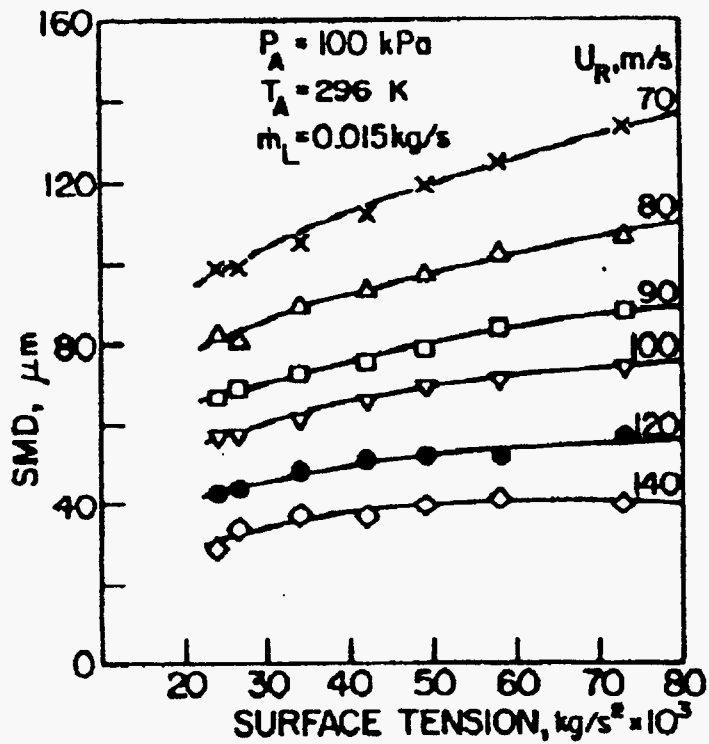
On a reporté dans la figure ci-dessous l'effet des variations des principales caractéristiques physiques du liquide sur sa pulvérisation assistée à l'air, en configuration d'écoulements tangentiels et mélange externe.



*Variation du diamètre moyen des gouttes obtenues, en fonction de leur masse volumique*



Variation du diamètre moyen des gouttes obtenues, en fonction de la viscosité dynamique du liquide

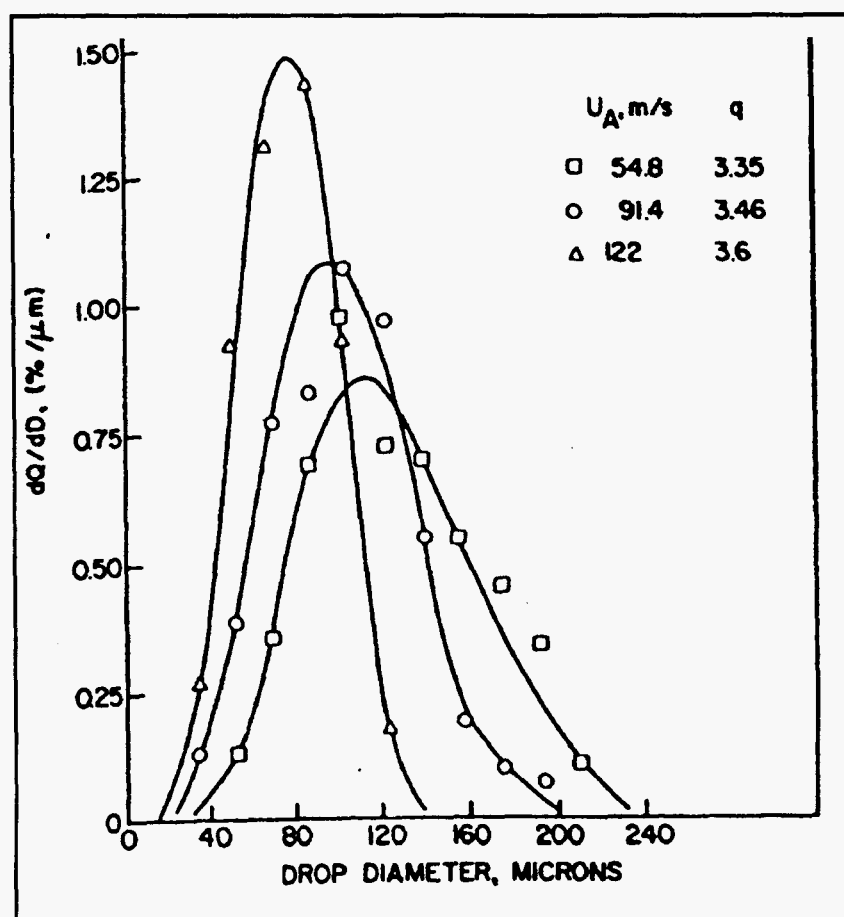


Variation du diamètre moyen des gouttes obtenues, en fonction de la tension superficielle du liquide

On voit que le diamètre moyen des gouttes obtenues décroît en abaissant la viscosité et la tension superficielle du liquide avec un effet plus modéré pour les variations de sa masse volumique.

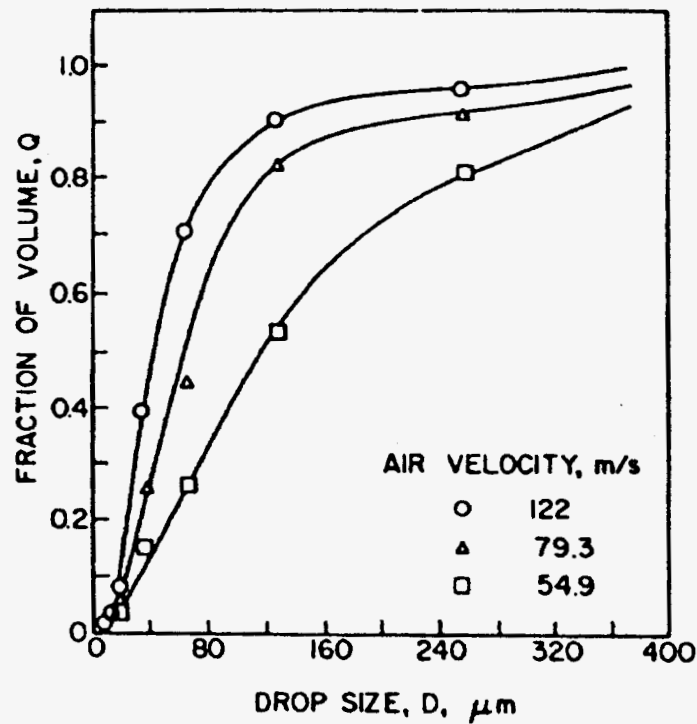
Un autre paramètre important du processus de pulvérisation des liquides est la dispersion granulométrique des tailles de gouttes obtenues autour du diamètre moyen.

On montre ci-dessous un exemple de l'effet de la vitesse de l'air utilisée sur la distribution en taille des gouttes obtenues [15].



*Effet de la vitesse de l'air de pulvérisation sur la distribution des tailles des gouttes obtenues*

Si on désigne par  $Q$  la fraction du volume total des gouttes d'un diamètre inférieur à  $d$ , on peut représenter les mêmes résultats en fraction cumulée en fonction du diamètre  $d$ . Ces résultats, sont illustrés dans la figure suivante :



*Effet de la vitesse de l'air de pulvérisation sur la distribution en volume cumulée*

Ces résultats peuvent être, en général décrits en utilisant la distribution proposée par Rosin et Rammler [16] dans le cas des poudres, soit :

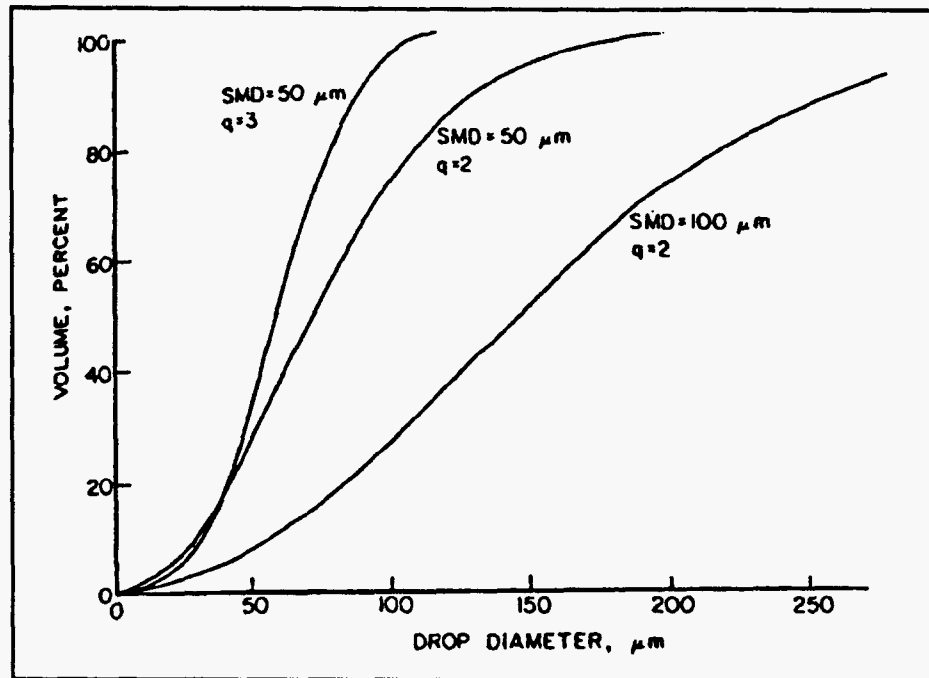
$$Q = 1 - e^{-\left(\frac{d}{X}\right)^q}$$

où  $X$  et  $q$  sont deux paramètres ajustables, caractéristiques de la distribution obtenue.

L'exposant  $q$  mesure la dispersion des tailles de gouttes autour du diamètre moyen. Plus  $q$  est grand, plus le spectre granulométrique est serré. Pour  $q$  infini, les gouttes de pulvérisation auraient toutes la même dimension.

Dans la pratique, la plupart des pulvérisations sont obtenues avec des coefficients  $q$  compris entre 1,5 et 4.

On montre dans la figure suivante l'effet des variations du diamètre de Sauter (SMD) et de l'indice  $q$  sur la distribution cumulée d'une dispersion.



*Evolution de la répartition granulométrique pour différents SMD et paramètres q*

On voit que pour un même diamètre moyen (SMD) le volume total des gouttes de diamètre supérieur au SMD augmente quand q diminue, signifie une baisse de la qualité de la dispersion.

### b) Vaporisation/Combustion de gouttes liquides et de spray

Après leur pulvérisation, les gouttes rencontrent dans la pratique, une enceinte chaude destinée à assurer leur combustion.

Ce processus est dominé aux instants initiaux par :

- une période chauffage de la goutte  $\Delta t_{hu}$  [17]
- une période de vaporisation  $t_e$

permettant la génération de vapeurs combustibles et donc l'inflammation du mélange air/vapeur formé.

Dans la pratique, les délais de chauffage des gouttes jusqu'à leur température de vaporisation sont faibles compte tenu des fortes températures extérieures  $T_\infty$  (800-1000°C).

- Vaporisation du liquide en ambiance chaude à  $T_\infty > T_e$ .

En remarquant que la décroissance du diamètre d'une goutte en cours de vaporisation est linéaire en représentation  $d^2$  en fonction du temps t, Godsave [18] a introduit un paramètre  $\lambda_{ev}$  représentant une constante d'évaporation :

$$\lambda_{ev} = - \frac{d}{dt}(d^2) > 0$$

de sorte que le diamètre d'une goutte, initialement égale à  $d_0$ , vaut, au bout du temps  $t$  :

$$d_0^2 - d^2 = \lambda_{ev} t$$

avec 
$$\lambda_{ev} = \frac{8 \lambda_g \text{Log}(1+B)}{\rho_l C_{pg}}$$

où l'indice  $g$  se réfère à la phase vapeur et :

$$B = \frac{C_{pg} (T_\infty - T_e)}{L_v}$$

où  $T_e$  est la température d'ébullition du fluide et  $L_v$  sa chaleur latente.

Le débit spécifique d'évaporation et donc de liquide est alors ( $\text{kg}/\text{m}^2\text{s}$ ) :

$$\dot{m}_l = 2 \pi d \left( \frac{\lambda}{C_p} \right)_g \text{Log}(1+B)$$

La durée de vie d'une goutte en évaporation est donc donnée par :

$$t_e = \frac{d_0^2}{\lambda_{ev}} = \frac{\rho_l d_0^2}{8 \left( \frac{\lambda}{C_p} \right)_g \text{Log}(1+B)}$$

### - Combustion d'une goutte isolée dans de l'air au repos.

S'il y a inflammation de la goutte à sa périphérie suivant les conditions de concentration et de température extérieure faites aux vapeurs, on pourra étendre les résultats précédents en incluant la chaleur de combustion générée dans le paramètre  $B$ . [19]

Alors, 
$$B' = \frac{1}{L_v} [ C_{pg} (T_\infty - T_e) + \Delta H_c \Phi ]$$

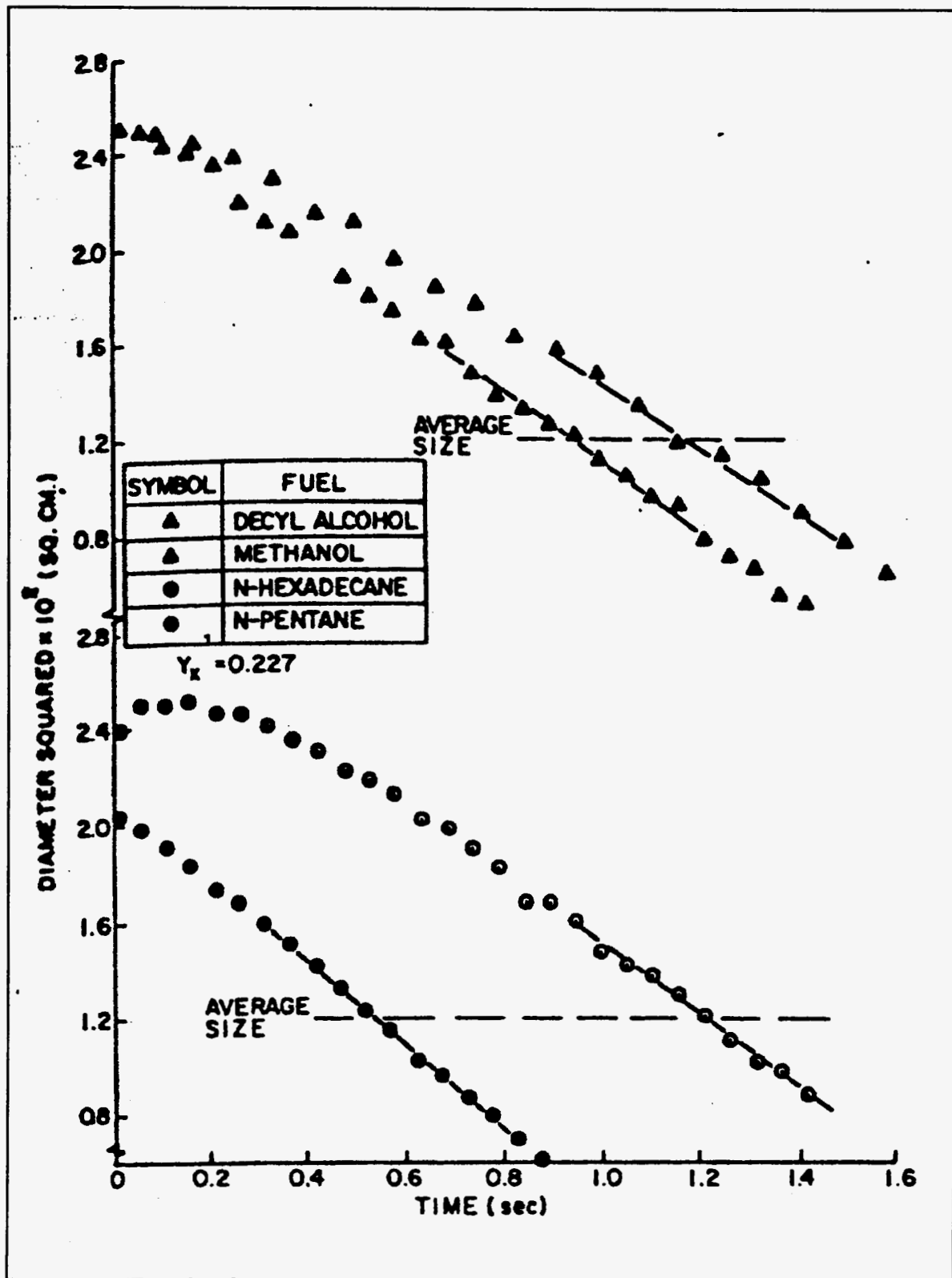
où  $\Delta H_c$  est la chaleur de combustion du liquide

$\Phi$  est le rapport  $\left( \frac{\text{air}}{\text{liquide}} \right) / \left( \frac{\text{air}}{\text{liquide}} \right)_{stoech.}$

de sorte que la durée de vie d'une goutte pourra alors être écrite :

$$t_e = \frac{d_0^2}{\lambda_c} = \frac{\rho_l d_0^2}{8 \left( \frac{\lambda}{C_p} \right)_g \text{Log}(1+B')}$$

On a représenté dans la figure suivante un exemple de loi de variation du diamètre au carré de gouttes au cours du temps et pour différents liquides. [20]



Représentation de la loi  $d^2(t)$  pour des gouttes isolées

On observe après une période non-linéaire correspondante à la phase de chauffage ( $\Delta t_{hu}$ ) la décroissance linéaire du carré du diamètre de la goutte en fonction du temps  $t$  suit  $d^2 = d_0^2 - \lambda_c t$ .

Les valeurs de la constante de vitesse de combustion  $\lambda_c$  sont, pour quelques liquides organiques :

liquide	$\lambda_c$ (mm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> )
cyclohexane	0,96
benzène	0,97
toluène	0,94
xylène	0,88
méthanol	0,78
éthanol	0,76

#### - Combustion d'une goutte en mouvement.

Les gouttes générées par un pulvérisateur sont en mouvement relatif par rapport à l'air ambiant chaud au cours de leur pénétration dans le foyer. On pourra tenir compte de cet effet en corrigeant la constante de vitesse  $\lambda_c$  sous la forme [20] :

$$\lambda'_c = \lambda_c \left[ 1 + 0,278 \text{Re}_1^{0,5} \text{Pr}^{0,5} \left( 1 + \frac{1,237}{\text{Re}_1 \text{Pr}^{4/3}} \right)^{-0,5} \right]$$

où  $\text{Re}_1$ : est un nombre de Reynolds de l'injection (défini précédemment).  
 $\text{Pr}$  est le nombre de Prandtl de la phase gaz.

Alors la durée de vie d'une goutte sera :

$$t'_c = \frac{d_0^2}{\lambda'_c} < t_c$$

avec 
$$\lambda_c = \frac{8 \lambda_g \text{Log}(1 + B')}{\rho_1 C_{pg}}$$

On voit que l'effet de la vitesse d'injection  $V_{01}$  est de réduire le temps de combustion de la goutte.



### - Combustion d'un spray

Dans une pulvérisation liquide les gouttes sont environnées d'autres gouttes, induisant par effets collectifs, un ralentissement du taux d'évaporation ou du taux de combustion par rapport à une goutte isolée.

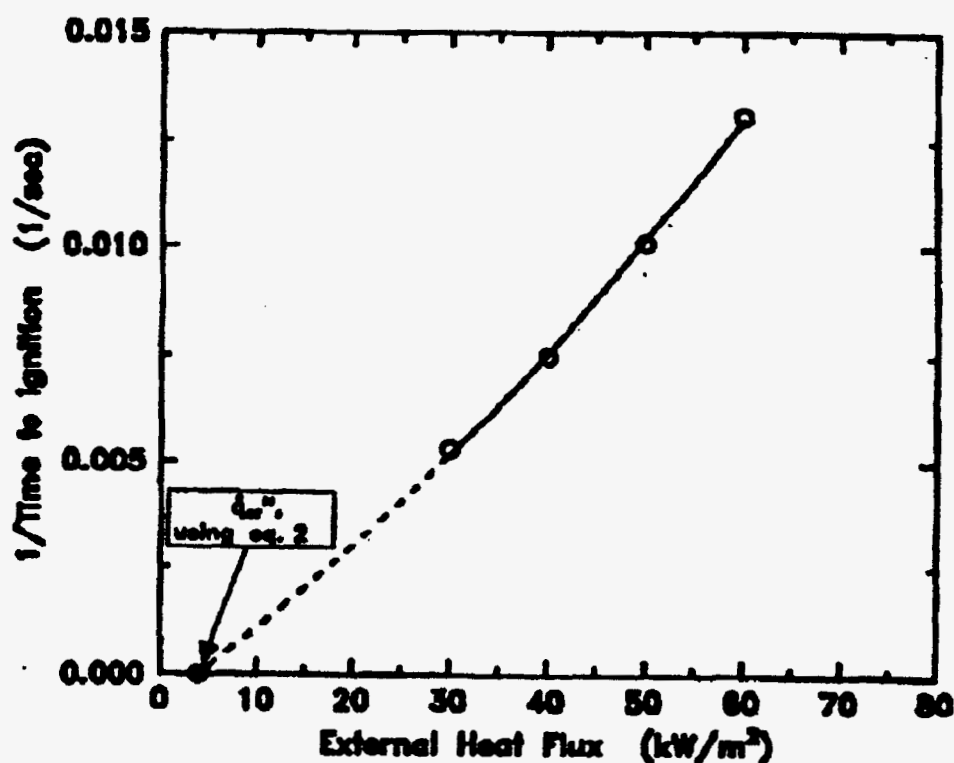
Cet effet peut être pris en compte en considérant que la vitesse de combustion est donnée par le paramètre  $B = C_{pg} (T_{\infty} - T_e) / L_v$ , en omettant le terme de génération de chaleur par combustion et en prenant pour  $T_{\infty}$  la température de combustion du mélange.

#### *Conditions d'inflammation d'un spray*

Les effets collectifs dus à la présence de nombreuses particules dans le mélange dispersion/air font qu'il peut apparaître une limite de l'inflammation de tels brouillards de gouttes. Ceci est d'autant plus vrai que les points flash de ces liquides sont élevés.

On peut mettre en évidence un flux critique en deça duquel l'inflammation d'une dispersion liquide/air (spray) n'est plus possible, en soumettant ce spray à un flux thermique radiatif en présence d'une flamme pilote [21]. Ce type de montage s'apparente aux dispositifs développés pour mesurer l'inflammabilité des solides (Cone Calorimeter, FMCC) décrits par ailleurs.

On représente l'évolution du délai d'inflammation  $t_{ig}$  trouvé en fonction du flux imposé.



*Délai d'inflammation d'un spray, en fonction du flux imposé*

Ces résultats montrent qu'il existe un flux critique  $\dot{q}''$  au dessous duquel le délai d'inflammation devient infini.

Ce flux critique a été relié par les auteurs [21] à la température de flamme  $T_{fl} > T_f$  (discuté précédemment) par la relation :

$$\dot{q}''_{crit} = \alpha \sigma T_{fl}^4$$

où  $\alpha$  est le coefficient d'absorption radiatif de la surface du liquide  
et  $\sigma$  la constante de Stefan ( $5,67 \times 10^{-11} \text{ kW/m}^2 \text{ K}^4$ ).

La détermination expérimentale de  $\dot{q}''_{crit}$  permet une détermination du  $T_{fl}$  associé.

Les auteurs proposent un critère pour l'inflammation valable pour les dispersions, soit SFP (Spray Flammability Parameter) :

$$SFP = \frac{4 \dot{Q}_{c,eff}}{\pi d_{os} \left( \frac{\rho_l}{\rho_a} \right)^{0,5} \dot{q}''_{crit}}$$

où  $\dot{Q}_{c,eff}$  est la puissance calorifique effectivement libérée par la combustion (kW)  
 $d_{os}$  est le diamètre de l'orifice de sortie (m)  
 $\rho_l, \rho_a$  les masses volumiques du liquide et de l'air.

Les liquides pour lesquels le paramètre SFP est grand sont réputés très inflammables ( $SFP > 10^4$ ).

Par ailleurs, l'efficacité de la combustion d'un spray peut être appréciée par la mesure du  $\dot{Q}_{c,eff}$ .

Par exemple, pour un diamètre de l'orifice de sortie  $d_{os}$ , la vitesse de sortie varie en fonction du débit massique  $\dot{m}_l$  suivant :

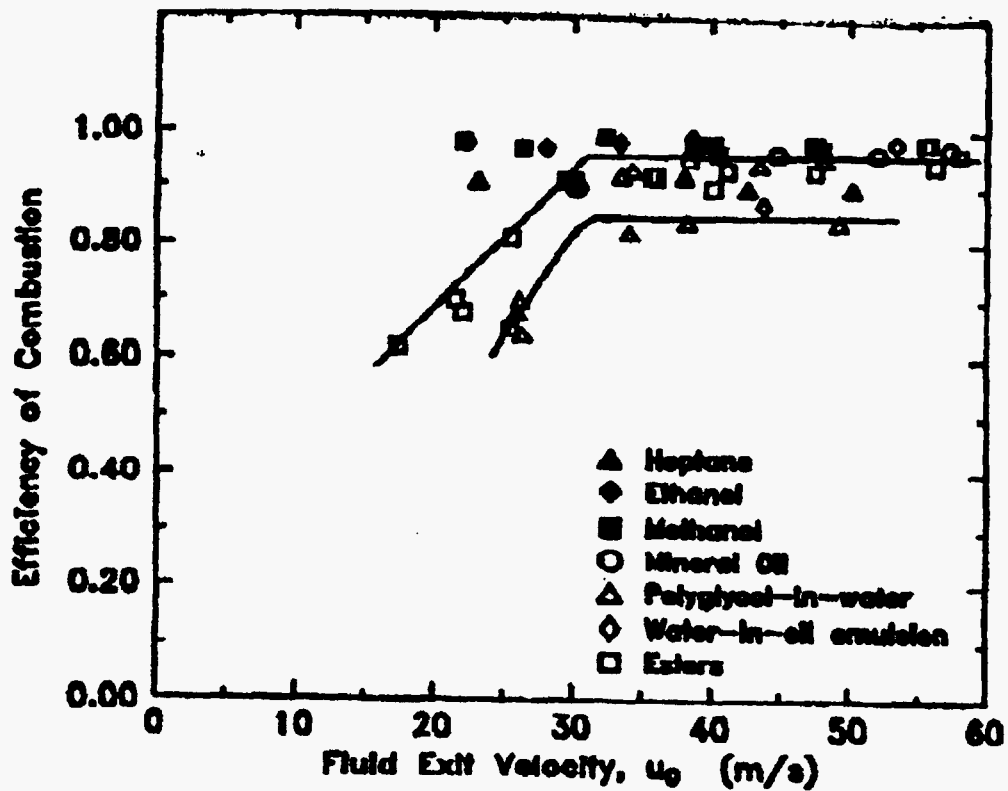
$$V_{ol} = \frac{4 \dot{m}_l}{\eta_{pl} d_{os}}$$

En portant l'efficacité de la combustion définie par le rapport :

$$\eta = \frac{\dot{Q}_{c,eff}}{\dot{m}_l (\Delta H)}$$

en fonction de la vitesse, on peut caractériser l'influence de  $V_{01}$  sur l'inflammation.

On reporte dans la figure ci-dessous un exemple de résultats obtenus pour différents liquides [21].



*Rendement de combustion d'un spray, en fonction de la vitesse de sortie*

On voit que l'efficacité de la combustion d'un spray décroît quand on diminue  $V_{01}$  en deçà de 30 m/s pour les liquides les moins volatils. Par contre, si  $V_{01} > 30$  m/s, la réduction de la taille des gouttes de spray permet leur inflammation totale et donc un bon rendement de combustion.

## REFERENCES

- [1] Norme française M.07.011 et norme M.07.036. (Août 1969).
- [2] Hirano, T., T. SUZUKI, I. MASHIKO and N. TANABE. Combustion Science and Technology, 22, 83, 1980.
- [3] ROSS, H.D. Ignition of and flame spread over laboratory scale pools of pure liquid fuels, Prog. Energy Combust., 20, p. 17-63, 1994.
- [4] MURAD, J., I. LAMENDOLA and M. SUMMERFIELD. Combust. Flame, 15, p. 289, 1970.
- [5] KANURY, A.M. Combust. Sci. Technol., 31, p. 297, 1983.
- [6] SUZUKI, T., K. OHTAGUCHI and K. KOIDE. Correlation and prediction of autoignition temperatures of hydrocarbons using molecular properties, J. of Chem. Eng. of Japan, 25, n°5, p. 606-608, 1992.
- [7] SUZUKI, T., K. OHTAGUCHI and K. KOIDE. A method for estimating flash points of organic compounds from molecular structures, J. of Chem. Eng. of Japan, 24, n°2, p. 258-261, 1991.
- [8] KIER, L.B. and L.W. HALL. Molecular Connectivity in Structure-Activity Analysis, Res. Study Press, Letchworth, 1986.
- [9] ROBERTS, A.F. and B.W. QUINCE. Comb. Flame, 20, p. 245, 1973.
- [10] GLASSMAN, I., J. HANSEL and T. EKLUND. Comb. Flame, 13, p. 199, 1969.
- [11] DERIS, J. and L. ORLOFF. Adimensionless Correlation of Pool burning rates, Comb. Flame, 18, p. 381-388, 1972.
- [12] REITZ, R.D. Atomization and other Breakup Regimes of a liquid jet. Ph D Thesis, Princeton University, 1978.
- [13] TANASAWA, Y. and S. TOYODA. On the atomization of a liquid jet issuing from a cylindrical nozzle, Tech. Report of Tohoku University, Japan, n°19-2, p. 155, 1955.
- [14] LORENZETTO, G.E. and A.H. LEFEBVRE. Measurements of drop size on a plain jet airblast atomizer, AIAA J, 15, n°7, p. 1006-1010, 1977.
- [15] RISK, N.K. and A.H. LEFEBVRE. Airblast atomization : Studies on drop size distribution, J. Energy, 6, n°5, p. 323-327, 1982.
- [16] ROSIN, P. and E. RAMMLER. The laws governing the finess of powdered coal, J. Inst. Fuel, 7, n°31, p. 29-36, 1933.
- [17] CHIN, J.S. and LEFEBVRE A.H. The role of the heat-up period in fuel drop evaporation, Int. J. Turbo Jet Engines, 2, p.315-325, 1985.
- [18] GODSAVE, G.A. Studies on the combustion drops in fuel spray : The Burning of a single drop, 4th Int. Symp. on Combustion, Williams and Wilkins, Baltimore, p. 818-830, 1953.

- [19] WILLIAMS, A. Combustion of droplets of liquid fuel. A review, *Comb. Flame*, 21, 1, 1973.
- [20] FAETH, G.M. and R.S. LAZAR. *AIAA J*, 9, p. 2165, 1971.
- [21] KHAN, M.M. and A.V. BRANDAO. Method for testing the spray flammability of hydraulic fluids, *S.A.E. Trans.*, 101, n°2, p. 600-605, 1992.

## **CHAPITRE 4**

### **CONDITIONS D'INFLAMMATION ET DE COMBUSTION DES SOLIDES TEMPERATURE D'INFLAMMATION - DELAIS D'IGNITION PARAMETRES TRP ET CHF TEMPS DE PYROLYSE - TEMPS DE COMBUSTION**

---

#### **1- PROCESSUS DE DECOMPOSTION PYROLYTIQUE. TEMPERATURE DE PYROLYSE**

- a) Cinétique de pénétration de la chaleur
- b) Temps de pyrolyse  $t_p$
- c) Nature de gaz émis et du résidu

#### **2- PROCESSUS D'INFLAMMATION, CRITERE TRP ET DELAIS D'INFLAMMATION**

#### **3- COMBUSTION/ INCINÉRATION DES SOLIDES CARBONÉS**

- a) Processus de diffusion externe
- b) Processus réactionnel chimique
- c) Cas mixte

Quand un matériau solide est soumis à un flux de chaleur, celui-ci émet, après une phase de séchage, des gaz et vapeurs organiques combustibles. Ce processus est désigné par pyrolyse.

Les gaz et vapeurs formés, mélangés avec l'air, peuvent s'enflammer soit spontanément (auto-ignition) soit en présence d'une source externe (flamme pilote, étincelle...). Les conditions d'inflammation des mélanges air/vapeur ont été décrites précédemment.

L'énergie calorifique générée par l'inflammation des gaz peut entretenir le processus de pyrolyse conduisant à une combustion auto-entretenu du solide. Simultanément un front de pyrolyse se propage à l'intérieur du matériau définissant ainsi, pour un matériau de dimension finie, un temps caractéristique de pyrolyse.

Le résidu carboné (coke) ainsi formé peut brûler par oxydation de surface, définissant un temps de combustion du solide carboné ainsi formé. Les deux processus pyrolyse (combustion des gaz et du solide) sont en général étroitement imbriqués.

Un processus de pyrolyse complète, en l'absence de combustion, peut cependant être réalisé en atmosphère réductrice ( $O_2 < 2\%$ ), les gaz et vapeurs émises étant disponibles pour une combustion ultérieure ou une utilisation à des fins de valorisation chimique.

De même que pour les liquides, qui nécessitent un processus de vaporisation pour générer des vapeurs combustibles dans l'air, permettant leur inflammation, les solides s'enflamment dans l'air après une étape de "distillation" thermique (départ de matières volatiles, départ de gaz de pyrolyse).

### **1- Processus de décomposition pyrolytique. Température de pyrolyse.**

Ce processus a lieu, au sein du matériau, en l'absence d'air sous l'effet de la pénétration de la chaleur dans le milieu, permettant d'atteindre une température suffisante pour la dégradation rapide du matériau en gaz et vapeurs. Ces gaz diffusent vers l'extérieur au cours du processus de pénétration de la chaleur.

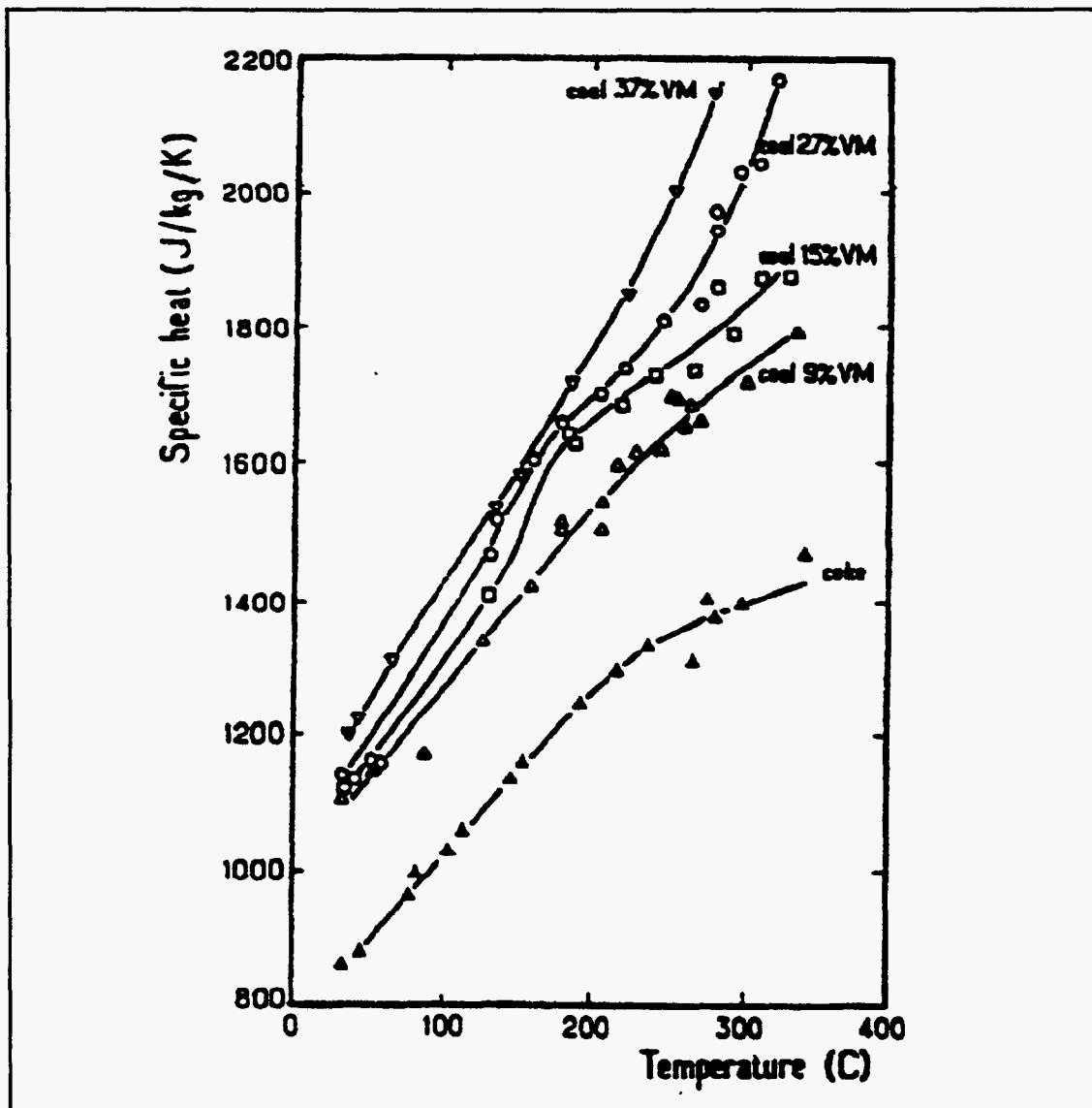
L'analyse du processus de pyrolyse peut être réalisée à partir du débit de gaz émis, ou par la perte de masse corrélative de l'échantillon soumis au traitement thermique.

La dégradation pyrolytique du matériau suppose sa transformation en fonction du niveau de température atteint.

Ce processus de transformation peut être suivi, par exemple, par l'évolution de sa chaleur spécifique en fonction de la température.

En effet, cette chaleur spécifique doit croître en fonction de la température vers une valeur maximale égale à  $\frac{3R}{M}$  ou M est la masse molaire moyenne du composé formant l'échantillon. Si le composé subit une transformation consistant en départ des éléments les plus légers (gaz, matières volatiles), la masse molaire moyenne finale devra être plus forte qu'en l'absence de transformation, et cette valeur maximale de la chaleur spécifique plus faible. L'évolution de la chaleur spécifique du matériau en fonction de la température doit donc présenter un maximum à un niveau de température voisin de celui du démarrage effectif de tels processus de décomposition.

Ce type d'évolution peut être suivi, par exemple, sur les résultats de Melchior et Luther [1] qui montrent les variations de la chaleur spécifique de charbons en fonctions de la température, et de leur teneur initiale en matériaux volatils.

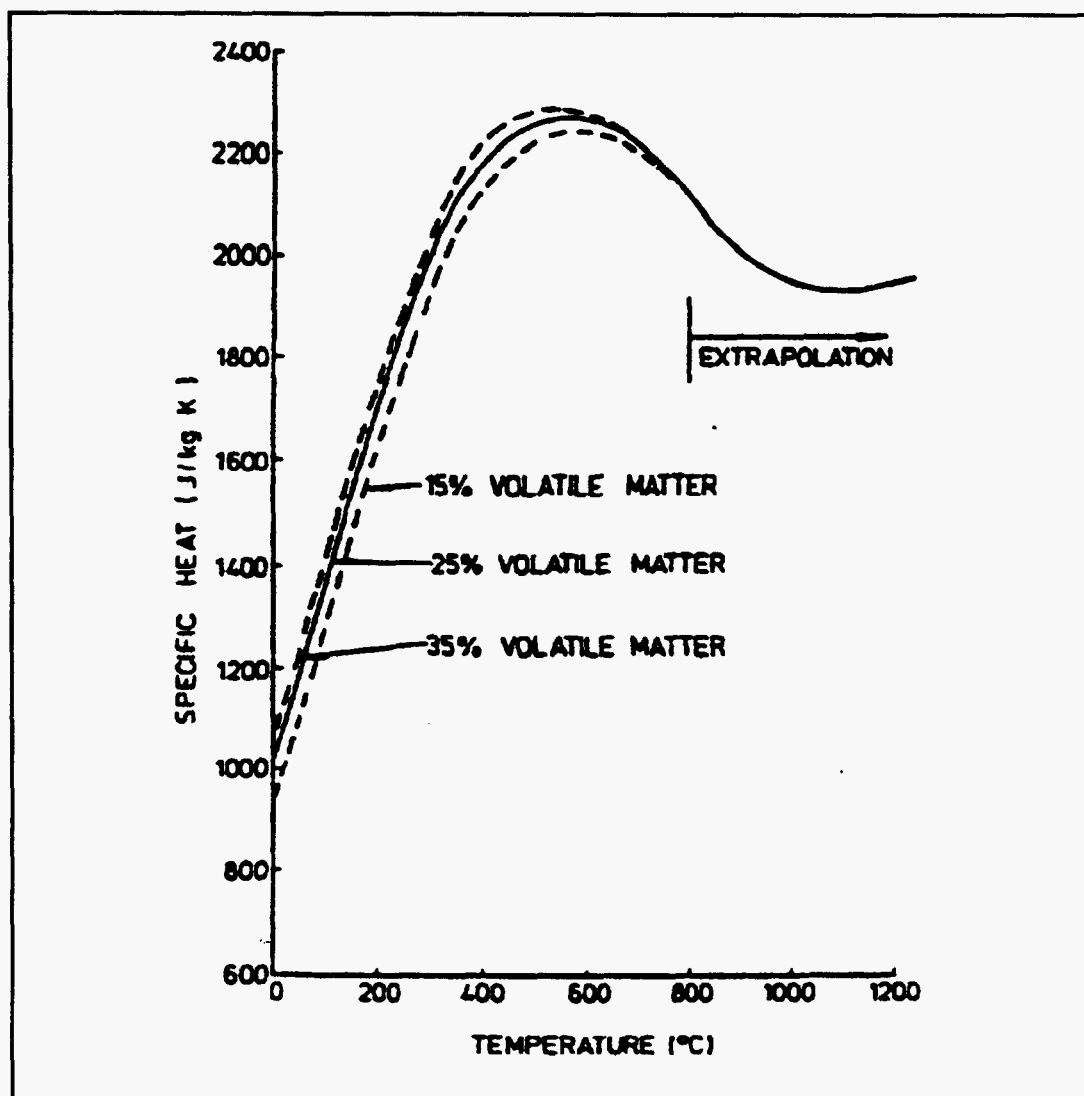


Variation des chaleurs spécifiques en fonction de leur température et leur rang



On comprend qu'un processus de pyrolyse correspondant à une élévation du  $C_p$  par chauffage et une diminution par perte de matières volatiles, puisse être détecté par l'apparition d'un extremum de la chaleur spécifique en fonction de la température.

Un modèle élaboré par Merrick [2] permet de rendre compte de ce processus.

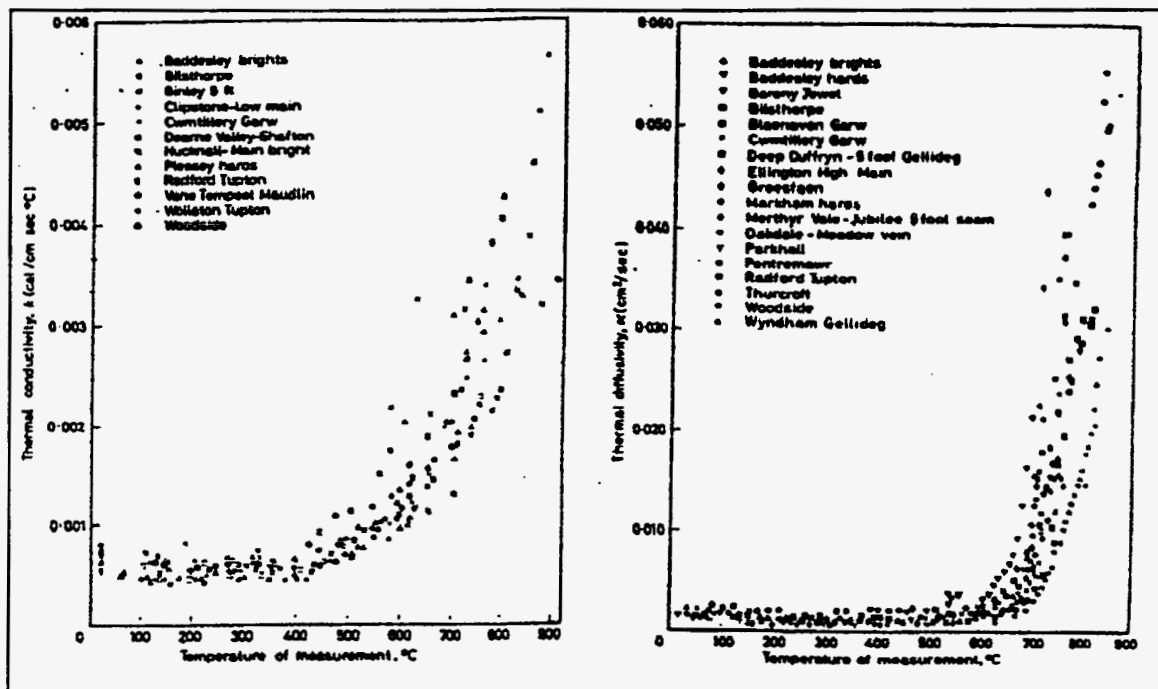


*Variation de la chaleur spécifique d'un charbon en fonction de la température [2]*

L'extremum obtenu correspond à une température voisine de 500°C et dépend de la teneur initiale en matières volatiles. Nous désignerons, par la suite, cette température comme température  $T_p$  de pyrolyse. Elle dépend bien entendu du matériau.

L'existence d'une température critique de pyrolyse est confirmée par le suivi des variations de la masse volumique  $\rho$  du matériau, de sa conductivité

thermique  $\lambda$  et surtout de son coefficient de diffusivité thermique  $D = \frac{\lambda}{\rho C_p}$ , en fonction de la température, comme le montrent les travaux de Badziock et al [3], pour un grand nombre de charbons.



*Variations de la conductivité thermique et de la diffusivité thermique en fonction de la température*

On observe, dans le cas d'une matière carbonée, une brusque variation de propriétés thermophysiques du composé, à une température voisine de 500-550°C assimilée à une température de pyrolyse  $T_p$ . Cette température a été trouvée égale à 346°C pour du bois [4] et à 382°C pour du papier [5].

Dans un matériau de dimensions finies, le processus de pyrolyse pourra donc être décrit par un processus de pénétration de la chaleur, le matériau subissant une décomposition pyrolytique lorsque la température en un point atteint la température critique  $T_p$ .

En d'autres termes, la cinétique de transfert thermique apparaît être le facteur limitant par rapport à celle de la décomposition thermochimique du matériau quand celui-ci est de taille finie, compte tenu de la faiblesse des conductivités et diffusivités initiales de la plupart des matériaux solides.

a) Cinétique de pénétration de la chaleur.

Considérons tout d'abord un solide semi-fini, initialement à la température  $T_0$ , plongé dans une atmosphère à la température  $T_\infty > T_0$ .

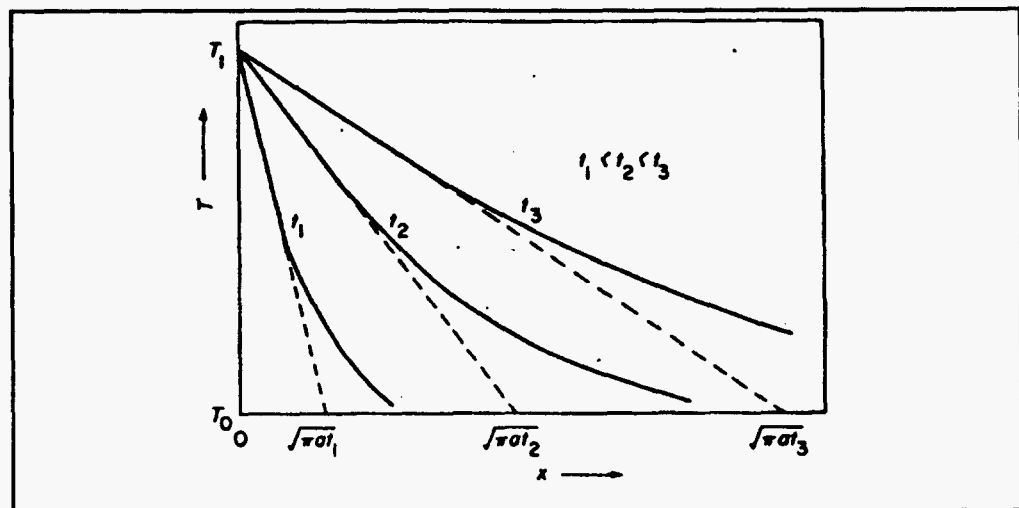
En négligeant, dans un premier temps la résistance thermique externe au milieu, on aura alors la température  $T_1$  de surface du matériau égale à celle du milieu extérieur soit  $T_1 = T_\infty$ .

La solution classique donnant la pénétration de la chaleur au cours du temps dans le milieu s'écrit alors

$$\frac{T_\infty - T(x,t)}{T_\infty - T_0} = \frac{T_1 - T(x,t)}{T_1 - T_0} = \operatorname{erf}\left(\frac{x}{\sqrt{4Dt}}\right)$$

où  $x$  est la coordonnée d'espace dans le sens de la pénétration (m).  
 $t$  est le temps (s)

$D = \frac{\lambda}{\rho C_p}$  ( $\text{m}^2 \text{s}^{-1}$ ) le coefficient de diffusivité thermique du matériau.



*Pénétration de la chaleur en milieu semi infini*

Le front thermique pénètre à l'intérieur du solide suivant une loi de type :

$$\delta = \sqrt{\pi D t}$$

où  $\delta$  représente la profondeur de pénétration par le front thermique au bout du temps  $t$ .

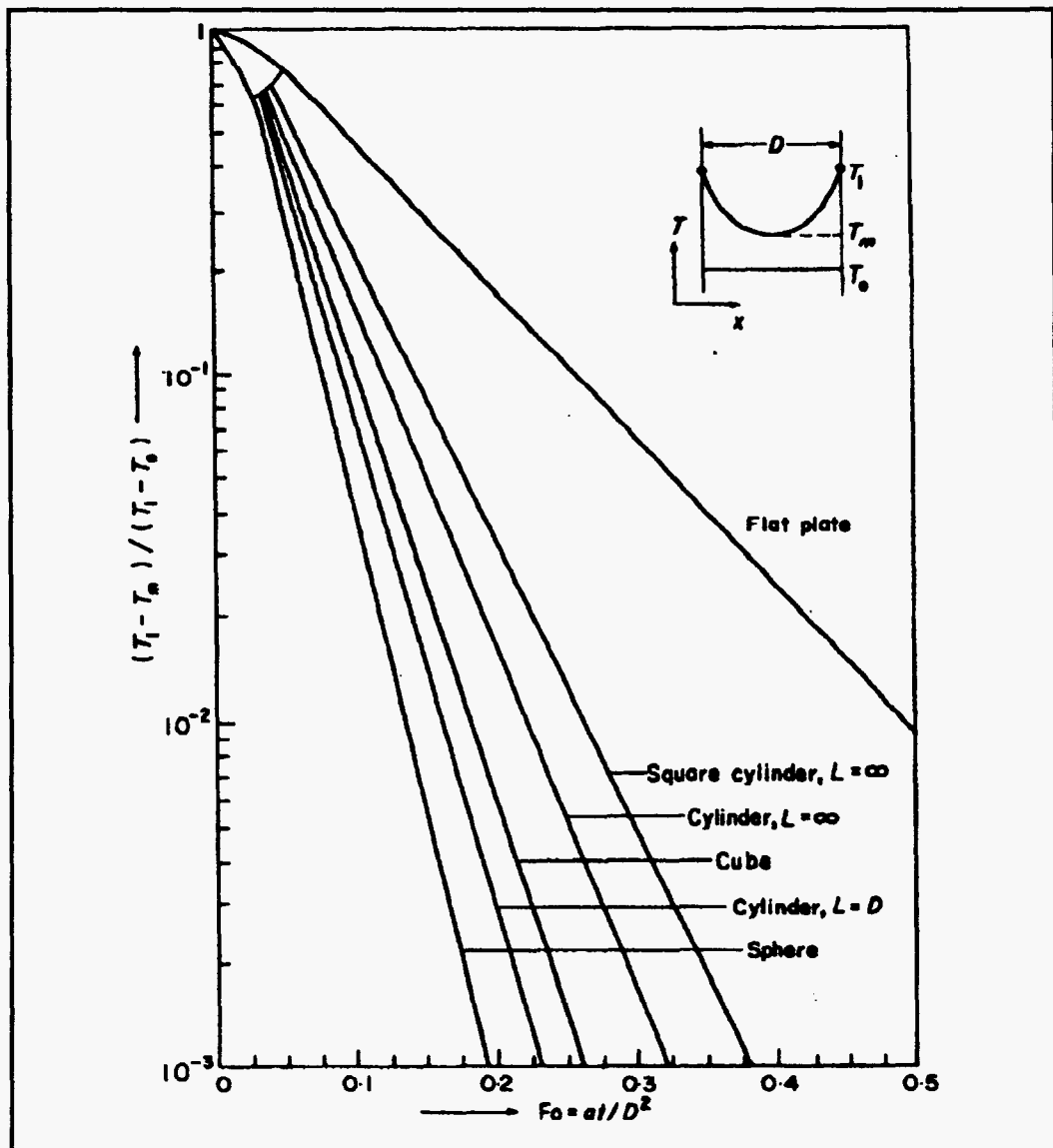
La vitesse de pénétration associée est donc d'autant plus forte que le coefficient  $D$  est élevé.

La solution indiquée est valable tant que la dimension  $L$  caractéristique du matériau reste faible devant  $\delta$ , soit sous forme adimensionnelle.

$$F_0 = \frac{Dt}{L^2} \ll 0,1 \quad (<0,05)$$

où  $F_0$  est un nombre de Fourier adimensionnel.

Pour des temps longs, ou des matériaux peu épais, on ne peut plus négliger les dimensions effectives du matériau ( $F_0 > 0,1$ ) et il s'installe un profil de température au sein du milieu. On représente dans la figure ci-dessous d'évolution de la température atteinte, par exemple, par le coeur du matériau au cours du temps [6].



Evolution de la température centrale du matériau, en fonction de sa forme

Dans ce qui précède on a supposé que la température extérieure était appliquée à la surface du milieu ( $T_{\infty} = T_1$ ), c'est à dire que la résistance thermique coté extérieur ( $\frac{1}{h_{ext}}$ ) était négligeable devant la résistance thermique du solide ( $\frac{1}{h_{int}} \sim \frac{L}{\lambda}$ ), soit, en terme de nombre de Biot.

$$Bi = \frac{h_{ext} L}{\lambda} > 0,1$$

C'est le cas pour la plupart des milieux solides non métalliques (bois, plastique, charbon...) de faible conductivité thermique, placés dans une atmosphère chaude turbulente ( $h_{ext}$  élevés).

Si ce n'est plus le cas (par exemple faible turbulence extérieure), c'est à dire si  $Bi < 1$ , on pourra néanmoins utiliser les diagrammes précédents pour calculer les évolutions de température au sein du milieu, à condition de remplacer le paramètre de Fourier  $\frac{D t}{L^2}$  par  $\frac{D t}{L^2} \left(1 + \frac{h_{int}}{h_{ext}}\right)^{-1}$  c'est à dire  $\frac{D t}{L^2} \left(1 + \frac{1}{Bi}\right)^{-1}$  et la température de surface  $T'_1$  par  $T'_1 < T_{\infty}$  déduit de l'équation :

$$h_{int} (T'_1 - \langle T \rangle) = h_{ext} (T_{\infty} - T'_1)$$

qui traduit la conservation du flux à la limite.

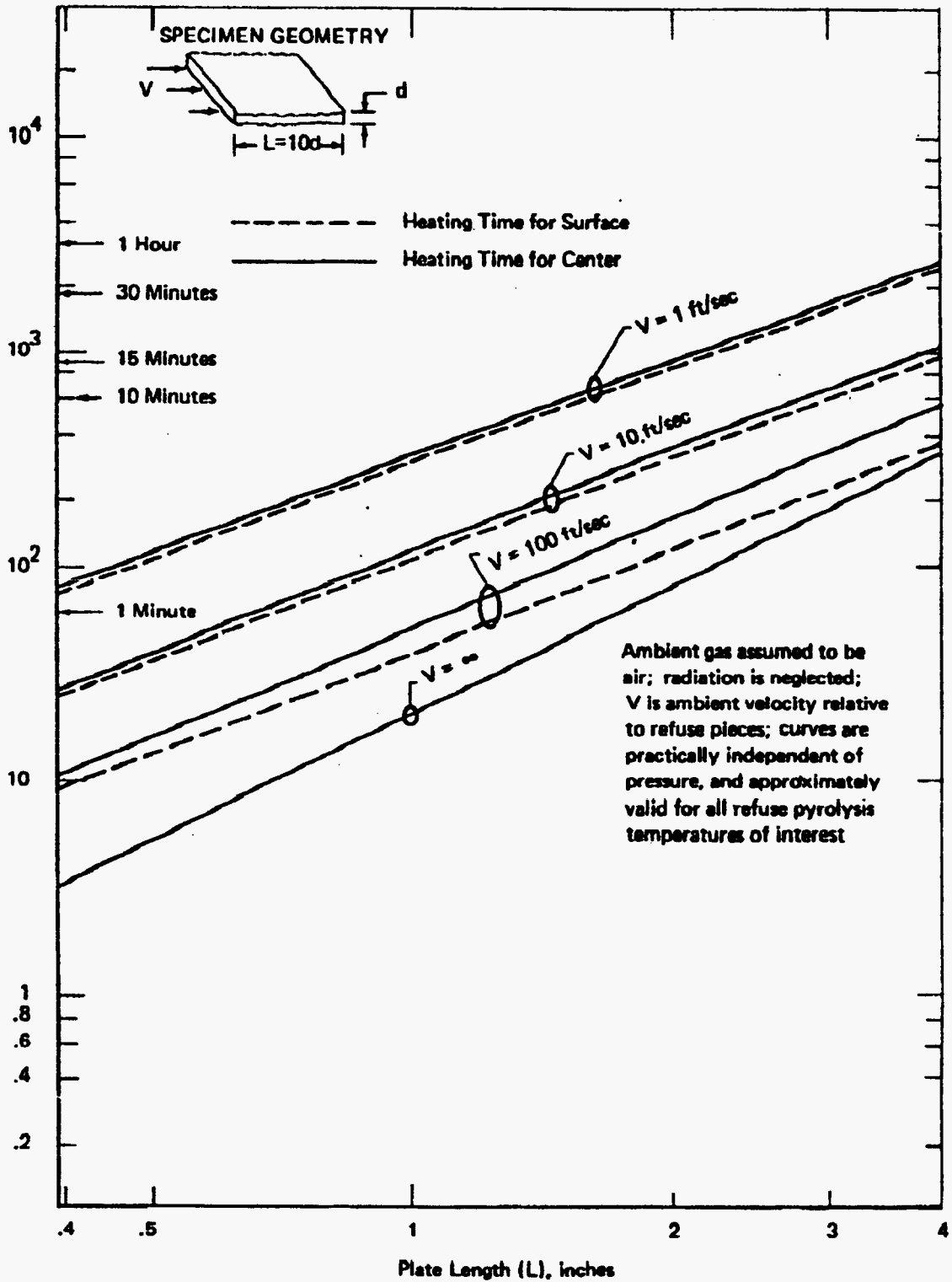
### b) Temps de pyrolyse $t_p$ .

Ce temps caractéristique peut être estimé en déterminant le temps nécessaire pour que la température au coeur du matériau atteigne la température extérieure imposée  $T_{\infty} > T_p$ .

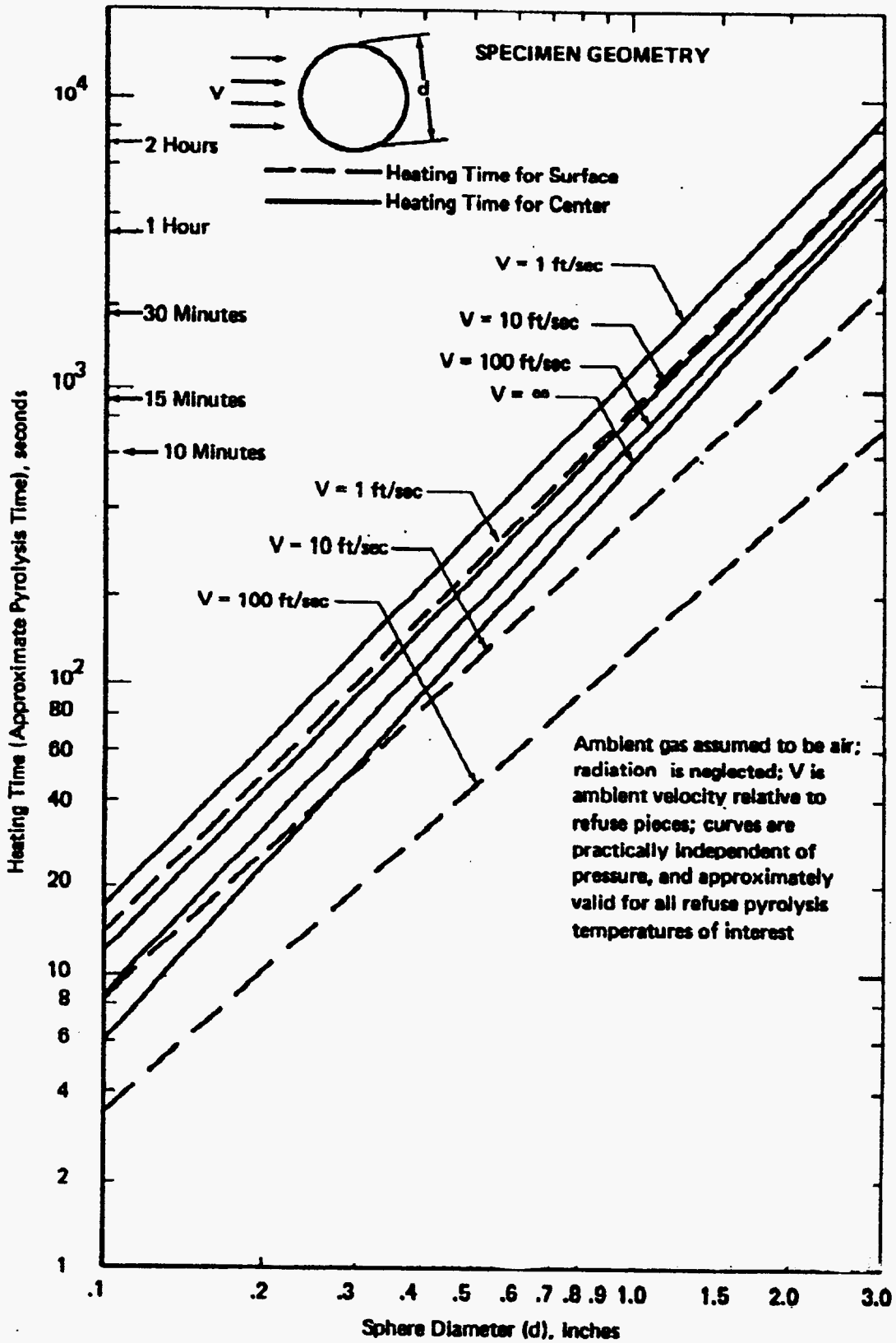
Cette hypothèse a été récemment confirmée par Hilavre [7] qui a mesuré la température au coeur d'un grain sphérique au cours de pyrolyse. Il a ainsi montré que la durée du processus de pyrolyse, déterminé par analyse des gaz émis, correspond exactement au temps nécessaire pour chauffer complètement le grain, c'est à dire pour que la température du coeur devienne égale à celle du milieu ambiant chaud.

De même, le temps de pyrolyse a été estimé par Niessen et Chansky [8] comme le temps nécessaire pour que l'écart de température entre le centre de l'échantillon et l'extérieur soit réduit à 5% de sa valeur initiale.

Ces résultats, décrits dans la figure ci-dessous prennent en compte une diffusivité moyenne  $D = 10^{-7} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$  caractéristique de la plupart des matériaux solides (bois, papier, charbons...). Ils montrent l'importance de la résistance externe au transfert en prenant en compte une vitesse tangentielle  $V$ , dont l'effet est de réduire le temps de pyrolyse quand elle augmente. Bien entendu, le temps de pyrolyse décroît avec la taille de l'échantillon, à  $V$  fixé.



*Temps de pyrolyse pour un échantillon solide parallélépipédique*



*Temps de pyrolyse pour un échantillon solide sphérique*

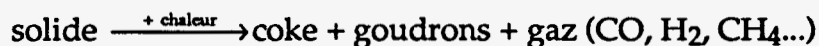
### c). Nature des gaz émis et du résidu.

La nature et la composition des gaz et vapeurs émises lors du processus de pyrolyse sont très variables en fonction du matériau, de la vitesse de chauffe et de la température finale atteinte.

On peut néanmoins observer que d'une manière générale ces gaz sont combustibles et que la quantité totale "obtenue" est d'autant plus élevée que la température finale est forte.

Le résidu formé est un résidu carboné assimilable à un semi-coke.

La réaction globale mise en oeuvre est de type :



Le processus mettant en oeuvre ce type de décomposition thermique a été décrit par ailleurs [9].

## 2- Processus d'inflammation critère TRP et délais d'inflammation

Le processus d'inflammation d'un solide, initialement à la température  $T_0$  peut être décrit en estimant le temps mis par la surface de ce solide pour atteindre une température critique  $T_{ig} = T_p$  quand on la soumet à un flux calorifique constant  $\Phi_0$  imposé depuis l'extérieur.

En effet, dès que cette température est atteinte en surface, on a vu qu'il y a dégagement de gaz combustibles, ceux-ci, en mélange avec l'air et en présence d'une source d'ignition (flamme pilote, étincelle...) s'enflamment, démarrant ainsi le processus de combustion entretenue du solide, l'énergie calorifique produite entretenant le processus de pyrolyse et donc la génération de gaz combustibles.

Dans le cas d'un milieu semi-infini initialement à la température  $T_0 = T_\infty$  donnant l'évolution de la température dans le milieu ( $x > 0$ ) s'écrit :

$$T(x,t) - T_0 = \frac{2 \phi_0 x}{\lambda A} \sqrt{\frac{Dt}{\pi}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}} - \frac{\phi_0 x}{\lambda A} \left( 1 - \operatorname{erf} \frac{x}{2\sqrt{Dt}} \right)$$

On voit lorsqu'on soumet une surface  $A$  ( $m^2$ ) d'un solide de diffusivité  $D$ , à un flux constant  $F_0$  à partir d'un instant initial, la température de surface  $T_s = (0, t)$  se met à croître à partir de sa température initiale  $T_0$  selon une loi de type :

$$T_s(t) - T_0 = \frac{2 \phi_0 x}{\lambda A} \sqrt{\frac{Dt}{\pi}} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left( \frac{\phi_0}{A} \right) \sqrt{\frac{1}{\rho C_p \lambda}} \sqrt{t}$$

Cette description peut être appliquée au processus d'inflammation. Si on désigne par  $T_{ig} \approx T_p$  la température d'ignition d'un composé solide alors, le



temps caractéristique  $t_{ig}$  nécessaire pour obtenir une inflammation (d'abord à la surface) dans des conditions de flux constant imposé sera :

$$T_{ig} - T_0 = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left( \frac{\phi_0}{A} \right) \sqrt{\frac{1}{\rho C_p \lambda}} \sqrt{t_{ig}}$$

soit un délai d'ignition :

$$\frac{1}{\sqrt{t_{ig}}} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left( \frac{\phi_0}{A} \right) \frac{1}{\sqrt{\rho C_p \lambda (T_{ig} - T_0)}}$$

De nombreuses méthodes de caractérisation de l'inflammabilité de composés solides ont été développés sur cette base.

Leur point commun est de soumettre un échantillon test à un flux de chaleur externe imposé et de détecter le temps nécessaire à l'inflammation de l'échantillon.

Les sources de chaleur utilisées sont :

- rayonnement externe par panneaux radiants (lampes, résistances)
- convection externe de gaz chauds
- chauffage par une flamme impactant sur l'échantillon

Le chauffage par impact direct d'une flamme de type Bunsen a fait l'objet de nombreux travaux [10, 11]. La limitation de ce type de test réside dans le fait que le flux imposé à l'échantillon est hautement non-uniforme et que, en conséquence, les résultats obtenus s'avèrent difficiles à exploiter.

Le chauffage convectif par gaz chauds impose la température et non le flux.

Le chauffage radiatif peut être considéré comme la meilleure façon d'imposer depuis l'extérieur un flux calorifique  $\Phi_0$  de densité de flux, ou irradiance,  $\Phi_0/A$ , uniforme, variant de zéro à 150 kW/m<sup>2</sup>. Le flux imposé à l'échantillon sera restreint par :

- le rayonnement ré-émis par la surface de l'échantillon (corps gris). On peut limiter cet effet en recouvrant l'échantillon d'une fine pellicule assimilable à un corps noir (poudre de graphite, peinture absorbante)

- les déperditions par convection naturelle, résultant de la différence de température instantanée entre la surface de l'échantillon et le milieu extérieur  $T_\infty$ . Cette déperdition peut être réduite en disposant l'échantillon horizontalement.

La surface de l'échantillon, soumise au flux thermique externe  $\Phi_0$ , émet alors des vapeurs ou des gaz, provenant de la dégradation thermique du matériau

test (processus de pyrolyse). Ces gaz se combinent avec l'air ambiant pour donner un mélange inflammable.

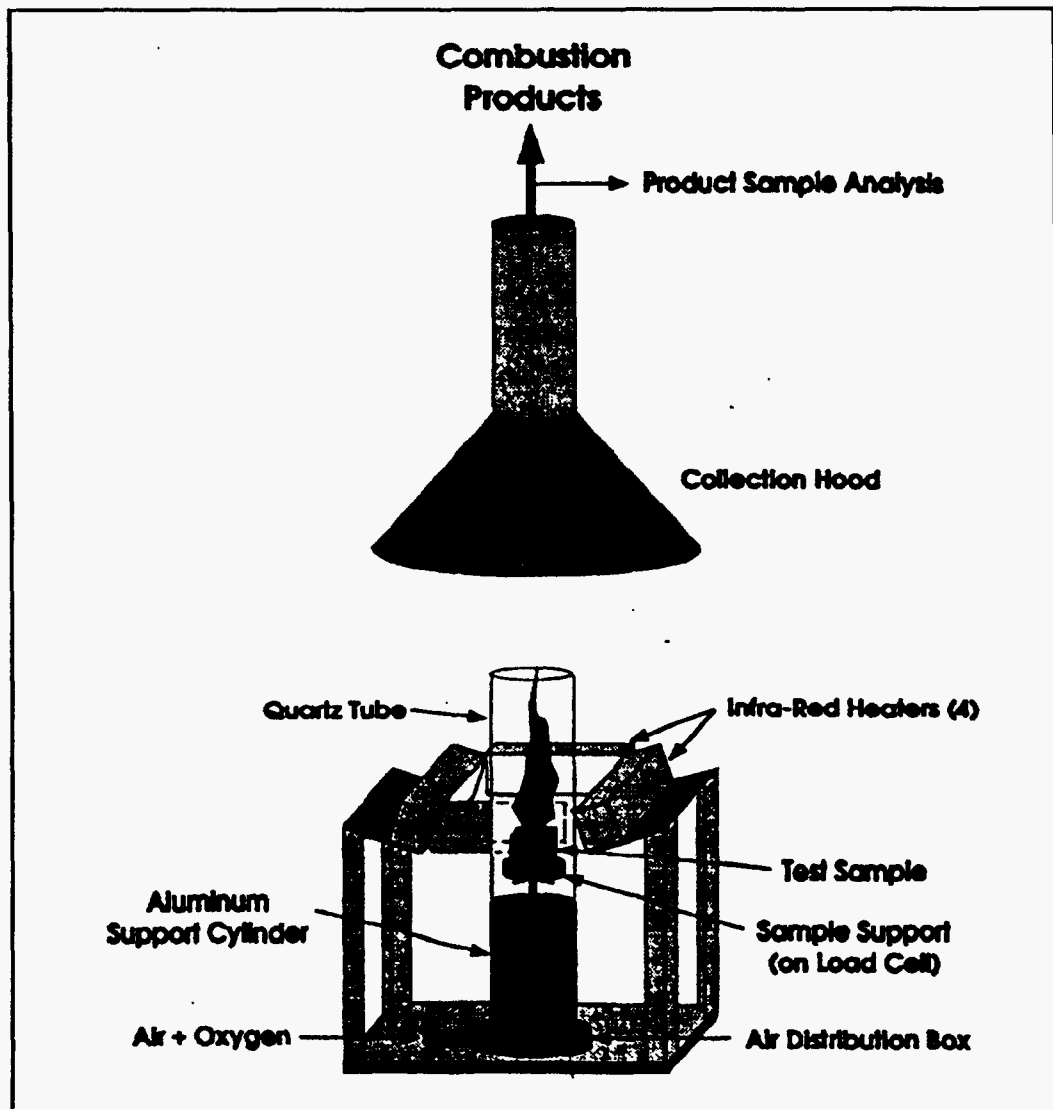
Cette couche gazeuse peut subir une :

- inflammation spontanée sous l'effet de la température et de la richesse du mélange formé. On a alors un processus d'auto-inflammation. Si la température est suffisamment élevée;

- inflammation provoquée par la présence d'une source externe (flamme pilote, étincelle électrique).

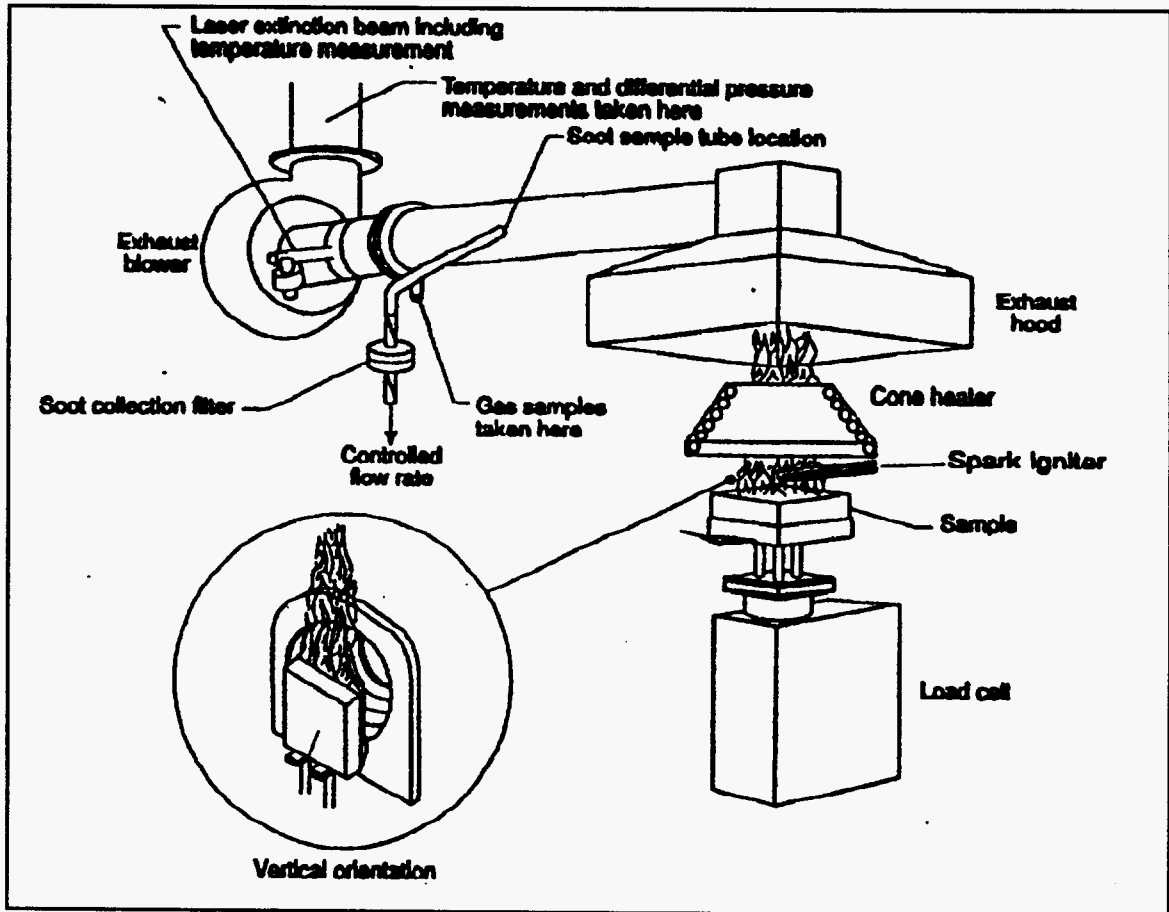
Différents dispositifs, à flux imposé et inflammation contrôlée, ont été développés. On présente ci-dessous deux exemples de tels dispositifs :

- le dispositif développé par la Factory Mutual Research Corporation, dit dispositif FMRC [12]



*Schéma du dispositif FMRC*

- le dispositif développé par la National Institut of Standard and Technology (NIST) dit Cone Calorimeter [13, 14] dans lequel l'inflammation est obtenue avec l'assistance d'étincelles électriques provoquées au voisinage de la face supérieure de l'échantillon.



*Le dispositif Cone Calorimeter (NIST)*

Ces dispositifs permettent la mesure du délai d'inflammation  $t_{ig}$ .

Ainsi, si on connaît la température d'inflammation  $T_{ig}$  du matériau, on a :

$$t_{ig} = \frac{\pi}{4} (\rho C_p \lambda) (T_{ig} - T_0)^2 \frac{1}{\left(\frac{\Phi_0}{A}\right)^2}$$

en désignant par  $\frac{\Phi_0}{A} = \dot{q}''$  l'irradiance (kW/m<sup>2</sup>), on aura:

$$t_{ig} = \frac{\pi}{4} (\rho C_p \lambda) (T_{ig} - T_0)^2 \dot{q}''^{-2}$$

Ce délai d'igniton peut être corrigé, en tenant compte du coefficient d'absorption radiatif  $\alpha$  du matériau pour prendre en compte le flux effectivement imposé, le flux transmis étant  $\alpha \frac{\phi_0}{A}$  soit  $\alpha \dot{q}''$ . Alors :

$$t_{ig} = \frac{\pi}{4} (\rho C_p \lambda) (T_{ig} - T_0)^2 (\alpha \dot{q}'')^{-2}$$

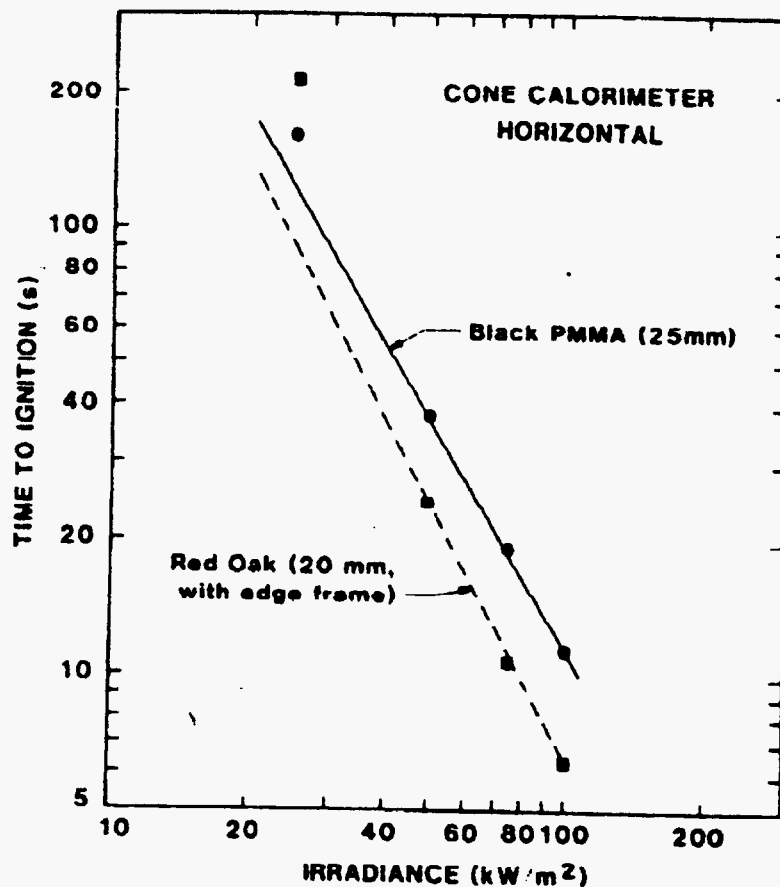
Par exemple pour du PMMA préalablement noirci, dont les propriétés thermophysiques sont bien connues par ailleurs, on a :

PMMA	$\alpha$	= 0,95
	$T_{ig}$	= 636 K
	$\rho C_p \lambda$	= 0,346 (s (kW/m <sup>2</sup> ) K <sup>-2</sup> )

On trouve

$$t_{ig} = 0,35 \times 10^5 (\dot{q}'')^{-2} \text{ (s)}$$

Un exemple de résultats obtenus par Hallman [15] est reporté dans la figure suivante, pour du PMMA noirci et du bois.



*Délai d'ignition du PMMA noirci et du bois*

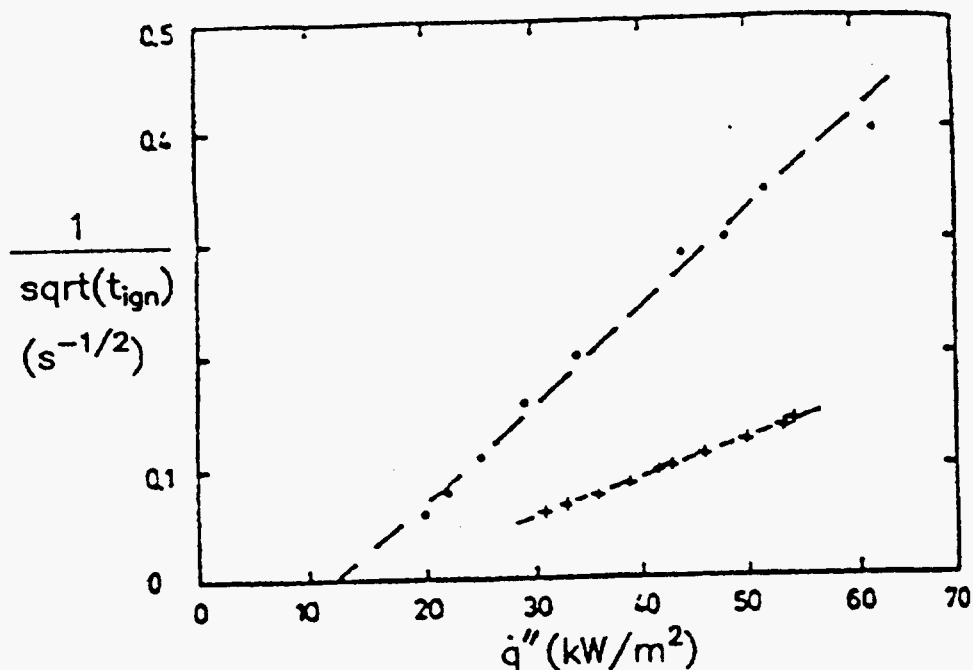
On remarque le bon accord de ces résultats avec la dépendance en  $(\dot{q}'')^{-2}$  du délai d'ignition  $t_{ig}$ . On peut également noter que cette dépendance est bien vérifiée aux fortes irradiances, mais l'est moins pour les faibles, du fait de l'effet non négligeable joué par les pertes radiatives de l'échantillon aux faibles irradiances (temps longs) de sorte que la température effective de surface  $T_s$  est plus faible dans ce cas, que celle prévue par le modèle. Donc, le temps pour atteindre  $T_{ig}$  en surface sera plus long que prévu.

Une approche simplifiée, pour le PMMA, consiste à diminuer le flux imposé aux faibles irradiances ( $< 20 \text{ kW m}^{-2}$ ). On peut alors écrire pour le PMMA :

$$\begin{cases} t_{ig} = 0,346 \times 105 (\dot{q}'' - 9,28)^{-2} & (\text{s}) \\ \dot{q}'' < 20 & (\text{kW m}^{-2}) \end{cases}$$

Un autre mode de représentation des résultats, utile en particulier aux faibles irradiances, consiste à porter les résultats donnant le délai d'ignition en fonction de la densité de flux en terme de dépendance du groupement  $\frac{1}{\sqrt{t_{ig}}}$  en fonction de  $\dot{q}''$ .

La dépendance du groupement  $(t_{ig})^{-1/2}$  est alors une fonction linéaire croissante de  $\dot{q}''$ . On montre dans la figure suivante un exemple des résultats obtenus dans ce type de représentation pour deux types de bois [16].



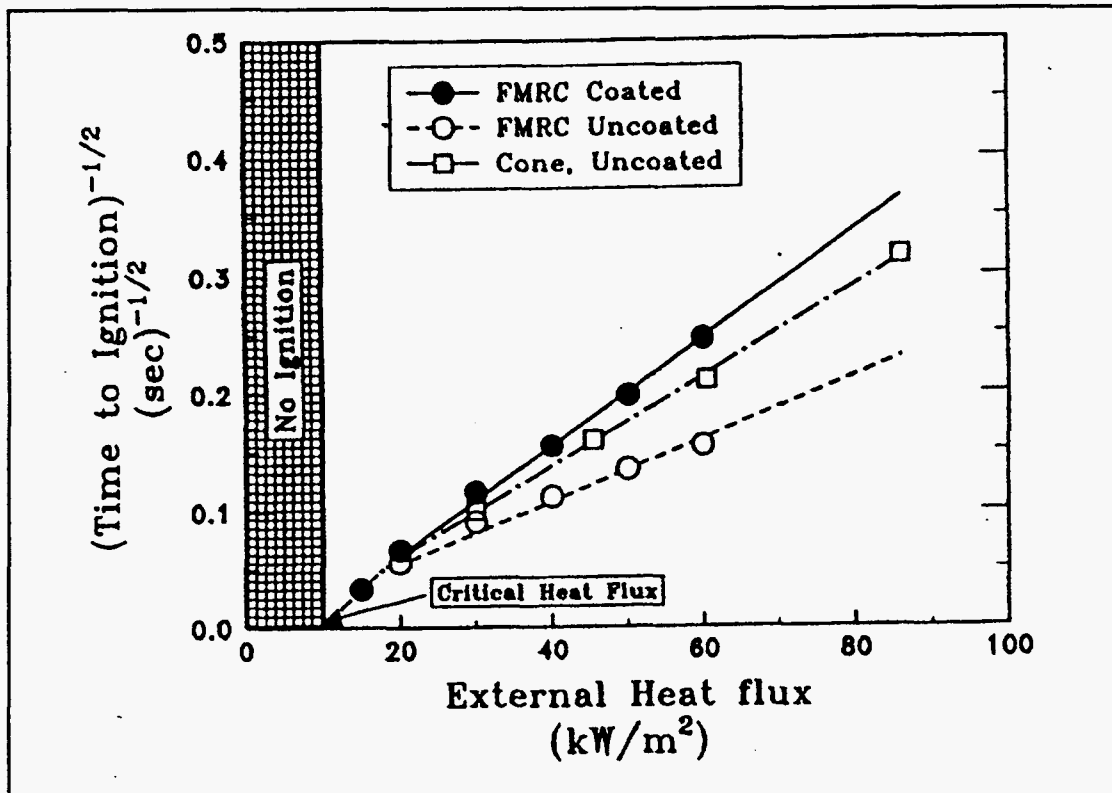
*Délai d'ignition de deux types de bois en fonction de la densité de flux imposé*

Ce type de représentation permet la mise en évidence d'une valeur limite de  $\dot{q}''$  pour laquelle le délai d'ignition prend une valeur infinie (par extrapolation de la courbe à l'origine).

Il y existe donc une valeur  $\dot{q}''$  critique du flux imposé en dessous de laquelle l'inflammation n'est pas possible et ce, pour chaque matériau.

Cette valeur, désignée par le paramètre CHF (Critical Heat Flux) peut être définie comme la densité de flux minimum en dessous de laquelle il n'y a pas génération d'un mélange de gaz de pyrolyse/air nécessaire à l'inflammation de l'échantillon [17].

Un exemple peut être donné par du PMMA dans ce type de représentation [12].



*Inverse de la racine carrée du délai d'ignition en fonction de la densité de flux imposée, pour du PPMA noirci ou non noirci, déduites des mesures sur dispositifs FMRC et Cone Calorimeter*

Cet exemple illustre :

- l'existence d'un flux critique  $\dot{q}'' = \text{CHF}$
- l'effet de l'absorbance de surface de l'échantillon
- la rupture de pente observée aux faibles irradiances.

L'effet de rupture de pente, déjà évoqué plus haut, a été analysé par Delichatsios et al [18] qui ont supposé la température de surface  $T_s$  de l'échantillon assimilable à celle de sa température de pyrolyse  $T_p$  au moment de

l'inflammation, comme l'on suggéré les expériences de mesures simultanées de la température de surface [19, 20].

Leur développement est basé sur le calcul de l'évolution de la température de surface de l'échantillon en tenant compte du flux de chaleur radiatif réémis par la surface soumise au flux externe  $\dot{q}''$ .

$$T_s - T_0 = \frac{1}{\sqrt{\pi \rho C_p \lambda}} \int_0^t \left\{ \frac{\alpha \dot{q}'' - \epsilon \sigma (T_s^4 - T_0^4)}{\sqrt{t - \tau}} \right\} d\tau$$

où :  $\alpha$  est le coefficient d'absorption radiatif de l'échantillon  
 $\epsilon$  est son coefficient d'émission radiative  
 $\sigma$  est la constante de Stefan-Boltzman.

Le délai d'ignition  $t_{ig}$  est calculé comme le temps pour que  $T_s$  atteigne la température de pyrolyse  $T_p$ . Des expressions simplifiées de cette solution sont données pour le cas où  $\alpha = 1$  et  $\epsilon = 1$  (corps noirci).

Elles s'écrivent ,

- aux flux élevés :

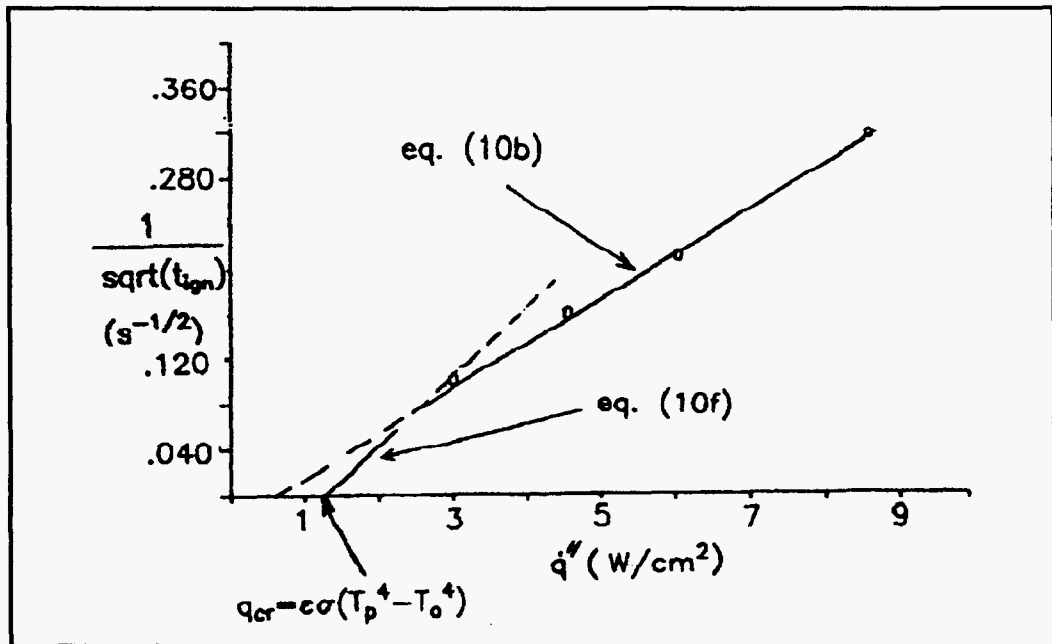
$$\frac{1}{\sqrt{t_{ig}}} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{\sqrt{\rho C_p \lambda (T_{ig} - T_0)}} \left[ \dot{q}'' - 0,64 \dot{q}_{crit}'' \right]$$

$$\text{avec } \dot{q}_{crit}'' = \sigma (T_p^4 - T_0^4)$$

- aux flux faibles :

$$\frac{1}{\sqrt{t_{ig}}} = \frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{\rho C_p \lambda (T_p - T_0)}} \left[ \dot{q}'' - \dot{q}_{crit}'' \right]$$

Leurs résultats sont reportés dans la figure suivante :



Correlation du délai d'ignition en fonction de la densité de flux imposée pour des échantillons de PMMA noircis.

La pente de la droite obtenue aux forts flux permet d'estimer le groupement :

$$\frac{2}{\sqrt{\pi \rho C_p \lambda} (T_p - T_0)} = 3,48 \cdot 10^{-2} \text{ cm}^2 \text{ W}^{-1} \text{ s}^{-1/2}$$

Si on admet pour le PMMA  $T_p = 400^\circ\text{C}$ , on en déduit avec  $T_0 = 25^\circ\text{C}$ , la valeur du terme :

$$\frac{1}{\sqrt{\pi \rho C_p \lambda}} = 6,55 \text{ cm}^2 \text{ K W}^{-1} \text{ s}^{-1/2}$$

très proche de la valeur déduite des données thermophysiques du PMMA (connues par ailleurs).

Par ailleurs, on observe que la valeur du flux critique  $\dot{q}''_{\text{crit}} = \text{CHF}$  déduite de l'extrapolation de la droite à forts flux vaut  $\dot{q}'' = 0,65 \text{ W/m}^2$ . Cette valeur est sous-estimée, la valeur réelle obtenue par extrapolation de la droite à faibles flux est  $\dot{q}''_{\text{crit}} - \sigma (T_p^4 - T_0^4) = 5,669 \times 10^{-12} (673^4 - 300^4) = 1,12 \text{ W/cm}^2$  qui vaut donc, en réalité, le double de la valeur extrapolée de la droite des forts flux.

Le même raisonnement pourrait être bâti, dans l'hypothèse de pertes convectives, ou une combinaison radiative/convective.



Dans le cas où une partie du flux imposé  $\dot{q}''$  serait perdue par pertes convectives à la surface de l'échantillon ou aurait, pour des flux importants ( $\dot{q}'' > 3 \dot{q}''_{crit,c}$ )

$$\frac{1}{\sqrt{t_{ig}}} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{\sqrt{\lambda \rho C_p (T_p - T_o)}} \left( \dot{q}'' - \frac{\pi}{4} \dot{q}''_{crit,c} \right)$$

avec  $\dot{q}''_{crit,c} = h_c (T_p - T_o)$

où  $h_c$  est la conductance convective externe ( $Wm^{-2}C^{-1}$ ) à l'échantillon (soit naturelle, soit forcée).

Dans le cas général où on ne connaît pas la température d'ignition  $T_{ig}$ , celle-ci pourra être déduite des pertes des courbes donnant  $(t_{ig})^{-1/2}$  en fonction de  $\dot{q}''$  comme on l'a vu précédemment, avec ou sans correction des pertes radiatives ou convectives, si les données manquent.

Ainsi, certains auteurs [21, 22] ont introduit un paramètre spécifique à l'échantillon, en regroupant les inconnues  $\lambda$ ,  $\rho$ ,  $C_p$  et  $T_{ig}$  sous la forme d'un paramètre de réponse thermique TRP (Thermal Response Parameter) exprimé sous la forme :

$$TRP = \sqrt{\lambda \rho C_p} (T_{ig} - T_o)$$

Alors, avec 
$$\frac{1}{\sqrt{t_{ig}}} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{TRP} \frac{\Phi_o}{A} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{TRP} \dot{q}''$$

On a 
$$TRP = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sqrt{t_{ig}} \dot{q}''$$

La détermination du TRP d'un échantillon peut être effectuée par mesure de pente des courbes donnant  $(t_{ig})^{-1/2}$  en fonction de  $\dot{q}''$ , ce qui permet, dans un second temps, de remonter aux valeurs de la température d'inflammation  $T_{ig}$ .

La difficulté de cette méthode réside dans la non-connaissance du flux effectivement absorbé (correction  $\alpha \dot{q}''$  suivant l'état de surface de l'échantillon (noirci ou pas)).

On illustre dans le tableau suivant les valeurs de paramètre TRP obtenues pour différents matériaux sur échantillon noirci (dispositif FMRC) et non noirci (Cone calorimeter).

Materials	TRP (kW·s <sup>1/2</sup> /m <sup>2</sup> )	
	FMRC <sup>a</sup>	Cone <sup>b</sup>
Flexible polyurethane foam	105	—
Polystyrene foam	125	168
Wood (red oak)	134	—
Wood (Douglas fir)	138	—
Polystyrene	162	—
Wood (hemlock)	—	175
Acrylic fiber 100%	—	180
Polypropylene	193	291
Styrene-butadiene	198	—
Wool 100%	—	232
Crosslinked polyethylene	239	—
Polyester—30% glass	—	256
Polyoxymethylene	269	—
Nylon	270	—
Polymethylmethacrylate	274	—
Polyether ether ketone—30% glass	—	301
ABS	—	317
Polyethylene (high density)	—	364
Vinyl ester panel	440	—
<b>Halogenated Materials</b>		
Isoprene	174	—
Polyvinylchloride (PVC)	194	—
Plasticized PVC-3, LOI 0.20	—	285
Tefzel (ETFE)	356	—
Rigid PVC, LOI 0.50	—	388
Plasticized PVC-4, LOI 0.35	—	345
Plasticized PVC-3, LOI 0.30	—	397
Plasticized PVC-3, LOI 0.25	—	401
Teflon (FEP)	682	—
<b>Thermosets</b>		
Polyvinyl ester	—	263
Polyester 2—glass composite	275	—
Vinyl ester-glass composite	281	—
Isophthalic polyester	—	296
Polyester 5—glass composite	338	—
Polyester 3—glass composite	382	—
Epoxy 4—glass composite	388	—
Graphite composite	400	—
Phenolic-graphite composite	400	—
Kevlar-phenolic composite	403	—
Polyester 4—glass composite	406	—
Epoxy 1—glass composite	420	—

*Paramètre TRP pour différents matériaux sur échantillon noirci (dispositif FMRC) et non noirci (Cone calorimeter)*

Suite

Materials	TRP (kW-s <sup>1/2</sup> /m <sup>2</sup> )	
	FMRC <sup>a</sup>	Cone <sup>b</sup>
Isophthalic polyester—77% glass	—	426
Polyester 1—glass composite	430	—
Polyvinyl ester resin—69% glass	—	444
Epoxy resin	—	457
Epoxy-graphite composite	481	—
Epoxy 3—glass composite	500	—
Modified acrylic-FR	—	526
Epoxy 2—glass composite	540	—
Phenolic composite	610	—
Vinyl ester-glass composite/cc	676	—
Phenolic laminate—45% glass	—	683
Epoxy resin—69% glass	—	688
Phenolic-graphite composite/cc	807	—
Epoxy-graphite composite/ic	962	—
Vinyl ester-glass composite/ic	1471	—
Phenolic-graphite composite/ic	1563	—
Epoxy-graphite composite/cc	2273	—
<i>Aircraft Panel Materials<sup>c</sup></i>		
Phenolic fiberglass	105	172
Epoxy kevlar	120	169
Epoxy fiberglass	156	198
Phenolic kevlar	185	258
Phenolic graphite	333	212

*Paramètre TRP pour différents matériaux sur échantillon noirci (dispositif FMRC) et non noirci (Cone calorimeter)*

De grandes valeurs du paramètre TRP associées à des CHF élevées indiquent des matériaux peu inflammables. Par exemple, des résines thermodurcissables ont des TRP plus élevés que des plastiques thermoformables. De même, la présence de composés halogénés augmentent le TRP.

De plus, on voit que la présence de fibre de verre dans le matériau (composite) accroît son TRP.

Par exemple, une résine epoxy brute a un TRP = 457 kW<sup>s</sup><sup>1/2</sup>m<sup>-2</sup> qui passe à 688 kW<sup>s</sup><sup>1/2</sup>m<sup>-2</sup> pour la même résine epoxy chargée de 69% de fibres de verre.

Les valeurs du paramètre TRP obtenues sont plus fortes pour des échantillons bruts (non noircis) que pour des échantillons préalablement noircis.

En effet, la relation :

$$\frac{1}{\sqrt{t_{ig}}} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left( \frac{1}{(\text{TRP})_n} \right) \dot{q}''$$

où  $\text{TRP}_n$  est le paramètre TRP de l'échantillon noirci doit être remplacé par :

$$\frac{1}{\sqrt{t_{ig}}} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left( \frac{1}{(\text{TRP})_{nn}} \right) \dot{q}''$$

où  $(\text{TRP})_{nn}$  le TRP de l'échantillon non noirci.

On observe que la pente de la courbe donnant  $t_{ig}^{-1/2}$  en fonction de  $\dot{q}''$  est plus forte pour des échantillons noircis de sorte que :

$$\frac{1}{(\text{TRP})_n} > \frac{1}{(\text{TRP})_{nn}} \rightarrow (\text{TRP})_{nn} > (\text{TRP})_n$$

En observant que les relations donnant  $t_{ig}^{-1/2}$  le sont en fonction du flux extérieur  $\dot{q}''_i$ , dans le cas de corps noirci on a  $\dot{q}''_i = \dot{q}''_{abs}$ , par contre pour les

échantillons non noircis on a  $\dot{q}''_i = \frac{\dot{q}''_{abs}}{\alpha}$  où  $\alpha$  est le coefficient d'absorption radiative de l'échantillon. Alors, si on peut trouver une expression unique pour un échantillon donné, donner son délai d'inflammation :

$$\frac{1}{\sqrt{t_{ig}}} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{(\text{TRP})_n} (\dot{q}''_{abs})_n = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{(\text{TRP})_{nn}} (\dot{q}''_{abs})_{nn}$$

Or  $(\dot{q}''_{abs})_n = \dot{q}''_i$   
 $(\dot{q}''_{abs})_{nn} = \frac{\dot{q}''_i}{\alpha}$

De sorte que

$$\frac{1}{(\text{TRP})_n} \dot{q}''_i = \frac{1}{(\text{TRP})_{nn}} \left( \frac{\dot{q}''_i}{\alpha} \right)$$

et  $(\text{TRP})_n = \alpha (\text{TRP})_{nn} \rightarrow (\text{TRP})_{nn} = \frac{1}{\alpha} (\text{TRP})_n$

fournissent directement  $(\text{TRP})_{nn} > (\text{TRP})_n$

Il est donc possible à partir de la valeur du TRP fourni par un échantillon brut, d'émissivité  $\alpha$ , de remonter à une valeur unique du  $(\text{TRP})^\circ$ , prise comme référence en écrivant (corps noir) :

$$(\text{TRP})^\circ = \alpha (\text{TRP})_{nn}$$

et d'en déduire une mesure absolue de la température d'ignition sous la forme :

$$\sqrt{\lambda\rho C_p} (T_{ig} - T_0) = (TRP)^\circ$$

soit

$$T_{ig} - T_0 = \frac{1}{\sqrt{\lambda\rho C_p}} (TRP)^\circ = \frac{\alpha}{\sqrt{\lambda\rho C_p}} (TRP)_{nn}$$

Par exemple pour du PMMA on trouve :

$$(TRP)_n = 274 \text{ kW s}^{1/2} \text{ m}^{-2} \text{ [12] (dispositif FMRC)}$$

pour  $\alpha = 0,9$

Ainsi en remplaçant par les valeurs connues des groupements  $\lambda, \rho, C_p$  [11]

$$T_{ig} - T_0 = \frac{0,9}{\sqrt{0,346}} \times 274 = 419^\circ\text{C}$$

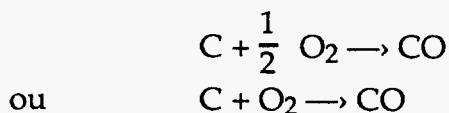
d'où  $T_{ig} = 419 - 20 \rightarrow T_{ig} \sim 400^\circ\text{C}$

Ce résultat est bien conforme à l'estimation de la température d'ignition, assimilée à la température de pyrolyse  $T_p$  par Delichatsios et al [18] soit  $T_p = 400^\circ\text{C}$ .

### 3- Combustion/incinération des solides carbonés.

Si l'inflammabilité des solides dépend directement de leur température de pyrolyse ( $T_p \sim 300 - 450^\circ\text{C}$ ), source de la production de gaz combustibles permettant l'inflammation du mélange air - gaz formé en surface, la combustion du résidu carboné consiste en une réaction hétérogène d'oxydation vive de la surface elle-même du solide carboné.

Cette réaction de surface est essentiellement basée sur les réactions classiques



fortement exothermiques.

Dans la pratique, de même que pour les liquides, on a intérêt à en augmenter la surface spécifique, de façon à réduire les durées nécessaires au chauffage du solide et accroître la surface totale de l'interface solide/gaz.

Ceci est réalisé par division plus ou moins grossière du solide, le temps de séjour nécessaire étant d'autant plus important que la taille moyenne du solide est grande.

La taille des solides ainsi obtenue par concassage ou broyage peut varier de quelques centimètres à quelques dizaines de microns (type pulvérisé  $80\% < 80 \mu\text{m}$ ).

Dans tous les cas, nous limiterons, notre discussion aux solides divisés de forme sphériques, sans restreindre la généralité du propos.

La cinétique de combustion de grains est régie par deux mécanismes concurrents :

- la diffusion de l'agent oxydant ( $\text{O}_2$  de l'air) à travers la couche limite externe du grain ;
- la cinétique chimique des réactions d'oxydation.

Le processus diffusionnel apparait être le facteur limitant pour les grandes particules, à l'inverse la cinétique chimique contrôle la cinétique globale pour les particules de petites dimensions.

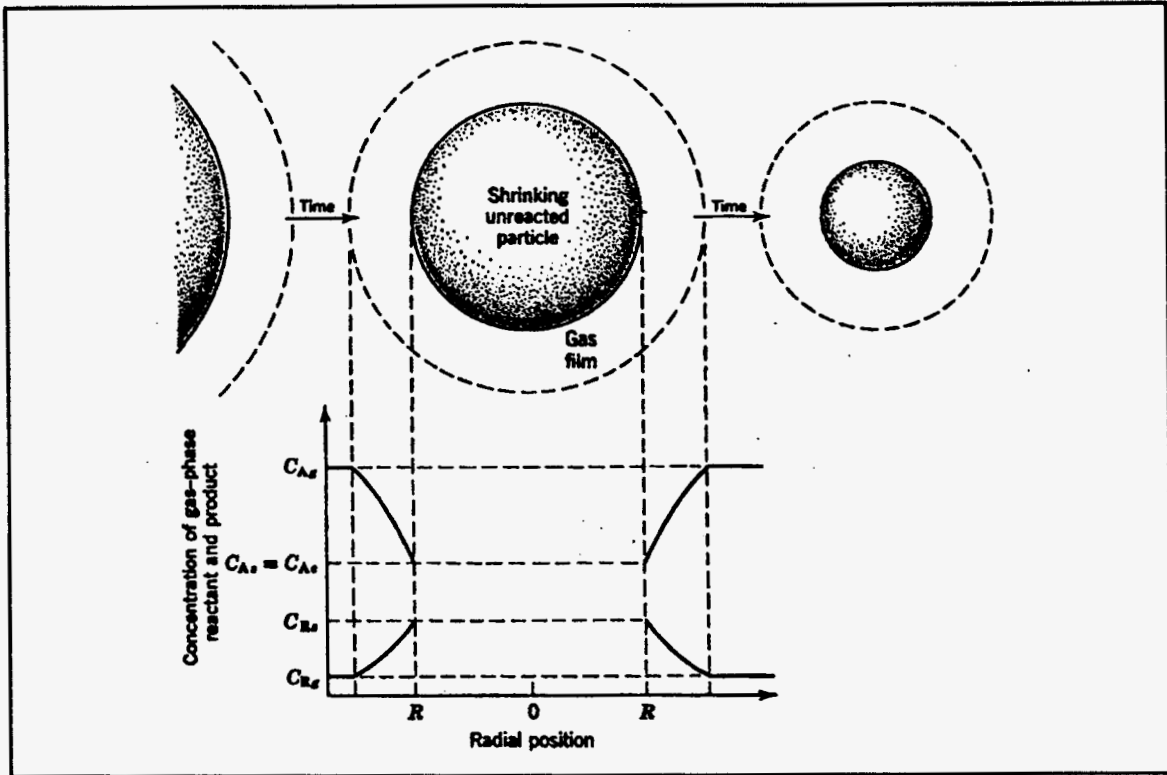
#### a) Processus de diffusion externe.

Si on désigne par  $C_0$  la concentration volumique en agent oxydant ( $\text{g}/\text{cm}^3$ ) dans l'atmosphère extérieure et  $C_s$  la concentration correspondante à la surface de la particule, la densité de flux diffusionnel  $J_s$  de l'espèce oxydante vers la surface peut s'écrire :

$$J_s = h_D (C_0 - C_s) \quad (\text{g}/\text{s cm}^2)$$

avec  $h_D$  représentant un coefficient de transfert de matière ( $\text{cm}^2/\text{s}$ ).

On a représenté dans la figure suivante un schéma du processus diffusionnel, la particule étant à "coeur rétrécissant".



*Processus de diffusion vers la surface, au cours de la consommation du grain*

Ce coefficient de transfert peut être obtenu par l'intermédiaire des corrélations donnant le nombre de Sherwood  $Sh$ . Par exemple, pour des grains sphériques on a [23] :

$$Sh = \frac{h_D d_p}{D_A} = 2 + 0,6 Sc^{1/3} Re_p^{1/2}$$

- où  $D_A$  est le coefficient de diffusion de l'oxygène dans l'air ( $cm^2/s$ ) ;  
 $d_p$  le diamètre de la particule ;  
 $Sc$  : le nombre de Schmidt de la phase gaz ;  
 $Re_p$  est un nombre de Reynolds basé sur le diamètre du grain.

Dans la pratique, à haute température  $Sc \sim 1$ .

Envisageons dans un premier temps une atmosphère au repos autour du grain, soit  $Re_p \sim 0$ . Alors :

$$h_D \sim \frac{2 D_A}{d_p} (cms^{-1})$$

On peut définir, un taux de perte de masse par unité de surface du grain en régime diffusionnel par :

$$R_e = - \frac{1}{A_e} \frac{dm}{dt} \text{ (g/cm}^2 \text{ s)}$$

où  $A_e$  est la surface externe du grain ;  
 $m_p$  est la masse totale instantannée du grain (g).

Dans le cas où la vitesse globale de réaction est contrôlée par l'arrivée de gaz comburant à la surface, on a :

$$R_{eD} = \Lambda J_s$$

$$\text{où } \Lambda = \frac{M_c}{v_g M_g}$$

avec  $M_c/M_g$  représentant le rapport des masses molaires de la matière carbonée et du gaz réactif et  $v_g$  le coefficient stoechiométrique de la réaction d'oxydation.

Par exemple  $\Lambda = 3/4$  pour la réaction  $C + \frac{1}{2} O_2 \rightarrow CO$  où  $\Lambda = \frac{3}{8}$  pour la réaction :  $C + O_2 \rightarrow CO_2$ .

Ainsi, on a :

$$R_{eD} = \Lambda h_D (C_o - C_s) = \frac{2 \Lambda D_A}{d_p} (C_o - C_s)$$

Le taux de perte de masse surfacique  $R_e$  peut être relié à la vitesse relative de perte de masse du grain par régime diffusionnel :

$$R_{mD} = - \frac{1}{m_p} \frac{dm_p}{dt} = - \frac{6}{\rho_p d_p} \frac{1}{A_e} \frac{dm_p}{dt} = \frac{6}{\rho_p d_p} R_{eD}$$

Ainsi

$$R_{mD} = \frac{12 \Lambda D_A}{\rho_p d_p^2} (C_o - C_s)$$

En admettant que le gaz est entièrement consommé à la surface on a  $C_s = 0$  et

$$R_{mD} = \frac{12 \Lambda D_A}{\rho_p d_p^2} C_o$$

Cette équation permet la détermination de l'évolution de masse consommée, ou de la diminution de taille de la particule en écrivant :



$$-\frac{1}{m_p} \frac{dm_p}{dt} = \frac{12 \Lambda D_A}{\rho_p d_p^2} C_o$$

$$\text{avec } m_p = \rho_p \frac{1}{6} \pi d_p^3$$

soit

$$d_{p_0}^2 - d_p^2 = \frac{8 \Lambda D_A C_o}{\rho_p} t \quad d_{p_0} \geq 200 \mu\text{m.}$$

où  $d_{p_0}$  est le diamètre de la particule à  $t = 0$ .

Cette relation indique une décroissance linéaire du carré du diamètre de la particule quand la cinétique globale est contrôlée par la diffusion externe.

On a vu qu'une loi en  $d^2$  s'appliquait pour des gouttes en vaporisation/combustion.

Cette relation a été confirmée expérimentalement [24] sur une grande variété de solides carbonés. Elle s'avère valable pour des diamètres initiaux supérieurs à  $200 \mu\text{m}$ .

Le temps total de combustion  $\tau_c$  nécessaire à la disparition complète du solide est alors, en fonction de sa taille initiale :

$$\tau_c = \frac{\rho_p d_{p_0}^2}{8 \Lambda D_A C_o}$$

En désignant par  $X$  le taux de conversion du solide à l'instant  $t$  on a :

$$X = \frac{\text{masse brute}}{\text{masse totale}} = 1 - \left(\frac{d_p}{d_{p_0}}\right)^3, \quad \text{soit}$$

$$X = 1 - \left(1 - \frac{t}{\tau_c}\right)^{3/2}$$

expression analogue à celle fournie par Levenspiel [25] dans le cas des régimes réactionnels contrôlés par la diffusion gazeuse externe pour une particule réactive à coeur rétrécissant.

En remarquant que [26] :

$$D_A(T) = D_A(T_o) \left(\frac{T}{T_o}\right)^{7/4}$$

et  $C_o = \frac{M_g P_o}{RT} x$

où  $x$  est la fraction molaire de l'espèce gazeuse, on peut également écrire le taux de perte de masse spécifique  $R_e$  (g/cm<sup>2</sup> s) sous la forme :

$$R_e = \frac{2\Lambda}{d_p} D_A (T_o) \left( \frac{T}{T_o} \right)^{3/4} \frac{M_g P_o}{RT} x \approx T^{3/4} d_p^{-1}$$

Ce résultat, exprimé sous forme pratique peut être écrit pour des solides carbonés dans l'air.

$$R_e = 4,35 \times 10^{-6} \frac{T^{0,75} P_{O_2}}{d_p} \text{ (g/cm}^2 \text{ s)}$$

où  $P_{O_2}$  représente la pression partielle d'oxygène dans le gaz comburant (atm) et  $d_p$  le diamètre de la particule (cm) et  $T$  la température (K).

#### b) processus réactionnel (chimique)

Dans le cas de petites particules ( $d_{p0} < 200 \mu\text{m}$ ), c'est la cinétique chimique d'oxydation qui contrôle la vitesse d'avancement de la réaction.

Elle est donc liée à la constante de vitesse réactionnelle  $k$  donnée par une loi de type Arrhenius.

$$k = e^{-\frac{E}{RT}}$$

En admettant une cinétique du premier ordre, on a alors dans le cas de particules carbonées [26], un taux de perte de masse par unité de surface en régime chimique, égal à :

$$R_{e_c} = 0,13 P_{O_2} e^{\frac{-35700}{R} \left( \frac{1}{T} - \frac{1}{1600} \right)}$$

où  $R$  est la constante des gaz parfaits (1,986 cal/g mol K)

Ainsi pour une température donnée  $T$  (K) on aura un taux de perte de masse spécifique constant qui indique une décroissance linéaire au cours du temps du diamètre  $d_p$  de la particule.

c) cas mixte

Dans le cas général les deux cinétiques se combinent et on pourra exprimer le temps de combustion totale d'une particule de diamètre initial  $d_{p0}$  jusqu'à sa disparition complète par l'expression :

$$\tau_c = \frac{1}{P_{O_2}} \left[ \frac{d_{p0}}{0,13 e^{\left[ \frac{-35700}{R} \left( \frac{1}{T} - \frac{1}{1600} \right) \right]}} + \frac{d_{p0}^2}{8,67 \cdot 10^{-6} T^{0,75}} \right]$$

Par exemple, dans une atmosphère à 1000°C et pour une pression partielle en oxygène égale à  $P_{O_2} = 0,017$  atm, on trouve :

$$\tau_c = 58 \left( \frac{d_{p0}}{2,33} + \frac{d_{p0}^2}{0,00185} \right)$$

qui montre clairement l'influence de la taille de la particule sur la durée nécessaire à la disparition complète soit :

diamètre initial ( $\mu\text{m}$ )	temps global de combustion (s)	type de contrôle
2	0,006	cinétique chimique
20 $\mu\text{m}$	0,175	mixte
200 $\mu\text{m}$	13,05	diffusionnel

On voit que des temps longs sont obtenus avec des grains (ou des agrégats de particules) de tailles supérieures à 100  $\mu\text{m}$ .

## REFERENCES

- [1] MELCHIOR, E. and H. LUTHER. Wahre Spezifische wärme von Koks und Steinkohlen Erdöl und Kölhe, Erdgas, Petrochimie vereinigt mit Brennstoff Chemie, 28, n°8, p. 379, 1975.
- [2] MERRICK, D. Mathematical models of the thermal decomposition of coal.2. Specific heats and heats of reaction Fuel, 62, p. 540, 1983.
- [3] BADZIOCH, S., D.R. GREGORY and M.A. FIELD. Investigation of the temperature variation of thermal conductivity and thermal diffusivity of coal, Fuel, 43, p. 267, 1964.
- [4] KANURY, M.A. Thermal decomposition kinetics of wood pyrolysis, Comb. Flame, 18, p. 75-83, 1972.
- [5] SHIVADEV, U.K. and EMMONS. Thermal degradation and spontaneous ignition of paper sheets in air by radiation, Comb. Flame, 22, p. 223-236, 1974.
- [6] BEEK, W.J. and K.M.K. MUTTZALL. Transport Phenomena, Wiley edn., 1975.
- [7] HILAIRE, P. Etude de la cinétique de décomposition thermique de particules de charbon, Thèse CNAM, Paris, 4 Mai 1990.
- [8] NIESSEN, W.R., E.L. CHANSKY. Systems Study of Air Pollution from Municipal Incineration, NAPCA, US DHEW, CPA 22-69-23, March 1970.
- [9] ANTONINI, G. et P. GISLAIS. Traitements thermiques des déchets industriels, Etude RECORD/ADEME, Lavoisier 1995.
- [10] Fire Test Standards, 1st edn. American Society for Testing Materials, Philadelphia, PA, 1982.
- [11] PARKER, W.J. The development of a test for case of ignition by flame impingement. Report 10495 (US) Nat. Bur. Stand. 1971.
- [12] TEWAESON, A. Flammability Parameters of Materials, J. of Fire Sciences, 12, p. 329-356, July 1994.
- [13] BABRAUSKAS, V. and D. MACAIONE. Ignitability Measurements with the Cone Calorimeter, Fire and Materials, 11, p. 31-43, 1987.
- [14] SCUDAMORE, M.J., P.J. BRIGGS and F.H. PRAGER. Cone Calorimeter : a review of tests, Fire and Materials, 15, p. 65-84, 1991.

- [15] HALLMAN, J.R. Ignition characteristics of plastics and rubber, PhD dissertation, University of Oklahoma, Norman, 1971.
- [16] NIKKOLA, E. and J.S. WICHMAN. Eastern Section Meeting, Combustion Institute, December 1988.
- [17] TEWARSON, A. and S.D. OGDEN. Fire Behavior of Polymethylmethacrylate, *Combustion and Flame*, 89, p. 237-259, 1992.
- [18] DELICHATSIOS, M.A., T.H. PANAGIOTOU and F. KILEY. The use of time to ignition data for characterizing the thermal inertia and minimum heat flux for ignition or Pyrolysis, *Combustion and Flame*, 84, p. 323-332, 1991.
- [19] THOMSON, H.E., D.D. DRYSDALE and C.L. BEYLER, *Fire Safety J.*, 13, p. 185, 1988.
- [20] ATREYA, A., C. CARPENTIER and M. HARKLEROAD. Proc. of the 1st Int. Symp. on Fire Safety Science Hemisphere, New-York, p. 97, 1985.
- [21] TEWARSON, A. and S.D. OGDEN. Fire behavior of PMMA, *Combustion and Flame*, 89, p. 237-259, 1992.
- [22] TEWARSON, A. and M.M. KHAN. Flame Propagation for Polymers, 22th Int. Symp. on Combustion, Pittsburgh, p. 1231-1240, 1988.
- [23] RANZ, W.E. and W.E. MARSHALL, *Chem. Eng. Prog.*, 48, p. 173, 1952.
- [24] MULCAHY, M.F.R. and I.W. SMITH, *Rev. Pure Appl. Chem.*, 19, p. 81, 1969.
- [25] LEVENSPIEL, O. *Chemical Reaction Engineering*, John Wiley edn., p. 368, 1972.
- [26] FIELD, M.A., D.W. GILL, B.B. MORGAN and P.G.W. HAWKSLEY. *Combustion of pulverized Coal*, BCURA, Leatherhead, England, 1967.

## **CHAPITRE 5**

### **LES CONDITIONS REACTIONNELLES DE LA DESTRUCTION THERMIQUE**

---

1- COMPARAISON DES PERFORMANCES D'ENCEINTES DE DESTRUCTION THERMIQUE EN ECOULEMENT PISTON OU RPA

2- CAS D'UNE HYDRODYNAMIQUE INTERNE QUELCONQUE

Les conditions réactionnelles pour la destruction thermique des déchets prennent en compte :

- des paramètres physiques
- des paramètres thermodynamiques et cinétiques

pour la mise en oeuvre des réactions de décomposition des espèces à détruire.

Les réactions suivent, en général, deux chemins principaux, l'un pour l'oxydation, l'autre pour la pyrolyse des espèces et peuvent se résumer par la relation :

$$-\frac{d[F]}{dt} = k_1[F]^a + k_2[F]^b[O_2]^c$$

avec  $k_1$  et  $k_2$  représentant les coefficients cinétiques pour la pyrolyse et pour l'oxydation ;  
 $[F]$  et  $[O_2]$ , les concentrations d'espèces et d'oxygène dans le mélange réactionnel ;  
 $a, b, c$  les ordres réactionnels pour la décomposition des espèces  $[F]$  à détruire.

En supposant des réactions en excès d'air, la cinétique de destruction peut être assimilée à une réaction du premier ordre avec :

$$k_2 = Ae^{-E/RT}$$

où  $A$  est la constante de vitesse de la réaction ;  
 $E$  est l'énergie d'activation ;  
 $T$  est la température.

Ce type de réaction peut être mis en oeuvre dans deux cas extrêmes de dispositif réactionnel :

- le réacteur parfaitement agité (R.P.A.) ;
- le réacteur piston.

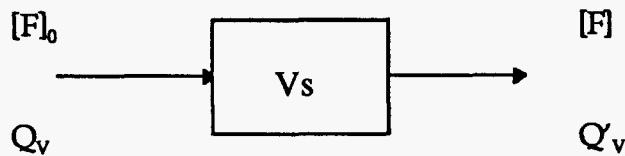
La réalité des conditions réactionnelles se situe entre les deux.

Commençons par comparer, toutes choses égales par ailleurs, les performances de ces deux types de réacteurs.

## 1- Comparaison des performances d'enceintes de destruction thermique en écoulement piston ou RPA

On considère une réaction de destruction de type  $[F] + O_2$  produite avec une cinétique de type  $r = k[F]$  du 1<sup>er</sup> ordre.

1° cas : RPA de volume  $V_s$



$[F]$  : concentration volumique en espèce

$$Q_v(T) : \text{débit volumique (m}^3/\text{s)} \quad (Q_v(T) = \frac{T}{T_0} Q_v(T_0))$$

On suppose ici, pour simplifier, le réacteur en marche isotherme avec :

$$Q_v = Q'_v$$

Le bilan entrée/sortie devient :

$$Q_v [F_0] - r V_s = Q_v [F]$$

$$Q_v [F_0] - k [F] V_s = Q_v [F]$$

$$[F] = \frac{[F_0]}{1 + k \frac{V_s}{Q_v}}$$

En désignant par  $\tau_s = \frac{V_s}{Q_v}$  le temps de passage du RPA on a :

$$[F] = \frac{[F_0]}{1 + k\tau_s}$$

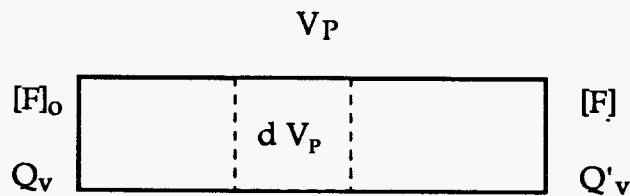
et le taux de conversion de la réaction entre l'entrée et la sortie est :



$$X_s = \frac{[F_0] - [F]}{[F_0]} = 1 - \frac{[F]}{[F_0]} = 1 - \frac{1}{1 + k\tau_s}, \text{ soit}$$

$$X_s = \frac{k\tau_s}{1 + k\tau_s} = X_s(\tau_s) \text{ avec } k = A e^{-\frac{E}{RT}} \quad \tau_s = \frac{V_s}{Q_v}$$

2° cas : réacteur piston de volume  $V_P$



On considère un écoulement piston à même débit que le réacteur parfaitement agité  $Q_v$  et de volume  $V_P$ .

Le bilan matière sur l'espèce en cours de réaction est :

$$Q_v[F] - r dV_P = ([F] + d[F]) Q_v, \text{ soit}$$

$$r dV_P = - Q_v d[F]$$

avec une cinétique de premier ordre  $r = k[F]$  et

$$k[F]dV_P = - Q_v d[F]$$

$$\frac{d[F]}{[F]} = - \frac{k dV_P}{Q_v}$$

$$\frac{[F]}{[F_0]} = e^{-\frac{k}{Q_v} V_P}$$

En désignant par  $\tau_p = \frac{V_P}{Q_v}$  le temps de passage on a :

$$[F] = [F_0] e^{-k\tau_p}$$

et un taux de conversion :

$$X_p = 1 - \frac{[F]}{[F_0]} = 1 - e^{-k\tau_p} = X_p(\tau_p)$$

$$\text{avec } k = A e^{-\frac{E}{RT}}$$

$$\tau_p = \frac{V_p}{Q}$$

Remarque:

Ce résultat pourrait être déduit du taux de conversion que l'on obtiendrait en réacteur parfaitement agité fermé au bout d'un temps  $\tau$ . En effet, dans un réacteur fermé, on a, pour un 1<sup>er</sup> ordre :

$$-\frac{d[F]}{dt} = r = k[F] \rightarrow [F] = [F_0] e^{-kt} \rightarrow X = 1 - \frac{[F]}{[F_0]} = 1 - e^{-kt}$$

$$\text{si : } t = \tau \rightarrow X = 1 - e^{-k\tau}$$

Le taux de conversion  $X_p$  est directement lié au DRE (chapitre incinération des gaz et vapeurs).

$$\text{DRE} = 100 \left(1 - \frac{[F]}{[F_0]}\right) \%$$

Soit, pour un DRE pour 99,99 % on a :

$$\frac{99,99}{100} = 1 - \frac{[F]}{[F_0]} \rightarrow \frac{[F]}{[F_0]} = 0,0001 = 10^{-4}$$

lié à une température  $T_{99,99}(\tau_p)$  pour une espèce donnée,

$$e^{-k\tau_p} = 10^{-4}$$

$$A e^{-\frac{E}{RT_{99,99}}} \tau_p = 9,21 \rightarrow e^{-\frac{E}{RT_{99,99}}} = \frac{9,21}{A\tau_p}$$

Si on prend  $\tau_p = 2$  s, on a :

$$T_{99,99}^{(2)} = \frac{E}{R \operatorname{Log} \left( \frac{A}{4,6} \right)}$$

qui ne dépend que de l'espèce considérée.

D'une façon plus générale on pourrait exprimer la relation liant la fraction restante  $f$  au bout du temps  $t$  et à la température  $T$  pour la relation :

$$T = 120 E \left[ \operatorname{Log} \left( \frac{-t A}{\operatorname{Log} f} \right) \left( \frac{O_2}{0,21} \right)^f \right]^{-1}$$

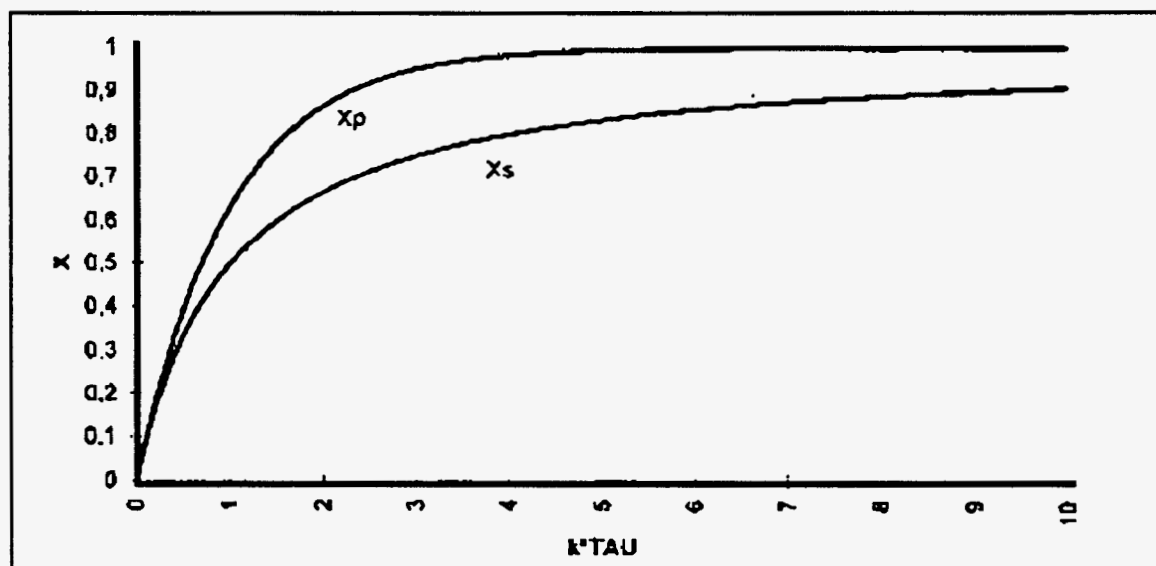
On peut alors comparer les performances des types de réacteurs à même débit d'entrée  $Q_v$  et même température  $T$  (même valeur de  $k$ ).

1° comparaison : à temps de séjour identiques  $\tau_s = \tau_p$  on a alors :

$$X_s = \frac{k\tau}{1+k\tau} ; \quad X_p = 1 - e^{-k\tau}$$

On voit que quelque soit la valeur du groupement  $k\tau$  on a  $X_p > X_s$ .

On a représenté ci-dessous l'évolution de  $X_p$  et  $X_s$  en fonction de groupement  $k\tau$ .



Dans tous les cas le réacteur piston est plus efficace, à même temps de séjour, qu'un réacteur parfaitement agité (RPA).

2° comparaison : à même taux de conversion.

Si on fixe le taux de conversion en sortie à une même valeur, on peut comparer, à même température, les volumes nécessaires :

$$X_p = X_s \rightarrow \frac{k\tau_s}{1+k\tau_s} = 1 - e^{-k\tau_s}$$

$$\text{En posant } \alpha = \frac{V_s}{V_p} \text{ on a : } V_s = \alpha V_p \text{ et } \tau_s = \frac{V_s}{Q_v} = \alpha \frac{V_p}{Q_v} = \alpha \tau_p$$

Ainsi :

$$\frac{k \alpha \tau_p}{1 + k \alpha \tau_p} = 1 - e^{-k\tau_p}$$

or, pour un même taux de conversion X on a :

$$X = X_s = X_p = 1 - e^{-k\tau_p}$$

d'où

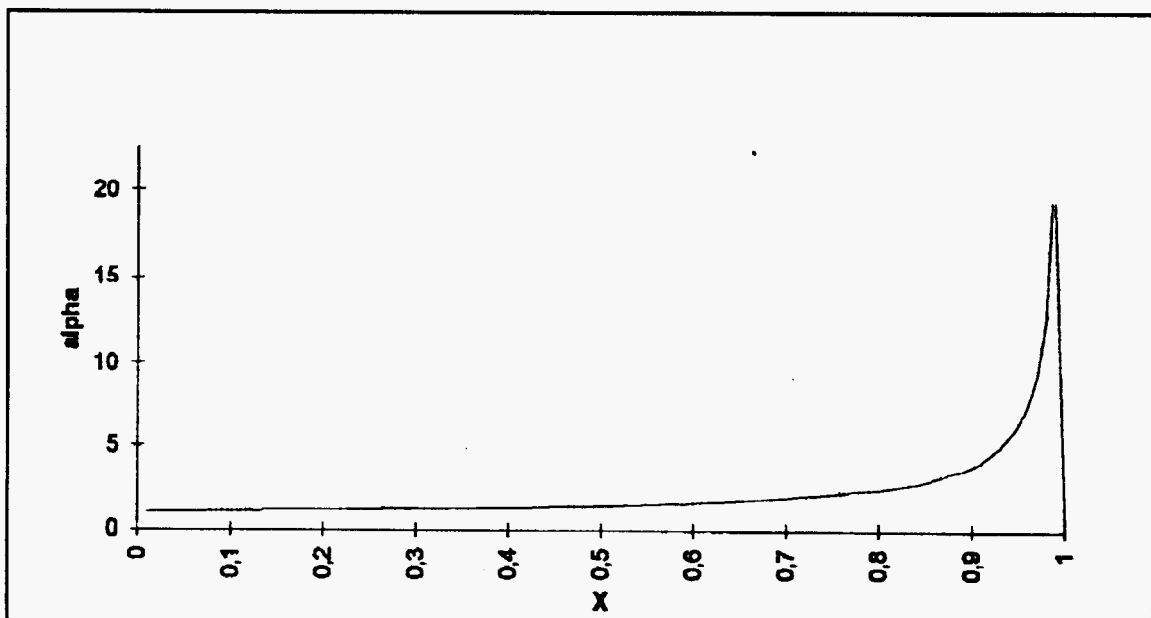
$$\frac{-\alpha \text{Log}(1-X)}{1 - \alpha \text{Log}(1-X)} = X$$

$$\alpha = \frac{X}{(X-1) \text{Log}(1-X)} > 1$$

On observe que  $\alpha = \frac{V_s}{V_p} > 1 \rightarrow V_s > V_p$

Ainsi pour obtenir une même efficacité de destruction, (taux de conversion identiques), et à même température, le volume nécessaire en réacteur agité sera toujours plus grand que dans le cas du réacteur piston.

On a représenté ci-dessous, les variations de  $\alpha$  avec le taux X de conversion



On voit que lorsque  $X \rightarrow 1$  le rapport  $\alpha = \frac{V_s}{V_p}$  devient très grand, indiquant que pour les grandes efficacités de destruction (conversion totale) le volume nécessaire en réacteur agité sera très supérieur au volume piston pour le même taux de conversion.

## 2. Cas d'une hydrodynamique interne quelconque

Dans un réacteur réel, l'hydrodynamique interne impose une distribution des temps de séjour  $t$  spécifique, intermédiaire entre un écoulement purement piston et un réacteur parfaitement agité.

Dans le débit  $Q_v$  de sortie, la fraction des particules ayant séjourné un temps  $t$  c'est-à-dire dont l'âge  $t_s$  de sortie est compris entre  $t$  et  $t+dt$  est :

$$\frac{dQ}{Q} = E(t) dt' \rightarrow dQ = Q E(t) dt$$

Comme :  $\int_0^{\infty} dQ = Q \rightarrow \int_0^{\infty} E(t) dt = 1$

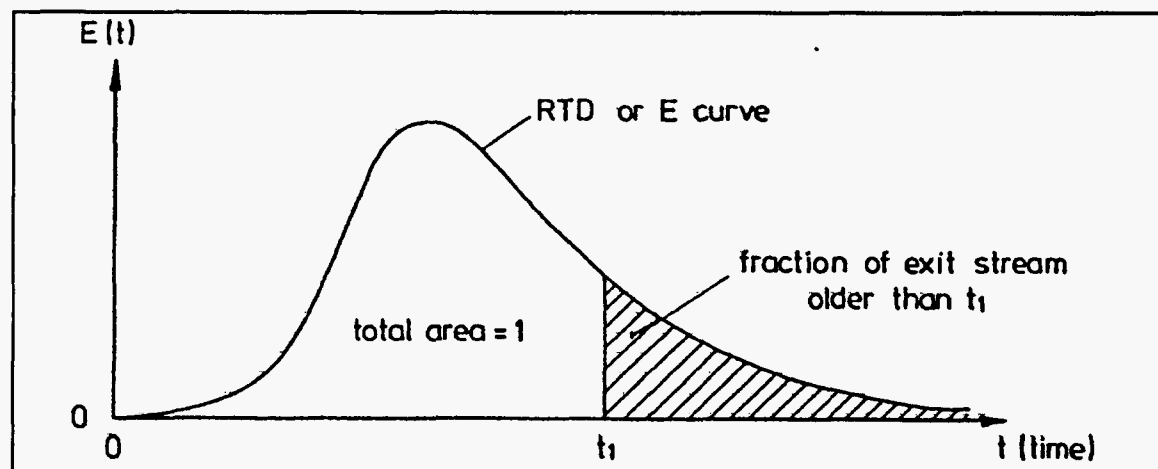
La fonction  $E(t)$  apparaît comme une densité de probabilité pour les éléments fluides qui séjournent dans l'enceinte pendant un temps  $dt$  compris entre  $t$  et  $t + dt$ .

Cette fonction  $E(t)$  est désignée par distribution des temps de séjour de l'enceinte ouverte [1,2]. On la note DTS.

La détermination pratique de la DTS.  $E(t)$  est réalisée par technique de traçage (injection d'impulsionnelle ou échelon).

Celle-ci peut-être réalisée par injection d'un traceur inerte (hélium par exemple) à  $t=0$ . Alors, le signal de sortie représente la fonction  $E(t)$ .

On a représenté dans la figure ci-dessous un exemple de fonction  $E(t)$ .



DTS d'un écoulement en système ouvert

La surface hachurée soit  $\int_{t_1}^{\infty} E(t)dt$  représente en particulier la fraction de molécules qui ont séjourné un temps supérieur à un temps  $t_1$  donné.

Si on a un réacteur piston, le signal d'entrée est la fonction Dirac  $\delta(t)$ , le signal de sortie sera la fonction translatée du temps de passage soit :

$$E(t) = \delta(t-\tau)$$

Dans le cas d'un réacteur parfaitement agité, on doit avoir :

$$\bar{t}_s = \int_0^{\infty} tE(t)dt = \tau$$

Ceci impose :

$$E(t) = \frac{1}{\tau} e^{-t/\tau}$$

Remarquons que la fonction  $E(t)$  d'un écoulement piston peut-être obtenue par une série de réacteurs parfaitement agités en série (cascade).

La fonction  $E(t)$  ou  $E(\theta)$  avec  $\theta = \frac{t}{\tau}$  peut en effet s'écrire :

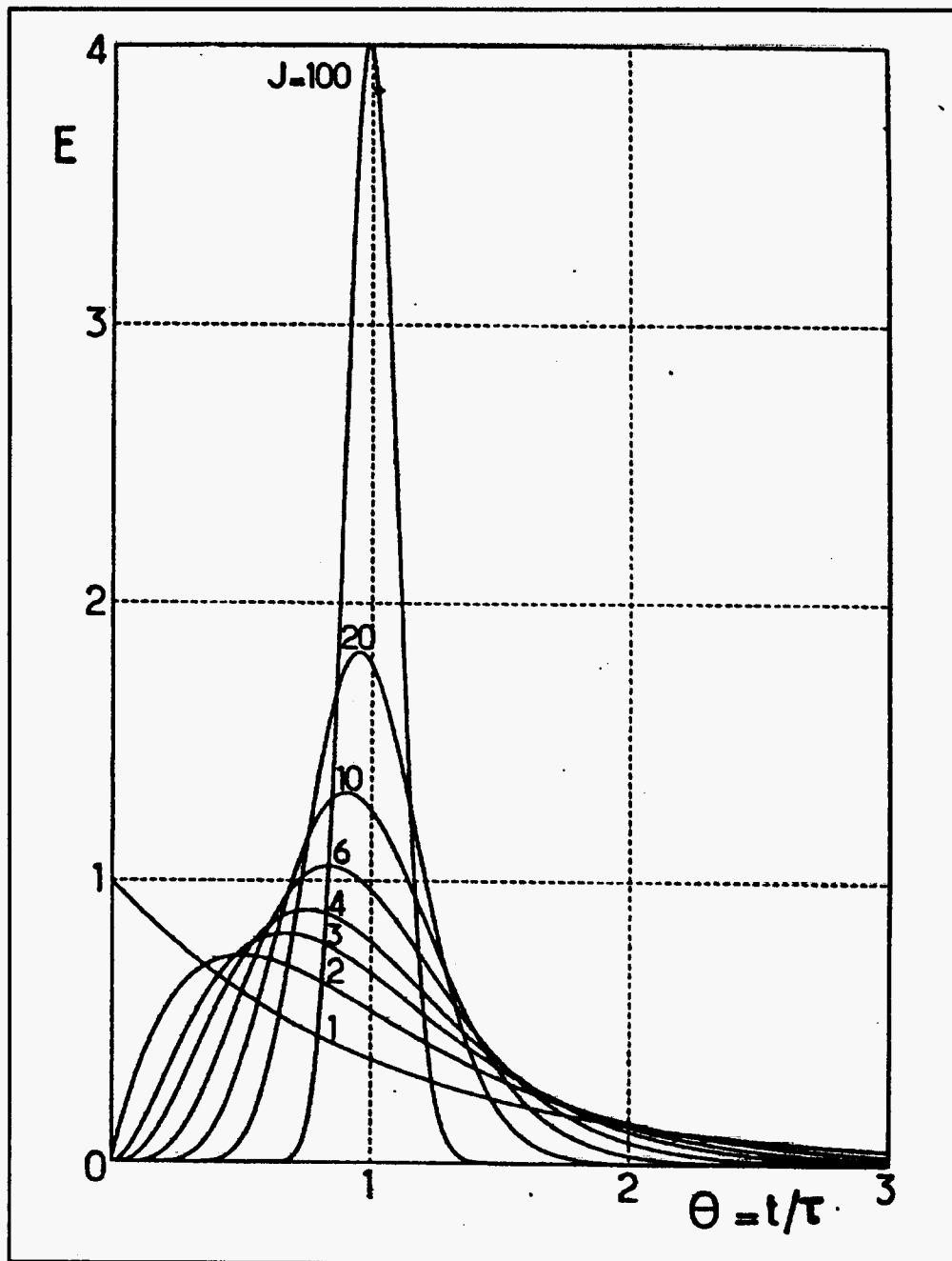
$$E(\theta) = \frac{n_n \theta^{n-1}}{(n-1)!} e^{-n\theta}$$

où  $n$  représente le nombre de réacteurs RPA en cascade.

Si  $n = 1$  on retrouve la fonction  $E(\theta) = e^{-\theta}$  du RPA

$$\text{Quand } n > 5 \quad E(\theta) = \sqrt{\frac{n}{2\pi}} \theta^{n-1} e^{-n(\theta-1)}$$

On a représenté ci-dessous la fonction  $E(\theta)$  en fonction de  $n$  [3].



*DTS d'une association de réacteur RPA en cascade ( $J=n$ )*

On observe que quand  $n \rightarrow \infty$ , la fonction  $E(\theta)$  tend bien vers une fonction Dirac pour  $\theta=1$  ( $t=\tau$ ).

D'une manière générale les fonctions  $E(\theta)$  déterminées expérimentalement peuvent être modélisées par des associations adaptées de réacteurs RPA en piston, en parallèle et en série.

Ce type d'analyse a été utilisé pour l'étude du fonctionnement d'un four horizontal, par traçage à l'hélium des fumées [4].

Dans tous les cas le temps de séjour moyen est bien égal au temps de passage.  
Cependant les taux de conversion  $X$  en sortie vont directement être influencés par la distribution  $E(t)$ .

En effet, en réacteur ouvert et avec une cinétique de premier ordre, on a une concentration moyenne  $[\bar{F}_s]$  en sortie égale à :

$$Q[\bar{F}_s] = \int_{\text{filets}} [F(t)] dQ_v$$

où  $[F(t)]$  est la concentration des filets fluides séjournant un temps  $t$  dans l'enceinte et assimilables à des réacteurs fermés en parallèles.

Alors :

$$[\bar{F}] = \frac{1}{Q_v} \int_0^{\infty} [F(t)] Q_v E(t) dt$$

$$[\bar{F}] = \int_0^{\infty} [F(t)] E(t) dt$$

La concentration au bout du temps  $t$  par filet est (si réacteur fermé) :

$$[F] = [F_0] e^{-kt} \quad k = A e^{-E/RT}$$

de sorte que :

$$[\bar{F}_s] = [F_0] \int_0^{\infty} E(t) e^{-kt} dt$$

On peut retrouver, à titre d'illustration la concentration de sortie des deux réacteurs limites.

- réacteur piston

$$E(t) = \delta(t-\tau) \quad \text{où } \delta \text{ est la fonction de Dirac}$$

$$\tau = \frac{V}{Q_v}$$

alors 
$$[\bar{F}_s] = [F_0] \int_0^{\infty} \delta(t-\tau) e^{-kt} dt = e^{-k\tau}$$

soit un taux de conversion

$$X = 1 - \frac{[\bar{F}_s]}{[F_0]} = 1 - e^{-k\tau}$$



- réacteur parfaitement agité (RPA)

$$E(t) = \frac{1}{\tau} e^{-t/\tau}$$

alors

$$[\bar{F}_s] = [F_0] \int_0^{\infty} E(t) e^{-kt} dt = [F_0] \int_0^{\infty} \left(\frac{e^{-t/\tau}}{\tau}\right) e^{-kt} dt$$

$$= \frac{[F_0]}{\tau} \int_0^{\infty} e^{-(\frac{1}{\tau}+k)t} dt = \frac{[F_0]}{\tau} \left[ \frac{e^{-(\frac{1}{\tau}+k)t}}{-(\frac{1}{\tau}+k)} \right]_0^{\infty}$$

$$[\bar{F}_s] = \frac{[F_0]}{\tau} \frac{1}{(\frac{1}{\tau}+k)} = [F_0] \frac{1}{1+k\tau}$$

soit un taux de conversion :

$$X = 1 - \frac{[\bar{F}_s]}{[F_0]} = 1 - \frac{1}{1+k\tau} = \frac{k\tau}{1+k\tau}$$

On retrouve bien les expressions de X obtenues par bilan matière direct sur les deux cas limites.

Ainsi, dans le cas général d'une DTS E(t) on aura en sortie :

$$[\bar{F}_s] = [F_0] \int_0^{\infty} E(t) e^{-kt} dt$$

Le taux de conversion correspondant est :

$$\bar{X} = 1 - \frac{[\bar{F}_s]}{[F_0]} = 1 - \int_0^{\infty} E(t) e^{-kt} dt$$

Connaissant A et E pour une espèce donnée on voit que le taux de conversion réel (DRE) devra être obtenu par intégration de la fonction :

$$\left\{ \begin{array}{l} \bar{X} = 1 - \int_0^{\infty} E(t) e^{-kt} dt \\ \text{avec } k = Ae^{-E/RT} \text{ pour des cinétiques de 1er ordre} \end{array} \right.$$

Comme on l'a vu la réaction piston est la plus efficace en terme de taux de conversion.

On peut donc introduire un paramètre  $E_{eff}$  défini comme suit :

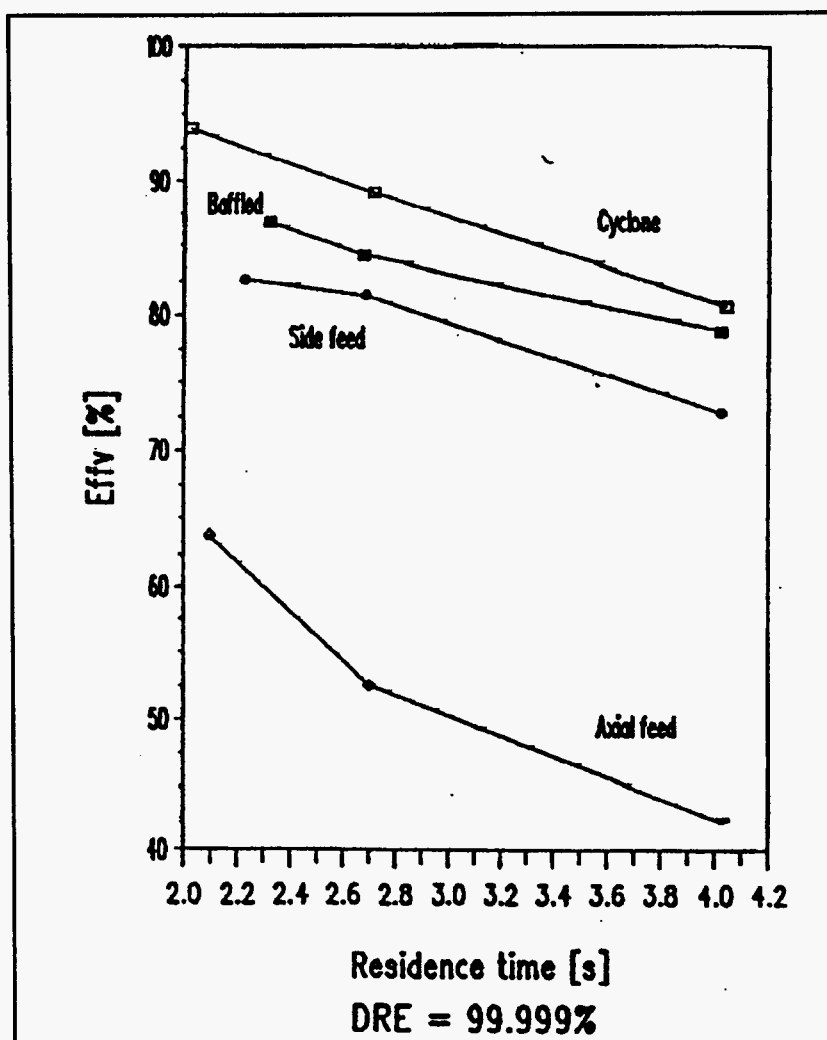
$$E_{eff} = \frac{V_{id}}{V_r}$$

où  $V_{id}$  est le volume piston du réacteur idéal nécessaire pour réaliser une destruction à un taux fixé, par exemple 99,99 % et donc à une température  $T_{99,99}$

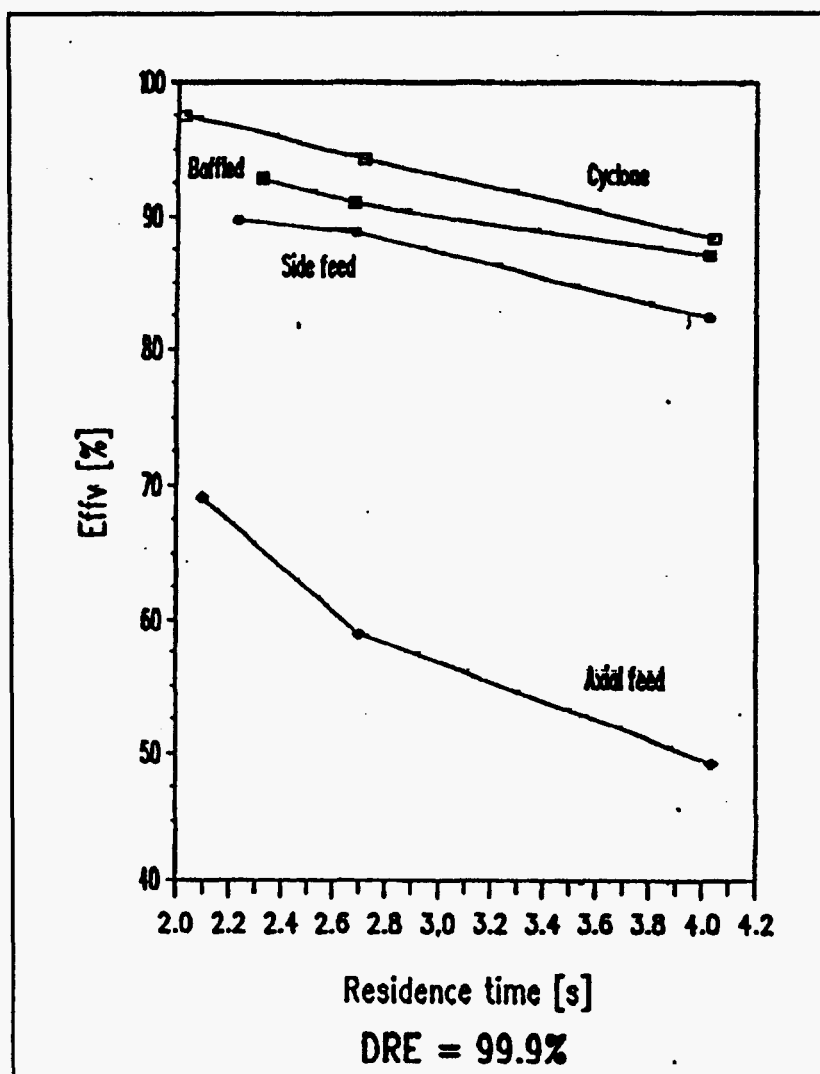
et  $V_r$  est le volume du réacteur réel permettant la même performance de destruction à la même température.

On a vu :  $V_r > V_{id}$  donc :  $E_{eff} \leq 1$

L'influence des modifications apportées à l'écoulement interne d'une enceinte (chicane, swirl, injection latérale...) et des modifications assumées de la DTS, a conduit Amodio et al [5] aux résultats représentés dans les figures ci-dessous.



Variation de  $V_{id} / V_r$  (%) en fonction du temps de séjour



Variation de  $V_{id} / V_r$  (%) en fonction du temps de séjour

On observe directement sur ces résultats l'influence de l'écoulement sur la performance de destruction, pour un même temps de séjour et une même DRE, le volume de l'enceinte de destruction à prendre en compte,  $V_r = \text{Eff} V_{id}$ , peut être considérablement plus grand, que celui donné par le réacteur piston.

Les considérations précédentes ont montré que la cinétique globale de conversion dépend de la distribution des âges des filets ou volumes élémentaires du fluide dans le réacteur.

On a supposé, en particulier que deux agrégats fluides de temps de séjour différents ne se mélangeant pas.

Cependant, du fait de la turbulence au niveau local, de tels agrégats peuvent se mélanger et le taux de conversion final sera modifié.

Ainsi, en toute rigueur, en plus de la distribution des temps de séjour, il faudrait préciser les échanges entre agrégats fluides au sein du volume réactionnel [2].

La grandeur caractérisant cette mise en contact est l'état de micro-mélange du fluide. On peut espérer y remonter par diverses techniques (fluctuation de vitesse, de concentration...).

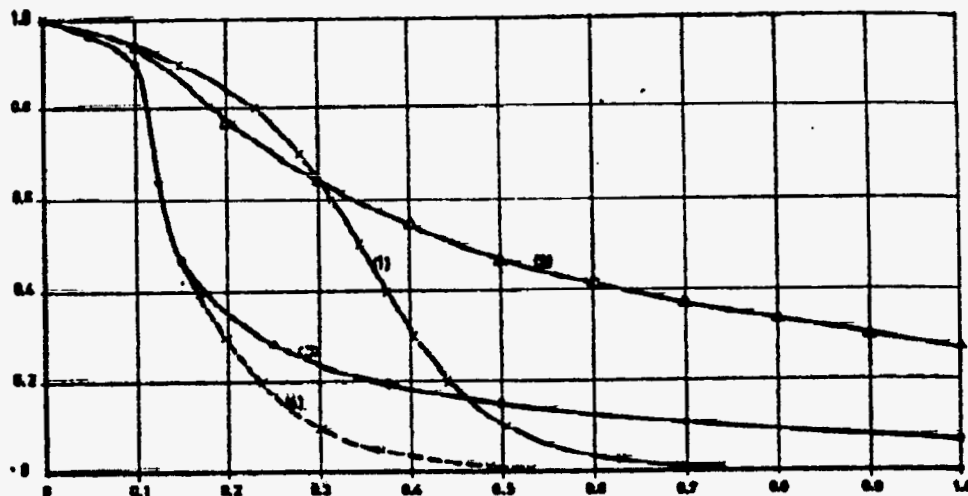
L'état de micro-mélange est toujours intermédiaire entre deux états de micro-mélange qui correspondent au :

- micro-mélange minimal (ségrégation totale) ;
- micro-mélange maximal.

Le micro-mélange minimal est observé lorsque les agrégats fluides de temps de séjour différents évoluent en bloc sans se mélanger, leur mise en contact se faisant seulement en sortie (mélange au plus tard). Le taux de conversion peut alors être écrit comme précédemment.

Le micro-mélange maximal est observé lorsque des agrégats de temps de séjour différents se mélangent au mieux (mélange au plus tôt). Comme l'a souligné Zwietering [6], ce mélange ne peut avoir lieu que lorsque les agrégats ont la même espérance de vie.

On illustre sur la figure suivante un exemple de prise en compte du micro-mélange dans l'estimation de la conversion de particules solides [7] (charbon).



*Fraction de solide non brûlée en fonction du temps de séjour moyen dans le cas d'un réacteur piston et d'un RPA*

- 
- courbe 1 : écoulement piston
  - courbe 2 : RPA à ségrégation totale
  - courbe 3 : RPA à micro-mélange maximal
  - courbe 4 : association en série d'un réacteur piston et d'un RPA.

Dans la pratique c'est bien une association en série d'un réacteur parfaitement mélangé et d'un réacteur piston qui assure la meilleure efficacité de destruction thermique à une température donnée.

Le premier étage de destruction (RPA) sera réalisé par la flamme elle-même en présence des turbulences induites par l'air primaire ou secondaire (jet, swirl...) ainsi que par les écoulements de recirculation induits par l'impulsion du jet. Cette zone permettra le mélange constituants / oxygène, leur vaporisation ou dévolatilisation (liquides, solides) leur inflammation et leur combustion à des niveaux qui permettront l'atteinte d'une température élevée (proche de la température de flamme) de manière à compenser le peu d'efficacité du RPA par des niveaux de température élevés.

Le deuxième étage de destruction (sans flamme), devra être aussi proche que possible d'un réacteur piston idéal. C'est lui qui permettra d'atteindre de grande efficacité de destruction thermique pour les temps de séjour les plus faibles.

Ainsi le temps de séjour effectif d'un four de destruction devra être basé sur un temps de séjour effectif  $\tau_{eff}$  défini sur :

$$\tau_{eff} = \frac{V_p}{Q_v(T)}$$

où  $V_p$  est le volume de la zone piston avec  $V_p = V - V_s$   
 $V_s$  est le volume de la zone de mélange et  $V$  le volume total de l'enceinte de destruction thermique.

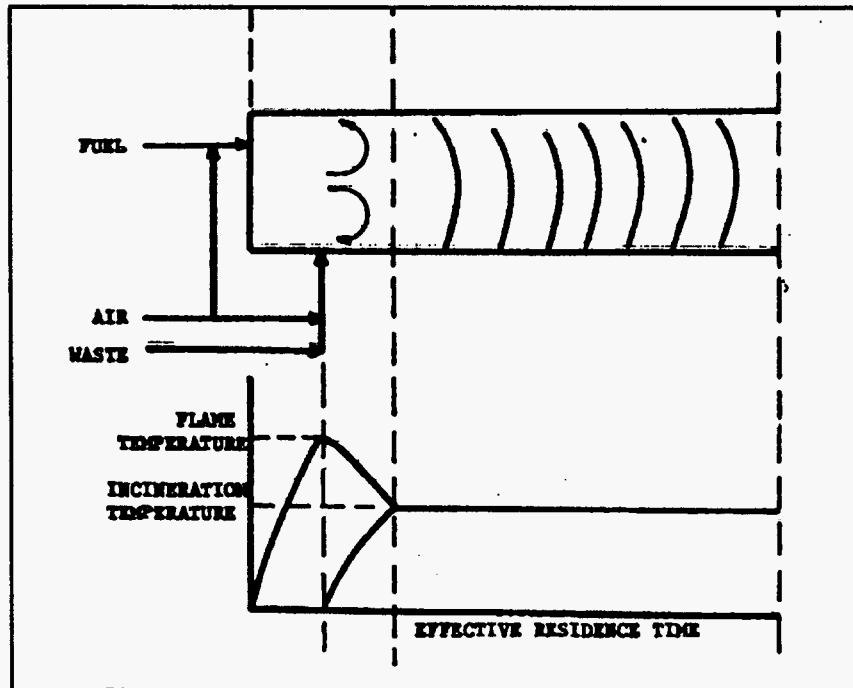
Le couple de données  $\tau_{eff}$ ,  $T$  devra être associé aux critères de destruction thermique des espèces primaires ou secondaires générées par le traitement thermique de la zone RPA. En particulier le critère  $T_{99,99(2)}$  permettra de fixer  $\tau_{eff} = 2$  pour une température  $T = T_{99,99}$  fixant ainsi le débit :

$$Q_v(T) = \frac{T}{T_0} Q_v(T_0)$$

le terme  $Q_v(T_0)$  étant évalué par le produit  $\dot{m} V'_{FH}$  où  $\dot{m}$  est le débit de déchet à incinérer et  $V'_{FH}$  est le pouvoir fumigène du déchet  $V_{FH}$  corrigé de l'excès d'air introduit au premier étage.

Les conditions de destruction thermique de constituants indésirables peuvent être résumées en stipulant que ces constituants doivent, en mélange avec l'air (limites d'inflammabilité, cinétiques de combustion) être portés à des températures suffisantes (température d'inflammation, température de destruction...) pendant des temps suffisants (délais d'inflammation, temps de combustion, temps de destruction...).

La répartition en deux zones (flamme + mélange et zone piston) est illustrée sur la figure suivante.



Répartition d'un incinérateur en deux réacteurs (RPA et piston).  
Temps de séjour effectif.

Pour un même temps de séjour global  $\tau = \frac{V}{Q_v(T)}$ , plus on réduira la taille de la zone de mélange, plus on augmentera le temps de séjour effectif de l'enceinte.

Signalons que la réduction de la zone RPA, permet pour un débit donné, d'augmenter la température de sortie de cette zone de mélange.

Les moyens utilisables pour réduire la taille de la zone RPA sont ceux qui permettent une réduction de la longueur de flamme, pour un constituant à détruire donné, par :

- Réduction des délais de vaporisation / dévolatilisation et des délais d'ignition  $t_{ig}$

Elle est réalisée par fractionnement du constituant à détruire (pulvérisation), par préchauffage (réduction du délai de chauffage ( $\Delta t_{hu}$ )) et par l'utilisation d'un flux thermique radiatif ( $\dot{q}''$ ) complémentaire par rayonnement (ouveau réfractaire) permettent la réduction du délai d'ignition. L'ensemble des éléments et connaissances disponibles nécessaires à l'évaluation de ces délais a été décrit précédemment (chapitres précédents).

- Intensification de la turbulence du mélange constituants/air

Elle est réalisée par utilisation d'écoulements de recirculation sur le pied de flamme (brûleur CINCLUS) par mise en rotation de la flamme ou par utilisation d'effet cyclone.

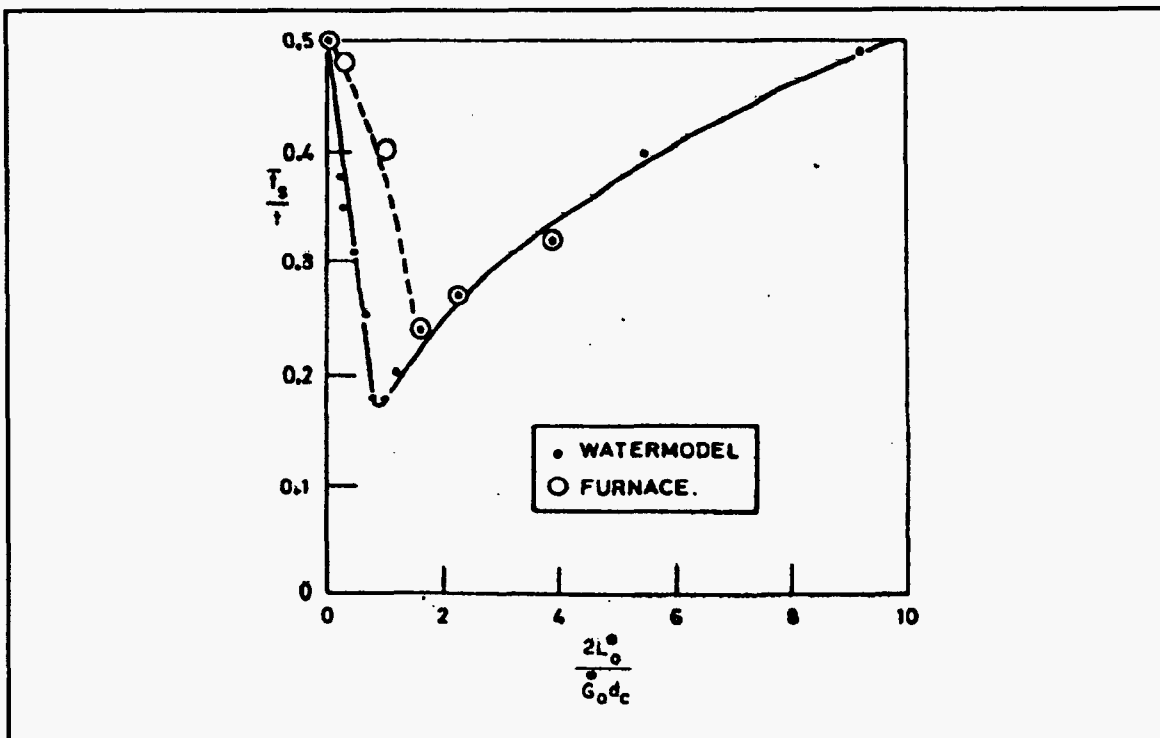
On montre dans la figure suivante l'effet du swirl imposé à la flamme pour la réduction de la taille de la zone RPA [8]. Cet effet est noté par l'intermédiaire de la réduction du temps de passage  $\tau_s$  dans la zone RPA, par rapport au temps de séjour global du four ; soit  $\tau_s / \tau$ , en fonction du nombre de swirl de l'écoulement défini par :

$$N = \frac{2 \dot{L}_0}{\dot{G}_0 d_c}$$

où  $\dot{L}_0$  et  $\dot{G}_0$  représentent respectivement des moments angulaires et axiaux du jet, et  $d_c$  le diamètre corrigé du jet compte tenu des effets de température.

$$d_c = \left(\frac{\rho_c}{\rho_h}\right)^{1/2} d_0$$

Les nombres de swirl typiques des brûleurs industriels s'étagent entre 0,6 et 2,5 [9].

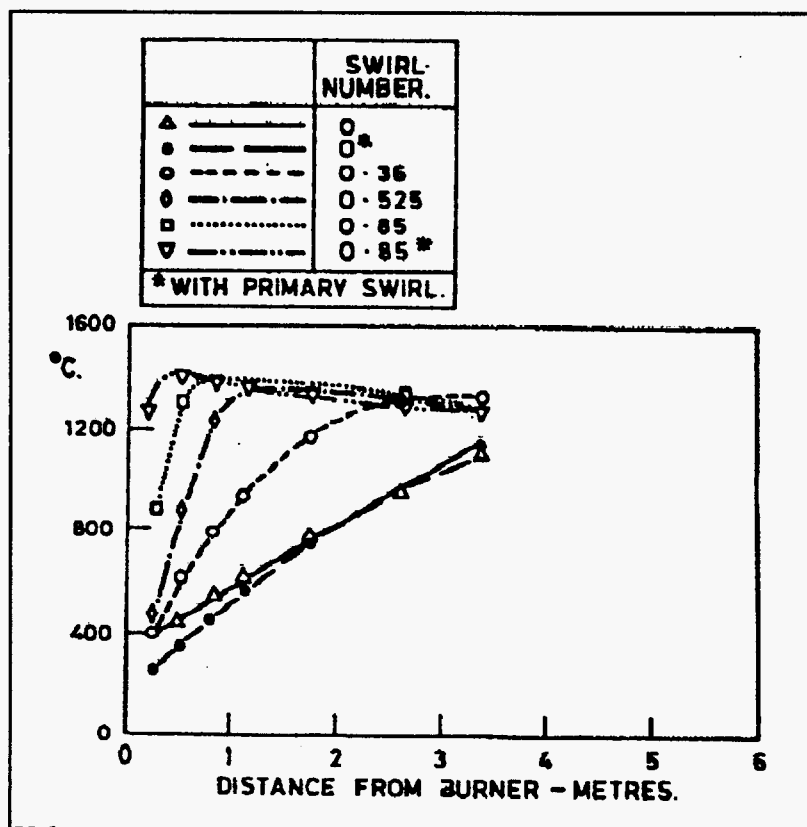


*Rapport du temps de séjour  $\tau_s$  de la zone RPA au temps de séjour global en fonction du nombre de swirl de l'injection.*

On observe l'existence d'un minimum pour  $N \sim 1,8$  pour lequel  $\frac{\tau_s}{\tau} \sim 0,2$  c'est-à-dire pour lequel la zone RPA est réduite à 20 % du volume total de l'écoulement dans le four.

L'atteinte de ce minimum dans la répartition temps de séjour RPA,  $\tau_s$ , par rapport au temps de séjour global  $\tau$ , permet d'atteindre effectivement une performance de combustion maximum, comme le suggère les résultats de Drake et Hubbard [10] obtenus sur la combustion de fuels lourds.

Cet effet du nombre de swirl, affecte, comme on l'a dit directement, la longueur de la zone RPA. Ceci est également illustré dans la figure ci-dessous qui montre dans le cas de la combustion de solides divisés à faible teneur en matière volatile (anthracite) l'effet du nombre de swirl sur la répartition de température le long de la chambre de combustion [11].



*Distribution longitudinale de la température des gaz dans une combustion de solide divisé en fonction du nombre de swirl.*

On constate la réduction considérable de la zone de mélange obtenue par l'augmentation de la turbulence.

La longueur de flamme est ainsi réduite de 3 mètres à moins d'un mètre et les résultats confirment bien l'amélioration corrélative de l'efficacité de combustion globale du dispositif par augmentation du paramètre  $N$  [11].



- Amélioration de la pression partielle en oxygène.

Celle-ci a un effet direct sur la cinétique chimique dans la zone RPA par diminution de temps de combustion complète  $\tau_c$  des éléments figurés (cf chapitre précédent).

Cet effet peut s'observer directement sur la réduction de la longueur de flamme (zone RPA). Ainsi, la longueur d'une flamme air/gaz en atmosphère infinie est donnée par :

$$L_0 = 6,65 \frac{\dot{m}}{\sqrt{G \rho_f}} \left(1 + \frac{V_A}{d_g}\right)$$

où  $\dot{m}$  est le débit massique de combustible ;  
G l'impulsion à l'injecteur ;  
 $V_A$  le pouvoir comburivore du combustible ;  
 $d_g$  la densité des fumées par rapport à l'air.

Dans le cas du remplacement partiel ou total de l'air de combustion par de l'oxygène pur, le calcul montre que la longueur devient :

$$L'_0 = 6,65 \frac{\dot{m}}{\sqrt{G \rho_f}} \left(1 + \frac{V_A}{d_g} (1 - 0,77K)\right)$$

où K est un coefficient caractéristique de la teneur en oxygène du mélange défini par :

$$K = \frac{\text{volume d'oxygène injecté}}{\text{volume d'oxygène stœchiométrique}}$$

Il apparaît donc qu'une flamme oxygène-air-gaz est plus courte que la flamme air-gaz ayant même débit et même impulsion du jet.

Le remplacement d'une proportion d'air par de l'oxygène a également pour effet d'augmenter la température adiabatique de flamme, par suppression du ballast azote, dans le pouvoir fumigène du combustible.

Cet accroissement de température améliore, en retour, la cinétique de décomposition chimique des composés à détruire, ainsi que le flux radiatif ceux-ci à l'entrée du four, réduisant également leur délai d'ignition.

Notons enfin, que le travail sous air enrichi permet d'accrocher des flammes sur des composés à faible PCI (déchets aqueux), la réduction du volume fumigène, permettant d'atteindre les températures d'inflammation, qui ne le seraient pas en présence d'air standard.

Ces effets, combinés à la génération d'un mouvement cyclone, ont été récemment mis à profit pour l'incinération de déchets liquides aqueux, en four cyclone sous air enrichi ou oxygène pur [12].

## REFERENCES

- [1] DANCKWERTS, P.V., Chem. Eng. Sci., 2, 1, 1953
- [2] LEVENSPIEL, O., Chem. Reaction Engineering, John Wiley edn., 1972
- [3] VILLERMAUX, J., Génie de la réaction chimique, Lavoisier edn., 1982
- [4] BAHMED, A., G. ANTONINI, Ph. SAJET et C. COPIN. Caractérisation de l'hydrodynamique interne d'un four à gaz par analyse de DTS, Proceeding du 4ème Congrès de Génie des Procédés, Grenoble, Septembre 1993.
- [5] AMODIO, F., L. LACQUANTI, G. BLASI, A. FICARELLA and D. LAFORGIA. Theoretical and experimental study of post combustion chamber - Journées Int. sur les flammes (FRIFE), Biarritz, n° 52, Mars 1994
- [6] ZWIETERING, T.N., Chem. Eng. Sci., 11, 1, 1958
- [7] BEER, J.M. and K.B. LEE. The effect of the residence time distribution on the performance and efficiency of combustors - 10th Symp. Int. on combustion, The Combustion Institute, p. 1187-1202, 1965
- [8] BEER, J.M. and K.B. LEE, Proceed. 10th Int. Symposium on combustion, Combustion Institute, Pittsburgh, Pa, p. 1187, 1965
- [9] SYRED, N. and J.M. BEER, Combustion in swirling flows combust. flame, 23, p. 143-201, 1974
- [10] DRAKE, P.F. and E.H. HUBBARD, Combustion system aerodynamics and their effect on the burning of heavy fuel oil - J. Inst. Fuel, 39, n° 302, p. 98-189, 1966
- [11] BEER, J.M. and N.A. CHIGIER, Stability and combustion intensity of pulverised coal flames. Effect of swirl and impingement - J. Inst. Fuel, 42, p. 443-50, 1969
- [12] ANTONINI, G., M. HAZI, Ph. SAJET, D. CARAMELLE, Ph. CHARLOT et J.P. PEROTIN. Mobile incineration unit for liquid waste thermal treatment, Proceedings of international incineration conference, Houston, Texas, USA, 9-13 May 1994.

**CHAPITRE 6**  
**INCINERABILITE**  
**FONCTIONNEMENTS DEGRADES**

---

1- PARAMETRES INTRINSEQUES DU CONSTITUANT PRINCIPAL A  
DETRUIRE

2- PARAMETRES EXTRINSEQUES (PARAMETRES OPERATOIRES)

- a) Conditionnement des produits à détruire
- b) Le contrôle des conditions réactionnelles

3- FONCTIONNEMENTS DEGRADES (PATHOLOGIQUES)

- a) Défauts d'identification des espèces à détruire
- b) Défauts de composition/ préparation du déchet entrant
- c) Défauts de fragmentation/pulvérisation
- d) Défauts dans la zone RPA
- e) Défauts dans la zone piston

4- VERS DES CRITÈRES GLOBAUX D'INCINÉRABILITÉ

Après avoir décrit les principaux paramètres à prendre en compte :

- intrinsèques,
- extrinsèques,

on passe en revue les fonctionnements en mode dégradé et les remèdes à y apporter.

### 1- Paramètres intrinsèques du constituant principal à détruire

Ces paramètres ont été décrits précédemment. Ils concernent la connaissance des produits à dégrader vis-à-vis des critères temps-température.

Les principaux critères sont :

- les températures flash ( $T_f$ ) et d'auto-inflammation ( $T_{ai}$ ) des composés liquides ou solides,
- les délais d'inflammation surfacique, donnés par le paramètre TRP pour les solides,
- les températures  $T_{99,99}$  (2) des gaz et vapeurs, qui constituent des critères mixtes temps/température.

L'ensemble de ces paramètres définit l'incinérabilité intrinsèque des composés. Ils permettent un classement des produits vis-à-vis de leurs capacités intrinsèques à la destruction thermique.

Il faut remarquer que, malgré de nombreuses préconisations, nous excluons le critère basé sur le pouvoir calorifique PCI du composé (ou sur la chaleur de formation  $\Delta H$ ), en tant que critère intrinsèque.

Nous présentons, dans le tableau suivant, une comparaison des  $T_{99,99}$  (2) et des quelques critères intrinsèques possibles, la corrélation étant effectuée sur 15 constituants [1].

Paramètre X	Coefficient de corrélation $R_1$ avec $T_{99,99}$ (2)
Température d'auto-inflammation (°C)	0,94
Potentiel d'ionisation (eV)	0,80
Chaleur de dissociation ionique (kJ/mol)	0,74
Chaleur molaire de combustion (J/mol)	0,62
Energie d'activation (kJ/g mol)	0,42
Chaleur de combustion (J/g)	0,39
Point éclair (°C)	0,22
Enthalpie de formation à 298°C (kJ/mol)	0,21
Energie libre à 298°C	0,08

On constate que ni les PCI ni les  $\Delta H$  ne constituent un bon critère de classification.

Le point flash donne plutôt une indication sur le délai d'ignition qui dépend de critères extrinsèques, mais n'est pas comme on l'a vu, directement lié à la capacité de maintenir une flamme auto-entretenu.

Les meilleurs critères intrinsèques semblent donc être la température d'auto-inflammation ( $T_{ai}$ ), très bien corrélée à la destructibilité du produit par voie thermique (critère temps/température).

Ce critère présente l'avantage d'être une donnée largement disponible dans la littérature, contrairement aux  $T_{99,99}$  (2). Il permet le classement des composés dangereux.

On présente ci-dessous un tel classement [1] basé sur la liste des principaux constituants dangereux (liste de l'appendice VIII du Federal Register US, 1981).

Chemical	AIT value (°C)	Chemical	AIT value
Phenol	715	Vinyl chloride	472
Dichloromethane	662	1,1-Dichloroethane	458
o-Dichlorobenzene	648	Vinylidene chloride	458
Chlorobenzene	638	1,1,2-Trichloroethene	457
Diphenylamine	634	Ethylene oxide	429
Chloromethane	632	Isobutyl alcohol	427
Hexachlorobutadiene	618	Formaldehyde	424
Aniline	615	Methyl methacrylate	421
Resorcinol	608	1,2-Dichloroethane	413
Cresylic acid	599	Epichlorohydrin	411
Benzyl chloride	585	Trichloroethylene	410
Phthalic anhydride	584	Di-n-butyl phthalate	403
1,2,4-Trichlorobenzene	571	Acetyl chloride	390
Acetophenone	570	Allyl alcohol	378
Cresol	559	Creosote	336
2-Chloronaphthalene	558	Ethyleneimine	322
1,2-Dichloropropane	557	Propyl amine	318
Dimethyl phthalate	556	1,2,3-Trichloropropane	304
Formic acid	539	Acrolein	278
Hydrocyanic acid	538	Nitroglycerin	270
2-Picoline	538	Hydrazine	270
Bromomethane	537	Hydrogen sulfide	260
Naphthalene	526	Nicotine	244
Acetonitrile	524	Paraldehyde	238
Acrylamide	524	Benzotrichloride	211
Methyl ethyl ketone	515	Crotonaldehyde	207
Benzene	498	Methyl hydrazine	194
1,1,1-Trichloroethane	486	Dimethyl sulfate	188
Nitrobenzene	482	Acetaldehyde	185
Toluene	482	1,4-Dioxane	180
Pyridine	482	Phosphine	100
Acrylonitrile	481	Carbon disulfide	90
Maleic anhydride	477		

*Classification des principaux composés dangereux vis-à-vis de leur résistance à la destruction thermique. Critère  $T_{ai}$ , température d'auto-inflammation.*

On a vu par ailleurs, que pour les composés solides, le critère TRP, couplant les propriétés thermophysiques ( $\lambda$ ,  $\rho$ ,  $C_p$ ) et thermochimiques ( $T_p \approx T_{ig}$ ) apparaît être le bon critère vis-à-vis de la combustibilité des solides.

## 2- Paramètres extrinsèques (paramètres opératoires)

Ce sont les paramètres sur lesquels on peut agir par :

- le conditionnement du produit à détruire,
- le contrôle des conditions réactionnelles
  - . en amont (engineering)
  - . en conduite du procédé.

### **a/ Conditionnement des produits à détruire**

Cela concerne les possibilités de :

1/ fragmentation du produit dans le cas des solides (opération de broyage à sec, broyage humide). Leur but est de réduire le diamètre moyen des particules pour diminuer le temps de combustion  $\tau_c$  (chapitre précédent). On cherchera à réduire la dispersion granulométrique des broyés autour de cette valeur (augmentation du paramètre  $q$  de Rosin-Ramler).

2/ déviscosification des produits liquides ou pâteux et cela, afin de faciliter la dispersion par pulvérisation du produit à l'entrée de l'enceinte (cf chapitre précédent).

Cette déviscosification peut être obtenue :

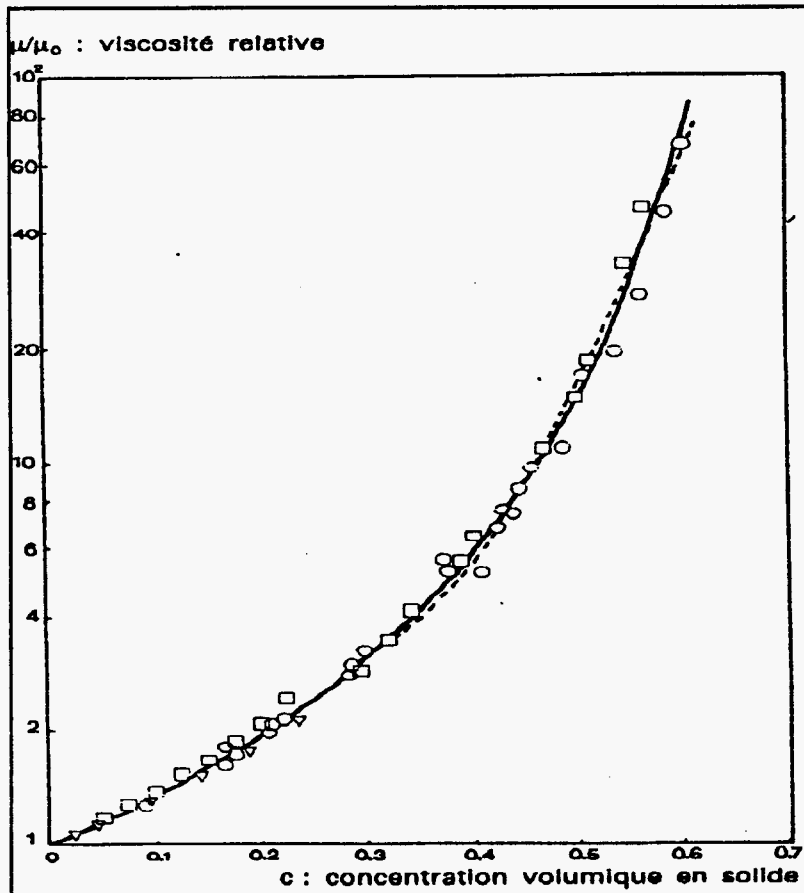
- par chauffage dans le cas des liquides quand les points éclairés ne sont pas trop bas,
- par ajout d'agents tensio-actifs,
- par mélange avec un liquide dans le cas des boues ou des pâtes. Ceci permet la génération de liquides chargés, pulvérisables. La viscosité dynamique  $\mu$  du mélange dépend directement de la fraction volumique  $\phi$ , du solide dans le mélange, soit [2] :

$$\mu(\phi) = \mu_0 (1 + 2,5 \phi + 10,5 \phi^2 + 0,00273 e^{16,6\phi})$$

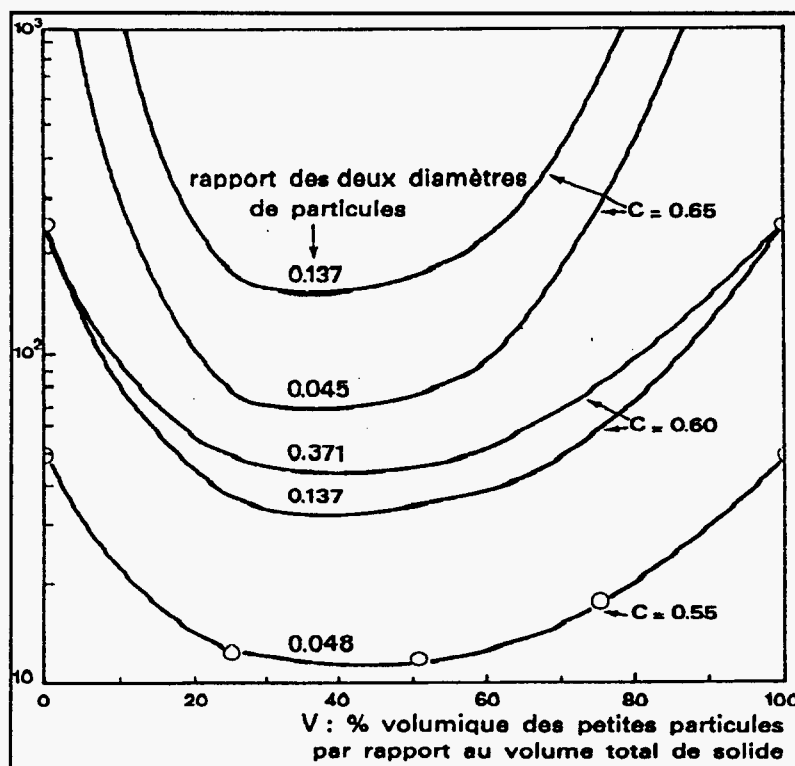
où  $\mu_0$  représente la viscosité du fluide suspendant.

De même, dans le cas des émulsions liquide/liquide :

- par adaptation granulométrique de la phase solide en mélange avec un liquide [3] ;
- par aération du produit ou préparation de mélange pseudo-homogène solide/liquide/gaz [4].



Corrélation de Thomas donnant la viscosité relative  $\mu/\mu_0$  d'un mélange liquide-solide en fonction de sa fraction volumique.



Variation de la viscosité relative par mélange de coupes granulométriques.

### 3/ homogénéisation du produit et conditionnement

Le déchet à détruire est souvent hétérogène en phase et en composition. Il est toujours préférable de "lisser" sa composition pour fixer l'ensemble des paramètres d'incinérabilité à des valeurs moyennes connues, permettant la marche en régime permanent du foyer. Cette opération est désignée par pseudo-homogénéisation du produit [4].

Une stratégie de préparation amont du déchet a été proposée par Haw [5] basée sur le mélange de trois classes de déchets : les deux premières classes sont formées de déchets à bonne incinérabilité mais présentant des volatilités différentes (Point flash) et le dernier groupe est constitué de déchets à volatilité intermédiaire et présentant les composés les plus récalcitrants à la destruction thermique. Ces coupes sont mélangées et homogénéisées avant leur introduction dans le foyer.

Le groupe le plus volatil permet l'inflammation rapide et sa combustibilité permet le maintien de la flamme. Le groupe de volatilité intermédiaire peut alors subir l'inflammation, sa combustion étant assistée par la volatilisation du troisième, qui peut alors entamer sa phase de combustion. Les conditions thermiques de destruction sont alors fixées sur le composé le plus récalcitrant.

Notons que l'ajout d'un agent liquide volatil dans une boue ou une pâte est par ailleurs susceptible de favoriser son atomisation lors de son introduction dans le foyer, par vaporisation flash, conduisant à la dispersion thermomécanique des gouttes.

#### b/ Le contrôle des conditions réactionnelles

Il concerne :

##### 1/ la fragmentation/pulvérisation à l'injection

Indépendamment du produit, on peut agir sur la qualité de la pulvérisation en :

- recherchant les paramètres de pulvérisation permettant la réduction de la taille moyenne (SMD) des gouttes formées de pulvérisation mécanique ou assistée. Le diamètre moyen des gouttes obtenues fixera le temps de combustion ( $\tau_c \approx d_{po}^2$ ) (cf chapitre précédent),
- recherchant la réduction de la dispersion de la répartition granulométrique du Spray à SMD fixé, c'est-à-dire en augmentant le paramètre q de Rosin Ramler (cf chapitre précédent) de manière à fixer le temps de combustion sur une fraction massique largement majoritaire du spray et non pas sur le SMD seul.



## 2/ L'étagement des zones de traitement thermique

- en destruction incinérative (fort excès d'air), on cherchera à séparer le processus de dégradation thermique en deux zones en série :

. une zone RPA à fort taux de turbulence et forte température assurant le micromélange des espèces avec l'air et l'ensemble des processus de vaporisation/dévolatilisation au sein d'une flamme stabilisée soit sur grille (solide), soit sur ouvreau réfractaire (liquide/gaz).

On a vu que la formation d'un swirl dans cette zone est susceptible de créer ce type de condition. De même l'utilisation d'air préchauffé ou d'oxygène permet le relèvement du niveau de température de cet étage.

L'introduction trop massive d'air (à température ambiante) dans le but d'augmenter en pression partielle d'oxygène effective dans la zone RPA (excès d'air élevé) ne doit pas être faite au détriment du niveau de température de cette zone.

. une zone la plus piston possible assurant la destruction thermique des composés gazeux formés en mélange avec l'air pendant le temps de séjour effective  $\tau_p$  adapté au  $T_{99,99}$  ( $\tau_p$ ) du composé le plus récalcitrant.

On devra veiller lors de la conception et de la conduite à assurer d'une DTS des gaz resserrée autour du temps de passage  $\tau_p$  effectif et éviter des DTS (fonction  $E(\theta)$ ) trop étalées, en particulier aux  $\theta$  petits.

Il est important de vérifier l'étagement favorable des DRE pour les deux zones en série. Des conditions typiques seront pour zone RPA une température de 1700 K et un temps de séjour  $\tau_p = 0,1$  s suivie d'une zone piston à une température de 1100 K et un temps de séjour  $\tau_p = 2$  s.

- en destruction pyrolytique (défaut d'air), on cherchera à étager la conduite en :

. une zone de pyrolyse sous-stoechiométrique par décomposition thermique endothermique des produits et génération de gaz et vapeurs combustibles,

. une zone de combustion oxydante des produits formés (post-combustion) basée sur le critère  $T_{99,99}$  ( $\tau_p$ ) avec  $\tau_p \approx 2$  sec.

Remarquons que l'ensemble de ces considérations imposent que la récupération calorifique éventuelle sur les fumées chaudes doit être faite après l'étagement évoqué précédemment. En particulier, il faut éviter de ne pas soumettre les tubes (eau ou fumées) du récupérateur au rayonnement de la zone RPA, afin de ne pas réduire la température de cette zone. De même, le refroidissement de

fumées doit être réalisé après en zone piston, de façon à ne pas réduire le temps de séjour effectif compatible avec le T<sub>99,99</sub> du composé le plus récalcitrant émis par la zone RPA.

### 3- Fonctionnements dégradés (pathologies)

Ils concernent la non prise en compte de l'ensemble des paramètres intrinsèques (produit à détruire) et extrinsèques (conditions de destruction et paramètres opératoires) évoqués précédemment.

On peut résumer les principales causes de façon non exhaustive.

#### a/ Défaut d'identifications des espèces à détruire

La non connaissance complète de la composition des produits à détruire ne permet pas l'identification de l'ensemble des critères intrinsèques de destruction du produit.

Par exemple, considérons des espèces en mélange introduites dans une enceinte à 1200 K, chacune ayant une énergie d'activation différente. On peut alors calculer le temps nécessaire à leur destruction à 99,99 %, en supposant pour les deux un facteur A d'Arrhenius égal à 10<sup>14</sup> s<sup>-1</sup> dans une cinétique premier ordre.

DRE = 99,99 %      T = 1200 K      A = 10 <sup>14</sup> s <sup>-1</sup>	
E (k cal/mol)	t (s)
60	0,007 s
80	27,0 s
100	115000,0 s

On voit que le temps nécessaire à la destruction calculé par :

$$t = e^{\frac{E}{RT}} \left[ -\frac{\text{Log}(1 - \text{DRE})}{A} \right] \quad (\text{cf chapitre précédent})$$

avec DRE = 99,99 % conduit à des temps qui peuvent varier considérablement.

La simple prise en compte du composant majoritaire ne suffit pas à fixer les constantes de temps et température nécessaires à une destruction du déchet. C'est sur le composé le plus récalcitrant que doit être bâtie la stratégie d'incinération. D'où l'intérêt des tentatives de hiérarchisation des composés évoquées précédemment.

#### b/ Défauts de composition/préparation du déchet entrant

Les conditions de combustion sont mieux maîtrisées lorsque la composition du produit d'entrée n'est pas sujette à de brusques variations. Des espèces chimiques variées présentant de fortes différences de combustibilité, de pouvoir calorifique, etc, peuvent conduire à des différences locales et instantanées très différentes en ce qui concerne leur demande en oxygène ou

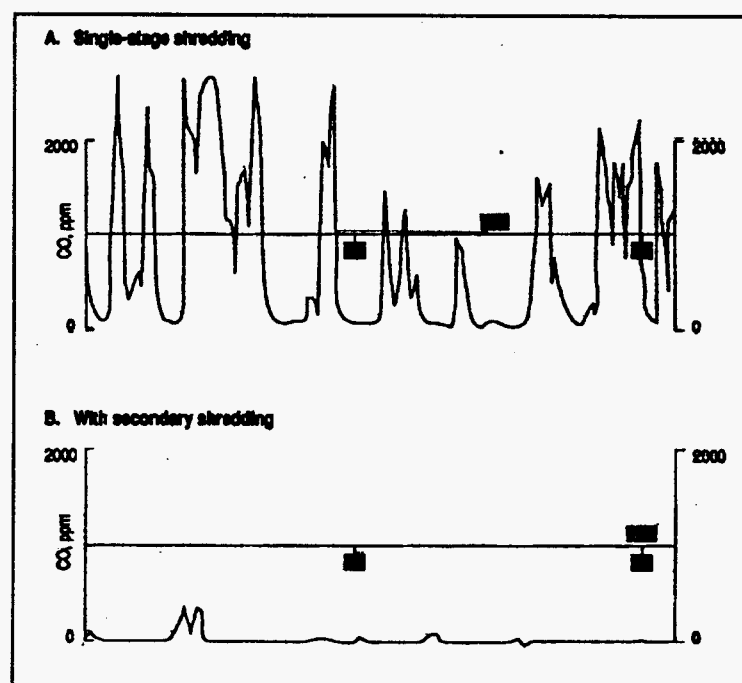
leur niveau de température de destruction. Si ces fractions massives du flux rentrant ne sont pas adaptées aux conditions de marche en continu du dispositif, des "poches" à faible teneur relative en oxygène peuvent résulter. Par exemple, une volatilisation trop rapide d'une partie du déchet peut entraîner une diminution locale de la pression partielle en oxygène entraînant la formation d'imbrûlés et d'émissions gazeuses indésirables (PIC, produits of incomplete combustion). Ces excursions de concentration dans les fumées, sous forme de "bouffées" sont d'ailleurs souvent associées à des excursions de la teneur en CO des fumées, au dessous des valeurs admises par la législation.

Ces excursions sont souvent rencontrées dans les dispositifs permettant l'enfournement de déchets solides de grandes tailles (fours tournants, fours à grille, lits fluidisés denses...) sous forme d'éléments massifs, insuffisamment homogénéisés (fûts, monstres...).

Cet effet est également observé dans l'incinération de déchets liquides ou pâteux lorsque la composition des mélanges est insuffisamment lissée.

On a vu que la classification en taille et de pseudo-homogénéisation est susceptible d'uniformiser les conditions de combustion, minimisant ainsi la formation de composés intempestifs par "bouffées".

Cet effet peut être illustré à partir, par exemple, des résultats de Kilgroe et al [7] qui comparent les bouffées de CO émises dans une incinération en lit fluidisé circulant avec une préparation modérée du déchet (1 étage de concassage) et une préparation plus poussée (2 étages de broyage suivis d'une homogénéisation). Les résultats montrent directement l'effet de la préparation du déchet sur les émissions intempestives.



*Pathologie d'un processus incinératif et sa suppression par préparation du déchet.*

### c/ Défauts de fragmentation/pulvérisation

Dans un produit broyé (solide) ou dans un produit pulvérisé (liquide), une fraction importante de la répartition granulométrique en masse du produit peut se situer bien au-dessus du paramètre SMD du produit broyé ou pulvérisé.

Cette fraction (grosses particules) peut alors sortir de la zone RPA, partiellement brûlée, ou même non enflammée.

Ces circonstances apparaissent en cas de non classification des produits solides ou dans l'utilisation d'injecteurs/pulvérisateurs non adaptés ou dégradés.

Illustrons cet effet dans le cas d'un spray liquide :

Considérons, par exemple, 1000 gouttes formées par une injection hypothétique, ayant la répartition granulométrique suivante [6] :

Diamètre initial des gouttes $d_0$ ( $\mu\text{m}$ )	Nombre de gouttes $n_i$	Pourcentage en nombre de la classe (%)
100	900	98,9 %
500	6	0,66 %
750	4	0,44 %

Le diamètre de Sauter (SMD) de cette répartition peut être calculé par :

$$\text{SMD} = \frac{\sum n_i d_i^3}{\sum n_i d_i^2}$$

On trouve, pour cette répartition :      SMD = 251  $\mu\text{m}$ .

Cependant, le paramètre significatif en incinération est :

$$\text{MF}_i = \frac{n_i m_i}{\sum n_i m_i}$$

représentant la fraction massique de la classe  $i$ , chaque  $m_i$  étant égal à  $\frac{1}{6} \rho \pi d_i^3$ .

On peut alors calculer la répartition des  $\text{MF}_i$  pour la répartition en taille indiquée précédemment.

Diamètre initial des gouttes $d_0$ ( $\mu\text{m}$ )	Fraction massique de la classe $\text{MF}_i = \frac{n_i m_i}{\sum n_i m_i}$
100	0,29
500	0,22
750	0,49

Ainsi, on observe que bien que près de 99 % des particules aient un diamètre de 100  $\mu\text{m}$ , cette classe ne représente en fait que 29 % de la fraction massique du spray.

A l'inverse, alors que les plus grosses particules ( $d = 750 \mu\text{m}$ ) ne représentent que 0,44 % de la répartition en nombre du spray, celles-ci correspondent à près de 50 % de sa répartition en masse !

On a vu (chapitre précédent) qu'une loi en  $d^2(t)$  s'applique pour les gouttes en vaporisation/combustion :

$$d^2 = d_0^2 - \lambda t$$

où  $\lambda$  est une constante de vitesse ( $\text{mm}^2/\text{s}$ ), ce qui impose une durée de vie à la goutte égale à :

$$\tau = \frac{d_0^2}{\lambda}$$

Dans le cas, par exemple, du processus de vaporisation nécessaire à l'inflammation du spray, la constante  $\lambda_v$ , associée au temps  $\tau_v$ , dépend :

- de la température extérieure,
- des propriétés thermophysiques des liquides,
- des vitesses relatives des gouttes par rapport à l'air,
- de la présence d'éléments dissous ou en suspension dans le liquide.

Les valeurs de cette composante  $\lambda_v$  calculée pour une température de 1300 K, dans l'air, sont comprises entre 0,25 et 2,5  $\text{mm}^2/\text{s}$  [8].

On peut alors calculer des délais de vaporisation en fonction de la taille initiale des particules.

Diamètre initial $d_0$ ( $\mu\text{m}$ )	Constante d'évaporation $\lambda_v$ dans l'air à 1300 K	
	$\lambda_v = 0,25 \text{ mm}^2/\text{s}$	$\lambda_v = 2,5 \text{ mm}^2/\text{s}$
50	$\tau_e = 0,01 \text{ s}$	$\tau_e = 0,001 \text{ s}$
100	0,04 s	0,004 s
500	1 s	0,1 s
750	2,25 s	0,225 s
1000	4 s	0,4 s

On observe un étagement des délais nécessaires à la vaporisation complète des gouttes variant de  $10^{-3}$  s à 4 s.

Ce résultat indique que les délais d'évaporation des gouttes les plus grosses (pourcentage en nombre faible, fraction massique de la classe élevée) peuvent avoir un effet significatif sur les performances d'incinération.

Les temps de séjour moyens  $\tau_s$  dans la zone RPA d'un incinérateur sont voisins de 0,5 s (~ 25 % du temps de passage global). On voit alors que, dans ces délais, les particules inférieures à 100  $\mu\text{m}$  seront toutes vaporisées. Par contre, les particules de diamètres initiaux de 500 et 1000  $\mu\text{m}$  ne le seront pas.

En particulier, les diamètres initiaux de 500  $\mu\text{m}$  et 750  $\mu\text{m}$  seront ramenés au bout de 0,5 s et pour  $\lambda_v = 0,25 \text{ mm}^2/\text{s}$  à 350 et 750  $\mu\text{m}$  respectivement.

On peut voir l'incidence de cette cinétique sur la répartition granulométrique hypothétique discutée précédemment avec  $\lambda = 0,25 \text{ mm}^2/\text{s}$  ( $T = 1300 \text{ K}$ ).

Diamètre initial $d_0$ ( $\mu\text{m}$ )	Nombre de gouttes $n_i$	Diamètre ( $\mu\text{m}$ ) final après un temps de séjour $\tau_s=0,5\text{s}$	Nombre de gouttes restantes après $\tau_s=0,5\text{s}$	Fraction massique initiale de la classe $MF_{i0}$	Fraction massique finale de la classe $MF_{if}$
100	990	0	0	0,29	0
500	6	354	6	0,22	0,07
750	4	661	4	0,49	0,34

On voit que sur la base du nombre de gouttes, 99 % de celles-ci ont été effectivement vaporisées pendant le temps  $\tau_s=0,5\text{s}$ .

Cependant, la fraction massique non vaporisée correspond à 41 % (7 + 34) du débit entrant.

A partir de cet exemple, on voit clairement que des conditions dégradées peuvent résulter d'effets souvent jugés du second ordre (ici quelques grosses gouttes dans le spray).

La suppression du mode dégradé suppose alors une meilleure maîtrise de la préparation amont du déchet (resserrement de la répartition granulométrique des solides divisés, déviscosification des produits visqueux ou pateux, choix d'injecteurs adaptés ou en cours de développement (ultra-sons, par exemple).

#### d/ Défauts dans la zone RPA

Ils concernent essentiellement trois modes de défaillance :

- défaut de mélange air/gaz ou vapeur générés dans l'étape d'injection, réacteur non RPA.

Cet effet a été discuté en montrant l'amélioration apportée par des promoteurs de turbulence (swirl, cyclone...) ou par l'utilisation d'air

enrichi permettant une distribution uniforme de l'agent oxydant dans le mélange air/gaz,

- défaut de niveau de température dans le RPA.

Cet effet peut résulter de différentes causes souvent imbriquées, par exemple :

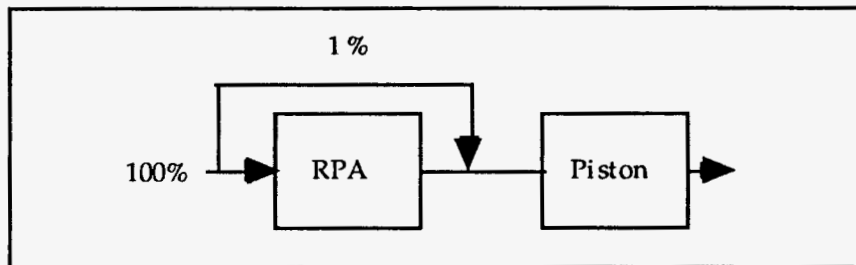
- baisse de température par injection excessive d'air en excès,
- défaut de vaporisation par existence de gouttes ou de particules de grand diamètre entraînant leur combustion incomplète,
- défaut de turbulence conduisant à une mauvaise distribution du champ de température,
- temps de séjour  $\tau_s$  insuffisant pour l'espèce considérée,
- injection de déchets à pouvoir calorifique transitoirement trop faible,
- existence de points froids dans le foyer ou en vis-à-vis radiatif du foyer (tubes récupérateurs, par exemple).

- défauts d'alimentation ou de distribution des espèces.

Ils concernent l'alimentation de la zone RPA en mélanges non préalablement préparés, non suffisamment atomisés ou en alimentation discontinue répétitive faisant fonction de système en génération de "bouffées" provoquant des excursions transitoires des performances de l'étage RPA. Cet effet a été discuté précédemment. On peut illustrer cet effet sur un court-circuit du RPA.

Considérons un incinérateur dont la zone RPA est typiquement à 1700 K avec un temps de séjour moyen de  $\tau_s = 0,1$  s suivie d'une zone piston typiquement à 1100 K avec un temps de séjour  $\tau_p = 2$  s.

Supposons que du fait de défauts d'alimentation amont de cette zone (grosses particules, gouttes de fortes tailles,...) une fraction très faible, fixée à 1 %, du déchet, court-circuite le RPA et passe directement dans la zone piston.



On peut calculer, dans cet exemple, la conséquence directe sur l'efficacité globale de destruction, par calcul des DRE de chaque zone dans les conditions indiquées plus haut, et ce pour différents composés jugés dangereux.

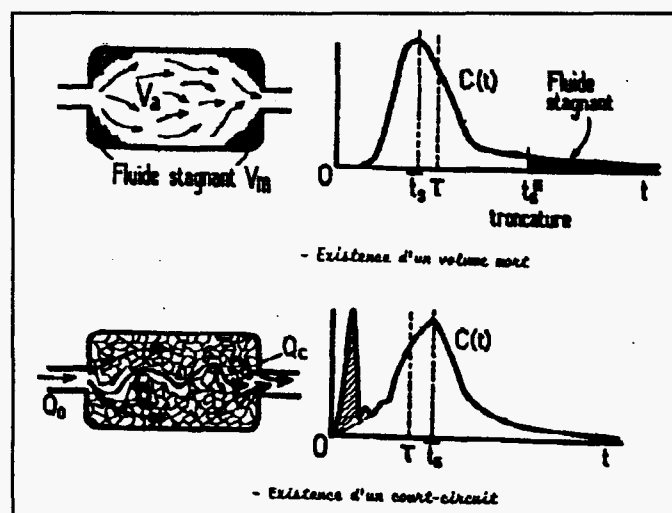
Composés	A(s <sup>-1</sup> )	E (kcal/mol)	DRE RPA T=1700 K $\tau_s = 0,1$ s	DRE Piston T=1100 K $\tau_p = 2$ s	DRE globale
chloroforme	$2,9 \times 10^{12}$	49	99,999	99,999	99,999
benzène	$2,8 \times 10^8$	38	99,999	99,999	99,999
tétrachlorobenzène	$2,9 \times 10^{12}$	30	99,999	98,566	99,986
tétrachloroéthylène	$2,6 \times 10^6$	33	99,999	77,127	99,771
acétonitrile	$4,7 \times 10^7$	40	99,999	66,357	99,664

On constate une chute importante du rendement de destruction global en fonction des composés à détruire, alors que seulement 1 % de la matière à court-circuité la zone RPA dont l'efficacité de destruction est effectivement supérieure à 99,999 %, et que la zone piston est aux bonnes conditions (1100 K et  $\tau_s = 2$  s).

#### e/ Défauts dans la zone piston

Ces défauts sont essentiellement liés :

- temps de séjour  $\tau_p$  insuffisants pour le niveau de température moyenne permettant la destruction à 99,99 % des composés les plus récalcitrants ( $T_{99,99}(\tau_p)$ ). Cet effet peut être dû à une surcharge transitoire du four, qui augmente le débit de gaz et diminue transitoirement le temps de séjour,
- défaut dans la distribution des temps de séjour  $E(\theta)$  par apparition de courts circuits ou de zones mortes dans l'aérodynamique interne du foyer. Ces effets s'appliquent en particulier dans les cas de mauvaises conceptions ou dans les transitoires (surcharge ou sous charge du foyer).



Exemples de DTS pathologiques.



- défaut de la teneur en oxygène. La température nécessaire à un DRE donné (par exemple 99,99 %) dépend de la teneur en oxygène du mélange :

$$T = \frac{E}{R \left( \frac{O_2}{0,21} \right) \text{Log} \left( \frac{-tA}{1 - \text{DRE}} \right)}$$

Plus cette teneur diminue, plus la température nécessaire devient grande et/ou le temps de destruction long. Des agrégats gazeux à faible teneur en O<sub>2</sub> (poche) peuvent donc se trouver partiellement convertis.

Si, par exemple, un agrégat gazeux contenant seulement 1 % des composés à détruire a un temps de séjour de 0,2 s et une teneur de 1 % en oxygène au lieu des conditions globales typiques de 2 s et 8 % d'oxygène, l'efficacité de destruction globale tombe de 99,99 % à 96 % entraînant transitoirement des émissions gazeuses en sortie de deux ordres de grandeur plus élevés que si l'analyse des fumées était réalisée en continue.

- refroidissements intempestifs (quench) par existence de parois froides ou pénétration d'air parasite.

Cet effet, souvent associé à des défauts provoqués de la DTS de la zone, entraîne l'apparition de paquets gazeux non complètement convertis...

D'une manière générale, on a vu que, même de faibles proportions du volume total du déchet qui se trouveraient dans ces conditions pathologiques, peuvent entraîner des déviations importantes dans l'objectif d'une destruction efficace du déchet.

En particulier, les effets de surcharge ou de sous-charge de l'alimentation du dispositif de destruction thermique induisant des pathologies que l'on a identifiées précédemment et qui se combinent pour provoquer des écarts importants sur les teneurs des fumées en micro-polluants. On illustre cet effet sur les résultats obtenus par Finkelstein et al [9] à partir d'un incinérateur à solides.

<i>Micro-polluants (µg/Nm<sup>3</sup>)</i>	<i>sous-charge</i>	<i>nominal</i>	<i>surcharge</i>
Chlorobenzènes	3,5	3,3	4,4
Chlorophenols	9,5	5,1	8
Composés polyaromatiques (PAH)	7,1	4	5,4
Polychlorobiphényle (PCB)	4,3	3	4,9
Polychlorodibenzo - P dioxines (PCDD)	0,0526	0,0188	0,0554
Polychlorodibenzofuran (PCDF)	0,1145	0,0445	0,1007

#### 4- Vers des critères globaux d'incinérabilité

On a vu que l'incinérabilité de composés dangereux dépendait non seulement de critères intrinsèques ( $\Delta H$ ,  $T_f$ ,  $T_{ai}$ ,  $T_{99}$  (2)) mais également de critères extrinsèques liés aux modes de défaillance en système réactionnel global.

Les principaux modes de défaillance sont :

- modes de défaillance dans la flamme (EFFM, Experimental Flame Failure modes).

Ces modes de défaillances simulés sur banc en condition dégradées de génération de flammes (défaut d'atomisation, température de flamme basse, défaut d'air,...) ont été testés par Seeker et al [10].

- une approche basée sur l'évaluation théorique des cinétiques dans les flammes en condition dégradée (TFMK, Theoretical Flame Mode Kinetics) a été proposée par Tsang et Shaub [11].

- une approche similaire au critère  $T_{99}$  (2) mais étendue au cas de faibles et fortes concentrations en oxygène lors de l'évaluation de la stabilité thermique des composés [12]. Ces critères sont respectivement désignés par  $TSL_{O_2}$  et  $TSHi_{O_2}$  (Thermal Stability Low-High  $O_2$ ).

Chacun de ces critères intrinsèques ( $T_{ai}$ ,  $t_{ig}$ ,  $\Delta H$ ,  $T_{99}$  (2)) ou globaux (EFFM, TFMK,  $TSL_{O_2}$ ,  $TSHi_{O_2}$ ) conduit à une hiérarchisation d'incinérabilité des produits. Ces hiérarchisations en incinérabilité résultent d'expérimentations à l'échelle laboratoire ou pilote.

Une première question que l'on peut se poser est la validité des critères de classification des produits en mélange (fatal ou délibéré). En d'autre terme, ces critères dépendent-ils de la concentration des produits à détruire dans un mélange complexe ?

Les résultats de Taylor et al [12] confirment que, par exemple, le critère  $T_{99}$  (2) reste pratiquement insensible à la concentration de l'espèce étudiée dans le mélange, validant ainsi les critères intrinsèques dans ce type de situation.

On peut également se poser la question de la validité des critères vis-à-vis des performances en destruction observée pour différents produits et dans différents incinérateurs en condition réelle. Ce travail a été réalisé par Dellinger et al [12] dans un programme d'essai basé sur dix dispositifs industriels de combustion ou d'incinération (A, B, C, ...).

POHC	concn, ppm	T <sub>99</sub>
acetonitrile	95	980
	155	1000
acrylonitrile	210	950
	615	935
benzene	455	1150
	360	1150
benzyl chloride	665	690
	310	685
	435	690
chlorobenzene	760	980
	280	850
chloromethane	160	950
	315	950
1,3-dichlorobenzene	355	1000
	590	980
1,1-dichloroethene	175	880
	655	860
1,2-dichloroethane	265	835
	655	840
dichloromethane	780	815
	580	810
	540	810
	275	815
	95	800
methyl ethyl ketone	165	650
	200	650
	95	650
tetrachloroethene	570	905
	335	880
tetrachloromethane	60	670
	100	645
	335	645
toluene	590	895
	240	920
	410	900
	595	890
	665	900
trichloroethene	165	860
	410	865
trichloromethane	200	635
	450	625

*Effet de la concentration d'une espèce dans un mélange complexe sur son critère T<sub>99</sub> (2).*

On indique ci-dessous les pourcentages statistiques de succès de chacune des classifications vis-à-vis de la prédiction des efficacités de destruction et de la génération de composés imbrulés (PIC) dans les fumées, en situation réelle.

Critère	tig	$\Delta H_c$	T <sub>ai</sub>	T <sub>99</sub> (2)	EFFM	TFMK	TSHiO <sub>2</sub>	TSL <sub>0</sub> O <sub>2</sub>
% de succès	0	10	11	11	0	33	20	70

On constate que les critères globaux prenant en compte des modes de défaillance des conditions réactionnelles permettent une meilleure classification des composés incinérés en conditions réelles.

Parmi ceux-ci, le critère TSL<sub>0</sub> O<sub>2</sub> apparaît le meilleur critère de classification, ce qui signifie que les modes de défaillance liée à l'apparition de conditions locales

ou transitoires de défaut d'air (poches en condition pyrolytique) ont un rôle dominant sur l'efficacité de la destruction globale des composés récalcitrants.

Enfin, mentionnons que les tentatives de classification des composés vis-à-vis de critères intrinsèques ou extrinsèques présenterait un grand intérêt, en cas de fiabilité prouvée, en fournissant une méthode économique de contrôle des performances d'incinération en site réel. Il s'agit d'identifier un composé dont la stabilité thermique est plus forte que l'ensemble des composés à détruire et à l'ajouter sous forme d'additif dans le déchet. Le suivi de sa seule performance de destruction permettrait d'affirmer, en cas de succès, que les objectifs de destruction des autres composés ont été a fortiori atteints. C'est la méthode des produits traceurs (surrogates). Ce composé doit être facilement détectable. On a proposé différents fréons [14] ou des SF<sub>6</sub> [15]. Une étude conduite par l'EPA [16] a validé la méthode en testant un mélange de quatre composés réputés stables en présence de SF<sub>6</sub> en alimentation d'un four tournant pour différentes conditions de température et de concentration en oxygène.

## REFERENCES

- [1] CUDAHY, J.J. and W.L. TROXLER. Auto-ignition temperature as an indicator of thermal oxidation stability, *J. of Hazard. Mat.*, **8**, p. 59-68, 1983.
- [2] THOMAS, D.G. *J. Colloid. Sci.*, **20**, p. 267, 1965.
- [3] CHONG, J.S., E.B. CHRISTIANSEN and A.E. BAER. *J. Appl. Polymer Science*, **15**, p. 2007, 1971.
- [4] ANTONINI, G., J.M. BRUNELLO, B. M'BAMA GAPORAUD, G.C. GRAZZINI. Efficiency of Combustion of a Specially Formulated Coal Water Froth, 13th International FBC Conference, May 7-10, Orlando, Florida, 1995.
- [5] LAW, C.K. Incineration of hazardous waste. Toxic combustion by products, W.R. Seeker and C.P. Koshland edn, Gordon and Breach Science Publishers, Philadelphia, p. 1, 1992.
- [6] MILLER, D.L., V.A. CUNDY and R.A. MATULA. Incinerability characteristics of selected chlorinated hydrocarbons, 9th Annual Research Symp. at Ft Mitchell, Ken, Incineration and Treatment of hazardous waste, May 2-4, 1983.
- [7] KILGROE, J.D., L.P. NELSON, P.J. SCHINDLER and W.S. LANIER. Incineration of hazardous waste - Toxic combustion by products, W.R. Seeker and C.P. Koshland edn., Gordon and Breach Publishers, Philadelphia, 1992.
- [8] KANURY, A. and MURTY. Introduction to combustion phenomena, Gordon and Breach edn, New-York, Chapitre 5, 1975.
- [9] FINKELSTEIN, A., R. KLICIUS and D. HAY. Emissions from combustion processes. Origin, measurement and control, R. Clement and R. Kagel edn., Lewis Publishers, Boca Raton, 1990.
- [10] SEEKER et al. Proceedings 9th Annual Research Symposium, Incineration and treatment of hazardous waste. US-EPA, IERL, EPA - 600/9 - 84 - 015, p. 79-94, 1984.
- [11] TSANG, W.S. and W. SHAUB. Detoxification of hazardous wastes, Ann. Arbor Science Publishers, p. 41-60, 1982.
- [12] TAYLOR, P.H., B. DELLINGER and C.C. LEE. Development of a thermal stability based ranking of hazardous organic compounds incinerability. *Environ. Sci. Technol.*, **24**, p. 316-328, 1990.

- [13] DELLINGER, B., M.D. GRAHAM and D.A. TIREY. Predicting emissions from thermal processing of hazardous wastes, *Hazard. Waste & Hazard Materials*, 3, n°3, p. 293-307, 1986.
- [14] GRAHAM, J.L., D.L. HALL and B. DELLINGER. Laboratory investigations of thermal degradation of a mixture of hazardous organic compounds, *Environ. Sci. Technol.*, 20, p. 703-710, 1986.
- [15] BERGER, M.L. and C. PROTOR. Sulfur hexafluoride as a surrogate for verification of destruction removal efficiency, *Conference on the Chemical/Physical Processes of Combustion*, 1985.
- [16] THURNAU, R.C. Incinerability index. A measure of incinerator performance, *Waste Management*, 10, p. 185-195, 1990.



**RE.CO.R.D.**

**ETUDE N° 94-0211/1A**

**RAPPORT FINAL  
Tome II**

**CONDITIONS DE DESTRUCTION THERMIQUE DES  
DECHETS INDUSTRIELS**

**février 1996**

**G. ANTONINI - Université de Technologie de Compiègne**

---

**ANNEXE 1**  
**NOMENCLATURE DES DECHETS INDUSTRIELS**

---

- 1- LES DECHETS INDUSTRIELS
- 2- CLASSIFICATION SELON L'ETAT PHYSIQUE
- 3- CLASSIFICATION SELON LA NATURE CHIMIQUE
- 4- CLASSIFICATION SELON LE POUVOIR CALORIFIQUE
- 5- AUTRE CLASSIFICATION, SELON LE CARACTERE DANGEREUX
  - 5-1- Classification selon le critère de danger
  - 5-2- Constituants de base contenus dans les déchets dangereux

---

**ANNEXE 2**  
**COMPATIBILITE DES DECHETS - STOCKAGE/MELANGE**

---

- 1- LE STOCKAGE DES DECHETS
  - 1-1- Les déchets liquides
  - 1-2- Les déchets solides
- 2- PROBLEMES POSES PAR LE STOCKAGE/MELANGE DES DECHETS
  - 2-1- Toxicité et instabilité des déchets seuls
  - 2-2- Incompatibilité des déchets/mélanges
- 3- LE CRITERE D'EXPLOSIVITE
- 4- COMPATIBILITE DES DECHETS
  - 4-1- Les groupes de réactivité
  - 4-2- Combinaison entre groupes de réactivité

---

**ANNEXE 3**  
**MECANISMES REACTIONNELS EN INCINERATION**

---

- 1- LE MECANISME REACTIONNEL DE LA COMBUSTION
- 2- INFLUENCE DES RADICAUX SUR LA COMBUSTION
- 3- INFLUENCE DE LA COMPOSITION REACTIFS-COMBURANT, LIMITES D'INFLAMMABILITE
- 4- INFLUENCE D'ADDITIFS SUR LA COMBUSTION
- 5- LES DIFFERENTS ELEMENTS STRUCTURAUX INFLUENÇANT LA COMBUSTIBILITE
- 6- ETUDE DE CAS SPECIFIQUES
  - 6-1- Les composés saturés
  - 6-2- Les composés insaturés

---

**ANNEXE 4**  
**FICHES DECHET**

---



## *ANNEXE 1*

### *NOMENCLATURE DES DECHETS INDUSTRIELS*

---

1- LES DECHETS INDUSTRIELS

2- CLASSIFICATION SELON L'ETAT PHYSIQUE

3- CLASSIFICATION SELON LA NATURE CHIMIQUE

4- CLASSIFICATION SELON LE POUVOIR CALORIFIQUE

5- AUTRE CLASSIFICATION, SELON LE CARACTERE DANGEREUX

5-1- Classification selon le critère de danger

5-2- Constituants de base contenus dans les déchets dangereux

## 1- LES DECHETS INDUSTRIELS :

Le déchet industriel se distingue du déchet banal par son volume important, sa toxicité et sa réactivité mais également par d'autres caractéristiques bien particulières :

- une certaine irrégularité de production, de livraison et de composition ;
- une grande variété de produits ;
- la présence de pâtes dont la viscosité varie avec la température ;
- la possibilité de présence de déchets à pouvoir calorifique inférieur élevé ;
- la présence de matières acides, alcalines, corrosives, ou explosives ;
- l'évolution chimique qui peut se produire en cours de transport ou pendant le stockage ;
- le mode de conditionnement.

La quantité des déchets industriels produits chaque année en France est estimée à 7 millions de tonnes. Ces déchets, contenant des éléments nocifs en quantité plus ou moins forte, proviennent de secteurs industriels variés :

- l'industrie chimique.....	23,5 %
- la sidérurgie et la cokerie.....	18,3 %
- la fonderie.....	13,6 %
- l'industrie agricole et agro-alimentaire .....	8,2 %
- les métaux non ferreux .....	7,6 %
- la papeterie.....	7,4 %
- l'industrie automobile .....	4,6 %
- l'industrie mécanique .....	3,6 %
- la pharmacie .....	3,2 %
- le travail des métaux .....	2,8 %
- divers .....	7,2 %

Dans un souci de planification, le Ministère de l'Environnement a établi une nomenclature des déchets visant à une meilleure approche et cohérence des problèmes pour l'ensemble des partenaires concernés, industriels, collectivités territoriales, services administratifs et publics. Celle ci est rassemblée dans le tableau ci après.

Il existe principalement quatre grandes techniques de traitement des déchets :

- la mise en décharge ;
- le traitement physico-chimique ;
- le traitement biologique ;
- le traitement thermique.

Le traitement thermique possède de nombreux avantages sur les autres types de traitements. Tout d'abord, il évite la contamination microbienne ou microbiologique, dont les principaux acteurs sont détruits à 200°C, et permet de détruire des produits toxiques ou nocifs et de casser de longues chaînes carbonées. Ensuite, la réduction de masse des déchets est très importante : pour les déchets industriels, les cendres obtenues représentent 20 % en masse et 1/10ème en volume des déchets traités. Enfin, la récupération d'énergie, ainsi obtenue, est non négligeable de part un pouvoir calorifique du déchet industriel de l'ordre de deux à trois fois celui du charbon ou du pétrole.

Catégories	Regroupements de repérage
Liquides, bains et boues acides non chromiques Liquides, bains et boues alcalins non chromiques, non cyanures Liquides, bains et boues cadmiques cyanures Liquides, bains et boues cadmiques non cyanures Liquides, bains et boues chromiques acides Liquides, bains et boues chromiques non acides Autres liquides, bains et boues contenant des métaux non précipités)	Déchets de préparation et revêtement de surface
Solvant halogènes Solvant non halogènes Déchets aqueux halogènes souillés de solvants Déchets aqueux non halogènes souillés de solvants Culots non aqueux halogènes de régénération de solvants Culots non aqueux non halogènes de régénération de solvants	Solvants et déchets contenant des solvants
Fluides d'usinage aqueux : émulsions huileuses Fluides d'usinage aqueux : solutions vraies Huiles entières d'usinage et de trempe Huiles de transmission hydraulique Huiles isolantes chlorées (y compris PCB, PCT) Huiles isolantes non chlorées Huiles moteurs Huiles minérales entières mélangées Eaux de machines à laver les pièces usinées Mélanges liquides eau/hydrocarbures	Déchets liquides huileux
Boues de peinture avec phase aqueuse Boues de peinture avec phase organique Déchets de peinture sans phase liquide Déchets d'encres ou de colorants avec phase organique Déchets d'encres ou de colorants sans phase organique	Déchets de peinture, vernis et encre
Boues d'usinage avec hydrocarbures Boues d'usinage sans hydrocarbures Graisses, corps gras, lubrifiants ou filmants d'origine minérale Savons, corps gras, lubrifiants ou filmants d'origine végétale ou animale	Boues d'apprêt et de travail des métaux
Copeaux et particules métalliques Déchets de grenailage Sels de trempe et autres déchets solides de traitements thermiques cyanures Sels de trempe et autres déchets solides de traitements thermiques non cyanures Déchets contenant des fibres d'amiantes libres ou libérables	Déchets minéraux de traitements mécaniques et thermiques
Mâchefers et cendres non volantes Poussières fines et cendres volantes Laitiers, scories, crasses, réfractaires usés Sables de fonderie usages	Déchets de cuisson, fusion, incinération
Eaux mères de fabrication salines Eaux mères de fabrication non salines Résidus liquides de distillation de fabrication Brais, goudrons, bitumes Autres loupes et sous-produits de fabrication issus de synthèse organique Eaux de lavage de matériel d'industrie chimique et parachimique	Déchets de synthèse organique
Acides minéraux résiduaire de traitements chimiques Bases minérales résiduaire de traitements chimiques Carbonate de calcium résiduaire Sulfate de calcium résiduaire souillé (phosphogypses...) Autres boues de neutralisation d'effluents acides Autres solutions salines	Déchets minéraux liquides et boueux de traitements chimiques

Catégories	Regroupements de repérage
Oxydes métalliques résiduaire solides Sels métalliques résiduaire solides hors alcalins Sels minéraux résiduaire solides cyanures Sels minéraux résiduaire solides non cyanures Catalyseurs usés	Déchets minéraux solides de traitements chimiques
Boues d'hydroxydes métalliques ayant subi un traitement de déshydratation Boues d'hydroxydes métalliques n'ayant pas subi un traitement de déshydratation Boues de station d'épuration biologique Résidus de décantation, filtration, centrifugation Résines échangeuses d'ions saturées Eluats et boues de régénération de résines échangeuses d'ions non classables Résines échangeuses d'ions saturées Boues de lavage de gaz Boues de décarbonatation	Déchets de traitement de dépollution et de préparation d'eau
Boues de forage Absorbants, matériaux souillés notamment de produits organiques Absorbants, matériaux souillés uniquement de produits inorganiques Matériels souillés Emballages souillés	Matériaux et matériels souillés
Loupes et chutes de fabrication non pris en compte par les rubriques précédentes Piles, batteries et accumulateurs usagés Rebuts d'utilisation d'explosifs et déchets à caractère explosif Rebuts d'utilisation de pesticides précédentes Déchets chimiques de laboratoires non classables ailleurs du fait de leur conditionnement Déchets biologiques ou anatomiques d'hôpitaux et de laboratoires	Rebuts d'utilisation loupés, pertes
Verre Métaux Minéraux (inertes, terres, stériles) Matières plastiques Caoutchouc Textiles Papiers cartons Bois Matières animales Sang Matières végétales	Déchets banals
Matières de vidange Boues de curage d'égouts Contenu de bacs à graisse Déchets de démolition Déchets encombrants Déchets de voiries et espaces verts Eaux grasses de cuisines Ordures ménagères Déchets industriels banals en mélange	Déchets urbains

*Nomenclature des déchets*

## 2- CLASSIFICATION SELON L'ETAT PHYSIQUE :

Les déchets, n'ont pas tous le même potentiel polluant. Il convient donc d'adapter les dispositions prises lors du choix de la filière de traitement, du stockage ou de la valorisation éventuelle du déchet en fonction de ce paramètre.

Il existe dans la littérature différentes classifications des déchets, la plus significative, pour ce qui nous concerne, tient compte du caractère dangereux (Hazardous) du déchet.

En général, on considère comme "solide" un déchet qui est "pelletable", c'est à dire que l'on peut charger à la pelle, et comme "liquide" un déchet qui est "pompable", c'est à dire que l'on peut aspirer et rejeter avec une pompe.

Les pompes étant de plus en plus perfectionnées, il arrive que des déchets soient à la fois pelletables et pompables, ce qui permettra de choisir entre les deux familles de méthodes pour les traiter.

La classification selon l'état matière identifie l'état physique du déchet. Cette classification est intéressante pour le choix et le dimensionnement du dispositif de manutention du déchet ainsi que pour le choix des équipements du procédé.

Selon ce critère, le déchet est classé selon l'état :

- Gazeux
- Pompable :
  - \* liquide
  - \* suspension
  - \* boue
- Solide

Si le fait de ne pas être pompables entraîne des dispositifs particuliers pour leur manipulation notamment, il ne faut pas oublier que certains déchets liquides demandent des traitements tout à fait spéciaux dont la complexité et le prix de revient sont comparables à ceux de bien des déchets industriels solides.

De fait, la véritable distinction à faire serait sur la teneur en eau des déchets : au-delà d'un seuil que l'on pourrait situer vers 95 %, on peut parler d'un effluent aqueux dont le traitement fait appel à un ensemble de techniques particulières.

En deçà (fond de bac de carburants, solvants et bain usés, par exemple), les méthodes de traitement se rapprochent beaucoup des techniques d'élimination des déchets solides.

En ce qui concerne l'aspect physique : si dans certains cas la réponse est évidente (gravats, cageots), il y a des cas limites, notamment les boues, les fonds de cuves, tout ce qui est pâteux.

La distinction est d'autant plus malaisée que la viscosité de ces matières peut évoluer en fonction du temps et de la température.

En plus de l'état physique, il est nécessaire de connaître certaines caractéristiques physiques parmi lesquelles on peut citer dans le tableau suivant :

Paramètres physiques			
Tout déchet	Déchet solide	Déchet pompable	Déchet gazeux
Taille	% Matière soluble	Turbidité	Température
Forme	% En suspension	Couleur	Pression
Volume	% Volatiles	Odeur	Volume
Poids	% Cendres	Température	Densité
Densité	Dureté	Viscosité	% Particulaire
Homogénéité	Distribution granu- lométrique	Densité	% Liquide
Compactibilité	Forme	Homogénéité	
Température	Porosité	Teneur en solide	
Couleur	Absorptivité	Oxygène dissous	
Odeur	Densité	Pression de vapeur	
Age	Agglomération	Effet du cisaillement	
Radioactivité		Effet de la température	
Etat physique			
Humidité (%)			
Solubilité dans l'eau			

*Critères de classification physique*

### 3- CLASSIFICATION SELON LA NATURE CHIMIQUE:

La classification par nature chimique permet de fixer les paramètres du procédé ainsi que le choix des matériaux et de sélectionner le système de traitement des rejets. Les principaux critères de sélection de paramètres chimiques sont cités dans le tableau suivant.

Nature chimique	
Organique	Inorganique et élémentaire
Protéine azoté	Carbone
Phosphore	Hydrogène
Lipides	P <sub>2</sub> O <sub>5</sub> et phosphates
Sucres	Soufre
Hemicellulose	Métaux alcalins
Phénols	Métaux alcalino-terreux
Benzène	Métaux lourds
Alkyl benzène sulfonate	Plomb
Extrait de chloroforme carbone	Cadmium
PCB (biphenyls polychlorés)	Cuivre
PNH (hydrocarbones polynucléaires)	Nickel
Vitamines	Chrome
Insecticides	Arsenic
DDT	Sélénium
Métaux précieux	Béryllium
	Amiante
	Potassium
	Phosphore

*Critères de classification selon la nature chimique*

A partir des critères de classification chimiques, on peut distinguer quatre classes de déchets :

- *Déchets propres* : ce groupe de déchets comprend les produits hydrocarbonés qui renferment du carbone, de l'hydrogène et de l'oxygène. Les produits de l'oxydation complète sont considérés comme propres et peuvent, dans ce cas, être directement évacués à l'atmosphère.
- *Déchets générant des effluents gazeux contaminants* : les produits de la combustion issus de ces déchets contiennent des contaminants gazeux comme l'acide chlorhydrique... Un traitement des fumées est dans ce cas nécessaire.
- *Déchets contenant des métaux lourds* : les produits issus de l'oxydation de ces déchets peuvent être à l'état solide dans les domaines de température considérés en incinération. Cette caractéristique affecte notamment le choix du traitement des fumées.
- *Déchets contenant des métaux alcalins* : en fonction du niveau de température du procédé, ce type de déchet peut générer des oxydes soluble. Cet aspect peut s'avérer critique pour le choix du procédé (traitement humide).

Cette classification est rassemblée dans le tableau suivant.

DECHET	CONSTITUANTS
Déchets propres	C, H, O
Déchets générant des contaminants gazeux	C, H, O, N, S, F, Cl, Br, P
Déchets contenant des métaux lourds	C, H, O, N, S, F, Cl, Br métaux lourds, Si
Déchets contenant des métaux alcalins	C, H, O, N, S, F, Cl, Br métaux lourds, Si, métaux alcalins P, B

*Classification selon le critère chimique*

#### 4- CLASSIFICATION SELON LE POUVOIR CALORIFIQUE

La classification selon le pouvoir calorifique du déchet permet de déterminer les énergies mises en œuvre dans le procédé.

- *Déchets combustibles* : ce type de déchet ne nécessite pas de combustible d'appoint lors de son incinération.
- *Déchets non combustibles* : ce type de déchet nécessite un combustible d'appoint lors de l'incinération.

Pour ces deux types de déchet, on prendra en compte la présence ou non de matière volatile (combustibles ou non).

Le pouvoir calorifique inférieur (P.C.I.) des déchets industriels est très variable : ainsi, il est nul pour les eaux faiblement chargées et peut s'élever à 10 000 kcal/kg pour des déchets de polyéthylène. Les déchets solides contenant peu de matières organiques et les déchets composés principalement d'eau ont un faible P.C.I. et leur combustion nécessite l'apport d'un combustible à haut P.C.I. Le combustible d'appoint peut être un autre déchet à condition que le mélange ainsi créé n'engendre pas des produits à leur tour difficiles à éliminer.

## **5 - AUTRE CLASSIFICATION, SELON LE CARACTERE DANGEREUX**

### **5-1- Classification selon le critère de danger**

D'après l'IFE , en France, les déchets industriels sont habituellement classés en trois catégories.

#### *a) Les déchets inertes :*

Constitués de déblais, gravats, matériaux inertes issus du traitement des minéraux... Ces déchets sont le plus souvent mis en décharge, leur production annuelle est estimée à 100 millions de tonnes.

#### *b) Les déchets banals :*

Assimilables aux ordures ménagères. Ils sont constitués de bois, papiers, cartons, matières plastiques... Ils peuvent être traités par les mêmes méthodes que les déchets inertes, leur production annuelle est estimée à 32 millions de tonnes.

#### *c) Les déchets spéciaux : (hazardous)*

Caractéristiques de l'activité industrielle, contenant des éléments nocifs en concentration plus ou moins importante et présentant de ce fait des risques accrus pour l'Environnement. Leur élimination doit être assurée avec des précautions particulières. Leur production annuelle est estimée à 18 millions de tonnes dont 2 millions sont qualifiés de toxiques et répertoriés en trois catégories :

##### **- Les déchets minéraux liquides ou semi-liquides**

(par exemple bains de traitement de surface des métaux, acides ou bases) traitables par voie physico-chimique (neutralisation, séparation des éléments indésirables dans une phase solide, oxydation ou réduction).

Ces traitements ont pour but la limitation de la toxicité des déchets ainsi que le recyclage de certains d'entre eux.

##### **- Les déchets organiques**

(essentiellement déchets d'hydrocarbures, goudrons, solvants,...) traitables le plus couramment par dégradation thermique, bien que des traitements physico-chimiques soient en cours de développement pour des déchets très spécifiques.

La présence de molécules chlorées dans une part importante de ces déchets nécessite des dispositifs spécifiques d'épuration des fumées.



### - Les déchets minéraux solides

(par exemple sables de fonderie, sels de trempe cyanurés devant être mis en décharge ou entreposés en stockage profond suivant la toxicité des éléments constitutifs, comme d'ailleurs les résidus d'incinération ou de traitements physico-chimiques (cendres, scories, mâchefers, poussières, boues d'hydroxydes).

Une attention particulière sera donc portée dans la suite à ces déchets spéciaux, particulièrement dangereux. On considérera qu'un déchet est dangereux, s'il est susceptible de remplir au moins une seule des conditions suivantes :

- possibilité d'ignition, qui est identifié par le risque au feu pendant la manutention du produit;
- risque de corrosivité, qui se traduit par la nécessité de mise sous container spéciaux ;
- réactivité ou explosivité, qui se traduit par le risque de réaction du déchet lorsqu'il est en contact avec l'air ou l'eau ou bien lors d'un choc ou d'un échauffement ;
- toxicité, qui est identifié par le risque de dégagement d'éléments toxiques en quantité suffisante pour poser des problèmes de santé ou des risques à l'environnement.

A partir de cette définition du déchet dangereux, on peut exclure :

- les déchets ménagers ;
- les eaux usées (égouts domestiques) ;
- les retours d'irrigations, déchets générés par les engrais ;
- déchets issus de l'exploitation minière ou pétrolière ;
- déchets issus de la combustion de combustibles fossiles.

### 5-2- Constituants de base contenus dans les déchets dangereux

Le tableau suivant (classification EPA) donne les éléments de base pouvant constituer un déchet dangereux. Tout déchet contenant au moins l'un de ces éléments sera considéré comme dangereux.

(Acétato)phenylmercure
1 Acétyl-2- thiourée
1,1,1,2-Tétrachloroéthane
1,1,1-Trichloroéthane
1,1,2-Trichloroéthane
1,1-Dichloroéthane
1,1-Dichloroéthylène
1,1-Diméthylhydrazine
1,2,3,4,10,10-Hexachloro-1,4,4a,5,8,8a-hexahydro-1,4:5,8-endo-endo-diméthanonaphtalène
1,2,3-Trichloropropane
1,2,4,5-Tétrachlorobenzène
1,2,4-Trichlorobenzène
1,2-Dibromo-3-chloropropane
1,2-Dibromométhane
1,2-Dichloroéthane
1,2-Dichloropropane
1,2-Diéthylhydrazine
1,2-Diméthylhydrazine

1,2-Diphénylhydrazine  
 1,2-Propanediol  
 1,3-Dichloropropène  
 1,4-Dioxane  
 1,4-Naphthoquinone  
 1-(O-Chlorophényl)thiourée  
 1-(p-Chlorobenzoyl)-5-méthoxy-2-méthylindole-3-acide acétique  
 1-Chloro-2,3-époxybutane  
 1-Naphthylamine  
 1-Naphtyl-2-thiourée  
 2,3,4,6-Tétrachlorophénol  
 2,3,7,8-Tétrachlorodibenzo p-dioxyne (TCDD)  
 2,4,5-Trichlorophénol  
 2,4,5-Trichlorophénoxy acide acétique (2,4,5-T)  
 2,4,5-Trichlorophénoxy acide propionique (2,4,5-TP)  
 2,4,6-Trichlorophénol  
 2,4-Dichlorophénol  
 2,4-Dichlorophénoxy acide acétique (2,4-D)  
 2,4-Diméthylphénol  
 2,4-Dinitrophénol  
 2,4-Dinitrotoluène  
 2,6-Dichlorophénol  
 2,6-Dinitrotoluene Di-n-octyl phtalate  
 2-Acetylaminofluorene  
 2-Chloroéthyl vinyl éther  
 2-Chloronaphtalene  
 2-Chlorophénol  
 2-Cyclohexyl-4,6-dinitrophénol  
 2-Fluoroacétamide  
 2-Méthyl-2-(méthylthio)propionaldéhyde-O-(méthylcarbonyl)oxyme  
 2-Méthylaziridine  
 2-Méthyllactonitrile  
 2-Naphthylamine  
 2-Propyne-1-ol  
 2-sec-Butyl-4,6-dinitrophenol (DNBP)  
 3,3'-Dichlorobenzidine  
 3,3'-Diméthoxybenzidine  
 3,3'-Diméthylbenzidine  
 3,3-Diméthyl-1-(méthylthio)-2-butanone-O-((méthylamino)carbonyl)oxyme  
 3,4-Dihydroxy-alpha-(méthylamino)-méthylbenzyl alcool  
 3-(alpha-Acetylbenzyl)-4- hydroxydecoumarin et sels  
 3-Chloropropionitrile  
 3-Méthylcholanthène  
 4,4'-Méthylène-bis-(2-chloroaniline)  
 4,6-Dinitro-O-crésol et sels  
 4-Aminobiphenyl  
 4-Aminopyridine  
 4-Bromophenyl phénylether  
 4-Nitrophénol  
 4-Nitroquinoline-1-oxyde  
 5-(Aminométhyl)-3-isoxazolol  
 5-Nitro-O-toluidine  
 6-Amino-1,1a,2,8,8a,8b-hexahydro-8-(hydroxyméthyl)-8a-méthoxy-5-méthylcarbamate  
 azirino(2',3':3,4)pyrrolo(1,2-a)indole-4,7-dione (ester) (Mitomycine C)  
 7,12-Diméthylbenz(a)anthracene  
 7-Oxabicyclo(2.2.1)heptane-2,3-acide dicarboxylique  
 7H-Dibenzo(c,g)carbazole)  
 Acétaldéhyde

Acétate de phénylmercure  
 Acétate de plomb  
 Acétate de Thallium (I)  
 Acetonitrile  
 Acide arsenique  
 Acide Benzenearsonique  
 Acide cyanhydrique  
 Acide fluoroacétique, sel de sodium  
 Acide phosphorothioïque, O,O-diméthyl ester, O-ester avec le N,N-diméthyl benzene sulfamide  
 Acide sélénique  
 Acide vanadique, sel d'ammonium  
 Acroleine  
 Acrylamide  
 Acrylonitrile  
 Alcool Allylique  
 Alcool oléique condensé avec 2 moles d'oxyde d'éthylène  
 alpha,alpha-Diméthylphénéthylamine  
 Anhydride maléique  
 Anhydride phtalique  
 Antimoine et composés, N.S.A  
 Argent et composés, N.S.A  
 Arsenic et composés, N.S.A  
 Azote moutarde et son chlorhydrate  
 Baryum et composés, N.S.A  
 Benz(a)anthracene  
 Benz(c)acridine  
 Benzene  
 Benzenes chlorés, N.S.A  
 Benzenethiol  
 Benzidine  
 Benzo(a)anthracene  
 Benzo(a)pyrene  
 Benzo(b)Fluoranthene  
 Beryllium et composés N.S.A  
 Biphényl polychloré, N.S.A  
 Bis(2-chloroethoxy)methane  
 Bis(2-chloroethyl)ether  
 Bis(2-chloroisopropyl)ether  
 Bis(2-ethylhexyl)phtalate  
 Bromoacétone  
 Bromométhane  
 Bromure de cyanogene  
 Butyl benzyl phtalate  
 Cadmium et composés, N.S.A  
 Carbonate de Thallium (I)  
 Chloroacétaldéhyde  
 Chlorométhane  
 Chlorométhyl méthyl éther  
 Chlorotoluene, N.S.A  
 Chlorure d'acétyle  
 Chlorure de Benzyle  
 Chlorure de Thallium (I)  
 Chlorure de vinyle  
 Chlorure de Vinylidine  
 Choroalkyl éthers  
 Chorobenzene  
 Chorobenzilate

Choroforme  
Chorure de Diméthylcarbamoyl  
Chromate de calcium  
Chrome et composés, N.S.A  
Chrysene  
Crotonaldéhyde  
Cyanogene  
Cyanure d'Argent  
Cyanure d'éthyle  
Cyanure de Baryum  
Cyanure de calcium  
Cyanure de cuivre  
Cyanure de Nickel  
Cyanure de Potassium  
Cyanure de Sodium  
Cyanure de Zinc  
Cyanures ( sels solubles et complexes), N.S.A  
Cyclophosphamide  
Di-isopropylfluorophosphate (DFP)  
Di-n-butyl phtalate  
Di-n-propylnitrosamine  
Dibenz(a,h)acridine  
Dibenz(a,h)anthracene(Dibenzo(a,h)anthracene)  
Dibenz(a,j)acridine  
Dibenzo(a,e)pyrene  
Dibenzo(a,h)pyrene  
Dibenzo(a,i)pyrene  
Dibromométhane  
Dichlorobenzene, N.S.A  
Dichloroéthylène, N.S.A  
Dichlorométhane  
Dichlorophénylarsine  
Dichloropropane  
Dichloropropanol, N.S.A  
Dichloropropène  
Diépoxybutane  
Diéthyl phtalate  
Diéthylarsine  
Diméthyl phtalate  
Diméthyl sulfate  
Diméthylnitrosoamine  
Dinitrobenzene, N.S.A  
Dioxyde d'azote  
Disulfure de carbone  
Epichlorohydrine  
Esters d'acide phtalique, N.S.A  
Ethane chloré, N.S.A  
Ethyl méthanesulfonate  
Ethylene diamine  
Ethylène thiourée  
Ethylenebisdithiocarbamate (EBDC)  
Ethyleneimine  
Fluor  
Fluoranthene  
Formaldéhyde  
Gaz moutarde  
Glycidylaldéhyde  
Halométhane, N.S.A

Heptachloropropane  
 Hexachlorobenzene  
 Hexachlorobutadiène  
 Hexachlorocyclohexane (tous isomères)  
 Hexachlorocyclopentadiène  
 Hexachloroéthane  
 Hexachlorophène  
 Hexachloropropène  
 Hexaéthyl tétraphosphate  
 Hydrazine  
 Indéno(1,2,3-c,d)pyrène  
 Iodométhane  
 Isocyanate de méthyle  
 Lasiocarpine  
 Malononitrile  
 Mercure et composés, N.S.A  
 Méthacrylate de méthyle  
 Méthanesulfonate de méthyle  
 Méthapyrilène  
 Méthyl éthyl cétone  
 Méthyl hydrazine  
 N,N-Bis(2-chloroethyl)-2-naphthylamine  
 N-Nitroso-N-éthylurée  
 N-Nitroso-N-méthylurée  
 N-Nitroso-N-méthyluréthane  
 N-Nitrosodi-N-butylamine  
 N-Nitrosodi-N-propylamine  
 N-Nitrosodiéthanolamine  
 N-Nitrosodiéthylamine  
 N-Nitrosodiméthylamine  
 N-Nitrosodiméthylvinylamine  
 N-Nitrosodiphénylamine  
 N-Nitrosométhyléthylamine  
 N-Nitrosomorpholine  
 N-Nitrosornicotine  
 N-Nitrosopipéridine  
 N-Nitrosopyrrolidine  
 N-Nitrososarcosine  
 N-oxyde d'azote moutarde et son chlorhydrate  
 N-Phénylthiourée  
 Naphtalène  
 Naphtalène chloré, N.S.A  
 Nickel carbonyl  
 Nickel et composés N.S.A  
 Nicotine et sels  
 Nitrate de Thallium  
 Nitrobenzene  
 Nitroglycérine  
 Nitrosamine, N.S.A  
 O,O,O-Triéthyl phosphorothioate  
 O,O-acide diéthylphosphorique, O-p-nitrophényl ester  
 O,O-Diéthyl-O-(2-pyrazinyl)phosphorothioate  
 O,O-Diéthyl-S-(2-éth ylthio)éthyl ester d'acide phosphorothioïque  
 O,O-Diéthyl-S-méthylester acide phosphorothioïque  
 Octaméthylpyrophosphoramide  
 Oxyde d'éthylene  
 Oxyde nitrique  
 Oxyde thallique

p-Choro-m-crésol  
p-Choroaniline  
p-Diméthylaminoazobenzene  
p-Nitroaniline  
Pentachlorobenzene  
Pentachloroéthane  
Pentachloronitrobenzene (PCNB)  
Pentachlorophénol  
Pentoxyde d'Arsenic  
Pentoxyde de Vanadium (poussières)  
Peroxyde d'azote  
Peroxyde de 2-Butanone  
Phénol  
Phénol chloré, N.S.A  
Phényl dichloroarsine  
Phosgène  
Phosphate de plomb  
Phosphore  
Phosphorure de Zinc  
Plomb et composés, N.S.A  
Plomb Tétraéthyl  
Propionamide  
Propionitrile  
Pyridine  
Saccharine  
Sélénium et composés, N.S.A  
Sélénourée  
Sélénure de Thallium  
Strychnine et composés, N.S.A  
Subacétate de plomb  
Sulfate de Thallium  
Sulfure d'hydrogène  
Sulfure de sélénium  
Sulfure de Strontium  
Tétrachloroéthane, N.S.A  
Tétrachloroéthylène  
Tétrachlorométhane  
Tétraéthylidithiopyrophosphate  
Tétraéthylpyrophosphate  
Tétroxyde d'azote  
Thallium et composés, N.S.A  
Thioacétamide  
Thiourée  
Toluene  
Toluene diamine  
Toluène disocyanate  
Toxaphene  
trans-1,2-Dichloroéthane  
Tribromométhane  
Trichloroéthylène  
Trichlorométhanethiol  
Trichloropropane, N.S.A  
Trichlorure de Benzene  
Trioxyde d'Arsenic  
Uréthane

*Constituants de base pour les déchets dangereux (EPA)*

## **ANNEXE 2**

### **COMPATIBILITE DES DECHETS STOCKAGE/MELANGE**

---

#### **1- LE STOCKAGE DES DECHETS**

1-1- Les déchets liquides

1-2- Les déchets solides

#### **2- PROBLEMES POSES PAR LE STOCKAGE/MELANGE DES DECHETS**

2-1- Toxicité et instabilité des déchets seuls

2-2- Incompatibilité des déchets/mélanges

#### **3- LE CRITERE D'EXPLOSIVITE**

#### **4- COMPATIBILITE DES DECHETS**

4-1- Les groupes de réactivité

4-2- Combinaison entre groupes de réactivité

Le stockage avant traitement ou mélange des déchets s'effectuera dans des conditions de sécurité similaires au stockage des produits chimiques. On pourra donc utilement se reporter aux normes en vigueur concernant la manutention/stockage de produits chimiques usuels.

Les conditions de manutention et de stockage des déchets sont déterminées par leur état physique : certains déchets sont pelletables, stockés en vrac, d'autres pulvérulents, susceptibles d'être mis en suspension dans un fluide de transport ou encore liquides stockés en bacs fermés ou en fûts.

Les réservoirs de stockage devront résister aux attaques chimiques ou mécaniques que les déchets pourraient provoquer ainsi qu'aux effets extérieurs.

## 1- STOCKAGE DES DECHETS

### 1-1- Les déchets liquides

La configuration d'un réservoir dépend de deux impératifs essentiels qui sont : d'une part, la conservation en produit en limitant ou en interdisant les évaporations et, d'autre part, la tenue de la structure à la pression interne développée par le produit ou maintenue à un certain niveau pour faciliter l'exploitation.

La géométrie des réservoirs étant déterminée (par la volatilité du produit stocké) différents mode de stockage peuvent être envisagés. On peut les classer en fonction de leur pression et de leur température de fonctionnement. Les possibilités de stockage se présentent de la façon suivante :

- pour les liquides très volatils qui n'entrent pas en ébullition à température ambiante : le stockage s'effectue sous pression atmosphérique ou sensiblement atmosphérique à température ambiante ;

- pour les liquides volatils qui entrent en ébullition à des températures inférieures ou égales à la température ambiante, trois modes de stockage peuvent être envisagés :

- \* stockage sous pleine pression ;
- \* stockage semi-réfrigéré ;
- \* stockage réfrigéré ou cryogénique

Suivant le liquide à stocker, les réservoirs comporteront des équipements supplémentaires :

- des parafoudres ;
- des dispositifs d'arrêt du feu ;
- des dispositifs pour récupérer et condenser les vapeurs ;
- des systèmes de conservation de la chaleur pour les conteneurs contenant des liquides dont les vapeurs ont tendance à cristalliser ;
- des vannes de sécurité .



## 1-2- Les déchets solides

Les déchets solides en vrac peuvent être stockés de trois façons :

- dans des silos ;
- dans des cuves en béton ou des magasins en béton ;
- dans des stocks de réserve.

En général, les déchets dangereux solides présentant un caractère toxique pour le personnel sont stockés dans des silos complètement fermés, les protégeant de tout élément extérieur susceptible d'être explosif, inflammable ou corrosif.

Un inertage par un gaz inerte est parfois nécessaire pour les solides puvérulents susceptibles de dégager de la matière volatile.

## 2- PROBLEMES POSES PAR LE STOCKAGE DES DECHETS :

On peut diviser les risques spécifiques entraînés par les produits chimiques en plusieurs catégories :

- ceux liés au potentiel de danger des déchets eux-mêmes (toxicité, explosivité des produits...);
- ceux survenant au cours d'opération de transport ou de transfert ;
- ceux causés par le mélange de substances incompatibles à partir de réactions chimiques entre déchets ou entre les déchets et leur contenant.

### 2-1-Toxicité et instabilité des déchets seuls

Les déchets sont constitués d'une multitude de produits chimiques qui pris séparément présentent un danger du fait de leur toxicité et de leur instabilité. De nombreuses substances sont :

- toxiques par inhalation : phosgène, chlorure d'hydrogène, sulfure de carbone...
- irritantes pour les yeux : phosgène, sulfure de carbone...
- irritantes pour la peau : chlorure d'hydrogène, sulfure de carbone...
- irritantes pour les voies respiratoires : chlorures d'hydrogène, phosgène...
- certaines sont aussi cancérigènes : benzène, chloroforme, chlorure de vinyle, dioxane...

D'autres produits sont dangereux car capables d'exploser par décomposition en présence d'une source de chaleur, on peut citer :

- les nitrates de cellulose ou nitrocellulose ; entrant dans la composition des matières plastiques ;

- les peroxydes organiques : ils se décomposent plus ou moins violemment sous l'effet d'un choc ou d'un frottement, en présence d'un feu ou d'une source de chaleur ;
- l'acétylure mercurique qui détone sous l'effet d'un choc ou d'une flamme.

Enfin, certaines substances, ayant un point éclair bas, peuvent s'enflammer au contact d'une étincelle. Par exemple :

Produit	Point éclair
Benzène	- 11°C
Propanol	- 30°C
Propylamine	- 37°C

Cela implique des précautions de manipulation des déchets contenant ces produits. Par exemple, lors de la vidange d'un camion citerne, on prendra soin de brancher le camion-citerne et tout l'appareillage à la masse pour éviter toute électricité statique pouvant provoquer des étincelles et donc des accidents.

## 2-2- Incompatibilité des déchets/mélanges

La majorité des déchets sont des mélanges complexes et, en pratique, il est souvent techniquement très difficile d'en déterminer la composition précise et les caractéristiques. Lors du stockage ou du transport des déchets, il y a risque de mélanger des déchets incompatibles entre eux, et donc de provoquer des réactions ayant des conséquences plus ou moins graves.

Les réservoirs recevant les déchets devront donc résister aux attaques chimiques ou mécaniques que les déchets pourraient provoquer.

On peut distinguer deux types de réactions (contenu-contenu et contenu-contenant) ayant plus ou moins les mêmes effets :

- génération de chaleur par réactions chimiques ;
- production de gaz inflammable ;
- production de gaz pouvant causer une montée en pression ;
- production de gaz toxiques ;
- ignition des mélanges ou produits de réaction ;
- explosions dues à des réactions très vigoureuses ;
- solubilisation de substances toxiques contenant des métaux ;
- polymérisation violente

### 2-2-1 - Génération de chaleur par réaction chimique :

Un grand nombre de réactions s'accompagnent d'un dégagement de chaleur :

- *Déshydratation* : elle met en jeu une fonction alcool dans des conditions acides ;  
ex : alcools ou glycols avec acides minéraux ou organiques

- *Condensation* : présence de deux fonctions carbonyles en milieu théoriquement basique pour former l'énolate.  
ex : aldéhydes avec acides minéraux, organiques ou avec des amines ; cétones avec soude.
- *Hydrolyse* : des liaisons O - C - OH, O = C -O, O = C -N, C = N ou C = O.  
Ex : amides avec acides minéraux ;  
carbammates avec acides minéraux ;  
alcalins ou alcalino-terreux avec alcools ou glycols ;  
esters avec soude
- *Polymérisation* : des aldéhydes, époxydes, isocyanates, nitriles,...  
polymérisations anioniques, initiation en milieu basique ;  
polymérisations cationiques : initiation en milieu acide ou acide de Lewis ;  
ex : aldéhydes avec acides minéraux ;  
isocyanates avec alcools, glycols ou amines ;  
époxydes avec mercaptans
- *Réactions acide-base* :  
ex : amines avec acides ;
- *Décarboxylation* : des acides carboxyliques  
des carbammates,  
des isocyanates ;  
ex : carbammates ou isocyanates avec acides minéraux
- *Oxydation* : des alcools, des composés aromatiques, des aldéhydes et cétones  
ex : acides minéraux avec : aldéhydes, amides, amines et esters ;  
alcools ou glycols avec peroxydes organiques.

#### 2-2-2- Production de gaz inflammable

Pour évaluer le risque d'inflammabilité des gaz produits lors de la réaction, on considère leur point éclair, leur température d'inflammation et leurs limites d'inflammabilité

Le *point éclair* est la température minimale à laquelle il faut porter le liquide pour que les vapeurs émises s'enflamment en présence d'une flamme dans des conditions normalisées (dans l'air). On donne quelques exemples dans le tableau suivant.

La *température d'auto-inflammation* d'un gaz ou d'une vapeur est la température minimale à laquelle un mélange en proportion convenable s'enflamme spontanément (voir tableau suivant). Pratiquement, cette température est communiquée par les parois du récipient. Celle-ci est le plus souvent comprise entre 250°C et 650°C bien qu'elle soit plus faible pour quelques corps (ex : disulfure de carbone : 90°C).

Produit	Température d'auto-inflammation (°C)	Point d'éclair (°C)
Acétone	561	-28
Alcool allylique	378	21
Aldéhyde benzoïque	192	64
Benzène	580	-11
Crésol	626	86
Dioxane	266	12
Naphtalène	559	80
Sulfure de carbone	120	-30
Toluène	552	4

Les mélanges d'un gaz combustible, non explosif lui-même, avec l'air ou avec un autre gaz comburant ne sont susceptibles d'être enflammés que s'ils renferment une quantité suffisante de gaz combustible et une quantité suffisante d'oxygène. Lorsque, partant d'un mélange à faible teneur en gaz combustible, on augmente cette teneur, un moment arrive où si l'on enflamme le mélange en un de ses points, la flamme se propage de proche en proche à tout l'ensemble. Un tel mélange est dit à la *limite inférieure d'inflammabilité*. Il existe de même une *limite supérieure* correspondant au mélange le plus riche en gaz combustible encore capable de propager la flamme.

#### 2-2-3 - Production de gaz pouvant causer une montée en pression

Une réaction chimique peut se traduire par un dégagement important de gaz, conduisant à une augmentation de la pression dans l'enceinte qui peut aller jusqu'à la rupture de l'enceinte : on appelle ceci une explosion mécanique. Les gaz susceptibles d'être produits et d'entraîner une pressurisation sont :



#### 2-2-4 - Production de gaz toxiques

Dans "A method for determining the compatibility of hazardous wastes", la liste des principaux gaz rencontrés est dressée :

- HCN
- H<sub>2</sub>S
- gaz halogénés
- CS<sub>2</sub>
- oxydes d'azote
- SO<sub>2</sub>
- NH<sub>3</sub>
- C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>
- phosphine
- phosgène

Les effets possibles sont l'irritation, l'asphyxie ou des effets cancérogènes. Les substances chimiques dangereuses sont classées par degré d'agressivité, suivant leur corrosivité, leur valeur limite d'exposition,...

### 2-2-5 - Ignition des mélanges ou produits de réaction

Dans le cas de réactions fortement exothermiques, une inflammation des produits de réaction, ou des réactifs eux-mêmes, peut se produire. Par exemple, dans un mélange d'hydrocarbures aromatiques avec des acides minéraux oxydants, la chaleur dégagée par la réaction d'oxydation des hydrocarbures provoque l'ignition du mélange.

### 2-2-6 - Explosions dues à des réactions très vigoureuses

L'explosion thermique est basée sur la compétition entre la chaleur dégagée par le système réactionnel et la chaleur dissipée par conduction, convection et radiation de la masse réactionnelle vers l'extérieur. La tendance du système réactionnel à s'accroître au-dessus de la température ambiante du fait de l'auto-échauffement, est opposée à la fois au transfert thermique vers l'extérieur et à la chaleur de réaction.

Si le taux de chaleur évacuée dépasse ou égale celui de la chaleur formée par le ou les réactifs, l'élévation de température sera stoppée et un système stationnaire en résultera dû dans la plupart des cas à la limitation de la consommation des réactifs.

Dans l'autre cas, l'accélération de la réaction chimique se produit simultanément à l'élévation exponentielle de la température qui conduira à l'ignition.

Pour évaluer les risques d'explosion, on doit non seulement considérer l'aspect cinétique de la réaction chimique mais aussi son aspect thermodynamique. En effet, un composé explosif se caractérise par une chaleur de formation très basse et donc par une chaleur de décomposition très élevée, due à la présence de groupes explosophores.

Ce sont des liaisons atomiques de nature déterminée qui engendrent le caractère explosif dans un groupement explosophore :

O - O	N = N	C = C
H - Sb	H - As	O - N
N - Cl	N - S	N - Se
C - S	C - N	C - Ag

Voici donc la liste des principaux groupes explosophores correspondant aux liaisons ci-dessus :

- NO	: nitroso	- NO <sub>2</sub>	: nitro
- C =-N	: cyano	- N =-C	: isocyano
- N = N-	: azo	- N ≡ N	: diazo
- C ≡ CH	: ethynyle	- IO <sub>2</sub>	iodyle
- O - OH	: hydroperoxy	- O - O -	peroxy
- N <sub>3</sub>	azido	- NH - OH	hydroxylamine
- ClO <sub>2</sub>	chloryle	- ClO <sub>3</sub>	perchloryle
- IO	iodoxyle		
- CH = CH <sub>2</sub>	vinyle		

La connaissance des explosophores est utile en ce qu'elle attire l'attention sur des groupements souvent très réactifs, dont la présence dans une molécule peut abaisser la chaleur de formation suffisamment pour que le corps soit éventuellement explosif.

Cependant, il ne suffit pas que figure dans la formule chimique un groupe explosophore pour qu'on ait un composé explosif ; le caractère explosif dépend de la molécule tout entière et non simplement d'un de ses groupements.

En résumé, des risques d'explosions se présentent lorsque :

- il y a présence de substances instables ;
- il y a présence de substances comportant un groupe explosophore ;
- on réalise des réactions exothermiques par exemple, polymérisations, oxydations, nitrations, peroxydations, hydrogénations ou des réactions mettant en jeu des organo- métalliques.
- on réalise des réactions à haute pression (pressurisation)

Ex : Peroxydes avec composés azotés ;  
agents oxydants avec agents réducteurs ;  
Alcalins avec azotures.

#### 2-2-7 - Solubilisation de substances toxiques contenant des métaux

En mélangeant des déchets, il peut arriver que des métaux toxiques se solubilisent dans des solvants (soit par réaction acide-base, soit par complexation):

- dans les acides minéraux non oxydants ou forts oxydants ;
- dans les acides organiques forts ;
- dans l'eau (solubilité augmentée en présence d'amines) ;
- dans les nitriles ;
- dans les amides
- dans la soude pour les composés suivants :  $PbCO_3$ ,  $PbCrO_4$ ,  $Cd(CN)_2$ ,  $As_2O_3$ ,  $AsF_5$ ,  $AgCRO_4$ ,  $ZnCO_3$ ,  $Zn(CN)_2$ .

#### 2-2-8 - Polymérisation violente

La présence dans les déchets : d'acides, de bases, de peroxydes, utilisés en tant que catalyseurs ou initiateurs dans les réactions de polymérisation, permet la polymérisation des monomères classiques et des composés éventuellement présents tels que :

- les composés insaturés ;
- les isocyanates ;
- les acides-alcools.

Les trois types de polymérisation anionique, cationique et radicalaire peuvent donc être initiés et catalysés grâce à des substances présentes dans le milieu.

### 3- LE CRITERE D'EXPLOSIVITE :

#### LE CRITERE CHETAH

On calcule pour chaque composé quatre sous critères :

- $C_1 = \Delta H_d$  : enthalpie de décomposition ou enthalpie maximale de réaction  
 $C_2 = \Delta H_c - \Delta H_d$  : différence entre l'enthalpie de combustion et l'enthalpie de décomposition  
 $C_3 = (z - 2x - y/2) \frac{1600}{M}$  : la balance en oxygène  
 x, y et z étant les variables formulaires d'un composé  $C_xH_yO_z$  et M la masse molaire  
 $C_4 = 10 \Delta H_d^2 \frac{M}{n}$  : où M est la masse molaire  
 n le nombre d'atomes

On évalue le risque par application des quatre critères simultanément

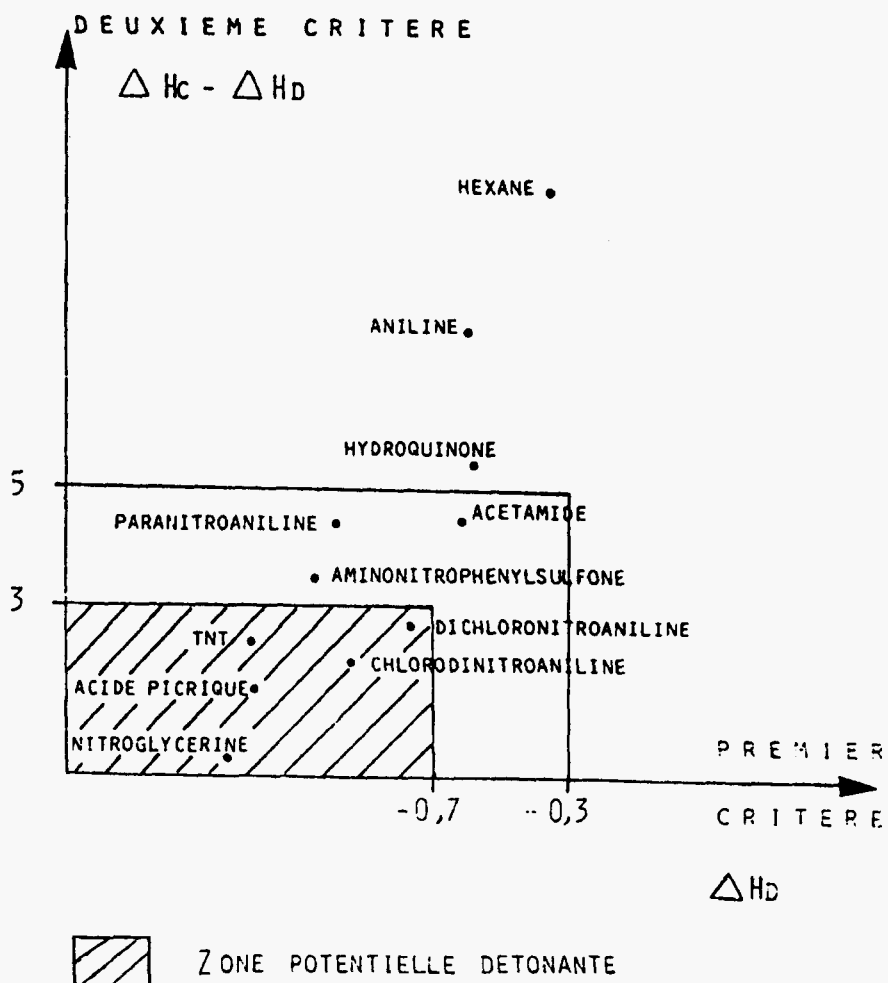
	$C_1 < -0,7$	et		$C_2 > -3$	: risque élevé
				$-5 < C_2 < -3$	: risque moyen
				$C_2 < -5$	: risque faible
	$-0,7 < C_1 < -0,3$	et		$C_2 > -5$	: risque moyen
				$C_2 < -5$	: risque faible
	$C_1 > -0,3$	et		$C_2 < 0$	: risque faible
	$C_3 < -240$				: risque faible
	$-240 < C_3 < -120$				: risque moyen
	$+80 < C_3 < +100$				
	$-120 < C_3 < +80$				: risque élevé
	$C_4 > 110$				: risque élevé
	$30 < C_3 < 110$				: risque moyen
	$C_3 < +30$				: risque faible

Remarque

Critère unique  $K = \left[ \sum_0^i (0,5 C_i + 50)^2 \right]^{1/2} - 100$   
 $- 100 < K < + 100$

$K < 0$  : risque faible  
 $K > 0$  : risque élevé

Benzène	- 12
Trichloroéthylène	+ 8
Chlorure de vinyle	+ 23





#### 4- COMPATIBILITE DES DECHETS (STOCKAGE/MELANGE)

##### Hypothèses de classification (EPA)

- les interactions entre déchets sont dues à des réactions entre substances chimiques pures

- les produits réagissent à température et à pression ambiantes et leur réactivité n'est pas influencée par leur concentration (ni par des effets synergiques)

- on se limite aux combinaisons binaires

- on affecte les déchets dans l'un des 41 groupes de réactivité préselectionnés

##### Critères de compatibilité :

- génération de chaleur	H
- inflammation	F
- génération de gaz/pressurisation	G
- génération de gaz toxique	GT
- génération de gaz inflammable	GF
- explosion	E
- polymérisation violente	P
- solubilisation de métaux toxiques	S
- composés inconnus présumés dangereux	L

#### 4-1- Groupes de réactivité

- 1 Acides minéraux non oxydants
- 2 Acides minéraux oxydants
- 3 Acides organiques
- 4 Alcools et glycols
- 5 Aldéhydes
- 6 Amides
- 7 Amines
- 8 Composés « azo », « diazo » et hydrazines
- 9 Carbamates
- 10 Bases fortes
- 11 Cyanures
- 12 Dithiocarbamates
- 13 Esters
- 14 Ethers
- 15 Fluorures minéraux
- 16 Hydrocarbures aromatiques
- 17 Dérivés halogénés organiques
- 18 Isocyanates
- 19 Cétones
- 20 Mercaptans et autres composés soufrés organiques
- 21 Métaux alcalins et alcalino-terreux, purs ou en alliage
- 22 Métaux divers (poudres et de grande surface spécifique)
- 23 Métaux et alliages (feuilles, baguettes, grenaille, ...)
- 24 Métaux et sels toxiques
- 25 Nitrures
- 26 Nitriles
- 27 Composés nitrés
- 28 Hydrocarbures aliphatiques insaturés
- 29 Hydrocarbures aliphatiques saturés
- 30 Peracides, peroxydes et hydroperoxydes organiques
- 31 Phénols
- 32 Composés organophosphorés et organothiophosphorés
- 33 Sulfures minéraux
- 34 Epoxydes
- 101 Composés inflammables et combustibles
- 102 Explosifs
- 103 Composés polymérisables
- 104 Agents oxydants
- 105 Agents réducteurs
- 106 Solutions aqueuses
- 107 Substances réagissantes avec l'eau



**Groupe 1 - Acides minéraux, non oxydants**

Acide borique  
Acide chlorosulfonique  
Acide difluorophosphorique  
Acide pyrosulfurique  
Acide fluoroborique  
Acide fluorosulfonique  
Acide fluorosilicique  
Acide hexafluorophosphorique  
Acide Iodhydrique  
Acide bromhydrique  
Acide Chlorhydrique  
Acide cyanhydrique  
Acide fluorhydrique  
Acide monofluorophosphorique  
Acide persulfurique  
Acide phosphorique  
Acide selenieux

**Groupe 2 - Acides minéraux, oxydants**

Acide bromique  
Acide chlorique  
Acide chromique  
Acide hypochloreux  
Acide nitrique  
Acide nitrochlorhydrique  
Oleum  
Acide perbromique  
Acide perchlorique  
Acide perchloreux  
Acide periodique  
Acide sulfurique

**Groupe 3 - Acides organiques**

Acide acétique  
Acide acrylique  
Acide adipique  
Acide benzoïque  
Acide butyrique  
Acide caprique  
Acide caproïque  
Acide caprylique  
Acide chlorométhylphénoxyacétique  
Acide cyanoacétique  
Acide dichlorophénoxyacétique

Endothal  
Acide fluoroacétique  
Acide formique  
Acide fumarique  
Acide glycolique  
Acide hydroxydibromobenzoïque  
Acide maléique  
Acide monochloracétique  
Acide oxalique  
Acide peracétique  
Acide phénylacétique  
Acide phtalique  
Acide propionique  
Acide succinique  
Acide trichlorophénoxyacétique  
Acide trinitrobenzoïque  
Acide toluïque  
Acide valérique

**Groupe 4 - Alcools et glycols**

Cyanhydrine de l'acétone  
Alcool allylique  
Aminoéthanol  
Alcool amylique  
Alcool benzylique  
Butanediol  
Alcool butylique  
Butyl cellosolve  
Chloroéthanol  
Alcool crotylique  
Cyclohexanol  
Cyclopentanol  
Décanol  
Diacétone alcool  
Dichloropropanol  
Diéthanolamine  
Diisopropanolamine  
Ethanol  
Ethoxyéthanol  
Cyanhydrine du glycol  
Ethylène glycol  
Ethylène glycol monométhyléther  
Alcool furfurylique  
Glycérine  
Heptanol  
Hexanol  
Alcool isobutylique  
Alcool isopropylique  
Mercaptoéthanol

Méthanol  
Monoisopropanolamine  
Nonanol  
Octanol  
Propanol  
Propylène glycol  
Propylène glycol monométhyléther  
Triéthanolamine

Groupe 5 - Aldéhydes

Acétaldéhyde  
Acroleïne  
Benzaldéhyde  
Butyraldéhyde  
Hydrate du chloral  
Chloroacétaldéhyde  
Crotonaldéhyde  
Formaldéhyde  
Furfural  
Glutaraldéhyde  
Heptanal  
Hexanal  
Nonanal  
Octanal  
Propionaldéhyde  
Tolualdéhyde  
Urée-Formaldéhyde  
Valéraldéhyde

Groupe 6 - Amides

Acétamide  
Benzadox  
Bromobenzoylacétanilide  
Butyramide  
Carbétamide  
Diéthyltoluamide  
Diméthylformamide  
Dimefox  
Diphénamide  
Fluoroacétanilide  
Formamide  
Propionamide  
Schradan  
Tri-(1-aziridiny) oxyde de phosphine  
Wepsyn 155  
Valéramide

Groupe 7 - Amines aliphatiques et aromatiques

Aminoéthanol  
Aminophénol  
Aminopropionitrile  
Amylamine  
Aminothiazole  
Aniline  
Benzidine  
Benzylamine  
Butylamine  
Chlorotoluidine  
Crimidine  
Cupriéthylènediamine  
Cyclohexylamine  
Dichlorobenzidine  
Diéthanolamine  
Diéthylamine  
N,N Diéthylaniline  
Diéthylènetriamine  
Diisopropanolamine  
Diméthylamine  
Diméthylaminoazobenzène  
Diphénylamine  
Diphénylamine chloroarsine  
Dipicrylamine  
Dipropylamine  
Ethylamine  
Ethylènediamine  
Ethylèneimine  
Hexaméthylènediamine  
Hexaméthylènetétramine  
Hexylamine  
Isopropylamine  
Méthylamine  
N-Méthylaniline  
4,4-Méthylène bis(2-chloroaniline)  
Méthyléthypyridine  
Monoisopropanolamine  
Morpholine  
Naphtylamine  
Nitroaniline  
Mechloréthamine  
Nitrosodiméthylamine  
Pentylamine  
Phénylènediamine  
Picramide  
Picridine  
Pipéridine

Propylamine  
Propylèneimine  
Pyridine  
Tétraméthylènediamine  
Toluidine  
Triéthanolamine  
Triéthylamine  
Triéthylènetétramine  
Triméthylamine  
Tripropylamine

**Groupe 8 - Composés «Azo»,  
«Diazo» et Hydrazines**

Tétraazidoborate d'aluminium  
Aminothiazole  
Azidocarbonylguanidine  
Azido-s-triazole  
Azo bis isobutyronitrile  
Chlorure de benzènediazonium  
Benzotriazole  
Azidoformate de t-butyle  
Chloroazodine  
Chlorobenzotriazole  
Diazodinitrophénol  
Diazidoéthane  
Diméthylaminoazobenzène  
Diméthylhydrazine  
Dinitrophénylhydrazine  
Guanyl nitrosoaminoguanilydine  
hydrazine  
Hydrazine  
Aoture d'hydrazinium  
Méthyhydrazine  
Mercaptobenzothiazole  
Chlorhydrate de phénylhydrazinium  
Tétrazène

**Groupe 9 - Carbamates**

Aldicarb  
Bassa  
Baygon  
Butacarb  
Bux  
Carbaryl  
Carbanolate  
Dioxacarb  
Dowco 139  
Chlorhydrate du forméтанate

Furadan  
Hopcide  
N-Isopropylméthylcarbamate  
Landrin  
Metacim  
Meobal  
Mesurol  
Methomyl  
Mipcin  
Mobam  
Oxamyl  
Pirimicarb  
Promecarb  
Tranid  
Tsumacid

**Groupe 10 - Bases minérales**

Ammoniac  
Ammoniaque  
Baryte  
Oxyde de baryum  
Hydroxyde de beryllium  
Amidure de cadmium  
Hydroxyde de calcium  
Oxyde de calcium  
Amidure de lithium  
Hydroxyde de lithium  
Aluminate de potassium  
Butylate de potassium  
Potasse  
Aluminate de sodium  
Amidure de sodium  
Carbonate de sodium  
Soude  
Hypochlorite de sodium  
Méthylate de sodium  
Oxyde de sodium

**Groupe 11 - Cyanures**

Cyanure de cadmium  
Cyanure de cuivre  
Bromure de cyanogène  
Acide cyanhydrique  
Cyanure de plomb  
Cyanure de mercure  
Cyanate de mercure  
Cyanure de Nickel  
Cyanure de potassium

Cyanure d'argent  
Cyanure de sodium  
Cyanure de zinc

**Groupe 12 - Dithiocarbamates**

CDEC  
Dithane M-45  
Ferbam  
Maneb  
Metham  
Nabam  
Niacide  
Polyram-combi  
Dithiocarbamate d'éthyle et de sélénium  
Thiram  
Diméthylthiocarbamate de zinc  
Zineb  
Ziram

**Groupe 13 - Esters**

Chloroformiate d'allyle  
Acétate d'amyle  
Acétate de butyle  
Acrylate de butyle  
Phtalate de benzyle et de butyle  
Formiate de butyle  
Phtalate de butyle  
Acétate du diéthylène glycol monobutyléther  
Acétate d'éthyle  
Acrylate d'éthyle  
Butyrate d'éthyle  
Chloroformiate d'éthyle  
Formiate d'éthyle  
Acrylate d'éthyl-2-hexyle  
Propionate d'éthyle  
Diacétate du glycol  
Acétate d'isobutyle  
Acrylate d'isobutyle  
Acrylate d'isodécyle  
Acétate d'isopropyle  
Acétate de medinoterb  
Acétate de méthyle  
Acrylate de méthyle  
Acétate de méthyl-amyle  
Butyrate de méthyle

Chloroformiate de méthyle  
Formiate de méthyle  
Méthacrylate de méthyle  
Propionate de méthyle  
Valérate de méthyle  
Propiolactone  
Acétate de propyle  
Formiate de propyle  
Acétate de vinyle  
Acétylacétate d'éthyle

**Groupe 14 - Ethers**

Anisole  
Butylcellosolve  
Bromodiméthoxyaniline  
Dibutyléther  
Dichloroéthyl éther  
Diméthyléther  
Formol diméthylacétal  
Dioxane  
Diphényl oxyde  
Ethoxyéthanol  
Ethyléther  
Ethylène glycol monométhyléther  
Furane  
Isopropyléther  
Méthylbutyléther  
Méthyl chlorométhyléther  
Méthyl éthyléther  
Propyléther  
Propylène glycol monométhyléther  
TCDD  
Tétrachloropropyléther  
Tétrahydrofurane  
Trinitroanisole  
Ethyl vinyléther  
Isopropyl vinyléther

**Groupe 15 - Fluorures minéraux**

Fluorure d'aluminium  
Bifluorure d'ammonium  
Fluorure d'ammonium  
Fluorure de baryum  
Fluorure de béryllium  
Fluorure de cadmium  
Fluorure de calcium  
Fluorure de césium  
Fluorure chromique

Acide fluoroborique  
Acide fluorosilicique  
Acide hexafluorophosphorique  
Acide fluorhydrique  
Fluorure de magnésium  
Fluorure de potassium  
Fluorure de sélénium  
Tétrafluorure de silicium  
Fluorure de sodium  
Pentafluorure de soufre  
Hexafluorure de tellure  
Fluoroborate de zinc

**Groupe 16 - Hydrocarbures  
aromatiques**

Acénaphène  
Anthracène  
Benzopyrène  
Benzène  
Butyl benzène  
Chrysène  
Cumène  
Cymène  
Décyl benzène  
Diéthyl benzène  
Biphényl  
Diphényl acétylène  
Diphényl éthane  
Diphényl éthylène  
Diphényl méthane  
Dodécyl benzène  
Dowtherm  
Durène  
Ethyl benzène  
Fluoranthrène  
Fluorène  
Hémimellitène  
Hexaméthyl benzène  
Indène  
Isodurène  
Mésitylène  
Méthyl naphthalène  
Naphthalène  
Pentaméthyl benzène  
Phénanthrène  
Phénylacétylène  
Propyl benzène  
Pseudocumène  
Styrène

Tétraphényl éthylène  
Toluène  
Stilbène  
Triphényl éthylène  
Triphényl éthane  
o-Xylène  
m-Xylène  
p-Xylène

**Groupe 17 - Dérivés halogénés**

Bromure d'acétyle  
Chlorure d'acétyle  
Aldrin  
Bromure d'allyle  
Chlorure d'allyle  
Chloroformiate d'allyle  
Chlorure d'amyle  
Dibromotoluène  
Dichlorotoluène  
Tribromobenzène  
Trichlorobenzène  
Bromure de benzyle  
Chlorure de benzyle  
Chloroformiate de benzyle  
Bromoacétylène  
Bromure de trifluorobenzyle  
Bromoforme  
Bromophénol  
Bromure de propargyle  
Bromotrichlorométhane  
Bromotrifluorométhane  
Bromoxynil  
Fluorobutane  
Tétrachlorure de carbone  
Tétrafluorure de carbone  
Tétraiodure de carbone  
Hydrate de chloral  
Chlordane  
Chloroacétaldéhyde  
Acide chloroacétique  
Chloroacétophénone  
Chloroacrylonitrile  
Chloroazodine  
Chlorobenzène  
Chlorobenzotriazole  
Peroxyde de chlorobenzoyle  
Chlorobenzylidène malononitrile  
Chlorobutyronitrile  
Chlorocrésol



Chlorodinitrotoluène  
Chlorhydrine du glycol  
Chloroéthylèneimine  
**Chloroforme**  
Chlorométhyl méthyl éther  
Acide chlorométhylphénoxyacétique  
Chloronitroaniline  
Chlorophénol  
Isocyanate de chlorophényle  
Chloropicrine  
Chlorothion  
Chlorotoluidine  
CMME  
Bromure de crotyle  
Chlorure de crotyle  
DDD  
DDT  
DDVP  
Dibromochloropropane  
Dichloroacétone  
Dichlorobenzène  
Dichlorobenzidine  
Dichloroéthane  
Dichloroéthylène  
Dichloroéthyléther  
Chlorure de méthylène  
Dichlorophénol  
Acide dichlorophénoxyacétique  
Dichloropropane  
Dichloropropanol  
Dichloropropylène  
Dieldrine  
Phosphate de diéthylchlorovinyle  
Dichlorophène  
Dinitrochlorobenzène  
Endosulfan  
Endrin  
Epichlorhydrine  
Chloroformiate d'éthyle  
Dibromoéthane  
Fluoroacétanilide  
Fréons  
Heptachlor  
Hexachlorobenzène  
Acide hydroxydibromobenzoïque  
Chlorure d'isopropyle  
Fluorure  
d'isopropylméthylphosphoryle  
Lindane  
Bromure de méthyle

Chlorure de méthyle  
**Méthylchloroforme**  
Chloroformiate de méthyle  
Chlorure de sec-butyle  
**Iodure de méthyle**  
Monochloracétone  
Nitrochlorobenzène  
Méchloréthamine  
Pentachlorophénol  
**Perchloréthylène**  
Perchlorométhylmercaptan  
Chlorure de picryle  
Biphényles polybromés  
Biphényles polychlorés  
Triphényles polychlorés  
Chlorure de propargyle  
TCDD  
Tétrachloréthane  
Tétrachlorophénol  
Tétrachloropropyl éther  
Trichloréthane  
**Trichloréthylène**  
Acide trichlorophénoxyacétique  
Trichloropropane  
Trifluoréthane  
Chlorure de vinyle  
Chlorure de vinylidène

#### Groupe 18 - Isocyanates

Isocyanate de chlorophényle  
Diisocyanate de diphénylméthane  
Isocyanate de méthyle  
Diisocyanate de méthylène  
Polyméthylisocyanate de polyphényle  
Toluène diisocyanate

#### Groupe 19 - Cétones

Acétone  
**Acétophénone**  
Acétylacétone  
**Benzophénone**  
Bromobenzoylacétanilide  
Chloroacétophénone  
Coumafuryle  
Coumatétralyle  
**Cyclohexanone**  
Diacétone alcool  
Diacétyle

Dichloroacétone  
Diéthylcétone  
Diisobutylcétone  
Heptanone  
Hydroxyacétophénone  
Isophorone

Oxyde de mésityle  
Méthyl t-butyl cétone  
Méthyl éthyl cétone  
Méthyl isobutyl cétone  
Méthyl isopropényl cétone  
Méthyl propyl cétone  
Méthyl vinyl cétone  
Monochloroacétone  
Nonanone  
Octanone  
Pentanone  
Quinone

Groupe 20 - Mercaptans et autres sulfures organiques

Aldicarb  
Amyl mercaptan  
Butyl mercaptan  
Sulfure de carbone  
Sulfure de méthyle  
Endosulfan  
Ethyl mercaptan  
Mercaptobenzothiazole  
Mercaptoéthanol  
Méthomyl  
Méthyl mercaptan  
Naphtyl mercaptan  
Perchlorométhyl mercaptan  
Phospholan  
Propyl mercaptan  
Ypérite  
Tétrasil  
Thionazine  
VX

Groupe 21 - Métaux alcalins et alcalino-terreux

Baryum  
Calcium  
Césium  
Lithium  
Magnésium

Potassium  
Rubidium  
Sodium  
Alliage sodium-potassium  
Strontium

Groupe 22 - Métaux pulvérulents ou de grande surface spécifique

Aluminium  
Bismuth  
Cérium  
Cobalt  
Hafnium  
Indium  
Magnésium  
Manganèse  
Vapeur de mercure  
Molybdène  
Nickel  
Nickel de Raney  
Sélénium  
Titane  
Thorium  
Zinc  
Zirconium

Groupe 23 - Métaux sous toutes formes

Aluminium  
Antimoine  
Bismuth  
Cuivre  
Bronze  
Cadmium  
Alliage Calcium-Manganèse-Silicium  
Chrome  
Cobalt  
Indium  
Fer  
Plomb  
Manganèse  
Molybdène  
Osmium  
Sélénium  
Titane  
Thorium  
Zinc  
Zirconium

Groupe 24 - Métaux et sels toxiques

Arséniate d'ammonium  
Bichromate d'ammonium  
Hexanitrocobaltate d'ammonium  
Molybdate d'ammonium  
Nitridoosmiate d'ammonium  
Permanganate d'ammonium  
Tétrachromate d'ammonium  
Tétraperoxychromate d'ammonium  
Trichromate d'ammonium  
Antimoine  
Nitrure d'antimoine  
Oxychlorure d'antimoine  
Pentachlorure d'antimoine  
Pentafluorure d'antimoine  
Pentasulfure d'antimoine  
Perchlorate d'antimoine  
Tartrate d'antimoine et de potassium  
Sulfate d'antimoine  
Tribromure d'antimoine  
Trichlorure d'antimoine  
Triiodure d'antimoine  
Trifluorure d'antimoine  
Trioxyde d'antimoine  
Trisulfure d'antimoine  
Trivinyl antimoine  
Arsenic  
Pentasélénure d'arsenic  
Pentaoxyde d'arsenic  
Pentasulfure d'arsenic  
Sulfure d'arsenic  
Tribromure d'arsenic  
Trichlorure d'arsenic  
Trifluorure d'arsenic  
Triiodure d'arsenic  
Trisulfure d'arsenic  
Arsines  
Baryum  
Azoture de baryum  
Carbure de baryum  
Chlorate de baryum  
Chlorure de baryum  
Chromate de baryum  
Fluorure de baryum  
Fluorosilicate de baryum  
Hydrure de baryum  
Hydroxyde de baryum  
Hypophosphite de baryum

Iodate de baryum  
Iodure de baryum  
Nitrate de baryum  
Oxyde de baryum  
Perchlorate de baryum  
Permanganate de baryum  
Peroxyde de baryum  
Phosphate de baryum  
Stéarate de baryum  
Sulfure de baryum  
Sulfite de baryum  
Beryllium  
Alliage cuivre-béryllium  
Fluorure de béryllium  
Hydrure de béryllium  
Hydroxyde de béryllium  
Oxyde de béryllium  
Tétrahydroborate de béryllium  
Bismuth  
Chromate de bismuth  
Acide bismuthique  
Nitrure de bismuth  
Pentafluorure de bismuth  
Pentaoxyde de bismuth  
Sulfure de bismuth  
Tribromure de bismuth  
Trichlorure de bismuth  
Triiodur de bismuth  
Trioxyde de bismuth  
Borane  
Arsénotribromure de bore  
Bromodiiodure de bore  
Nitrure de bore  
Phosphite de bore  
Triazoture de bore  
Tribromure de bore  
Triiodure de bore  
Trisulfure de bore  
Trichlorure de bore  
Trifluorure de bore  
Acide Cacodylique  
Cadmium  
Acétylure de cadmium  
Amidure de cadmium  
Azoture de cadmium  
Bromure de cadmium  
Chlorate de cadmium  
Chlorure de cadmium  
Cyanure de cadmium  
Fluorure de cadmium

Chlorate de cadmium hexamine	Acétate de plomb
Perchlorate de cadmium hexamine	Arséniate de plomb
Iodure de cadmium	Arsénite de plomb
Nitrate de cadmium	Azoture de plomb
Nitrure de cadmium	Carbonate de plomb
Oxyde de cadmium	Chlorite de plomb
Phosphate de cadmium	Cyanure de plomb
Sulfure de cadmium	Dinitrorésorcinate de plomb
Chlorate de cadmium trihydrazine	Mononitrorésorcinate de plomb
Perchlorate de cadmium trihydrazine	Nitrate de plomb
Arséniate de calcium	Oxyde de plomb
Arsénite de calcium	Styphnate de plomb
Chlorure chromique	Sulfure de plomb
Fluorure chromique	Lewisite
Oxyde chromique	Arséniate de magnésium
Sulfate chromique	Arsénite de magnésium
Chrome	Manganèse
Sulfure de chrome	Acétate de manganèse
Trioxyde de chrome	Arséniate de manganèse
Chlorure de chromyle	Bromure de manganèse
Cobalt	Chlorure de manganèse
Bromure de cobalt	Manganèse méthylcyclopentadiényl
Chlorure de cobalt	tricarbone
Nitrate de cobalt	Nitrate de manganèse
Sulfate de cobalt	Sulfure de manganèse
Résinate de cobalt	Acétate mercurique
Cuivre	Chlorhydrate d'ammonium
Acétoarsénite de cuivre	mercurique
Acétylure de cuivre	Benzoate mercurique
Arséniate de cuivre	Bromure mercurique
Arsénite de cuivre	Chlorure mercurique
Chlorure de cuivre	Cyanure mercurique
Chlorotétrazole de cuivre	Iodure mercurique
Cyanure de cuivre	Nitrate mercurique
Nitrate de cuivre	Oléate mercurique
Nitrure de cuivre	Oxyde mercurique
Sulfate de cuivre	Oxycyanure mercurique
Sulfure de cuivre	Iodure de potassium mercurique
Cupriéthylène diamine	Salicylate mercurique
Cyanochloropentane	Sulfate mercurique
Diéthylzinc	Sulfate mercurique basique
Diisopropylbéryllium	Sulfure mercurique
Diphénylamine chloroarsine	Thiocyanate mercurique
Ethyl chloroarsine	Mercuriol
Oxyde d'éthylène chromique	Bromure mercureux
Arséniate ferrique	Gluconate mercureux
Arséniate ferreux	Iodure mercureux
Hydrogène sélénié	Nitrate mercureux
Indium	Oxyde mercureux
Plomb	Sulfate mercureux

Mercure  
 Fulminate de mercure  
 Chlorure de méthoxyéthylmercure  
 Dichloroarsine de méthyle  
 Molybdène  
 Sulfure de molybdène  
 Trioxyde de molybdène  
 Acide molybdique  
 Nickel  
 Acétate de nickel  
 Antimoniure de nickel  
 Arséniate de nickel  
 Arsénite de nickel  
 Nickel carbonyl  
 Chlorure de nickel  
 Cyanure de nickel  
 Nitrate de nickel  
 Séléniure de nickel  
 Sulfure de nickel basique  
 Sulfate de nickel  
 Osmium  
 Nitrate d'osmium amine  
 Perchlorate d'osmium amine  
 Dichloroarsine de phényle  
 Arséniate de potassium  
 Dichromate de potassium  
 Permanganate de potassium  
 Sélénium  
 Fluorure de sélénium  
 Dithiocarbamate de diéthylsélénium  
 Acide selénieux  
 Acétylure d'argent  
 Azoture d'argent  
 Cyanure d'argent  
 Nitrate d'argent  
 Nitrure d'argent  
 Styphnate d'argent  
 Sulfure d'argent  
 Argent tétrazène  
 Arséniate de sodium  
 Arsénite de sodium  
 Cacodylate de sodium  
 Chromate de sodium  
 Dichromate de sodium  
 Molybdate de sodium  
 Permanganate de sodium  
 Séléniate de sodium  
 Chlorure stannique  
 Sulfure stannique  
 Arséniate de strontium  
 Monosulfure de strontium  
 Nitrate de strontium  
 Peroxyde de strontium  
 Tétrasulfure de strontium  
 Hexafluorure de tellure  
 Tétraéthylplomb  
 Tétraméthylplomb  
 Tétranitruure de sélénium  
 Thallium  
 Nitrure de thallium  
 Sulfure de thallium  
 Sulfate de thallium  
 Thorium  
 Titane  
 Sulfate de titane  
 Sesquisulfure de titane  
 Tétrachlorure de titane  
 Sulfure de titane  
 Nitrure de cadmium  
 Nitrure de césium  
 Triéthylarsine  
 Triéthylbismuthine  
 Tréthylstibine  
 Nitrure de plomb  
 Triméthylarsine  
 Triméthylbismuthine  
 Triméthylstibine  
 Tripropylstibine  
 Trisilylarsine  
 Nitrure de thorium  
 Trivinylostibine  
 Acide tungstique  
 Sulfure d'uranium  
 Nitrate d'uranyle  
 Anhydride vanadique  
 Oxychlorure de vanadium  
 Tétraoxyde de vanadium  
 Trioxyde de vanadium  
 Chlorure de vanadium  
 Sulfate de vanadyle  
 Zinc  
 Acétylure de zinc  
 Nitrate de zinc ammonium  
 Arséniate de zinc  
 Arsénite de zinc  
 Chlorure de zinc  
 Cyanure de zinc  
 Fluoroborate de zinc  
 Nitrate de zinc  
 Permanganate de zinc

Peroxyde de zinc  
Phosphore de zinc  
Sels de zinc de l'acide  
diméthylthiocarbamique  
Sulfate de zinc  
Sulfure de zinc  
Zirconium  
Chlorure de zirconium  
Picramate de zirconium

#### Groupe 25 - Nitrures

Nitrure d'antimoine  
Nitrure de bismuth  
Nitrure de bore  
Nitrure de cuivre  
Nitrure de soufre  
Nitrure de lithium  
Nitrure de potassium  
Nitrure d'argent  
Nitrure de sodium  
Nitrure de sélénium  
Nitrure de thallium  
Nitrure de cadmium  
Nitrure de calcium  
Nitrure de césium  
Nitrure de plomb  
Nitrure de mercure  
Nitrure de thorium

#### Groupe 26 - Nitriles

Acétone cyanhydrine  
Acétonitrile  
Acrylonitrile  
Adiponitrile  
Aminopropionitrile  
Cyanure d'amyle  
Azo bis isobutyronitrile  
Benzonitrile  
Bromoxynil  
Butyronitrile  
Chloroacrylonitrile  
Chlorobenzylidène malononitrile  
Chlorobutyronitrile  
Acide cyanoacétique  
Cyanochloropentane  
Cyanogène  
Ethylène cyanhydrine  
Glycolonitrile

Phénylacétonitrile  
Phénylvaléronitrile  
Propionitrile  
Surecide  
Tétraméthyl succinonitrile  
Tranid

#### Groupe 27 - Composés nitrés

Nitrate d'acétyle  
Chlorodinitrotoluène  
Chloronitroaniline  
Chloropicrine  
Collodion  
Diazodinitrophénol  
Nitrate de diéthylène glycol  
Dinitrobenzène  
Dinitrochlorobenzène  
Dinitrocrésol  
Dinitrophénol  
Dinitrophénylhydrazine  
Dinitrotoluène  
Dinosb  
Hexanitate de dipentaérythritol  
Dipicrylamine  
Nitrate d'éthyle  
Nitrite d'éthyle  
Nitrate de glycol  
Trinitrate du glycol monolactate  
Nitrate de guanidine  
Dinitrorésorcinate de plomb  
Mononitrorésorcinate de plomb  
Styphnate de plomb  
Hexanitate de mannitol  
Acétate de médinoterb  
Nitroaniline  
Nitrobenzène  
Nitrobiphényle  
Nitrocellulose  
Nitrochlorobenzène  
Nitroéthane  
Nitroglycérine  
Nitrométhane  
Nitrophénol  
Nitropropane  
N-nitroso diméthylamine  
Nitrosoguanidine  
Nitroamidon  
Nitroxylène  
Tétranitrate de pentaérythritol

Picramide  
Acide picrique  
Chlorure de picryle  
Nitrate de polyvinyle  
Dinitrobenzofuroxane de potassium  
RDX  
Styphnate d'argent  
Picramate de sodium  
**Tétranitrométhane**  
Trinitroanisole  
Trinitrobenzène  
Acide trinitrobenzoïque  
Trinitronaphtalène  
Trinitrorésorcinol  
**Trinitrotoluène**  
Nitrate d'urée

**Groupe 28 - Hydrocarbures  
aliphatiques insaturés**

Acétylène  
Allène  
Pentène  
Butadiène  
Butadiyne  
Butène  
Cyclopentène  
Décène  
**Dicyclopentadiène**  
Diisobutylène  
Diméthylacétylène  
Diméthylbutyne  
Dipentène  
Dodécène  
Ethylacétylène  
Ethylène  
Heptène  
Hexène  
Hexyne  
Isobutylène  
Isooctène  
**Isoprène**  
Isopropylacétylène  
Méthylacétylène  
Méthylbutène  
Méthylbutyne  
Méthylstyrène  
Nonène  
Octadécyne  
Octène

Pentène  
Pentyne  
Polybutène  
Polypropylène  
Propylène  
**Styrène**  
Tétradécène  
Tridécène  
Undécène  
Vinyltoluène

**Groupe 29 - Hydrocarbures  
aliphatiques saturés**

Butane  
Cycloheptane  
**Cyclohexane**  
Cyclopentane  
Cyclopropane  
Décaline  
Décane  
Ethane  
**Heptane**  
Hexane  
Isobutane  
Isohexane  
Isooctane  
Isopentane  
Méthane  
Méthylcyclohexane  
Néohexane  
Nonane  
Octane  
Pentane  
Propane

**Groupe 30 - Peroxydes et  
hydroperoxydes organiques**

Peroxyde d'acétyle et de benzoyle  
Peroxyde d'acétyle  
Peroxyde de benzoyle  
Hydroperoxyde de butyle  
Peroxyde de butyle  
Peracétate de butyle  
Perbenzoate de butyle  
Perpivalate de butyle  
Peroxyde de caprylyle  
Peroxyde de chlorobenzoyle  
Hydroperoxyde de cumène

Peroxyde de la cyclohexanone  
Peroxyde de dicumyle  
Hydroperoxyde de diisopropylbenzène  
Percarbonate d'isopropyle  
Dihydroperoxyde de diméthylhexane  
Percarbonate d'isopropyle  
Peroxyde de lauroyle  
Peroxyde de la méthyl éthyl cétone  
Acide peracétique  
Peroxyde de l'acide succinique

**Groupe 31 - Phénols et crésols**

Aminophénol  
Bromophénol  
Bromoxynil  
carbacol  
Huile carbolique  
Catechol  
Chlorocrésol  
Chlorophénol  
Goudron de houille  
Crésol  
Créosote  
Cyclohexyl phénol  
Dichlorophénol  
Dinitrocrésol  
Dinitrophénol  
Dinoseb  
Eugénol  
Guaiacol  
**Hydroquinone**  
Hydroxyacétophénone  
Hydroxydiphénol  
Hydroxyhydroquinone  
Isoeugénol  
**Naphtol**  
Nitrophénol  
Nonyl phénol  
Pentachlorophénol  
**Phénol**  
o-Phényl phénol  
Phloroglucinol  
Acide picrique  
Pyrogallol  
**Résorcinol**  
Saligénine  
Pentachlorophénate de sodium  
Phénolsulfonate de sodium

Tétrachlorophénol  
Thymol  
Trichlorophénol  
Trinitrorésorcinol

**Groupe 32 - Composés organophosphorés et organothiophosphorés**

Abate  
Ethyl azinphos  
Azodrine  
Bidrine  
Bomyl  
Chlorfenvinphos  
Chlorothion  
Coroxon  
DDVP  
Demeton  
s-Méthyl sulfoxyde de déméton  
Diazinon  
Phosphate de diéthyle et de chlorovinyle  
Acide diméthylthiophosphorique  
Dimefox  
Dioxathion  
Disulfoton  
Dyfonate  
Endothion  
EPN  
Ethion  
Fensulfothion  
Guthion  
Tétraphosphate d'hexaéthyle  
Malathion  
Mecarbam  
Méthylparathion  
Mevinphos  
Mocap  
Fluorure d'a-isopropyl méthylphosphoryle  
Paraoxon  
Parathion  
Phorate  
Phosphamidon  
Phospholane  
Potasan  
Prothoate  
Shradan  
Sulfotepp



Supracide  
Surecide  
Dithionopyrophosphate de  
tétraéthyle  
Pyrophosphate de tétraéthyle  
Thionazin  
Oxyde de tri (1-aziridiny) phosphine  
VX  
Wepsyn 155

### Groupe 33 - Sulfures minéraux

Sulfure d'ammonium  
Pentasulfure d'antimoine  
Trisulfure d'antimoine  
Pentasulfure d'arsenic  
Sulfure d'arsenic  
Trisulfure d'arsenic  
Sulfure de baryum  
Sulfure de béryllium  
Sulfure de bismuth  
Trisulfure de bismuth  
Trisulfure de bore  
Sulfure de cadmium  
Sulfure de calcium  
Trisulfure de cérium  
Sulfure de césium  
Sulfure de chrome  
Sulfure de cuivre  
Sulfure ferrique  
Sulfure ferreux  
Sulfure de germanium  
Sulfure d'or  
Hydrogène sulfuré  
Sulfure de plomb  
Sulfure de lithium  
Sulfure de magnésium  
Sulfure de manganèse  
Sulfure mercurique  
Sulfure de molybdène  
Sulfure de nickel  
Heptasulfure de phosphore  
Pentasulfure de phosphore  
Sesquisulfure de phosphore  
Trisulfure de phosphore  
Sulfure de potassium  
Sulfure d'argent  
Sulfure de sodium  
Sulfure stannique  
Monosulfure de strontium

Tétrasulfure de strontium  
Sulfure de thallium  
Sesquisulfure de titane  
Sulfure de titane  
Sulfure d'uranium  
Sulfure de zinc

### Groupe 34 - Epoxydes

Butyl glycidyl éther  
t-Butyl-3-phényl oxazirane  
Crésol glycidyl éther  
Diglycidyl éther  
Epichlorhydrine  
Epoxybutane  
Epoxybutène  
Epoxy éthylbenzène  
Oxyde d'éthylène  
Glycidol  
Phényl glycidyl éther  
Oxyde de propylène

### Groupe 101 - Composés inflammables et combustibles

Résines alkyle  
Asphalte  
Bakélite  
N-Buna  
Fioul  
Huile de camphre  
Charbon actif  
Cellulose  
Pétrole  
Essence  
Gasoil  
Graisses  
Polypropylène  
Kérosène  
Laques  
Méthyl acétone  
Ether de pétrole  
White spirit  
Naphta  
Huile de bergamote  
Papier  
Carton  
Résine polyamide  
Résine polyester  
Polyéthylène

Polypropylène  
Polystyrène  
Polyuréthane  
Polyacétate de vinyle  
Polychlorure de vinyle  
Résines  
Polysulfure de sodium  
Soufre  
Caoutchouc synthétique  
Goudrons  
Essence de térébenthine  
Cires  
Bois

**Groupe 102 - Explosifs**

Azoture d'acétyle  
Nitrate d'acétyle  
Azoture d'ammonium  
Chlorate d'ammonium  
Hexanitrocobaltate d'ammonium  
Nitrate d'ammonium  
Nitrite d'ammonium  
Periodate d'ammonium  
Permanganate d'ammonium  
Picrate d'ammonium  
Tétraperoxychromate d'ammonium  
Azidocarbonyl guanidine  
Azoture de baryum  
Chlorure de benzène diazonium  
Benzotriazole  
Peroxyde de benzoyle  
Nitrure de bismuth  
Trizoture de bore  
Trinitrate de butanetriol  
Hypochlorite de t-butyle  
Azoture de cadmium  
Chlorate de cadmium hexamine  
Perchlorate de cadmium hexamine  
Nitrate de cadmium  
Nitrure de cadmium  
Chlorate de cadmium trihydrazine  
Nitrate de calcium  
Azoture de césium  
Chlorure d'azothydryle  
Dioxyde de chlore  
Oxyfluorure de chlore  
Trioxyde de chlore  
Chloroacétylène  
Chlorpicrine

Acétylure de cuivre  
Triazoture cyanurique  
Diazidoéthane  
Diazidodinitrophénol  
Dinitrate de diéthylèneglycol  
Hexanitate de dipentaérythritol  
Dipicrylamine  
Nitrure de soufre  
Nitrate d'éthyle  
Nitrite d'éthyle  
Azoture de fluor  
Dinitrate d'éthylèneglycol  
Trinitrate de glycolmonolactate  
Fulminate d'or  
Guanyl nitrosaminoguanilydène  
hydrazine  
HMX  
Azoture d'hydrazine  
Acide hydrazoïque  
Azoture de plomb  
Dinitrorésorcinate de plomb  
Styphnate de plomb  
Hexanitate de mannitol  
Oxycyanure de mercure  
Fulminate de mercure  
Nitrocellulose  
Nitroglycérine  
Nitrosoguanidine  
Nitroamidon  
Tétranitate de pentaérythritol  
PicramideAcide picrique  
Chlorure de picryle  
Nitrate de polyvinyle  
Dinitrobenzofuroxane de potassium  
Nitrate de potassium  
RDX  
Acétylure d'argent  
Azoture d'argent  
Nitrure d'argent  
Styphnate d'argent  
Tétrazène d'argent  
Azoture de sodium  
Picramate de sodium  
**Tétranitrométhane**  
Nitrure de sélénium  
Nitrure de soufre  
Tétrazène  
Nitrure de thallium  
Nitrure de plomb  
Nitrure de mercure

Trinitrobenzène  
Acide trinitrobenzoïque  
Trinitronaphtalène  
Trinitrorésorcinol  
Trinitrotoluène  
Nitrate d'urée  
Azoture de vinyle  
Peroxyde de zinc

**Groupe 103 - Composés polymérisables**

Acroleïne  
Acide acrylique  
Acrylonitrile  
Butadiène  
Acrylate de butyle  
Acrylate d'éthyle  
Oxyde d'éthylène  
Éthylèneimine  
Acrylate d'éthyl-2-hexyle  
Acrylate d'isobutyle  
Isoprène  
Acrylate de méthyle  
Méthacrylate de méthyle  
Méthyl styrène  
Oxyde de propylène  
Styrène  
Acétate de vinyle  
Chlorure de vinyle  
Chlorure de vinylidène  
Vinyl toluène

**Groupe 104 - Agents oxydants**

Chlorate d'ammonium  
Dichromate d'ammonium  
Nitridoosmiate d'ammonium  
Perchlorate d'ammonium  
Periodate d'ammonium  
Permanganate d'ammonium  
Persulfate d'ammonium  
Tétrachromate d'ammonium  
Tétraperoxychromate d'ammonium  
Trichromate d'ammonium  
Perchlorate d'antimoine  
Bromate de baryum  
Chlorate de baryum  
Iodate de baryum  
Nitrate de baryum

Perchlorate de baryum  
Permanganate de baryum  
Peroxyde de baryum  
Acide bromique  
Brome  
Fluorure de brome  
Pentafluorure de brome  
Trifluorure de brome  
Hypochlorite de t-butyle  
Chlorate de cadmium  
Nitrate de cadmium  
Bromate de calcium  
Chlorate de calcium  
Chlorite de calcium  
Hypochlorite de calcium  
Iodate de calcium  
Nitrate de calcium  
Perchromate de calcium  
Permanganate de calcium  
Peroxyde de calcium  
Acide chlorique  
Chlore  
Dioxyde de chlore  
Oxyfluorure de chlore  
Fluorure de chlore  
Oxyde de chlore  
Pentafluorure de chlore  
Trifluorure de chlore  
Trioxyde de chlore  
Acide chromique  
Chlorure de chromyle  
Nitrate cobalteux  
Nitrate de cuivre  
Dichloroamine  
Acide dichloroisocyanurique  
Oxyde chromique d'éthylène  
Fluor  
Oxyde de fluor  
Nitrate de guanidine  
Eau oxygénée  
Pentaoxyde d'iode  
Chlorite de plomb  
Nitrate de plomb  
Hypochlorite de lithium  
Peroxyde de lithium  
Chlorate de magnésium  
Nitrate de magnésium  
Perchlorate de magnésium  
Peroxyde de magnésium  
Nitrate de manganèse

Nitrate mercurique  
 Nitrate mercureux  
 Nitrate de nickel  
 Oxyde d'azote  
 Nitrate d'osmium amine  
 Perchlorate d'osmium amine  
 Difluorure d'oxygène  
 Fluorure de perchlore  
 Oxybromure de phosphore  
 Oxychlorure de phosphore  
 Bromate de potassium  
 Dichloroisocyanurate de potassium  
 Dichromate de potassium  
 Nitrate de potassium  
 Perchlorate de potassium  
 Permanganate de potassium  
 Peroxyde de potassium  
 Nitrate d'argent  
 Bromate de sodium  
 Peroxycarbonate de sodium  
 Chlorate de sodium  
 Chlorite de sodium  
 Dichloroisocyanurate de sodium  
 Dichromate de sodium  
 Hypochlorite de sodium  
 Nitrate de sodium  
 Nitrite de sodium  
 Perchlorate de sodium  
 Permanganate de sodium  
 Peroxyde de sodium  
 Nitrate de strontium  
 Peroxyde de strontium  
 Trioxyde de soufre  
 Acide trichloroisocyanurique  
 Nitrate d'uryle  
 Nitrate d'urée  
 Nitrate de zinc ammonium  
 Nitrate de zinc  
 Permanganate de zinc  
 Peroxyde de zinc  
 Picramate de zirconium

**Groupe 105 - Agents réducteurs**

Borohydrure d'aluminium  
 Carbure d'aluminium  
 Hydrure d'aluminium  
 Hypophosphure d'aluminium  
 Hypophosphure d'ammonium  
 Sulfure d'ammonium

Pentasulfure d'antimoine  
 Trisulfure d'antimoine  
 Sulfure d'arsenic  
 Trisulfure d'arsenic  
 Arsine  
 Carbure de baryum  
 Hydrure de baryum  
 Hypophosphure de baryum  
 Sulfure de baryum  
 Benzylsilane  
 Benzylsodium  
 Hydrure de béryllium  
 Sulfure de béryllium  
 Tétrahydroborate de béryllium  
 Sulfure de bismuth  
 Arsénotribromure de bore  
 Trisulfure de bore  
 Bromodiborane  
 Bromosilane  
 Butyl dichloroborane  
 Butyl lithium  
 Acétylure de cadmium  
 Sulfure de cadmium  
 Calcium  
 Carbure de calcium  
 Hexammoniate de calcium  
 Hydrure de calcium  
 Hypophosphure de calcium  
 Sulfure de calcium  
 Hydrure de cérium  
 Sulfure de cérium  
 Phosphure de cérium  
 Carbure de césium  
 Hexahydroaluminate de césium  
 Hydrure de césium  
 Sulfure de césium  
 Chlorodiborane  
 Chlorodiisobutylaluminium  
 Chlorodiméthylamine diborane  
 Chlorodipropylborane  
 Chlorosilane  
 Sulfure de chrome  
 Acétylure de cuivre  
 Sulfure de cuivre  
 Diborane  
 Chlorure de diéthylaluminium  
 Diéthylzinc  
 Diisopropylbéryllium  
 Diméthylmagnésium  
 Sulfure ferreux

Sulfure de germanium  
Acétylure d'or  
Sulfure d'or  
Hexaborane  
Hydrazine  
Hydrogène sélénié  
Hydrogène sulfuré  
Hydroxylamine  
Sulfure de plomb  
Hydruure de lithium et d'aluminium  
Hydruure de lithium  
Sulfure de lithium  
Sulfure de magnésium  
Sulfure de manganèse  
Sulfure mercurique  
Sesquibromure de  
méthylaluminium  
Sesquichlorure de méthylaluminium  
Bromure de méthylmagnésium  
Bromure de méthylmagnésium  
Iodure de méthylmagnésium  
Sulfure de molybdène  
Sulfure de nickel oxyde  
Pentaborane  
Phosphine  
Iodure de phosphonium  
Phosphore rouge  
Phosphore blanc  
Heptasulfure de phosphore  
Pentasulfure de phosphore  
Sesquisulfure de phosphore  
Trisulfure de phosphore  
Hydruure de potassium  
Sulfure de potassium  
Acétylure d'argent  
Sulfure d'argent  
Sodium  
Aluminate de sodium  
Hydruure de sodium et d'aluminium  
Hydruure de sodium  
Hyposulfite de sodium  
Sulfure de sodium  
Sulfure stannique  
Monosulfure de strontium  
Tétrasulfure de strontium  
Tétraborane  
Sulfure de thallium  
Sesquisulfure de titane  
Sulfure de titane  
Triéthylaluminium

Triéthylstibine  
Triisobutylaluminium  
Triméthylaluminium  
Triméthylstibine  
Tri butyl borane  
Triocetylaluminium  
Sulfure d'uranium  
Acétylure de zinc  
Sulfure de zinc

**Groupe 106 - Solutions aqueuses et  
déchets humides**

**Groupe 107 - Substances réactives  
avec l'eau**

Anhydride acétique  
Bromure d'acétyle  
Chlorure d'acétyle  
Chlorure d'alkylaluminium  
Allyltrichlorosilane  
Aminoborohydrure d'aluminium  
Borohydrure d'aluminium  
Bromure d'aluminium  
Chlorure d'aluminium  
Fluorure d'aluminium  
Hypophosphure d'aluminium  
Phosphure d'aluminium  
Tétrahydroborate d'aluminium  
Amyltrichlorosilane  
Chlorure d'anisoyle  
Tribromure d'antimoine  
Trichlorure d'antimoine  
Trifluorure d'antimoine  
Triiodure d'antimoine  
Trivinylantimoine  
Tribromure d'arsenic  
Trichlorure d'arsenic  
Triiodure d'arsenic  
Baryum  
Carbure de baryum  
Oxyde de baryum  
Sulfure de baryum  
Phényldichlorophosphine  
Chlorure de benzoyle  
Benzylsilane  
Benzylsodium  
Hydruure de béryllium  
Tétrahydroborate de béryllium  
Pentafluorure de bismuth

Borane	Oxyde de fluor
Bromodiodoborane	Acide fluorosulfonique
Dibromoiodoborane	Acétylure d'or
Phosphure de bore	Hexadécyltrichlorosilane
Tribromure de bore	Hexyltrichlorosilane
Trichlorure de bore	Acide bromhydrique
Trifluorure de bore	Chlorure d'iode
Triiodure de bore	Lithium
Fluorure de brome	Hydrure de lithium et d'aluminium
Pentafluorure de brome	Amidure de lithium
Trifluorure de brome	Hydrure de lithium
Bromodiéthylaluminium	Peroxyde de lithium
Butyllithium	Lithium silicium
Butyltrichlorosilane	Sesquibromure de
Acétylure de cadmium	méthylaluminium
Amidure de calcium	Sesquichlorure de méthylaluminium
Calcium	Méthyl-dichlorosilane
Carbure de calcium	Diisocyanate de méthylène
Hydrure de calcium	Isocyanate de méthyle
Oxyde de calcium	Méthyltrichlorosilane
Phosphure de calcium	Bromure de méthylmagnésium
Amidure de césium	Chlorure de méthylmagnésium
Hydrure de césium	Iodure de méthylmagnésium
Phosphure de césium	Antimoniure de nickel
Dioxyde de chlore	Nonyltrichlorosilane
Fluorure de chlore	Octadécyltrichlorosilane
Pentafluorure de chlore	Octyltrichlorosilane
Trifluorure de chlore	Phényltrichlorosilane
Chlorure de chloroacétyle	Iodure de phosphonium
Chlorodiisobutylaluminium	Anhydride phosphorique
Isocyanate de chlorophényle	Oxychlorure de phosphore
Chlorure de chromyle	Pentasulfure de phosphore
Acétylure de cuivre	Trisulfure de phosphore
Cyclohexyltrichlorosilane	Phosphore rouge
Décaborane	Oxybromure de phosphore
Diborane	Oxychlorure de phosphore
Chlorure de diéthylaluminium	Pentachlorure de phosphore
Diéthyl-dichlorosilane	Sesquisulfure de phosphore
Diéthylzinc	Tribromure de phosphore
Diisopropylbéryllium	Trichlorure de phosphore
Diméthyl-dichlorosilane	Potassium
Diméthylmagnésium	Hydrure de potassium
Diphényl-dichlorosilane	Oxyde de potassium
Diisocyanate de diphénylméthane	Peroxyde de potassium
Chlorure de disulfuryle	Propyltrichlorosilane
Dodécyltrichlorosilane	Chlorure de pyrosulfuryle
Ethyl-dichloroarsine	Tétrachlorure de silicium
Ethyl-dichlorosilane	Acétylure d'argent
Ethyltrichlorosilane	Sodium
Fluor	Hydrure de sodium et d'aluminium

Amidure de sodium  
Hydrure de sodium  
Méthylate de sodium  
Oxyde de sodium  
Peroxyde de sodium  
Alliage sodium-potassium  
Chlorure stannique  
Fluorure de sulfonyle  
Acide sulfurique (>70%)  
Chlorure de soufre  
Pentafluorure de soufre  
Trioxyde de soufre  
Chlorure de sulfuryle  
Chlorure de thiocarbonyle  
Chlorure de thionyle  
Chlorure de thiophosphoryle  
Tétrachlorure de titane  
Toluène diisocyanate  
Trichlorosilane  
Triéthylaluminium  
Triisobutylaluminium  
Triméthylaluminium  
Tributylaluminium  
Tributylborane  
Trioctylaluminium  
Trichloroborane  
Triéthylarsine  
Triéthylstibine  
Triméthylarsine  
Triméthylstibine  
Tripropylstibine  
Trisilylarsine  
Trivinylstibine  
Trichlorure de vanadium  
Vinyltrichlorosilane  
Acétylure de zinc  
Phosphure de zinc  
Peroxyde de zinc

## 4-2- Combinaisons des groupes de réactivité

### **1 + 4 Acides minéraux + alcools et glycols**

Réactions exothermiques de déshydratation et de substitution par les halogénures

### **1 + 5 Acides minéraux + aldéhydes**

Réactions exothermiques de condensation. L'acroleïne et les aldéhydes  $\alpha$ - $\beta$  insaturés se polymérisent facilement

### **1 + 6 Acides minéraux + Amides**

Hydrolyse exothermique des amides en acides carboxyliques

### **1 + 7 Acides minéraux + Amines**

Réaction acido basique avec formation de sels d'ammonium. Cette réaction peut être suffisamment exothermique pour créer un sinistre

### **1 + 8 Acides minéraux + Composés azoïques**

Décomposition exothermique des composés diazoïques par mélange avec les acides avec formation d'azote et du carbocation correspondant. Les composés aliphatiques (diazalcanes) peuvent se polymériser violemment avec formation de chaleur. Les azotures organiques peuvent également se décomposer en présence d'acide fort avec dégagement d'azote et formation des carbocations. Les hydrazines réagissent également comme les amines avec formation de sels. Le diazométhane est un composé particulièrement dangereux de cette série.

### **1 + 9 Acides minéraux + Carbamates**

Les carbamates subissent une hydrolyse rapide en présence d'acide. Cette hydrolyse est suivie généralement d'une décarboxylation (forte augmentation de pression en récipient clos). Ces deux réactions sont exothermiques.

### **1 + 10 Acides minéraux + Bases fortes**

Les réactions acide-base entre acides et bases forts dégagent une grande quantité de chaleur et peuvent être suffisamment violentes pour enflammer les produits de la réaction (cas des alcoolates).



- 1 + 11 Acides minéraux + Cyanures**
- Les cyanures métalliques sont rapidement décomposés par les acides avec formation d'acide cyanhydrique gazeux extrêmement toxique et inflammable
- 1 + 12 Acides minéraux + Dithiocarbamates**
- Les dithiocarbamates se décomposent en présence d'acide fort avec formation de sulfure de carbone, composé extrêmement toxique et inflammable. Cette réaction est exothermique
- 1 + 13 Acides minéraux + Esters**
- Décomposition des esters avec formation des alcools et des acides carboxyliques correspondants. Il peut y avoir réaction exothermique entre l'acide fort et l'alcool formé
- 1 + 14 Acides minéraux + Ethers**
- Coupage des éthers par les acides forts avec formation d'alcools, de phénols et de dérivés halogénés
- 1 + 15 Acides minéraux + Fluorures**
- La plupart des fluorures minéraux réagissent avec les acides forts pour former de l'acide fluorhydrique, gaz extrêmement toxique et corrosif
- 1 + 17 Acides minéraux + Dérivés halogénés organiques**
- Décomposition exothermique des dérivés halogénés par les acides forts avec formation de fumées toxiques et d'hydracides halogénés
- 1 + 18 Acides minéraux + Isocyanates**
- La décarboxylation des isocyanates par les acides peut dégénérer en décomposition violente
- 1 + 19 Acides minéraux + Cétones**
- Réaction exothermiques d'aldolisation
- 1 + 20 Acides minéraux + Mercaptans (thiols)**
- Réaction facile des thiols avec les acides avec formation d'acide sulfhydrique ( $H_2S$ ), gaz très toxique et inflammable. Un excès d'acide peut conduire à une émission de fumées toxiques (oxydes de soufre)

- 1 + 21 Acides minéraux + Métaux alcalins ou alcalino-terreux**  
Réaction particulièrement violente et exothermique avec formation d'hydrogène, celui-ci peut s'enflammer spontanément dans ces conditions
- 1 + 22 Acides minéraux + Métaux pulvérulents**  
Réaction très vigoureuse avec formation d'hydrogène qui peut s'enflammer. La chaleur produite peut conduire à l'explosion du mélange
- 1 + 23 Acides minéraux + Métaux sous toutes formes**  
Réaction avec formation d'hydrogène, la réaction peut devenir suffisamment exothermique pour enflammer le gaz produit
- 1 + 24 Acides minéraux + Métaux et sels métalliques toxiques**  
Mise en solution des métaux toxiques et de leurs sels par les acides forts avec possibilité de relargage de ces derniers dans l'environnement
- 1 + 25 Acides minéraux + Nitrures**  
La fraction aqueuse des acides forts minéraux réagit avec les nitrures pour former du gaz ammoniac inflammable et toxique. La réaction acide-base correspondante est fortement exothermique
- 1 + 26 Acides minéraux + Nitriles**  
Hydrolyse exothermique des nitriles en acides carboxyliques correspondants avec formation des sels d'ammonium. Les nitriles peuvent également se décomposer en présence d'acide fort avec formation d'acide cyanhydrique extrêmement toxique et inflammable
- 1 + 28 Acides minéraux + Carbures aliphatiques insaturés**  
L'addition des acides minéraux aux alcènes conduit à la formation exothermique d'alcools (hydratation), de dérivés halogénés ou de sulfates. L'acétylène et les composés acétyléniques par hydratation conduisent aux aldéhydes, aux cétones ou aux dérivés polyhalogénés
- 1 + 30 Acides minéraux + Peroxydes organiques**  
Les acides forts minéraux peuvent réagir avec les peroxydes ou les hydroperoxydes organiques de façon suffisamment violente pour déclencher l'explosion de ces derniers. Formation corrélative d'oxygène

**1 + 31 Acides minéraux + Phénols ou Crésols**

L'acide sulfurique concentré forme très facilement des acides sulfoniques et des sulfates de phénols, réactions exothermiques. Un excès d'acide fort peut décomposer les phénols avec un grand dégagement de chaleur.

**1 + 32 Acides minéraux + Composés organophosphorés**

Un excès d'acide fort peut conduire à la décomposition exothermique des dérivés organophosphorés ou thioorganophosphorés avec production de gaz toxiques

**1 + 33 Acides minéraux + Sulfures**

Les acides réagissent avec les sulfures avec formation d'hydrogène sulfuré (H<sub>2</sub>S) extrêmement toxique et inflammable

**1 + 34 Acides minéraux + Époxydes**

La coupure des époxydes est catalysée par les acides et peut en provoquer la polymérisation exothermique

**1 + 101 Acides minéraux + Matériaux combustibles**

Un excès d'acide fort peut provoquer la déshydratation et la décomposition exothermique de certains matériaux avec la formation possible de gaz toxiques

**1 + 102 Acides minéraux + Explosifs**

La plupart des composés explosifs sont sensibles à une évaluation de température, celle-ci peut être provoquée par l'action des acides forts sur ces composés

**1 + 103 Acides minéraux + Composés polymérisables**

Les acides forts peuvent agir comme initiateurs de polymérisation. Celle-ci est souvent exothermique et violente

**1 + 104 Acides minéraux + Agents oxydants**

Le mélange des oxydants avec des acides forts est souvent sensible à la chaleur et aux chocs et peut se décomposer brutalement. Les hydracides halogénés en présence d'oxydants conduisent à la formation d'halogènes corrosifs et très toxiques

**1 + 105 Acides minéraux + Agents réducteurs**

La plupart des agents réducteurs se décomposent en milieu acide avec formation d'hydrogène extrêmement inflammable. La réaction est souvent suffisamment exothermique pour déclencher l'inflammation spontanée du mélange. Quelques réducteurs à base de soufre ou de phosphore se décomposent avec formation de dérivés hydrogénés extrêmement toxiques et inflammables

**1 + 106 Acides minéraux + Déchets en solution aqueuse**

L'hydrolyse ou la solubilisation de ces acides peut être fortement exothermique

**1 + 107 Acides minéraux + Composés réagissant avec l'eau**

Les composés du groupe 107 si ils réagissent de façon violente avec l'eau sont également extrêmement sensibles à un grand nombre d'autres réactifs. Ces réactions sont souvent violentes, exothermiques et productrices de gaz toxiques et/ou inflammables. Les mélanges de ces substances avec d'autres réactifs sont souvent instables et parfois explosives. En fait les substances du groupe 107 doivent toujours être stockées isolément d'autres composés. A noter que certaines d'entre elles sont également pyrophoriques.

**2 + 3 Acides minéraux oxydants + Acides organiques**

Ces acides minéraux peuvent oxyder la partie organique des acides carboxyliques avec dégagement de chaleur et formation de sous-produits gazeux

**2 + 4 Acides minéraux oxydants + Alcools et Glycols**

L'oxydation de la partie organique peut être exothermique et former des sous-produits gazeux. L'acide nitrique, spécialement en présence d'acide sulfurique conduit à la formation de dérivés nitrés et de nitrates particulièrement instables

**2 + 5 Acides minéraux oxydants + Aldéhydes**

Formation très rapide d'acides organiques. Ultérieurement l'oxydant peut décomposer la partie organique avec production de chaleur et de sous-produits gazeux

**2 + 6 Acides minéraux oxydants + Amides**

Un excès d'acide donne une réaction exothermique avec production d'oxydes d'azote

- 2 + 7 Acides minéraux oxydants + Amines**
- Réaction acide-base exothermique. L'excès d'oxydant conduira à la production d'oxydes d'azote
- 2 + 8 Acides minéraux oxydants + Composés azoïques**
- Décomposition facile des composés aziques en milieu acide avec dégagement d'azote. La nature oxydante de ces acides conduira à la formation d'oxydes d'azote. Les hydrazines sont particulièrement sensibles aux oxydants et peuvent s'enflammer par contact avec ceux-ci. Les azotures et les composés « diazo » se décomposent spontanément en présence d'acide (possibilité d'explosion)
- 2 + 9 Acides minéraux oxydants + Carbamates**
- Les carbamates subissent une hydrolyse rapide en présence d'acide. Cette hydrolyse est suivie généralement d'une décarboxylation (forte augmentation de pression en récipient clos). Ces deux réactions sont exothermiques. L'oxydation ultérieure conduit à la formation d'oxydes d'azote et d'oxydes de soufre (thiocarbamates)
- 2 + 10 Acides minéraux oxydants + Bases fortes**
- La réaction de neutralisation peut être violente et exothermique
- 2 + 11 Acides minéraux oxydants + Cyanures**
- La formation d'acide cyanhydrique extrêmement toxique et inflammable peut se produire avant l'oxydation des composés
- 2 + 12 Acides minéraux oxydants + Dithiocarbamates**
- Les dithiocarbamates se décomposent en présence d'acide fort avec formation de sulfure de carbone, composé extrêmement toxique et inflammable. Cette réaction est exothermique. La présence d'oxydant peut déclencher l'inflammation spontanée du sulfure de carbone
- 2 + 13 Acides minéraux oxydants + Esters**
- L'oxydation des esters peut produire leur décomposition exothermique avec possible inflammation des composés les plus légers. La transformation des esters en acides et en alcools est également possible. Les acides peuvent également se décarboxyler avec production de gaz carbonique

- 2 + 14 Acides minéraux oxydants + Ethers**
- Oxydation exothermique des éthers avec inflammation des composés les plus légers. Les acides peuvent également couper les éthers
- 2 + 15 Acides minéraux oxydants + Fluorures minéraux**
- La plupart des fluorures minéraux réagissent avec les acides forts pour former de l'acide fluorhydrique, gaz extrêmement toxique et corrosif
- 2 + 16 Acides minéraux oxydants + Hydrocarbures aromatiques**
- L'oxydation de ces hydrocarbures peut être suffisamment exothermique pour enflammer le mélange
- 2 + 17 Acides minéraux oxydants + Dérivés halogénés**
- Ces acides peuvent provoquer l'oxydation et la décomposition des dérivés halogénés organiques avec production de chaleur et dégagement de gaz toxiques, acides halogénés, halogènes, phosgène, etc...
- 2 + 18 Acides minéraux oxydants + Isocyanates**
- Les isocyanates sont hydrolysés par l'eau en présence d'acide concentré avec formation de gaz carbonique. Ils peuvent également être oxydés dans ces conditions avec dégagement de chaleur et production d'oxydes d'azote
- 2 + 19 Acides minéraux oxydants + Cétones**
- Les cétones peuvent subir des condensations aldoliques en milieu acide. Les acides oxydants peuvent également couper les cétones avec production de différents acides. Un excès de réactif peut causer la décomposition complète de la cétone, réaction fortement exothermique qui peut déclencher l'inflammation
- 2 + 20 Acides minéraux oxydants + Mercaptans**
- Réaction facile des thiols avec les acides avec formation d'acide sulfhydrique (H<sub>2</sub>S), gaz très toxique et inflammable. Un excès d'acide peut conduire à une émission de fumées toxiques (oxydes de soufre)

- 2 + 21 Acides minéraux oxydants + Métaux alcalins et alcalino-terreux**
- Le contact des acides avec ces métaux provoque un dégagement d'hydrogène extrêmement inflammable. La réaction d'un oxydant fort avec ces métaux très réducteurs peut être suffisamment violente pour déclencher l'inflammation de l'hydrogène et même une explosion
- 2 + 22 Acides minéraux oxydants + Métaux pulvérulents**
- La réaction des acides avec ces métaux produit de l'hydrogène et un grand dégagement de chaleur. La grande surface spécifique du métal peut provoquer une dérive explosive de la réaction
- 2 + 23 Acides minéraux oxydants + Métaux sous toutes formes**
- Réaction avec formation d'hydrogène, la réaction peut devenir suffisamment exothermique pour enflammer le gaz produit
- 2 + 24 Acides minéraux oxydants + Métaux et sels métalliques toxiques**
- Mise en solution des métaux toxiques et de leurs sels par les acides forts avec possibilité de relargage de ces derniers dans l'environnement
- 2 + 25 Acides minéraux oxydants + Nitrures**
- La fraction aqueuse des acides forts minéraux réagit avec les nitrures pour former du gaz ammoniac inflammable et toxique. La réaction acide-base correspondante est fortement exothermique
- 2 + 26 Acides minéraux oxydants + Nitriles**
- Le danger principal dans cette combinaison est l'oxydation des nitriles fortement exothermique qui s'accompagne de dégagement d'oxydes d'azote. Dans quelques cas comme la cyanhydrine de l'acétone ou le propionitrile, il faut ajouter un dégagement d'acide cyanhydrique extrêmement toxique et inflammable. Le mélange de l'acétonitrile avec l'acide nitrique est hautement explosif
- 2 + 27 Acides minéraux oxydants + Dérivés nitrés**
- Ces acides décomposent les dérivés nitrés avec production de gaz toxiques (oxydes d'azote). Cette oxydation peut être extrêmement violente. Les mélanges d'acide nitrique avec les dérivés nitrés aromatiques possèdent des propriétés explosives. Certains dérivés nitrés aliphatiques peuvent également détoner en présence d'acide nitrique

**2 + 28 Acides minéraux oxydants + Carbures aliphatiques insaturés**

Les alcènes et les alcynes sont extrêmement réactifs vis à vis des oxydants. Ces réactions provoquent un grand dégagement de chaleur, et éventuellement l'inflammation du mélange

**2 + 29 Acides minéraux oxydants + Carbures aliphatiques saturés**

L'oxydation des alcanes est exothermique et provoque le dégagement de gaz carbonique

**2 + 30 Acides minéraux oxydants + Peroxydes organiques**

Les peroxydes et les hydroperoxydes organiques sont très sensibles à la chaleur et aux chocs. Le mélange avec les acides oxydants provoque une augmentation de température à cause de l'hydrolyse catalysée par les acides. Cette réaction peut donc dégénérer en une décomposition explosive

**2 + 31 Acides minéraux oxydants + Phénols et crésols**

Les phénols et les crésols sont facilement oxydés avec génération de chaleur

**2 + 32 Acides minéraux oxydants + Composés organophosphorés**

Un excès d'acide oxydant peut décomposer les dérivés organophosphorés avec dégagement de chaleur et production d'oxydes d'azote, de soufre et de phosphore

**2 + 33 Acides minéraux oxydants + Sulfures**

Génération d'hydrogène sulfuré toxique et inflammable. Les sulfures peuvent également être oxydés en dioxyde de soufre également toxique, cette oxydation est souvent exothermique et peut être extrêmement violente.

**2 + 34 Acides minéraux oxydants + Epoxydes**

Coupure exothermique très facile des époxydes par les acides. Cette ouverture de cycle peut être l'initiation de la formation de résines époxy et cette polymérisation non contrôlée provoque un grand dégagement de chaleur. La capacité d'oxydation de ces acides peut causer l'inflammation des époxydes

**2 + 101 Acides minéraux oxydants + Matériaux combustibles**

Les acides oxydants peuvent décomposer ces substances et causer leur inflammation. Des gaz toxiques dont la nature dépend de la composition des matériaux peuvent se former



- 2 + 102 Acides minéraux oxydants + Explosifs**
- Le mélange de ces acides avec les substances explosives cause un dégagement de chaleur suffisant pour causer la détonation. Le caractère oxydant de ces acides augmente la possibilité d'explosion
- 2 + 103 Acides minéraux oxydants + Composés polymérisables**
- Les acides peuvent agir comme initiateurs de polymérisation. Ces réactions sont exothermiques et peuvent être très violentes. De plus ces acides peuvent oxyder les composés polymérisables (généralement insaturés) avec dégagement de chaleur et de gaz toxiques
- 2 + 105 Acides minéraux oxydants + Agents réducteurs**
- Le mélange des oxydants forts et de ces réducteurs est fortement exothermique et peut dégénérer en incendie et explosion
- 2 + 106 Acides minéraux oxydants + Déchets en solution aqueuse**
- La dissolution de ces acides dans l'eau est fortement exothermique
- 3 + 4 Acides organiques + Alcools et glycols**
- Les acides organiques ne réagissent que lentement avec les alcools et les glycols par estérification (cette réaction peut être catalysée par les acides forts). Les diacides peuvent se polymériser avec les diols, réaction exothermique. Certains acides organiques, notamment les acides  $\alpha$ -halogénés sont aussi forts que les acides minéraux et doivent être rapprochés du groupe 1
- 3 + 5 Acides organiques + Aldéhydes**
- Les aldéhydes subissent des réactions d'autocondensation exothermiques par catalyse acide. Le dégagement de chaleur est suffisant pour déclencher la polymérisation des polyacides et des acides insaturés
- 3 + 7 Acides organiques + Amines**
- Réaction exothermique acido-basique avec formation de sels. Les diacides et les diamines peuvent polymériser
- 3 + 8 Acides organiques + Composés azoïques**
- Les composés diazoïques sont décomposés en milieu acide avec dégagement de chaleur et production d'azote. Les composés azoïques

ne sont pas sensibles à une telle décomposition. Les hydrazines réagissent comme les amines avec formations de sels

**3 + 10 Acides organiques + Bases fortes**

Réaction acide-base exothermique

**3 + 11 Acides organiques + Cyanures**

Décomposition des cyanures par les acides avec formation d'acide cyanhydrique gazeux extrêmement toxique et inflammable

**3 + 12 Acides organiques + Dithiocarbamates**

Les dithiocarbamates réagissent avec les plus forts des acides organiques pour fournir du sulfure de carbone toxique et extrêmement inflammable. Le sulfure du carbone est un liquide mais avec une tension de vapeur élevée

**3 + 15 Acides organiques + Fluorures**

Les fluorures métalliques sont décomposés par les acides organiques forts avec production d'acide fluorhydrique extrêmement toxique et corrosif. Les fluorures alcalins sont les plus sensibles à cette réaction

**3 + 18 Acides organiques + Isocyanates**

Les isocyanates sont hydrolysés par l'eau contenue en faible quantité dans les acides organiques. Il se forme du gaz carbonique et des amines. La réaction est exothermique

**3 + 21 Acides organiques + Métaux alcalins ou alcalino-terreux**

La réaction des acides organiques avec ces métaux sous n'importe quelle forme provoque un dégagement exothermique d'hydrogène qui peut s'enflammer

**3 + 22 Acides organiques + Métaux pulvérulents**

Les plus forts des acides organiques peuvent réagir avec ces métaux, la réaction produit de l'hydrogène, risque d'explosion

**3 + 24 Acides organiques + Métaux et sels métalliques toxiques**

Possibilité de mise en solution de ces métaux ou de leurs sels par complexation

- 3 + 26 Acides organiques + Nitrures**
- Réaction acide-base exothermique avec formation d'ammoniac toxique et inflammable. La plupart des nitrures sont instables et peuvent exploser à cause de l'élévation de température
- 3 + 26 Acides organiques + Nitriles**
- Les acides organiques forts peuvent hydrolyser les nitriles en acides carboxyliques, réaction exothermique
- 3 + 33 Acides organiques + Sulfures**
- Génération d'hydrogène sulfuré extrêmement toxique et inflammable
- 3 + 34 Acides organiques + Epoxydes**
- La coupure des époxydes catalysée par les acides peut déclencher leur polymérisation fortement exothermique
- 3 + 102 Acides organiques + Explosifs**
- Les acides les plus forts peuvent décomposer les substances explosives avec un dégagement de chaleur qui peut provoquer leur détonation
- 3 + 103 Acides organiques + Composés polymérisables**
- Les acides organiques les plus forts peuvent initier les polymérisations cationiques. Réactions fréquemment exothermiques
- 3 + 104 Acides organiques + Agents oxydants**
- La partie organique des acides carboxyliques peut être décomposée par les oxydants forts, réaction exothermique avec libération de gaz. Ces gaz peuvent être toxiques si les acides comportent des halogènes ou d'autres hétéro-éléments
- 3 + 105 Acides organiques + Agents réducteurs**
- Les acides carboxyliques sont réduits facilement par l'hydrure de lithium et d'aluminium (AlLiH<sub>4</sub>) en alcools, réaction faiblement exothermique. Les autres réducteurs demandent des conditions plus vigoureuses. Certains réducteurs métalliques ou hydrures peuvent extraire le proton acide avec dégagement d'hydrogène

- 4 + 8 Alcools et glycols + Composés azoïques**
- Les composés diazoïques réagissent avec les alcools pour former des éthers avec libération d'azote. Les azotures et les hydrazines sont généralement insolubles dans les alcools et ne réagissent pas violemment
- 4 + 18 Alcools et glycols + Isocyanates**
- Les polyols et les polyisocyanates se polymérisent très facilement (polyuréthanes) avec dégagement de chaleur. Les alcools forment des carbamates.
- 4 + 21 Alcools et glycols + Métaux alcalins et alcalino-terreux**
- Formation exothermique d'alcoolates avec dégagement d'hydrogène inflammable. Avec les métaux alcalins, la réaction peut être suffisamment violente pour causer l'inflammation du mélange
- 4 + 25 Alcools et glycols + Nitrures**
- Les alcools décomposent les nitrures avec production d'ammoniac, toxique et inflammable. La plupart des nitrures sont instables et peuvent exploser à cause de l'élévation de température
- 4 + 30 Alcools et glycols + Peroxydes organiques**
- Les alcools peuvent être oxydés par les peroxydes ou les hydroperoxydes organiques, réaction exothermique qui peut aller jusqu'à l'inflammation
- 4 + 34 Alcools et glycols + Epoxydes**
- Réaction de polymérisation exothermique possible en présence d'une trace d'acide ou de base
- 4 + 104 Alcools et glycols + Agents oxydants**
- Transformation des alcools en aldéhyde ou en cétone. Les oxydants forts peuvent détruire la molécule avec production de chaleur et formation de composés instables éventuellement explosifs
- 4 + 105 Alcools et glycols + Agents réducteurs**
- Les agents réducteurs peuvent arracher le proton hydroxylique avec formation d'hydrogène inflammable. La réaction peut être assez violente pour enflammer le mélange
- 4 + 107 cf. 1 + 107**

- 5 + 7**      **Aldéhydes + Amines**
- Condensation exothermique, la réaction est catalysée par les acides
- 5 + 8**      **Aldéhydes + Composés azoïques**
- Les composés « diazo », spécialement le diazométhane réagissent avec les aldéhydes pour donner des cétones ou des époxydes avec dégagement d'azote
- 5 + 10**     **Aldéhydes + Bases fortes**
- Autocondensation exothermique des aldéhydes en présence de bases. Les aldéhydes insaturés comme l'acroléine se polymérisent violemment avec un grand dégagement de chaleur
- 5 + 12**     **Aldéhydes + Dithiocarbamates**
- Réaction peu décrite mais qui peut résulter en la formation de sulfure de carbone toxique et extrêmement inflammable
- 5 + 21**     **Aldéhydes + Métaux alcalins et alcalino-terreux**
- Formation possible de carbanions avec dégagement d'hydrogène. Les carbanions conduisent à un grand nombre de réactions d'autocondensation exothermiques
- 5 + 25**     **Aldéhydes + Nitrures**
- Les nitrures sont décrits comme des bases fortes et peuvent donc déclencher des réactions de condensation exothermiques. L'acroléine peut se polymériser dans ces conditions. L'arrachement du proton énolique conduit à la formation d'ammoniac toxique et inflammable
- 5 + 27**     **Aldéhydes + Composés nitrés**
- Les composés nitrés se condensent avec les aldéhydes, réaction catalysée par les bases et faiblement exothermique. Le formol réagit de cette manière avec le nitrométhane
- 5 + 28**     **Aldéhydes + Hydrocarbures insaturés**
- Les diènes conjugués comme le butadiène réagissent avec les aldéhydes  $\alpha$ - $\beta$  insaturés à haute température (réaction de Diels-Alder). Cette réaction peut être exothermique

- 5 + 30 Aldéhydes + Peroxydes organiques**
- Ce mélange forme des  $\alpha$ -hydroxy peroxydes très instables à la chaleur ou aux chocs. La formation de radicaux libres dans ces conditions peut conduire à une réaction en chaîne fortement exothermique.
- 5 + 33 Aldéhydes + Sulfures**
- Les sulfures en milieu aqueux réagissent facilement avec les aldéhydes pour former des gemhydroxythiols avec dégagement de chaleur
- 5 + 104 Aldéhydes + Agents oxydants**
- Les aldéhydes sont très facilement oxydés en acides carboxyliques correspondants ou subissent une destruction complète. Dans les deux cas, la réaction est fortement exothermique
- 5 + 105 Aldéhydes + Agents réducteurs**
- Les aldéhydes sont facilement réduits en alcools. Les réducteurs très basiques peuvent déclencher des réactions de condensation avec dégagement d'hydrogène
- 6 + 21 Amides + Métaux alcalins et alcalino-terreux**
- Les amides peuvent perdre les protons portés par l'azote avec dégagement exothermique d'hydrogène
- 6 + 24 Amides + Métaux toxiques et leurs sels**
- Les amides liquides de faible poids moléculaire peuvent agir comme solvant ionisant et dissoudre ces composés
- 6 + 104 Amides + Agents oxydants**
- L'oxydation totale des amides est exothermique et provoque des émissions d'oxydes d'azote
- 6 + 105 Amides + Agents réducteurs**
- Les réducteurs peuvent arracher les protons portés par l'azote avec dégagement exothermique d'hydrogène
- 7 + 12 Amines + Dithiocarbamates**
- Peu d'informations sont disponibles, mais le mélange de ces composés doit être évité car probablement dangereux

- 7 + 17 Amines + Dérivés halogénés**
- Les amines sont facilement alkylées par les dérivés halogénés avec formation d'amines tertiaires ou d'ammoniums quaternaires, réactions faiblement exothermiques
- 7 + 18 Amines + Isocyanates**
- Les amines réagissent comme des bases organiques et catalysent la polymérisation exothermique des isocyanates. La réaction, si elle n'est pas contrôlée peut devenir très violente
- 7 + 21 Amines + Métaux alcalins et alcalino-terreux**
- Ces métaux peuvent se dissoudre dans les amines comme dans l'ammoniac pour donner une solution d'électrons solvatés très réductrice. Ces solutions peuvent évoluer vers la formation d'amidures et un dégagement d'hydrogène
- 7 + 24 Amines + Métaux toxiques et leurs sels**
- Les amines agissent comme tensio-actifs et favorisent la dissolution de ces composés dans l'eau
- 7 + 30 Amines + Peroxydes organiques**
- Les amines sont très sensibles à l'oxydation et sont donc décomposées par les peroxydes, les peracides ou les hydroperoxydes avec formation de gaz toxiques (oxydes d'azote) et dégagement de chaleur. On peut également observer des transferts radicalaires d'hydrogène avec initiation de polymérisations
- 7 + 34 Amines + Epoxydes**
- Les amines se condensent avec les époxydes par ouverture du cycle, la réaction est exothermique et peut initier des réactions de polymérisation
- 7 + 104 Amines + Agents oxydants**
- L'oxydation totale des amines est fortement exothermique et provoque l'émission de fumées toxiques (oxydes d'azote)
- 7 + 105 Amines + Agents réducteurs**
- Les composés organométalliques subissent une protonolyse exothermique de la part des amines primaires et secondaires avec formation des alcanes correspondants. Certains agents réducteurs

peuvent agir par arrachement du proton et provoquer une émission d'hydrogène

**8 + 9 Composés azoïques + Carbamates**

Les diazoalcanes s'additionnent sur le carbonyle des isocyanates avec libération d'azote. Les sels de diazonium aromatiques peuvent également réagir sur l'azote des isocyanates avec également production d'azote. Les hydrazines s'additionnent sur les isocyanates avec formation d'hydrazones et dégagement de chaleur

**8 + 11 Composés azoïques + Cyanures**

Les sels de diazonium aromatiques peuvent réagir avec les cyanures métalliques pour former des nitriles, des sels minéraux et dégagement d'azote.

**8 + 12 Composés azoïques + Dithiocarbamates**

Peu d'informations sont disponibles, mais le mélange de ces composés doit être évité car probablement dangereux

**8 + 13 Composés azoïques + Esters**

Les diazoalcanes et spécialement le diazométhane se comportent comme des agents alkylants et peuvent réagir avec certains esters. Cette réaction est exothermique mais limitée à quelques esters réactifs (malonate d'éthyle p. ex.)

**8 + 17 Composés azoïques + Dérivés halogénés**

Les diazoalcanes peuvent se comporter comme des nucléophiles et réagir par substitution sur les dérivés halogénés avec production d'azote. Les hydrazines réagissent comme les amines et sont alkylées dans ces conditions

**8 + 19 Composés azoïques + Cétones**

Quoique moins réactives que les aldéhydes, les cétones réagissent avec les diazoalcanes avec dégagement d'azote. Les hydrazines se condensent sur les cétones pour fournir des hydrazones

**8 + 20 Composés azoïques + Mercaptans**

Les sels de diazonium aromatiques réagissent avec les mercaptans pour donner des thioéthers aromatiques et un dégagement d'azote



- 8 + 21**      **Composés azoïques + Métaux alcalins et alcalino-terreux**
- Réaction par transfert électronique exothermique et dégagement d'azote
- 8 + 22**      **Composés azoïques + Métaux pulvérulents**
- Ces métaux de grande surface spécifique peuvent initier l'inflammation de l'hydrazine et de ces dérivés légers dans l'air (métaux pyrophoriques), formation probable de fumées toxiques (oxydes d'azote). Les diazoalcanes se polymérisent en présence de cuivre et d'autres métaux, réaction très exothermique
- 8 + 23**      **Composés azoïques + Métaux divers**
- L'hydrazine et ces dérivés organiques légers peuvent s'enflammer au contact d'une surface métallique
- 8 + 25**      **Composés azoïques + Nitrures**
- Peu d'informations sont disponibles, mais le mélange de ces composés doit être évité car probablement dangereux
- 8 + 30**      **Composés azoïques + Peroxydes organiques**
- Les hydrazones sont oxydées de manière explosive par les peroxydes organiques avec formation d'oxydes d'azote. Les diazoalcanes forment des peroxydes très instables lorsqu'ils sont traités par les hydroperoxydes. Comme les peroxydes, les composés azoïques sont relativement sensibles à la fission homolytique, un mélange de ces composés soumis à la chaleur ou à la lumière résulte en une réaction en chaîne exothermique extrêmement rapide
- 8 + 31**      **Composés azoïques + Phénols et crésols**
- Les sels de diazonium aliphatiques et aromatiques réagissent avec les phénols pour donner des éthers avec dégagement d'azote
- 8 + 32**      **Composés azoïques + Composés organophosphorés**
- Peu d'informations sont disponibles, mais le mélange de ces composés doit être évité car probablement dangereux
- 8 + 33**      **Composés azoïques + Sulfures**
- L'addition des sels de diazonium à des solutions de sulfure de sodium, de bisulfites ou de polysulfures provoque une explosion même à froid

- 8 + 34      Composés azoïques + Epoxydes**
- Les réactions d'ouverture de cycle et de polymérisation sont possibles avec les sels de diazonium par attaque sur l'oxygène ou sur le carbone avec dégagement d'azote. Les hydrazines réagissent comme les amines par ouverture exothermique du cycle
- 8 + 102      Composés azoïques + Explosifs**
- Les composés diazo aliphatiques ou aromatiques sont très réactifs et peuvent subir de nombreuses interactions avec les explosifs. Toute élévation de température ou choc peut faire détoner le mélange
- 8 + 103      Composés azoïques + Composés polymérisables**
- L'ion diazonium peut se comporter comme un acide de Lewis et catalyser les polymérisations cationiques. Les diazoalcanes peuvent s'ajouter sur les composés insaturés et déclencher leur polymérisation. Les hydrazines sont suffisamment basiques pour initier une polymérisation anionique
- 8 + 104      Composés azoïques + Agents oxydants**
- Les composés « azo », « diazo » et les hydrazines réagissent avec les oxydants forts. Réaction exothermique, explosive dans le cas des hydrazines, avec dégagement de fumées toxiques (oxydes d'azote)
- 8 + 105      Composés azoïques + Agents réducteurs**
- De nombreuses réactions peuvent se produire entre les sels de diazonium et les réducteurs forts avec dégagement de chaleur et production d'azote. Les diazoalcanes réagissent avec tous les réducteurs pour donner un grand nombre de produits, ces réactions sont fortement exothermiques
- 8 + 106      Composés azoïques + Déchets en solution aqueuse**
- Les composés « diazo » sont détruits par l'eau avec formation d'azote
- 8 + 107      cf. 1 + 107**
- 9 + 10      Carbamates + Bases fortes**
- L'hydrolyse basique des carbamates est fortement exothermique, les produits formés sont les amines et le gaz carbonique qui provient de la décarboxylation des acides carbamiques intermédiaires

- 9 + 21      Carbamates + Métaux alcalins et alcalino-terreux**
- Ces métaux réagissent facilement avec les carbamates. Une réaction redox violente peut se produire avec dégagement d'hydrogène et inflammation du mélange
- 9 + 22      Carbamates + Métaux pulvérulents**
- Peu d'informations sont disponible, mais le mélange de ces composés doit être évité car probablement dangereux
- 9 + 25      Carbamates + Nitrures**
- Les nitrures sont des bases fortes et peuvent extraire le proton porté par l'azote, formation d'ammoniac toxique et inflammable et décomposition en produits azotés divers
- 9 + 30      Carbamates + Peroxydes organiques**
- On peut observer une oxydation sélective exothermique sur l'azote ou une oxydation totale avec production de fumées toxiques (oxydes d'azote) et grand dégagement de chaleur. La réaction initiale peut conduire à une décomposition explosive des peroxydes
- 9 + 104     Carbamates + Agents oxydants**
- L'oxydation totale des carbamates est fortement exothermique et conduit à l'émission de fumées toxiques (oxydes d'azote)
- 10 + 13     Bases fortes + Esters**
- Saponification des esters avec formation d'alcool et du sel de l'acide correspondant
- 10 + 17     Bases fortes + Dérivés halogénés**
- Les bases diluées transforment les dérivés halogénés aliphatiques en alcools alors que les bases concentrées forment des alcènes et des alcynes inflammables par élimination
- 10 + 18     Bases fortes + Isocyanates**
- L'hydrolyse basique des diisocyanates provoque leur polymérisation exothermique. Les monoisocyanates dans les mêmes conditions se décomposent en amines et en gaz carbonique
- 10 + 19     Bases fortes + Cétones**
- Réactions d'autocondensation exothermiques des cétones dans ces conditions

- 10 + 21 Bases fortes + Métaux alcalins et alcalino-terreux**  
L'eau des solutions basiques réagit avec ces métaux pour donner de l'hydrogène inflammable
- 10 + 22 Bases fortes + Métaux pulvérulents**  
Quelques métaux comme l'aluminium, le magnésium, le zinc et le béryllium se dissolvent dans les bases fortes avec production d'hydrogène. Si le métal possède une très grande surface spécifique, la réaction peut devenir explosive
- 10 + 23 Bases fortes + Métaux sous toutes formes**  
Réaction identique à la précédente mais beaucoup plus lente
- 10 + 24 Bases fortes + Métaux toxiques et leurs sels**  
Un grand nombre d'oxydes et sels de métaux toxiques (  $\text{PbCO}_3$ ,  $\text{PbCrO}_4$ ,  $\text{Cd}(\text{CN})_2$ ,  $\text{As}_2\text{O}_3$ ,  $\text{AsF}_5$ ,  $\text{AgCrO}_4$ ,  $\text{ZnCO}_3$ ,  $\text{Zn}(\text{CN})_2$ , etc ...) se dissolvent dans les bases
- 10 + 25 Bases fortes + Nitrures**  
Peu d'informations sont disponible, mais le mélange de ces composés doit être évité car probablement dangereux
- 10 + 26 Bases fortes + Nitriles**  
Peu d'informations sont disponible, mais le mélange de ces composés doit être évité car probablement dangereux
- 10 + 27 Bases fortes + Composés nitrés**  
Les nitroalcanes forment des sels solubles dans l'eau en présence de base forte. Ces sels sont explosifs lorsqu'ils sont secs
- 10 + 32 Bases fortes + Composés organophosphorés**  
Ces composés subissent une hydrolyse alcaline généralement exothermique. Dans ces conditions les composés thiophosphorés peuvent subir un réarrangement explosif
- 10 + 34 Bases fortes + Epoxydes**  
La coupure basique des époxydes peut dégénérer en une polymérisation fortement exothermique

- 10 + 102 Bases fortes + Explosifs**  
L'hydrolyse alcaline de ces composés peut être suffisamment exothermique pour en provoquer la détonation
- 10 + 103 Bases fortes + Composés polymérisables**  
Ces composés peuvent subir une polymérisation anionique exothermique en présence de base
- 10 + 107 cf. 1 + 107**
- 11 + 17 Cyanures + Dérivés halogénés**  
Substitution nucléophile et formation de nitriles
- 11 + 18 Cyanures + Isocyanates**  
Décomposition exothermique des isocyanates aussi bien due à l'eau de solvatation qu'au caractère basique des cyanures, formation d'amines et de gaz carbonique
- 11 + 19 Cyanures + Cétones**  
Formation peu exothermique de cyanhydrines
- 11 + 21 Cyanures + Métaux alcalins et alcalino-terreux**  
L'acide cyanhydrique peut réagir avec ces métaux et dégagement d'hydrogène
- 11 + 25 Cyanures + Nitrures**  
Réaction possible avec formation d'ammoniac toxique et inflammable
- 11 + 30 Cyanures + Peroxydes organiques**  
Les cyanures métalliques et l'acide cyanhydrique sont facilement oxydés et peuvent réagir de façon explosive avec les peroxydes et les hydroperoxydes. Formation de fumées toxiques (oxydes d'azote)
- 11 + 34 Cyanures + Epoxydes**  
Les solutions de cyanures sont suffisamment basiques pour initier l'ouverture et la polymérisation exothermique des époxydes
- 11 + 104 Cyanures + Agents oxydants**  
Les cyanures métalliques et l'acide cyanhydrique sont facilement oxydés. Formation de fumées toxiques (oxydes d'azote)

- 11 + 107** cf. 1 + 107
- 12 + 21** **Dithiocarbamates + Métaux alcalins et alcalino-terreux**
- Une réaction entre ces métaux et la grande densité électronique du groupe disulfure est possible mais peu décrite. Si elle se produit, elle sera exothermique et produira des fumées toxiques (oxydes d'azote)
- 12 + 30** **Dithiocarbamates + Peroxydes**
- L'oxydation sera exothermique et produira des oxydes d'azote et de soufre toxiques
- 12 + 103** **Dithiocarbamates + Composés polymérisables**
- Peu d'informations sont disponibles, mais le mélange de ces composés doit être évité car probablement dangereux
- 12 + 104** **Dithiocarbamates + Agents oxydants**
- L'oxydation des thiocarbamates produira des fumées toxiques (oxydes d'azote et de soufre)
- 12 + 105** **Dithiocarbamates + Agents réducteurs**
- La coupure réductrice de la liaison carbone-soufre produira un dégagement d'hydrogène sulfuré toxique et inflammable
- 12 + 106** **Dithiocarbamates + Déchets aqueux**
- Les dithiocarbamates sont hydrolysés avec formation de sulfure de carbone toxique et extrêmement inflammable
- 12 + 107** cf. 1 + 107
- 13 + 21** **Esters + Métaux alcalins et alcalino-terreux**
- Réactions de condensation des esters avec formation d'hydrogène
- 13 + 25** **Esters + Nitrures**
- Les nitrures peuvent déprotomer les esters avec formation d'ammoniac toxique et inflammable, réaction exothermique. Les nitrures des métaux de transition sont inertes
- 13 + 102** **Esters + Explosifs**
- Les esters peuvent former avec certains explosifs (nitrates métalliques) des composés oxygénés encore plus instables. Ils

peuvent également réagir avec les autres composés explosifs et provoquer leur décomposition explosive

**13 + 104 Esters + Agents oxydants**

Oxydation exothermique de la partie organique des esters

**14 + 104 Ethers + Agents oxydants**

Les éthers peuvent réagir violemment avec les oxydants pour former des composés instables qui peuvent se décomposer avec inflammation et explosion

**14 + 107 cf. 1 + 107**

**15 + 107 cf. 1 + 107**

**16 + 104 Hydrocarbures aromatiques + Agents oxydants**

Réaction violente avec grand dégagement de chaleur et inflammation possible

**17 + 20 Dérivés halogénés + Mercaptans**

Réaction de substitution peu exothermique qui produit des thioéthers

**17 + 21 Dérivés halogénés + Métaux alcalins et alcalino-terreux**

Ces métaux forment avec les dérivés halogénés des mélanges explosifs

**17 + 22 Dérivés halogénés + Métaux pulvérulents**

Les métaux sous cette forme sont très réactifs et peuvent provoquer des réactions violentes avec les dérivés halogénés. Des explosions sont possibles avec l'aluminium, le magnésium, le zinc, le zirconium et leurs alliages

**17 + 23 Dérivés halogénés + Métaux sous toutes formes**

Réaction exothermique spécialement avec l'aluminium et le magnésium. La formation des halogénures métalliques peut catalyser ces réactions et provoquer des explosions

**17 + 25 Dérivés halogénés + Nitrures**

On peut observer une substitution exothermique mais la formation d'ammoniac est plus probable

- 17 + 30**      **Dérivés halogénés + Peroxydes**
- Les peroxydes et les hydroperoxydes peuvent initier la décomposition radicalaire des dérivés halogénés. Cette réaction peut devenir explosive avec les peroxydes les plus réactifs
- 17 + 104**      **Dérivés halogénés + Agents oxydants**
- Les dérivés halogénés sont facilement oxydés avec production d'acides halogénés toxiques et corrosifs
- 17 + 105**      **Dérivés halogénés + Agents réducteurs**
- Les hydrures de bore et les organoboranes forment des mélanges explosifs avec les dérivés halogénés
- 17 + 107**      **cf. 1 + 107**
- 18 + 20**      **Isocyanates + Mercaptans**
- Addition peu exothermique des mercaptans aux isocyanates. Les diisocyanates avec les dimercaptans peuvent se polymériser avec un grand dégagement de chaleur
- 18 + 21**      **Isocyanates + Métaux alcalins et alcalino-terreux**
- Ces métaux peuvent déprotoner les isocyanates aliphatiques avec dégagement d'hydrogène. Il peut y avoir également transfert électronique exothermique et réduction du groupe isocyanate
- 18 + 22**      **Isocyanates + Métaux pulvérulents**
- Les plus réactifs de ces métaux, l'aluminium, le magnésium, le zinc, le zirconium et leurs alliages peuvent déprotoner les isocyanates avec formation d'hydrogène. La décomposition des isocyanates est également possible
- 18+ 25**      **Isocyanates + Nitrures**
- Peu d'informations sont disponible, mais le mélange de ces composés doit être évité car probablement dangereux
- 18 + 30**      **Isocyanates + Peroxydes organiques**
- Les isocyanates forment des peroxy-carbamates avec les hydroperoxydes, ces produits peuvent à leur tour se décomposer avec formation de gaz carbonique et de radicaux libres qui peuvent initier des réactions en chaînes. Les peroxydes réagissent avec les isocyanates pour donner des carbamates avec dégagement de chaleur



**18 + 31      Isocyanates + Phénols et crésols**

Formation exothermique de carbamates d'aryle. Les polyphénols réagissent avec les diisocyanates par polymérisation fortement exothermique. Cette réaction peut être catalysée par les métaux

**18 + 33      Isocyanates + Sulfures**

Les sulfures sont solubles dans les isocyanates. Une attaque peut se produire sur le groupe carbonyle avec dégagement de chaleur. Si les sulfures sont en solution aqueuse, c'est l'eau qui réagit préférentiellement avec formation de gaz carbonique par décarboxylation de l'acide carbamique intermédiaire

**18 + 104    Isocyanates + Agents oxydants**

L'oxydation des isocyanates se produit avec grand dégagement de chaleur, inflammation possible et production de fumées toxiques (oxydes d'azote)

**18 + 106    Isocyanates + Déchets aqueux**

La réaction des isocyanates avec l'eau forme des acides carbamiques qui se décarboxylent avec production de gaz carbonique. Cette réaction est exothermique

**18 + 107    cf. 1 + 107**

**19 + 20      Cétones + Mercaptans**

Les cétones réagissent sur les mercaptans pour former des gem-thioéthers

**19 + 21      Cétones + Métaux alcalins et alcalino-terreux**

Les cétones énolisables sont déprotonés avec formation d'hydrogène. Possibilité de duplication réductrice radicalaire faiblement exothermique

**19 + 25      Cétones + Nitrures**

Les nitrures sont faiblement solubles dans les cétones. Déprotonation possible avec formation d'ammoniac toxique et inflammable. D'autres réactions exothermiques sont possibles

**19 + 30      Cétones + Peroxydes et hydroperoxydes**

Formation de diperoxydes et de composés peroxy divers. Ceux-ci sont très sensibles à la chaleur et aux chocs

- 19 + 104 Cétones + Agents oxydants**  
Oxydation exothermique avec inflammation possible
- 19 + 105 Cétones + Agents réducteurs**  
Réduction facile des cétones en alcools avec production possible d'hydrogène
- 19 + 107 cf. 1 + 107**
- 20 + 21 Mercaptans + Métaux alcalins et alcalino-terreux**  
Formation exothermique des thiolates avec dégagement d'hydrogène
- 20 + 22 Mercaptans + Métaux pulvérulents**  
Les métaux sous cette forme peuvent réagir violemment avec les mercaptans pour former des thiolates avec dégagement d'hydrogène. Les métaux les plus réactifs sont l'aluminium, le magnésium, le béryllium, le zinc et le zirconium. Cette réaction peut devenir explosive
- 20 + 25 Mercaptans + Nitrures**  
Les nitrures sont solubles dans les mercaptans et peuvent se décomposer avec formation d'ammoniac toxique et inflammable
- 20 + 30 Mercaptans + Peroxydes organiques**  
L'hydrogène porté par le soufre peut être extrait par les radicaux formés dans la décomposition des peroxydes. Les réactions en chaîne créées peuvent être extrêmement exothermiques. Les peroxydes de bas poids moléculaire, étant les plus instables, peuvent alors exploser
- 20 + 34 Mercaptans + Epoxydes**  
Les époxydes sont coupés par les mercaptans avec dégagement de chaleur. Les mercaptans difonctionnels peuvent se polymériser avec les époxydes, réaction très exothermique
- 20 + 104 Mercaptans + Agents oxydants**  
L'oxydation destructive des mercaptans s'accompagne d'un grand dégagement de chaleur avec émission d'oxydes de soufre

- 20 + 105      Mercaptans + Agents réducteurs**
- A part les métaux déjà vus, les autres agents réducteurs peuvent réagir avec dégagement d'hydrogène
- 20 + 107      cf. 1 + 107**
- 21 + 25      Métaux alcalins et alcalino-terreux + Nitrures**
- La plupart des nitrures sont très instables et peuvent réagir très violemment avec ces métaux
- 21 + 26      Métaux alcalins et alcalino-terreux + Nitriles**
- Ces métaux peuvent déprotoner les nitriles pour donner de l'hydrogène avec dégagement de chaleur. Certains nitriles peuvent se polymériser dans ces conditions, réaction très exothermique
- 21 + 27      Métaux alcalins et alcalino-terreux + Composés nitrés**
- Les dérivés nitrés aliphatiques peuvent être déprotonés par ces métaux. Les sels métalliques obtenus sont très instables et peuvent détoner au choc ou à une augmentation de température. Les dérivés nitrés aromatiques peuvent subir une réaction redox exothermique
- 21 + 30      Métaux alcalins et alcalino-terreux + Peroxydes organiques**
- Réaction redox exothermique
- 21 + 31      Métaux alcalins et alcalino-terreux + Phénols et crésols**
- Les phénols sont déprotonés par ces métaux avec production d'hydrogène. La réaction est suffisamment exothermique pour enflammer le mélange
- 21 + 32      Métaux alcalins et alcalino-terreux + Composés organophosphorés**
- Transfert électronique exothermique du métal vers le phosphore. Dans le cas des composés thiophosphorés, la réaction peut être suffisamment violente pour initier un réarrangement explosif. Le parathion et le méthylparathion sont particulièrement sensibles à cette réaction
- 21 + 101      Métaux alcalins et alcalino-terreux + Matériaux combustibles**
- La plupart de ces matériaux, particulièrement ceux qui sont humides, réagissent violemment avec ces métaux avec production de gaz inflammables. La chaleur produite peut enflammer le mélange

**21 + 102 Métaux alcalins et alcalino-terreux + Explosifs**

La plupart des explosifs contiennent un grand pourcentage d'oxygène, ce qui les rend très sensibles à l'action des métaux très réducteurs. La réaction est suffisamment violente pour déclencher l'explosion

**21 + 103 Métaux alcalins et alcalino-terreux + Composés polymérisables**

Le transfert électronique de ces métaux peut initier une polymérisation radicalaire souvent très exothermique

**21 + 104 Métaux alcalins et alcalino-terreux + Agents oxydants**

Ces métaux sont des réducteurs très puissants, ils réagissent donc très violemment avec les oxydants avec production d'une grande quantité de chaleur qui provoque incendie et explosion

**21 + 106 Métaux alcalins et alcalino-terreux + Déchets aqueux**

Ces métaux réagissent violemment dans l'eau avec production d'hydrogène. Le sodium et le potassium provoqueront l'inflammation du mélange

**21 + 107 cf. 1 + 107**

**22 + 28 Métaux pulvérulents + Hydrocarbures insaturés**

Les dérivés de l'acétylène réagissent avec le cuivre et l'argent pour former des acétylures. Ceux-ci sont très sensibles aux chocs et à la chaleur et régénèrent les carbures par contact avec l'eau

**22 + 30 Métaux pulvérulents + Peroxydes organiques**

Les peroxydes d'acyle et les ozonides sont particulièrement réactifs avec ces métaux. Ils peuvent se décomposer violemment avec génération de chaleur et de gaz. Les peracides sont des oxydants puissants et leur réaction avec les métaux est fortement exothermique. Les autres composés peroxydiques peuvent se décomposer par contact avec ces métaux et générer de l'oxygène

**22 + 34 Métaux pulvérulents + Epoxydes**

La couche d'oxyde portée par ces métaux finement divisés peut catalyser l'ouverture et la polymérisation exothermique des époxydes

- 22 + 102 Métaux pulvérulents + Explosifs**
- La plupart des substances explosives sont des oxydants forts et peuvent détoner par contact avec ces métaux
- 22 + 103 Métaux pulvérulents + Composés polymérisables**
- La couche d'oxyde portée par ces métaux peut catalyser la polymérisation exothermique de quelques monomères
- 22 + 104 Métaux pulvérulents + Agents oxydants**
- Ces métaux sont facilement oxydés, la réaction procède avec un grand dégagement de chaleur qui peut provoquer inflammation et explosion
- 22 + 106 Métaux pulvérulents + Déchets aqueux**
- Certains de ces métaux réagissent avec l'eau et dégagement exothermique d'hydrogène. Dans une enceinte confinée, une explosion peut se produire
- 22 + 107 cf. 1 + 107**
- 23 + 103 Métaux divers + Composés polymérisables**
- La polymérisation exothermique de certains monomères peut être catalysée par certaines surfaces métalliques
- 23 + 104 Métaux divers + Agents oxydants**
- La plupart des métaux subissent une oxydation exothermique qui peut dégénérer en incendie
- 23 + 107 cf. 1 + 107**
- 24 + 26 Métaux toxiques et leurs sels + Nitriles**
- L'acétonitrile et la cyanhydrine de l'acétone sont utilisés comme solvant non aqueux pour la plupart des sels minéraux
- 24 + 30 Métaux toxiques et leurs sels + Peroxydes organiques**
- La plupart des sels métalliques catalysent la décomposition exothermique des peroxydes et des hydroperoxydes organiques avec formation d'oxygène et de gaz carbonique. Les peroxydes d'acyle sont spécialement sensibles et subissent une décomposition explosive en présence des métaux lourds et de leurs sels. Les hydroperoxydes sont un peu plus stables mais peuvent subir une réaction semblable

**24 + 34 Métaux toxiques et leurs sels + Epoxydes**

La polymérisation des époxydes, spécialement de l'oxyde d'éthylène et de l'oxyde de propylène sont catalysées par les acides de Lewis comme  $\text{SnCl}_4$ ,  $\text{ZnCl}_2$ ,  $\text{SbCl}_3$ ,  $\text{ZrCl}_4$ ,  $\text{CrCl}_3$ ,  $\text{CoCl}_2$  et  $\text{HgCl}_2$ . Les composés organométalliques du zinc peuvent également réagir avec dégagement de chaleur

**24 + 102 Métaux toxiques et leurs sels + Explosifs**

Les sels dérivant de la plupart de ces métaux réagissent de façon exothermique avec les explosifs et provoquent leur détonation. La réactivité est associée avec l'anion du sel plutôt qu'avec le cation

**24 + 103 Métaux toxiques et leurs sels + Composés polymérisables**

Les monomères vinyliques et les diènes sont susceptibles de se polymériser en présence d'acide de Lewis (voir 24 + 34). Un cocatalyseur comme l'eau ou l'acide chlorhydrique en très petite quantité est souvent nécessaire

**24 + 106 Métaux toxiques et leurs sels + Déchets aqueux**

Quelques uns de ces sels sont solubles dans l'eau

**24 + 107 cf. 1 + 107**

**25 + 26 Nitrures + Nitriles**

Les nitrures ioniques sont solubles dans les nitriles. Ils peuvent également déprotoner les nitriles avec production d'ammoniac toxique et inflammable et dégagement de chaleur

**25 + 27 Nitrures + Composés nitrés**

Quand ils sont solubles, les nitrures peuvent déprotoner les composés nitrés aliphatiques avec production exothermique d'ammoniac toxique et inflammable. Le mélange des nitrures ioniques et des composés aromatiques polynitrés est sensible à la chaleur et aux chocs. Les nitrures peuvent initier la détonation de tels composés nitrés

**25 + 30 Nitrures + Peroxydes organiques**

Par combinaison avec les hydroperoxydes, les nitrures peuvent extraire le proton peroxydique avec formation exothermique d'ammoniac toxique et inflammable. L'anion formé peut alors se décomposer avec un excès d'hydroperoxyde et formation d'oxygène. Cette décomposition peut provoquer inflammation et explosion.

Certains hydroperoxydes peuvent former des sels stables qui se décomposent alors par chauffage. Les nitrures peuvent également déprotomer le carbone peroxydique ce qui provoque une scission homolytique du peroxyde avec dégagement de chaleur

**25 + 31 Nitrures + Phénols et crésols**

Réaction acide-base avec production d'ammoniac toxique et inflammable

**25 + 34 Nitrures + Epoxydes**

L'ouverture basique des époxydes peut conduire à leur polymérisation exothermique

**25 + 101 Nitrures + Matériaux combustibles**

La plupart de ces matériaux contiennent de l'eau qui forme de l'ammoniac avec les nitrures. Les nitrures sont également pyrophoriques et peuvent initier la combustion en présence d'air

**25 + 102 Nitrures + Explosifs**

Les nitrures ioniques sont pyrophoriques et sensibles aux chocs et à la chaleur. Ils peuvent agir comme détonateur sur la plupart des substances explosives

**25 + 103 Nitrures + Composés polymérisables**

Les nitrures peuvent catalyser les polymérisations anioniques des monomères vinyliques et des diènes, réactions très exothermiques

**25 + 104 Nitrures + Agents oxydants**

Les nitrures ioniques sont pyrophoriques et peuvent s'enflammer ou exploser au contact des oxydants forts

**25 + 106 Nitrures + Déchets aqueux**

Hydrolyse facile des nitrures avec production d'ammoniac toxique et inflammable

**25 + 107 cf. 1 + 107**

**26 + 30 Nitrile + Peroxydes organiques**

Certains nitriles comme le phénylacétonitrile sont convertis en peroxyesters par les hydroperoxydes avec formation d'acide cyanhydrique. La polymérisation de l'acrylonitrile peut être initiée par les peroxydes, le plus utilisé est le peroxyde de benzoyle.

L'oxydation totale des nitriles par les peracides est fortement exothermique et provoque un dégagement de fumées toxiques (oxydes d'azote)

**26 + 104 Nitriles + Agents oxydants**

L'oxydation totale des nitriles peut conduire à une inflammation du mélange et à une émission de fumées toxiques (oxydes d'azote)

**26 + 105 Nitriles + Agents réducteurs**

Les nitriles sont réduits en amines par les hydrures, notamment par  $AlLiH_4$  avec dégagement de chaleur. De l'hydrogène peut se former par déprotonation des nitriles aliphatiques

**27 + 104 Composés nitrés + Agents oxydants**

La plupart des composés nitrés peuvent se décomposer avec explosion. Les oxydants forts peuvent catalyser cette décomposition par oxydation de la partie organique. Des sels peuvent également se former, ceux-ci sont particulièrement sensibles aux chocs quand ils sont secs

**27 + 105 Composés nitrés + Agents réducteurs**

Un certain nombre de réducteurs se comportent comme des bases fortes et peuvent déprotoner les composés nitrés aliphatiques avec dégagement d'hydrogène et production de chaleur

**27 + 107 cf. 1 + 107**

**28 + 30 Hydrocarbures aliphatiques insaturés + Peroxydes organiques**

Les alcènes réagissent avec les peracides pour former des époxydes, cette réaction peut être exothermique. Les peroxydes attaquent les oléfines par un mécanisme radicalaire qui peut conduire à une polymérisation fortement exothermique. Les hydrocarbures acétyléniques subissent des réactions semblables mais plus lentes

**28 + 104 Hydrocarbures aliphatiques insaturés + Agents oxydants**

L'oxydation totale peut s'accompagner de l'inflammation de l'hydrocarbure

**28 + 107 cf. 1 + 107**

**29 + 104 Hydrocarbures aliphatiques saturés + Agents oxydants**

Ces hydrocarbures s'oxydent avec dégagement de chaleur et peuvent s'enflammer au cours de la réaction



- 29 + 107**      **cf. 1 + 107**
- 30 + 31**      **Peroxydes organiques + Phénols et crésols**
- Oxydation des phénols faiblement exothermique en quinones ou substitution radicalaire sur le cycle aromatique. Ces oxydations sont catalysées par des traces métalliques
- 30 + 32**      **Peroxydes organiques + Composés organophosphorés**
- Peu d'informations sont disponible, mais le mélange de ces composés doit être évité car probablement dangereux
- 30 + 33**      **Peroxydes organiques + Sulfures**
- Les sulfures minéraux peuvent être oxydés avec formation de dioxyde de soufre toxique. Les ions métalliques peuvent catalyser la décomposition des peroxydes et des hydroperoxydes les plus instables
- 30 + 34**      **Peroxydes organiques + Epoxydes**
- Les hydroperoxydes sont connus pour ouvrir les époxydes par attaque nucléophile de l'anion peroxy. Une polymérisation peut se produire par combinaison d'époxydes allyliques et de peroxydes par un mécanisme radicalaire
- 30 + 101**      **Peroxydes organiques + Matériaux combustibles**
- La plupart de ces matériaux sont susceptibles d'être oxydés par les peroxydes avec dégagement de fumées toxiques. Une inflammation peut résulter de cette réaction dans certains cas
- 30 + 102**      **Peroxydes organiques + Explosifs**
- Si l'explosion ne se produit pas immédiatement au contact de ces deux types de substance, le mélange sera extrêmement instable et détonera au moindre choc ou à la chaleur
- 30 + 103**      **Peroxydes organiques + Composés polymérisables**
- Les doubles liaisons carbone-carbone sont très sensibles aux peroxydes et aux hydroperoxydes, la polymérisation radicalaire exothermique sera catalysée par ces substances
- 30 + 104**      **Peroxydes organiques + Agents oxydants**
- Les oxydants forts décomposent les peroxydes avec dégagement de chaleur et production d'oxygène et de gaz carbonique. Cette

décomposition peut être initiée par le caractère métallique des substances oxydantes

**30 + 105 Peroxydes organiques + Agents réducteurs**

Ces composés peuvent réagir avec explosion

**30 + 107 cf. 1 + 107**

**31 + 34 Phénols et crésols + Epoxydes**

Les époxydes sont coupés par les phénols en présence d'acide ou de base. Réaction faiblement exothermique qui peut conduire en certains cas à la polymérisation de l'époxyde

**31 + 104 Phénols et crésols + Agents oxydants**

Une oxydation douce est possible avec formation de cétones, quinones, acides carboxyliques et gaz carbonique. L'oxydation totale est très exothermique et peut conduire à l'inflammation du mélange

**31 + 105 Phénols et crésols + Agents réducteurs**

Les phénols sont déprotonés dans ces conditions avec formation d'hydrogène

**31 + 107 cf. 1 + 107**

**32 + 34 Composé organophosphorés + Epoxydes**

Peu d'informations sont disponible, mais le mélange de ces composés doit être évité car probablement dangereux

**32 + 104 Composé organophosphorés + Agents oxydants**

L'oxydation totale de ces composés est exothermique et produit des fumées toxiques d'oxydes d'azote, de soufre et de phosphore

**32 + 105 Composé organophosphorés + Agents réducteurs**

La réduction de ces composés peut s'accompagner du dégagement d'hydrogène sulfuré toxique et inflammable

**32 + 107 cf. 1 + 107**

**33 + 34 Sulfures + Epoxydes**

Les sulfures solubles peuvent ouvrir les époxydes par attaque nucléophile et initier une polymérisation exothermique

- 33 + 102 Sulfures + Explosifs**
- Les sulfures sont très réducteurs et peuvent initier l'explosion des composés les plus oxygénés
- 33 + 104 Sulfures + Composés polymérisables**
- Les sulfures peuvent catalyser une polymérisation anionique exothermique
- 33 + 106 Sulfures + Déchets aqueux**
- Formation d'hydrogène sulfuré inflammable et toxique
- 33 + 107 cf. 1 + 107**
- 34 + 102 Epoxydes + Explosifs**
- Les époxydes de bas point moléculaire sont extrêmement inflammables et peuvent réagir de façon explosive avec les substances explosives les plus oxygénées
- 34 + 104 Epoxydes + Agents oxydants**
- L'oxydation totale est fortement exothermique et enflammera les époxydes les plus légers
- 34 + 105 Epoxydes + Agents réducteurs**
- La réduction des époxydes par les hydrures conduit aux alcools, la réaction est exothermique
- 34 + 107 cf. 1 + 107**
- 101 + 102 Matériaux combustibles + Explosifs**
- La plupart des explosifs sont oxydants et peuvent servir de comburants. Si la réaction n'est pas immédiate, le mélange est très instable
- 101 + 104 Matériaux combustibles + Agents oxydants**
- Mélange qui réagira avec dégagement de chaleur, inflammation ou explosion. Des gaz toxiques peuvent se former si le matériau comporte de l'azote, du soufre ou du phosphore

**101 + 105 Matériaux combustibles + Agents réducteurs**

Si ces matériaux sont humides, il peut se former de l'hydrogène. Certains réducteurs sont également pyrophoriques et peuvent catalyser l'inflammation en présence d'air

101 + 107 cf. 1 + 107

**102 + 103 Explosifs + Composés polymérisables**

La plupart des explosifs sont de bons oxydants et peuvent réagir de façon explosive avec les monomères

**102 + 104 Explosifs + Agents oxydants**

Les mélanges de ces deux types de substance sont extrêmement instables. La présence d'un oxydant peut catalyser la décomposition explosive des substances les plus oxygénées. Les autres explosifs comme les nitrures, les azotures ou les carbures peuvent être oxydés et réagir de façon explosive

**102 + 105 Explosifs + Agents réducteurs**

Comme les explosifs sont en général de bons oxydants, leur mélange avec les réducteurs peut être extrêmement violente

102 + 107 cf. 1 + 107

**103 + 104 Composés polymérisables + Agents oxydants**

Les monomères sont des composés organiques facilement combustibles et peuvent donc réagir violemment avec les oxydants forts, réaction exothermique et inflammation possible. Les monomères halogénés et azotés peuvent générer des fumées toxiques

**103 + 105 Composés polymérisables + Agents réducteurs**

La plupart des réducteurs peuvent être utilisés comme initiateur d'une polymérisation anionique. La réaction sera en général exothermique. Réactions compétitives avec dégagement d'hydrogène

103 + 107 cf. 1 + 107

**104 + 105 Agents oxydants + Agents réducteurs**

Ces composés réagissent violemment par contact

104 + 107 cf. 1 + 107

**105 + 106    Agents réducteurs + Déchets aqueux**

Les agents réducteurs les plus forts peuvent se décomposer dans l'eau avec production d'hydrogène, d'ammoniac, d'hydrogène sulfuré, de phosphine ou d'acétylène. La chaleur produite peut enflammer ces gaz

**105 + 107    cf. 1 + 107**

**106 + 107    cf. 1 + 107**

## *ANNEXE 3*

### *MECANISMES REACTIONNELS EN INCINERATION*

---

- 1- LE MECANISME REACTIONNEL DE LA COMBUSTION
- 2- INFLUENCE DES RADICAUX SUR LA COMBUSTION
- 3- INFLUENCE DE LA COMPOSITION REACTIFS-COMBURANT, LIMITES D'INFLAMMABILITE
- 4- INFLUENCE D'ADDITIFS SUR LA COMBUSTION
- 5- LES DIFFERENTS ELEMENTS STRUCTURAUX INFLUENÇANT LA COMBUSTIBILITE
- 6- ETUDE DE CAS SPECIFIQUES
  - 6-1- Les composés saturés
  - 6-2- Les composés insaturés

## 1- LE MECANISME REACTIONNEL DE LA COMBUSTION

Il est évident que l'expression d'une cinétique globale ne rend pas compte du mécanisme réel de la réaction chimique. Chaque réaction, qui doit mettre en jeu plus de deux (ou trois) partenaires à la fois, se fait par étapes élémentaires. Etapes dans lesquelles sont mis en jeu des radicaux libres. La réactivité de ces radicaux est très forte, d'où il résulte une vitesse réactionnelle parfois très élevée, c'est la combustion vive.

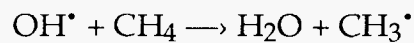
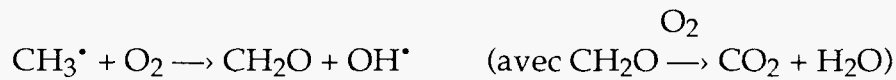
Exemple de la combustion du méthane :

### Initiation



Cette étape d'initiation a pour effet de créer un très petit nombre de radicaux.

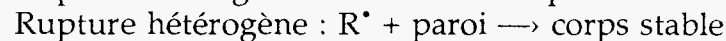
### Propagation



Les deux réactions ont donc transformé une mole de combustible et deux moles d'oxygène en produits finaux de combustion ; en même temps, le radical  $\text{CH}_3^\bullet$  est régénéré et peut recommencer le maillon de propagation un nombre infini de fois, brûlant à chaque maillon une mole de combustible. C'est donc la chaîne ainsi transformée qui fait avancer la combustion.

### Terminaison de la chaîne

La chaîne peut être terminée ou rompue, à savoir par une étape dite de rupture qui fait disparaître les radicaux  $\text{CH}_3^\bullet$  ou  $\text{OH}^\bullet$  qui sont les propagateurs de chaîne. Cette rupture peut avoir lieu en phase homogène ou en phase hétérogène lors d'une collision d'un radical sur une paroi (effet inhibiteur de la paroi).

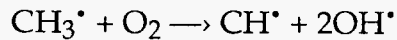


### Ramification de la chaîne

Au cours de la combustion, d'autres étapes élémentaires, qui augmentent le nombre de radicaux libres dans le système, peuvent intervenir.

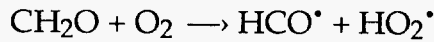
\* Ramification directe :

Elle se fait à partir d'un des réactifs primitifs (combustible ou comburant).



\* Ramification indirecte :

Elle se fait à partir d'une espèce intermédiaire élaborée elle-même par les étapes élémentaires de propagation :



Ces ramifications indirectes jouent un rôle important dans l'auto-inflammation des hydrocarbures.

## 2- INFLUENCE DES RADICAUX SUR LA COMBUSTION

Il faut, pour entretenir une combustion, une concentration en radicaux suffisante.

On désigne par  $d$  le groupement qui représente la probabilité pour qu'une collision biparticulaire (faisant intervenir un radical) soit suivie de ramification, c'est-à-dire que  $d$  traduit le fait qu'à partir de deux entités (dont un radical), on obtient deux radicaux (génération de radicaux).

On désigne d'autre part  $b$  la probabilité pour qu'une collision soit suivie de rupture c'est à dire :  $\text{R}^\bullet + \text{R}^\bullet \longrightarrow \text{R} - \text{R}'$  ou  $\text{R}^\bullet + \text{paroi}$   $\text{CH}_3^\bullet + \text{O}_2 \longrightarrow$  espèce stable, on obtient alors le critère chimique suivant :

La combustion se poursuit tant que  $d > b$ .

## 3- INFLUENCE DE LA COMPOSITION REACTIFS-COMBURANT, LIMITES D'INFLAMMABILITE

A pression constante, les températures d'auto-inflammation varient en fonction de la composition du mélange (richesse et degré de dilution) ; Remarquons qu'en fonction de la richesse du mélange, la température d'auto-inflammation passe par un minimum. Très souvent, on désigne cette valeur minimale de la température limite, mesurée à pression atmosphérique, sous le vocable "température d'auto-inflammation" d'un combustible, sans préciser de quelle richesse il s'agit ; cette manière de faire est visiblement inspirée par un souci de sécurité.

La limite inférieure (ou "trop pauvre") correspond au pourcentage volumique minimal du combustible dans l'air qui permet la combustion. Pour des compositions en dessous de la limite inférieure, la chaleur dégagée par la réaction est insuffisante pour élever la température des gaz avoisinants jusqu'à leur température d'inflammation. Pour des compositions au-dessus de la limite supérieure (ou "trop riche", ou contenant trop de combustible) d'inflammabilité, la réaction de combustion se bloque à la suite de réactions entre diverses espèces engendrées dans la zone où l'inflammation a été initiée.



La loi de Le Chatelier permet de prévoir la valeur des limites d'inflammabilité L des mélanges de combustibles. Elle s'applique surtout à la limite inférieure soit  $L_1, L_2, \dots, L_n$  les limites d'inflammabilité des différents combustibles ;  $C_1, C_2, \dots, C_n$  leur concentration en pourcentage dans le mélange des combustibles ; la limite d'inflammabilité L du mélange est donnée par la formule :

$$L = 100 / \sum_j (C_j / L_j)$$

#### 4- INFLUENCE D'ADDITIFS SUR LA COMBUSTION

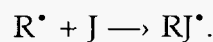
Avant d'étudier les effets de différents additifs, nous allons tout d'abord nous intéresser aux différents processus d'inhibition générés par ces additifs.

\* Les processus d'inhibition

*L'inhibition homogène :*

On peut prévoir un double effet d'inhibition en phase homogène :

- D'abord la capture de radicaux propagateurs de chaîne R par l'inhibiteur J qui le transforme en un radical  $RJ^\circ$  moins réactif :



Ceci a pour premier effet de diminuer la durée de vie des radicaux capables de donner lieu à des étapes de propagation, et en conséquence d'abaisser la vitesse fondamentale.

La seconde conséquence est une modification du poids moléculaire moyen ( $M_p$ ). Si par exemple on ajoute un peu d'acide bromhydrique à un mélange hydrocarbure/oxygène, le poids moyen des radicaux passe de 17 à 80 et donc diminue sensiblement la vitesse fondamentale.

Ces considérations permettent également de concevoir à priori la possibilité d'une action promotrice de certains additifs sur la vitesse de propagation. Mais pour les flammes d'hydrocarbures, aucun corps ne semble exercer sur celle-ci un effet promoteur, de sorte qu'on peut dire en généralisant que dans la combustion appliquée, il est impossible d'accélérer des vitesses de flamme avec des additifs.

*L'inhibition hétérogène :*

Les corps solides introduits dans la flamme peuvent agir comme inhibiteurs hétérogène de deux façons différentes. L'influence peut être purement thermique, c'est-à-dire agir par abaissement de la température, ou bien elle peut assumer un rôle cinétique en ce que la surface du solide provoque des ruptures de chaînes. On aboutit à l'extinction chimique vue plus haut :  $d < b$ .

#### \* Action sur le comburant

L'extinction d'un feu peut être exécutée soit en supprimant l'apport du comburant ou du combustible, soit en injectant un gaz inerte au sein de la vapeur en train de brûler. Le gaz inerte étouffe (éteint) le feu en faisant chuter la zone d'inflammabilité à zéro, montrant l'action inhibitrice de l'hélium. En fait, ces gaz inertes provoquent un refroidissement de la zone de combustion, via les collisions intermoléculaires, jusqu'en dessous de la température d'auto-inflammation.

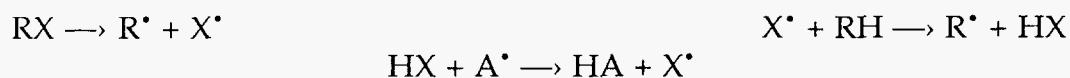
#### \* Effet des organométalliques

Concernant les phénomènes des auto-inflammations, disons un mot du problème de l'inhibition de ces dernières par des additifs chimiques. C'est un fait établi que certains corps tels les organométalliques, sont efficaces pour augmenter l'indice d'octane. Il n'y a plus aucun doute que ce soit le métal ou ses oxydes qui jouent comme piège pour les radicaux libres. Les organométalliques sont donc des inhibiteurs de combustion.

#### \* Effet des halogènes

Il n'est plus à démontrer non plus le caractère inhibiteur des halogènes pour la combustion. Ceux-ci sont d'ailleurs des inhibiteurs beaucoup plus efficaces que les gaz inertes pour défavoriser la flamme, en effet les halogènes empêchent la flamme de se former, ou du moins la réduisent par action chimique directe avec la réaction de combustion. Il a même été montré qu'il existe une relation directe entre le nombre d'halogènes de l'inhibiteur et sa faculté à lutter contre la combustion. Il a aussi été montré que la réaction d'inhibition ne diminuait en rien la température de flamme ; en fait, dans certains cas, l'action de l'inhibiteur provoque même une augmentation de la température de flamme.

La séquence de réaction traduisant cette inhibition est :



Où R est le radical inorganique, X l'halogène et A une chaîne de propagation active.

Comme application, on peut citer l'utilisation pour les extincteurs chimiques de bromure de méthyle. Leur présence relève considérablement le domaine d'inflammabilité et rend impossible l'existence d'une flamme.

#### \* Effet des peroxydes organiques

Les peroxydes organiques subissent très facilement une rupture homolytique de la liaison O-O et exercent donc une action promotrice très prononcée sur les flammes froides dont les délais d'ignition sont fortement raccourcis ou pratiquement supprimés ; on constate également que l'auto-inflammation est favorisée.

\* Effet des aldéhydes

Action du formaldéhyde HCHO.

Par introduction d'une certaine quantité de formaldéhyde dans un processus de combustion, les analyses faites sur les délais d'auto-inflammation ont mis en évidence un accroissement des concentrations de formaldéhyde. Cela montre le caractère inhibiteur du formaldéhyde, en effet, l'étape d'initiation :

$RH + O_2 \rightarrow R^* + HO_2^*$ , qui était à l'origine de nouveaux radicaux libres, se trouve maintenant relayée par l'étape de ramification du formaldéhyde :

$CH_2O + O_2 \rightarrow COH^* + HO_2^*$ , qui est beaucoup plus rapide, ayant une énergie d'activation de 32 kcal/mole, contre 48 pour l'étape d'initiation.

Il est connu depuis longtemps que l'acétaldéhyde abaisse fortement les pressions limites dans le domaine des basses températures, tandis que la limite dans le domaine à haute température reste inchangé.

Les aldéhydes exercent une influence très différente suivant leur nature et le domaine de température exploré. Ainsi le formaldéhyde, du moins lorsque la quantité introduite n'est pas trop petite, présente un effet inhibiteur très prononcé dans la partie basse température du domaine des flammes froides (basse température et haute pression) : il y provoque une élévation considérable de la pression limite de leur apparition et une prolongation de leur délai ; le même effet est constaté sur les réactions lentes. Par contre, à des températures suffisamment élevées, le formaldéhyde joue un rôle de promoteur et diminue les délais d'auto-inflammation.

L'acétaldéhyde, et d'une façon générale tous les aldéhydes supérieurs, ont un effet tout à fait opposé : dans le domaine des températures inférieures, il raccourcissent le délai d'auto-inflammation et celui de l'apparition de flammes froides en même temps qu'ils y abaissent la pression limite d'inflammation. Dans la région des hautes températures, la pression n'est pas modifiée et l'influence sur les délais est peu sensible.

\* Effet des oxydes d'azote

L'influence de l'addition d'oxydes d'azote (NO et NO<sub>2</sub>) est assez complexe comme on peut le constater ; elle dépend, comme dans le cas des aldéhydes, des conditions expérimentales de température et de pression. Il ressort néanmoins des observations rapportées, que, d'une façon générale, l'influence des oxydes d'azote, est plutôt inhibitrice sur les processus réactionnels propres aux flammes froides mais promotrice par contre pour l'inflammation ordinaire.

## 5- LES DIFFERENTS ELEMENTS STRUCTURAUX INFLUENÇANT LA COMBUSTIBILITE

Dans une série de parafines homologues, l'énergie minimum d'ignition se déplace vers les mélanges plus riches quand le nombre d'atome de carbone augmente, l'effet de la structure moléculaire pour un même nombre de carbone par contre est très faible.

D'une façon générale, les températures d'auto-inflammation diminuent pour les homologues parafiniques lorsque la taille de la molécule augmente. D'une manière générale :

- l'augmentation de l'insaturation dans une molécule de taille donnée augmente la vitesse de flamme
- l'augmentation de la longueur de la chaîne carbonée pour un composé insaturé diminue la vitesse de flamme.

## 6- ETUDE DE CAS SPECIFIQUES

### 6-1- Les composés saturés

#### a- Généralités

Dans la famille des composés saturés on trouve beaucoup de molécules halogénées et en particulier des hydrocarbures halogénés. Les hydrocarbures chlorés, par exemple, sont des déchets chimiques souvent présents.

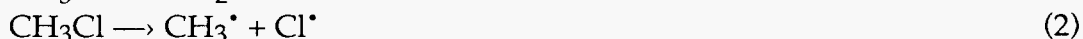
La présence du chlore est un facteur très important comme l'expliquent Wu et Bozzelli [1]. D'un côté, le chlore est connu pour accélérer la combustion des HC mais d'autre part le chlore inhibe l'oxydation de CO en CO<sub>2</sub> et promouvoir la formation d'hydrocarbures en C<sub>2</sub> comme C<sub>2</sub>H<sub>2</sub> et C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>.

Herron [2] a recueilli les constantes de vitesse des réactions de nombreux composés organiques saturés avec l'oxygène atomique.

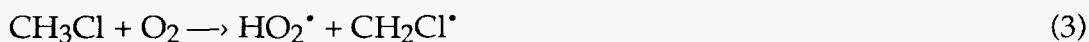
#### b- Le chlorométhane CH<sub>3</sub>Cl

Le plus simple de cette famille est le chlorométhane, très utilisé comme solvant industriel. Sa combustion a été décrite par Ho, Yu et Bozelli [3].

L'initiation se fait par décomposition unimoléculaire ou par des réactions bimoléculaires de H<sub>2</sub> ou de CH<sub>3</sub>Cl avec O<sub>2</sub>. Deux des réactions unimoléculaires possibles sont :



La vitesse de (2) est au moins mille fois plus importante à toute température et toute pression à cause de son énergie d'activation très basse et de son facteur A très grand, (2) domine donc la dissociation. Les réactions bimoléculaires incluent :

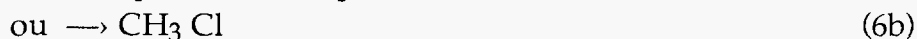
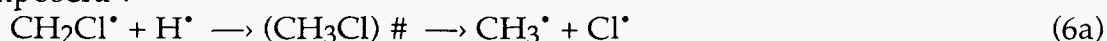


(3) et (4) sont fonction du taux de conversion de  $\text{CH}_3\text{Cl}$ , ces réactions contribuent à l'initiation mais à de fort taux de conversion ces réactions sont déplacées vers la gauche.

Les atomes d'hydrogène sont formés par (4) et (5).



Le radical  $\text{CH}_2\text{Cl}^\bullet$  formé en (3) réagit rapidement avec un atome H pour former un complexe énergétique qui sera stabilisé par perte d'énergie ou qui se décomposera :

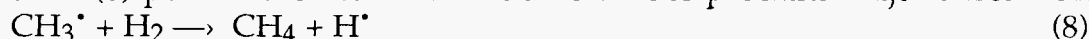


Le résultat dépendra de la température, de la pression et des constantes de vitesse.

Les réaction (6a) et (7) contribuent à la formation du radical  $\text{CH}_3$  :

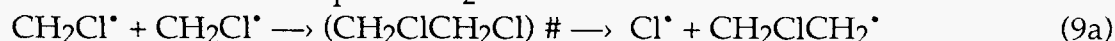


La réaction (8) permet ensuite la formation d'un des produits majoritaires :  $\text{CH}_4$



Les radicaux, tels  $\text{CH}_3^\bullet$ ,  $\text{CH}_2\text{Cl}^\bullet$ ,  $\text{ClO}^\bullet$  vont eux se combiner pour former des complexes énergétiques.

Autour de 727°C on obtient pour  $\text{CH}_2\text{Cl}^\bullet$  :



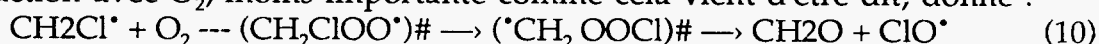
Le radical  $\text{CH}_2\text{ClCH}_2^\bullet$  se décompose ensuite par beta-scission en  $\text{Cl}^\bullet + \text{C}_2\text{H}_4$  pour former une liaison C-C plus forte que la liaison C-Cl de départ. Le chemin de décomposition dominant du complexe dépend de la pression et de la température.

A une atmosphère et à basse température (9c) sera dominant. A plus haute température cette réaction se fera dans le sens inverse. Autour de 727°C (9a) et (9b) sont les chemins prédominants.

Les combinaisons de radicaux  $\text{CH}_3^\bullet$  et  $\text{CH}_2\text{Cl}^\bullet$  mènent, en présence de chlore, à la formation d'hydrocarbure en  $\text{C}_2$  et d'hydrocarbure chloré. Le radical  $\text{Cl}^\bullet$  est formé au début de la combustion par les réactions (2), (-5), (6), (9a)...etc. Il réagit très

rapidement avec les molécules de combustible qui sont très présentes au début. Aux températures de la combustion l'arrachement de H par Cl permet de former l'hydrocarbure radical correspondant et HCl. Ces arrachements sont rapides, elles ont des facteurs A élevés (généralement supérieurs à  $1,0 \times 10^{13}$ ) et de faibles  $E_a$  (quelques kcal/mole). Les radicaux en  $C_1$  formés ne réagissent pas avec l'oxygène moléculaire aussi vite que les radicaux en  $C_2$  ou plus. Les radicaux en  $C_1$  se combinent entre eux.

La réaction avec  $O_2$ , moins importante comme cela vient d'être dit, donne :

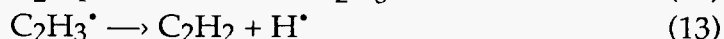
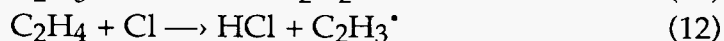
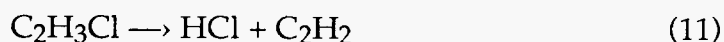


Première étape : addition  
 Deuxième : déplacement de Cl  
 Troisième : beta-scission

Remarque : plus de 95 % des complexes énergétiques formés se décomposent pour redonner les réactifs initiaux entre 600 et 1027°C.

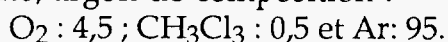
Les PIC détectés lors de la combustion de  $CH_3Cl$  sont :  $C_2H_2$ ,  $C_2H_4$  et  $C_2H_3Cl$ .

La formation de  $C_2H_2$  par exemple se fait principalement par trois réactions :



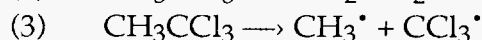
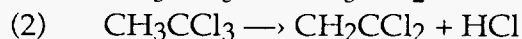
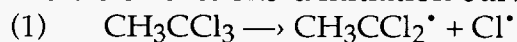
### c- Le 1, 1, 1 - trichloroéthane $CH_3CCl_3$

La décomposition thermique du 1, 1, 1 - trichloroéthane a été décrite par Wu et al. [1], pour des temps de séjour compris entre 0,05 et 2,5 s et des températures comprises entre 500 et 800°C. L'étude théorique de la combustion est réalisée dans un mélange oxygène/argon de composition :



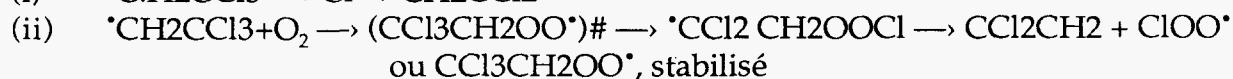
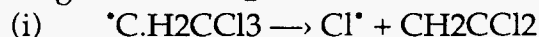
La disparition totale du composé a lieu à 600°C pour un temps de séjour de 1s. La concentration en oxygène n'a pas d'effet sur cette décomposition thermique, ce qui confirme les modes de destruction unimoléculaires attribués aux hydrocarbures chlorés saturés.

Les trois réactions d'initiation suivantes sont proposées :



D'après les constantes cinétiques la réaction (2) est au moins mille fois plus rapide pour des températures inférieures à 600°C. Ceci est confirmé par le fait qu'à ces mêmes températures, HCl et  $CH_2CCl_2$  sont les principaux produits détectés. La cause de ce phénomène est la faible énergie d'activation de la décomposition unimoléculaire de type (2).

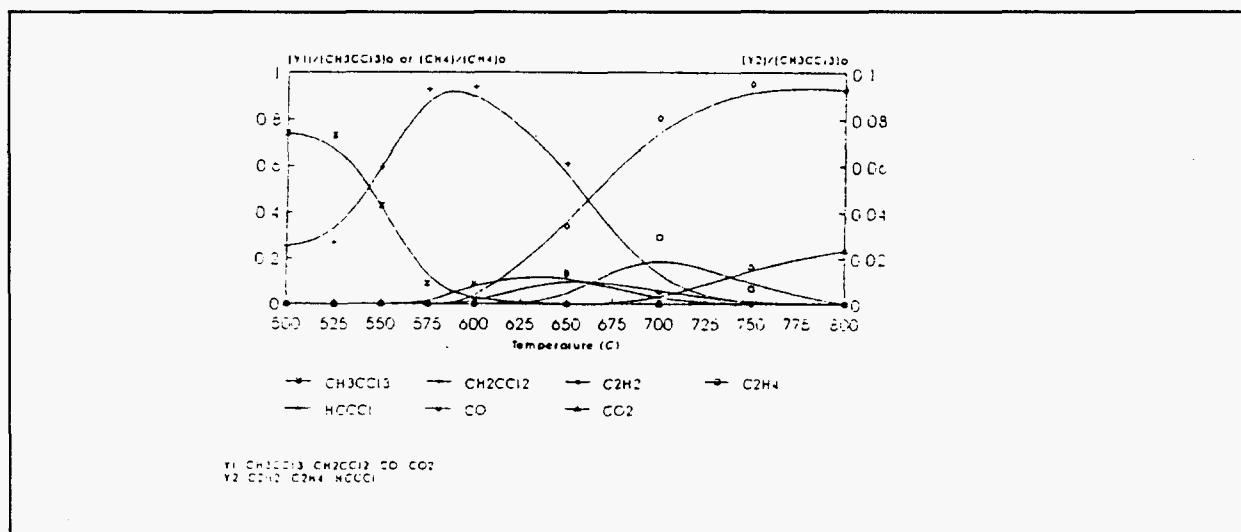
L'éventualité de réactions bimoléculaires qui interviendrait avant que la température de décomposition unimoléculaire soit atteinte est aussi prise en compte. Il y aurait alors arrachement d'un atome d'hydrogène par un radical OH, H, Cl...etc. Le radical trichloroéthyle formé se dissocierait par beta-scission(i) ou réagirait avec O<sub>2</sub> (ii).



de plus  $\text{ClOO}\cdot$  se décomposera rapidement en  $\text{Cl}\cdot + \text{O}_2$

Ce chemin réactionnel reste toutefois très minoritaire et donne de toute façon le même PIC.

La formation du produit de combustion majoritaire  $\text{CH}_2\text{CCl}_2$  augmente quand la température augmente et atteint un maximum près de 600°C pour un temps de séjour d'une seconde. La concentration de ce produit décroît ensuite quand la température augmente en présence d'oxygène (voir figure).



*Courbe de distribution des différents produits présents lors de la combustion du 1, 1, 1 -trichloroéthane en fonction de la température pour un temps de séjour d'une seconde.*

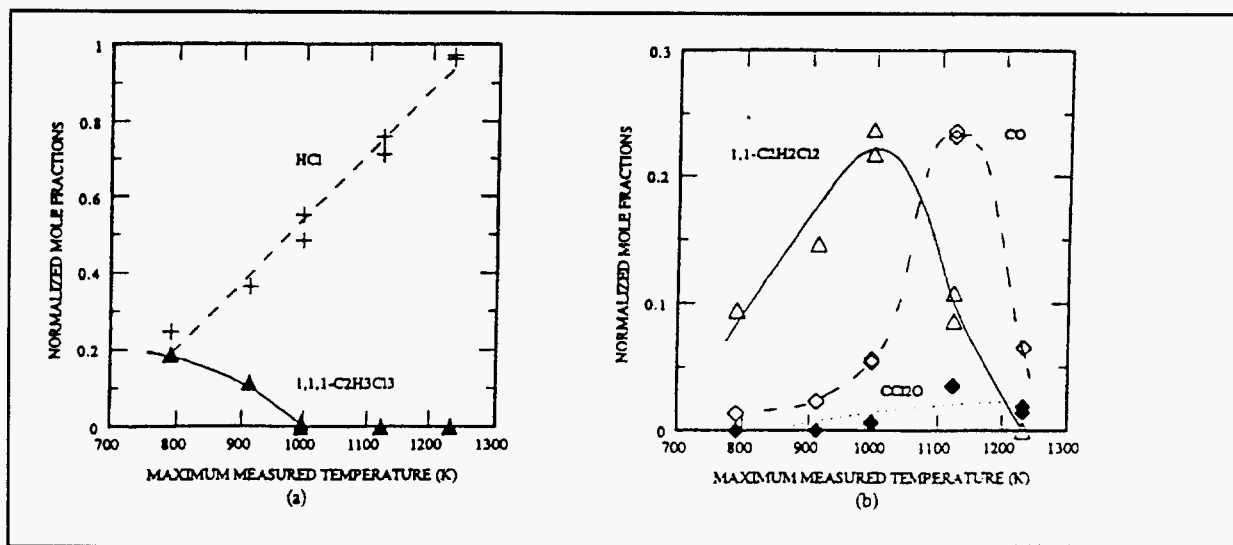
Trois types de dégradation du 1, 1-dichloroéthylène formé peuvent ensuite avoir lieu. Ces dégradations seront traitées par la suite. On verra que les produits formés au dessus de 750°C sont  $\text{HC} = \text{CCl}$  et des hydrocarbures non chlorés tels  $\text{C}_2\text{H}_2$ ,  $\text{C}_2\text{H}_4$ ,  $\text{CO}$  et  $\text{CO}_2$ .

Fisher et Koshland [14] ont étudié ce même composé et particulièrement la formation de PIC. L'incinération est réalisée dans un mélange air/propane. Les PIC détectés sont 1, 1- $\text{C}_2\text{H}_2\text{Cl}_2$ ,  $\text{CO}$ ,  $\text{C}_2\text{H}_2$  et le phosgène  $\text{CCl}_2\text{O}$ .

Remarque :

Les produits finaux de combustion désirés sont  $\text{CO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$  et  $\text{HCl}$ . Tous les produits chlorés autres que  $\text{HCl}$  et le 1, 1, 1-trichloroéthane sont considérés comme des PIC.

Les résultats sont cohérents avec ceux de Wu et al. [1]. La figure suivante montre la composition du milieu réactionnel en fonction de la température pour des temps de séjour compris entre 0,17 et 0,23 s, pour le produit injecté et  $\text{HCl}$  (a) et pour les PIC (b).



*Composition du milieu réactionnel de combustion de 1, 1, 1-C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>Cl<sub>3</sub> en fonction du maximum de température mesuré pour chaque essai. Temps de séjour de 0,17 à 0,23 s. (a) produit injecté et HCl, (b) PIC.*

Le maximum de taux de 1, 1-C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> est observé à 727°C mais les auteurs précisent que, les intervalles de température entre deux mesures étant importants, le maximum peut se trouver n'importe où entre 647 et 847°C, ce qui est assez cohérent avec la valeur donnée par Wu et al.

Les deux mêmes processus de formation de 1, 1-C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> sont indiqués. Un autre mécanisme minoritaire est signalé. Il s'agit de l'arrachement d'un atome de chlore par un atome d'hydrogène, puis de la beta-scission d'un atome d'hydrogène. Les deux produits formés sont à nouveau  $\text{HCl}$  et 1, 1-C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>.

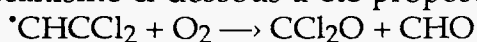
En ce qui concerne les PIC formés, il faut souligner que le 1, 1-C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> est beaucoup plus toxique que le 1, 1, 1-trichloroéthane de départ. Le seuil d'exposition autorisé pour les travailleurs aux Etats Unis en 1988 était de 5 ppm pour le 1, 1-C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> contre 350 ppm pour le trichloroéthane.

D'autres PIC ont aussi été détectés ; en particulier le phosgène ( $\text{CCl}_2\text{O}$ ), à des températures supérieures à celles du pic du 1,1-C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>. Le phosgène est un gaz très toxique (utilisé autrefois comme arme chimique). Sa formation à partir de divers CHC a été observée à haute température, spécialement en présence de



surfaces métalliques. Mais, en présence d'excès d'oxygène les quantités formées sont normalement négligeables.

Le mécanisme ci-dessous a été proposé pour la synthèse du phosgène :



sachant que le radical dichlorovinyle proviendrait de l'arrachement d'un hydrogène du 1,1-C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>.

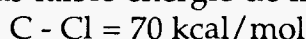
Une autre suggestion a été faite : la réaction sur charbon actif de CO avec Cl<sub>2</sub> à des températures comparables à celles du système d'échantillonnage utilisé au cours de l'expérimentation est un processus industriel de synthèse du phosgène.

Il se pourrait donc que le phosgène soit un artefact de la procédure d'échantillonnage. Mais, dans ce cas, la présence de phosgène serait la preuve de la présence de Cl<sub>2</sub>, une autre substance très toxique.

#### d- Le tétrachlorure de carbone CCl<sub>4</sub>

Graham et al. [4] ont considéré la combustion du tétrachlorure de carbone seul et dans un mélange de 5 POHC (principal hazardous compounds).

La plus faible énergie de liaison de la molécule est :



Etant donné le caractère saturé du composé et l'énergie de liaison ci-dessus (à comparer aux 95 kcal/mol de C-Cl du monochlorobenzène (MCBz) ou aux 85 kcal/mol de C-Cl de CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>Cl), on s'attend à une décomposition unimoléculaire du composé par rupture de la liaison C-Cl.

Pourtant, les remarques suivantes sont faites :

-T<sub>99</sub> est de 70°C plus élevée quand le composé est brûlé seul que lorsqu'il est brûlé dans le mélange (une petite différence dans ce sens est toujours notée mais 70°C représentent plus que la normale) ;

- T<sub>99</sub> ne varie pas lorsque la teneur en oxygène change.

On peut en conclure qu'une décomposition bimoléculaire qui demande une énergie plus basse que la dégradation unimoléculaire à lieu lors de la combustion du mélange. H et OH n'étant pas disponibles lors de l'incinération du composé pur mais l'étant par contre dans le cas du mélange, on suppose que l'un de ces deux radicaux est responsable de cet effet.

On peut par exemple envisager l'arrachement d'un chlore par un atome d'hydrogène pour former HCl. Cette hypothèse reste à vérifier.

On notera que T<sub>99</sub> obtenue par extrapolation vaut 670°C, dans le cas du mélange.

#### e- Le fréon 113

Cette même étude de Graham et al porte aussi sur la combustion du 1,1,1-trichloro-1, 2,2-trifluoroéthane ou fréon 113, qui est particulièrement stable (le

plus stable des 5 POHC étudiés : CCl<sub>4</sub>, MCBz, fréon 113, trichloroéthylène et toluène).

Pour le fréon 113 la T<sub>99</sub> est estimée par extrapolation à 770°C.

Les énergies de liaison de cette molécules ne sont pas connues des auteurs, mais on sait que pour le fréon 112 (CClF<sub>2</sub>-CClF<sub>2</sub>), l'énergie de la liaison C-Cl vaut 78 kcal/mol et que, dans la série des méthanes halogénés, un nombre décroissant de fluors fait baisser l'énergie de la liaison C-Cl. On peut donc supposer que pour le fréon 113 on a une valeur inférieure à 78 kcal/mol.

Il reste tout de même impossible de comparer avec les 70 kcal/mol de C-Cl dans CCl<sub>4</sub>.

Le fait est que le fréon 113 est le seul composé parmi les 5 dont la T<sub>99</sub> est identique dans le cas de l'incinération du mélange et dans celui du composé seul.

#### f- L'hexafluorure de soufre SF<sub>6</sub>

L'hexafluorure de soufre a été étudié par Lamb et al. [5]. SF<sub>6</sub> est un composé saturé halogéné mais il ne suit pas du tout le même comportement que les hydrocarbures saturés halogénés. En effet, la force de la liaison S-F le rend extrêmement stable et résistant à l'oxydation. Il requiert 1200°C et 2,0 s pour 99,99 % de destruction. De plus, son taux de décomposition dépend beaucoup de la teneur en oxygène de l'atmosphère de combustion.

#### 6-2- Les composés insaturés

##### a- Les dérivés de l'éthylène

##### Le chlorure de vinyle (monochloroéthylène) CH<sub>2</sub> = CHCl

Lee et al. [6] se sont intéressés à ce composé.

Il semble qu'aucun intermédiaire stable ne soit formé au cours de la combustion et qu'au dessus de 816°C pour des temps de séjour supérieurs à 0.08 s aucune quantité de chlorure de vinyle ne soit détectable.

La constante de vitesse proposée pour des températures inférieures à 767°C et des temps de séjour inférieurs à 1,6 s est :

$$k = 3,57E14 \exp (-63,300/RT) \text{ avec } R = 1,987 \text{ cal. mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$$

##### Remarque :

L'énergie d'activation de ce composé étant grande une petite différence de température pourra entraîner une grande différence de taux de destruction.

##### Le 1.1-dichloroéthylène CH<sub>2</sub> = CCl<sub>2</sub>

Cette molécule très stable est formée, on l'a vu, par la décomposition unimoléculaire du 1, 1, 1-trichloroéthane.

La destruction proposée ici est celle de Wu et al. [1]. Trois possibilités sont décrites :

- Arrachement de l'hydrogène par  $\text{OH}^\bullet$ ,  $\text{Cl}^\bullet$ ,  $\text{O}^\bullet$ ,  $\text{R}^\bullet$  ou  $\text{H}^\bullet$ ; étant un radical hydrocarboné ; le radical 1, 1-dichlorovinyl ainsi formé réagirait rapidement avec  $\text{O}_2$  pour donner le radical  $\text{HCO}^\bullet$  et  $\text{CCl}_2\text{O}$ , le phosgène.

Remarque :

à de plus hautes températures, supérieures à  $1227^\circ\text{C}$ , les produits de la réaction radicalaire suivante seront majoritaires. On aura :  $\text{CCl}_2 = \text{CHO}^\bullet + \text{O}^\bullet$  et des réactions avec  $\text{O}_2$  donnerons ensuite le phosgène,  $\text{CO}_2$  et l'atome d'hydrogène.

- Elimination unimoléculaire d'HCl pour former le chloroacéthylène.

Remarque : cette réaction est beaucoup plus endothermique que l'élimination d'HCl du 1, 1, 1-trichloroéthane et donc beaucoup moins rapide. Elle sera surtout mise en jeu dans des systèmes assez inertes ou dans des conditions pyrolytiques.

- Addition d'un atome sur la double liaison

Un atome d'hydrogène peut s'ajouter sur le carbone portant le chlore ou, s'ajouter sur l'autre carbone puis migrer (isomérisation) pour former le complexe énergétique  $(\text{CH}_2\text{CHCl}_2)^\ddagger$  qui donnera le chlorure de vinyle par coupure de la liaison faible C-Cl.

Remarque : le chlorure de vinyle formé réagira ensuite de la même façon que son précurseur.

Le trichloroéthylène  $\text{CHCl} = \text{CCl}_2$

D'après Graham et al. [4], la destruction du trichloroéthylène se fait majoritairement par attaque du radical OH ou d'un atome d'oxygène. Son comportement, montré au cours des expérimentations, est tout à fait celui attendu. Sa  $T_{99}$  évaluée par extrapolation est égale à  $730^\circ\text{C}$  (cette valeur augmente lorsque la concentration d'oxygène décroît).

L'article de Wu et al. [1] signale que les PIC obtenus pour ce composé sont :  $\text{C}_2\text{Cl}_2$ ,  $\text{C}_2\text{Cl}_4$ ,  $\text{CCl}_4$ ,  $\text{CHCl}_3$  et  $\text{COCl}_2$ .

Le perchloroéthylène  $\text{CCl}_2 = \text{CCl}_2$

Les réactions mises en jeu et les constantes de vitesse associées sont données dans l'étude de Tsang et Burgess [7].

La conclusion faite par les auteurs est que l'atome d'hydrogène joue le premier rôle dans la destruction de ce composé.

b- Composés à structure conjuguée

L'acroléine (propenal)  $\text{CH}_2 = \text{CHO}$

La constante de vitesse obtenue est de :

$$k = 3,30 \times 10 \exp(-35,99/RT) \text{ avec } R = 1,987 \text{ cal. mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$$

Elle doit être utilisée pour des températures inférieures à  $427^\circ\text{C}$ .

les auteurs : Lee et al. [6], signalent la formation d'un intermédiaire lors de la combustion, mais en quantités négligeables.

On peut remarquer que l'énergie d'activation est faible, la destruction de l'acroléine sera donc beaucoup moins sensible à la température en comparaison au benzène par exemple.

Pour une augmentation de température de 139°C, entre 649 et 788°C, qui entraînait une diminution du temps de séjour requis de 100 à 0,1 s pour le benzène, on obtient pour l'acroléine une diminution de 0,07 à 0,005 s seulement.

L'acrylate d'éthyle (propénoate d'éthyle)  $\text{CH}_2 = \text{CH} - \text{COOC}_2\text{H}_5$

La constante de vitesse obtenue par les mêmes auteurs est :

$$k = 2,19\text{E}12 \exp(-46,000/\text{RT}) \text{ avec } R = 1,987 \text{ cal.mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$$

Elle doit être utilisée pour des températures inférieures à 427°C.

Lee et al. [6], signalent la formation d'un intermédiaire lors de la combustion, mais en quantité négligeable.

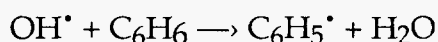
On peut remarquer que l'énergie d'activation est faible, la destruction de l'acroléine sera donc beaucoup moins sensible à la température en comparaison du benzène par exemple.

Pour une augmentation de température de 139°C, (entre 649 et 788°C), qui entraînant une diminution du temps de séjour requis de 100 à 0,1s pour le benzène, on obtient pour l'acroléine une diminution de 0,07 à 0,005 s seulement.

### 6-3- Les composés aromatiques

#### a- Le benzène $\text{C}_6\text{H}_6$

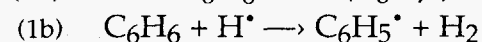
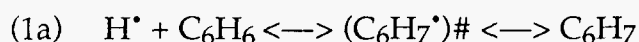
Le principal mode de destruction du benzène est l'arrachement d'un hydrogène du noyau par un radical  $\text{OH}^\bullet$



Pour des températures comprise entre 227 et 877°C la constante de vitesse bimoléculaire donnée par Tully et al. [8] augmente de façon monotone avec la température et suit un comportement de type Arrhenius.

$$k(T) = (2,4 \pm 0,9)\text{E}-11 \exp(- (2,26 \pm 0,30)\text{E}3/\text{RT}) \text{ cm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1}$$

Nicovich et Ravishankara [10] ont étudié les réactions du benzène avec l'atome d'hydrogène. Ils proposent les trois possibilités ci-dessous :



Leurs conclusions sont les suivantes :

- la réaction 1b est négligeable

- le radical libre cyclohexadiène ( $C_6H_7^*$ ) formé est susceptible de se décomposer à haute température, toutefois, il pourrait quand même jouer un rôle important dans le cas où il rencontrerait des espèces envers lesquelles il serait très réactif.

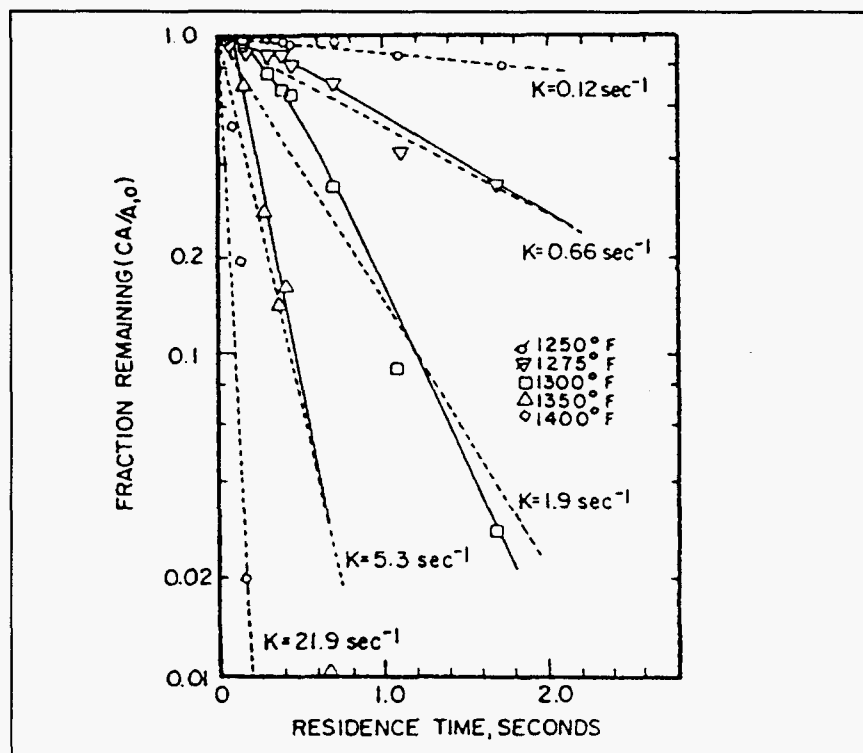
Le cas de l'atome d'oxygène a été étudié par Nicovich [ref] : une réaction d'addition électrophile a lieu sur le noyau aromatique. On suppose la formation d'un triplet biradical  $C_6H_6O$ ; mais le devenir de ce triplet n'est pas connu.

Pour des températures inférieures à 597 °C, la constante de vitesse est :

$$k(t) = (4,62 \pm 0,68) E-11 \exp \{-(2,47 \pm 0,08)E3/RT\}$$

Lee et al [6] ont proposé la constante de vitesse suivante pour la destruction du benzène à des températures inférieures à 691 °C :

$$k(t) = (2,52) E3 \exp \{-(99,650/RT)\} \quad \text{avec } R = 1,987 \text{ cal}^{-1} \text{ mol K}^{-1}$$



*Fraction de benzène restant en fonction du temps de séjour et de la température*

La figure montre la fraction de benzène restant en fonction du temps de séjour. Les lignes en pointillés ont été utilisées pour calculer des constantes de vitesses empiriques du premier ordre. Les lignes pleines représentent les points expérimentaux. Pour ces points, on remarque qu'à 704 °C, on obtient une région plate pour des temps de séjour très courts, puis après cette période, la vitesse suit un comportement du premier ordre.

### Remarques :

- sur les quatre composés testés par ces auteurs (benzène, acroléine, acrylate d'éthyle et chlorure de vinyle) seul le benzène semble avoir formé des produits de cracking, qui se sont déposés ;
- plus aucune quantité de benzène n'est détectée au dessus de 788 °C pour des temps de séjour supérieurs à 0,08 s ;
- l'énergie d'activation pour la destruction du benzène est particulièrement élevée, l'efficacité de destruction sera donc très dépendante de la température.

### b- Les chlorobenzènes

#### Le monochlorobenzène C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>Cl (MCBz)

Le MCBz possède une structure électronique qui le rend susceptible de subir des attaques radicalaires par des radicaux déficients en électrons. Les espèces concernées ici sont O et OH. Ceci est montré par le fait que la T<sub>99</sub> de ce composé est dépendante de la concentration en oxygène de l'atmosphère. Dans le cas d'un tel excès d'oxygène, elle est égale à 730 °C (valeur obtenue par extrapolation).

Les énergies de liaison pour cette molécule sont :

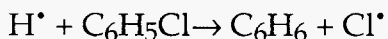
C-Cl : 95 kcal/mol

C-H : 110 kcal/mol

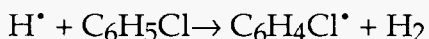
Le MCBz est plus stable que le toluène car le chlore est attracteur d'électrons et désactive la structure électronique [4] (toute oxydation étant une capture d'électrons, l'appauvrissement électronique d'une structure organique le rend plus difficile à oxyder).

Tsang et Burgess [7]. ont réalisés une étude sur l'incinérabilité de ce composé. Ils proposent des constantes de vitesse pour les processus suivants :

- remplacement d'un atome de chlore par un atome d'hydrogène :



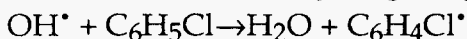
- arrachement d'un hydrogène par un atome d'hydrogène



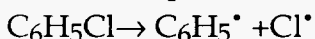
- arrachement de l'atome de chlore par un atome d'hydrogène :

ce processus est négligeable devant les autres

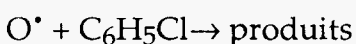
- arrachement d'un hydrogène par un radical OH :



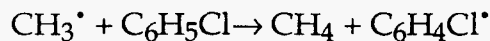
- la décomposition unimoléculaire :



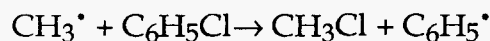
- réaction bimoléculaire avec un atome d'hydrogène :



- arrachement d'un atome de chlore par un radical CH3 :



- arrachement d'un atome de chlore par un radical CH3 :



Les constantes sont données dans le tableau ci-dessous.

$\text{H} + \text{C}_2\text{Cl}_4 = \text{Cl} + \text{C}_2\text{Cl}_3\text{H}$	$k_e = 1.9 \times 10^{14} \exp(-4532/T)$
$\text{H} + \text{C}_2\text{Cl}_4 = \text{HCl} + \text{C}_2\text{Cl}_3$	$k_i = 1.2 \times 10^{15} \exp(-7552/T)$
$\text{H} + \text{C}_6\text{H}_5\text{Cl} = \text{C}_6\text{H}_5 + \text{Cl}$	$k_p = 2.2 \times 10^{13} \exp(-4532/T)$
$\text{H} + \text{C}_6\text{H}_2\text{Cl} = \text{C}_6\text{H}_2\text{Cl} + \text{H}_2$	$k_d = 1.7 \times 10^6 T^{2.55} \exp(-6914/T)$
$\text{OH} + \text{C}_2\text{Cl}_4 = \text{products}^\dagger$	$k_r = 5.8 \times 10^{12} \exp(-1210/T)$
$\text{OH} + \text{C}_6\text{H}_5\text{Cl} = \text{H}_2\text{O} + \text{C}_6\text{H}_4\text{Cl}$	$k_j = 2.4 \times 10^6 T^2 \exp(-5186/T)$
$\text{O} + \text{C}_2\text{Cl}_4 = \text{products}$	$k_z = 5.8 \times 10^{12} \exp(-1210/T)$
$\text{O} + \text{C}_6\text{H}_5\text{Cl} = \text{products}$	$k_n = 2.2 \times 10^{12} \exp(-282/T)$
$\text{CH}_3 + \text{C}_2\text{Cl}_4 = \text{C}_2\text{Cl}_3 + \text{CH}_2\text{Cl}$	$k_1 = 2.5 \times 10^{13} \exp(-9063/T)$
$\text{CH}_3 + \text{C}_6\text{H}_2\text{Cl} = \text{CH}_4 + \text{C}_6\text{H}_2\text{Cl}$	$k_2 = 7 \times 10^{11} \exp(-9315/T)$
$\text{CH}_3 + \text{C}_6\text{H}_2\text{Cl} = \text{CH}_2\text{Cl} + \text{C}_6\text{H}_2$	$k_3 = 6 \times 10^{12} \exp(-14100/T)$
$\text{C}_2\text{Cl}_4 = \text{C}_2\text{Cl}_3 + \text{Cl}$	$k_4 = 4.5 \times 10^{14} \exp(-40785/T) \text{s}^{-1}$
$\text{C}_6\text{H}_5\text{Cl} = \text{C}_6\text{H}_5 + \text{Cl}$	$k_m = 1.5 \times 10^{15} \exp(-47835/T) \text{s}^{-1}$

*Constantes de vitesse de destruction du perchloroéthylène et du chlorobenzène*

#### Remarques :

Les expressions données sont du type Arrhenius ( $K = A \exp(-E/RT)$ ) ou de la forme modifiée ( $K = AT^n \exp(-E/RT)$ )

Pour  $K_e$ ,  $K_g$  et  $K_h$  les réactions sont supposées irréversibles et les produits formés ne continuent pas à réagir.

Sachant que, plus K est grand plus le composé est instable, on peut tirer les conclusions suivantes :

- la combustion est très dépendante des radicaux présents
- $\text{O}^\bullet$  et  $\text{CH}_3^\bullet$  ne contribuent pas beaucoup à la destruction du MCBz.
- $\text{OH}^\bullet$  est le radical le plus performant au cours de la combustion
- les destructions unimoléculaires ne sont pas très importantes, même à haute température car les énergies d'activation de ces processus sont trop grandes.

Les paramètres cinétiques de pseudo-premier ordre donnés par Lamb et al. [5] pour le MCBz sont :

$$A(\text{s}^{-1}) = 8,8\text{E}4 \text{ et } E_a (\text{Kcal/mol})=23$$

#### Composés polychlorés

Les paramètres donnés par les mêmes auteurs pour deux composés polychlorés sont :

$$A(\text{s}^{-1}) = 2,8\text{E}8 \text{ et } E_a (\text{Kcal/mol}) = 41 \text{ pour l'hexachlorobenzène}$$

$A(s^{-1}) = 2,2E8$  et  $E_a$  (Kcal/mol) = 39 pour le 1,2,4-trichlorobenzène

Cui et al [11] ont calculé expérimentalement les constantes de vitesse d'attaque de l'atome d'hydrogène sur des benzènes chlorés à haute température. Bien que l'on soit sûr maintenant que l'attaque se fasse principalement par le radical OH, qui est présent en de beaucoup plus grandes quantités, ces mesures présentent tout de même un grand intérêt.

Tout d'abord, la constante de remplacement d'un atome de chlore par un atome d'hydrogène permet de calculer la constante de la réaction inverse, c'est à dire la chloration d'un atome de carbone du cycle. En comparant ces constantes de chloration à d'autres processus mettant en jeu le chlore on peut ainsi connaître l'importance de cette formation de produits chlorés au cours de la combustion.

Par ailleurs, la conclusion suivante peut être tirée : le calcul de la constante de vitesse de remplacement par atome de chlore augmente quand le degré de chloration augmente. L'hexachlorobenzène est donc le moins stable des benzènes chlorés avec une constante environ 15 fois plus importante que celle du MCBz.

D'autres remarques sont faites à propos de l'influence de la substitution du cycle. Les variations des vitesses de substitution (par atome de chlore) d'un atome de chlore par un atome d'hydrogène en fonction de la substitution du noyau aromatique ne sont pas énormes mais sont tout de même très intéressantes. Les vitesses sont quasiment égales pour le MCBz, o-dichlorobenzène et p-dichlorobenzène. Cependant, pour le 1,2,3-trichlorobenzène elles sont multipliées par un facteur 2,4 pour le chlore situé sur l'atome de carbone qui se trouve entre les deux atomes de carbone chlorés, et par un facteur 1,8 pour les deux autres atome de chlore. Dans le cas de la présence d'un substituant méthyle, le remplacement est favorisé et les constantes obtenues sont proches de celle du 1,2,3-trichlorobenzène. Il est aussi intéressant de noter que contrairement au cas de l'orthodichlorobenzène, la présence d'un méthyle en position ortho fait augmenter la contante de vitesse du emplacement du chlore. Pour le toluène, l'aniline, le phénol et le MCBz les constantes de vitesse décroissent régulièrement.

### c- Les benzènes méthylés

#### Le toluène $C_6H_5CH_3$

Le toluène est l'un des composés organiques les plus utilisés ; il est donc très présent dans les déchets. Il est cité dans l'article de Gram, Hall eet Dellinger [4] parmi les composés qui subissent une décomposition bimoléculaire dépendante de la concentration en  $O_2$  de l'atmosphère de combustion.

La liaison la plus faible de la molécule est C-H du groupement méthyl. Elle a une énergie de 85 kcal/mol. Sa  $T_{99}$  est évaluée par extrapolation à 670 °C.

Le toluène est connu pour former du benzaldéhyde par oxydation partielle. Comme on le verra dans les paragraphes suivants le radical méthyphényle est majoritairement formé.



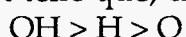
Ce radical va ensuite attaquer une molécule neutre ou se recombinaison avec un radical.

Par recombinaison avec le radical OH (radical le plus commun du système), il y aura formation de benzaldéhyde.

Dans son étude sur la destruction du toluène, Altwicker [12] donne l'expression cinétique suivante :

$$(\text{tol})_s/(\text{tol})_e = \exp(-kT) \quad \text{avec } (\text{tol})_s : \text{concentration de toluène à la sortie} \\ \text{avec } (\text{tol})_e : \text{concentration de toluène à l'entrée}$$

qui est telle que, dans l'ordre décroissant d'efficacité, on a :



Des études cinétiques ont été réalisées concernant ces trois agents de destruction.

Tully et al. [8] ont étudié la cinétique des réactions bimoléculaires avec le radical OH.

A des températures élevées, la réaction prédominante est l'arrachement d'un hydrogène du groupement méthyle et on note que, au dessus de 227°C la constante de vitesse calculée augmente régulièrement avec la température.

Soit  $k_1(T)$  la constante de vitesse d'arrachement d'un hydrogène du noyau aromatique et  $k_2(T)$  la constante de vitesse d'arrachement d'un hydrogène du groupement méthyle

on a :  $k_1(T)/k_2(T) \leq 0,5$  pour une température inférieure à 1227°C

avec :  $k_2(T) = (2,1 \pm 0,6)E-11 \exp(-1,3 \pm 0,2)E/RT \text{ cm}^3 \text{ molécule}^{-1}\text{s}^{-1}$

On aura donc par la suite des réactions mettant en jeu des radicaux benzyles plutôt que des radicaux méthylphenyles.

Robaugh et Tsang [13] ont étudié la cinétique des réactions bimoléculaires avec l'atome d'hydrogène. A nouveau c'est l'arrachement d'un atome d'hydrogène qui prédomine.

L'ensemble des possibilités proposées est :

- (a)  $\text{H}^\bullet + \text{toluène} \rightarrow \text{radical méthylcyclohexadiényle}$
- (b)  $\text{H}^\bullet + \text{toluène} \rightarrow \text{radical méthyle} + \text{benzène}$
- (c)  $\text{H}^\bullet + \text{toluène} \rightarrow \text{radical benzyle} + \text{H}_2$
- (d)  $\text{H}^\bullet + \text{toluène} \rightarrow \text{radical méthylphényle} + \text{H}$

L'arrachement de l'hydrogène benzylique (c) est la réaction la plus favorable. La formation du radical méthyle, bien qu'elle soit moins importante est tout de même intéressante car le radical formé est très réactif (beaucoup plus que le benzyle).

Nicovich et al. [10] ont étudié la cinétique des réactions avec l'atome d'oxygène. Cette fois le processus majoritaire est l'addition électrophile sur le noyau aromatique.

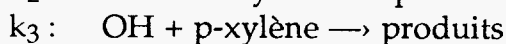
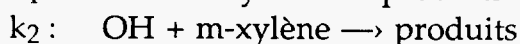
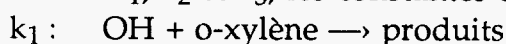
La constante de vitesse obtenue est, pour des températures inférieures à 671°C,  $k(T) = (4,26 \pm 0,58)E-11 \exp(-(1,91 \pm 0,07)E_3/T) \text{ cm}^3 \text{ molécule}^{-1}\text{s}^{-1}$

Il faut noter que la nature électrophile de la réaction est renforcée par l'action du groupement méthyle qui fait augmenter la densité électronique du noyau aromatique.

Les xylène (diméthylbenzènes)

La cinétique de destruction des xylènes par les radicaux OH a été décrite par Nocovich et al. [10]. Le même comportement que pour le benzène et le toluène a été observé. L'arrachement d'un atome d'hydrogène d'un groupement méthyle est le processus majoritaire.

Soient  $k_1$ ,  $k_2$  et  $k_3$ , les constantes de vitesse des réactions suivantes :



Entre 227 et 727°C les constantes sont les suivantes :

$$k_1 (T) = (6,5 \pm 1,1)E-11 \exp (-(1,42 \pm 0,12)E3/T) \text{ cm}^3 \text{ molécule}^{-1}\text{s}^{-1}$$

$$k_2 (T) = (6,8 \pm 2,3)E-11 \exp (-(1,54 \pm 0,24)E3/T) \text{ cm}^3 \text{ molécule}^{-1}\text{s}^{-1}$$

$$k_3(T) = (6,4 \pm 2,4)E-11 \exp (-(1,44 \pm 0,25)E3/T) \text{ cm}^3 \text{ molécule}^{-1}\text{s}^{-1}$$

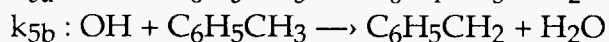
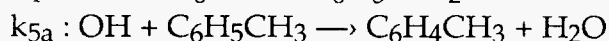
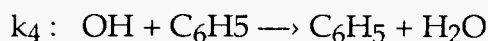
On constate qu'il n'y a pas de différence détectable entre  $k_1$ ,  $k_2$  et  $k_3$  dans les limites de mesure.

Comme pour le benzène et le toluène, les constantes augmentent de façon monotone dans l'intervalle de température considéré et suivent un comportement de type Arrhenius.

Les conclusions tirées sont les suivantes :

- la vitesse d'arrachement d'un atome d'hydrogène d'un groupement méthyle par Oh est indépendante de la position ortho, méta ou para des substituants du noyau benzénique.
- l'énergie d'activation de cette arrachement est aussi indépendante du nombre et de la position des groupements méthyles substituant le noyau benzénique
- les xylènes ne subissent pas de décomposition thermique unimoléculaires.

Une comparaison des constantes de vitesse des xylènes avec celles du benzène et du toluène a été réalisée par les auteurs, en nommant  $k_4$ ,  $k_{5a}$  et  $k_{5b}$  les constantes des réactions suivantes :



Les résultats de cette comparaison sont les suivants :

- $k_1$ ,  $k_2$  et  $k_3$  valent environ deux fois le double de  $k_5$  ( $k_5 = k_{5a} + k_{5b}$ ) et sont de 10 à 20 fois plus grandes que  $k_4$ , toujours pour une température comprise entre 227 et 727°C.

- $k_{5a}$  est environ égal à  $(5/6)k_4$ , l'arrachement d'hydrogène du noyau n'est donc ni aidée ni gênée par la présence d'un substituant méthyle.

## Comparaison du benzène du toluène et des xylènes

La cinétique des réactions bimoléculaires avec l'atome d'oxygène a été décrite par Nicovich et al. [10]. Les conclusions faites par les auteurs sont les suivantes:

- les facteurs A des réactions de O avec le benzène, le toluène et les xylènes sont quasiment équivalents et égaux à environ  $4E-11 \text{ cm}^3 \text{ molécule}^{-1}\text{s}^{-1}$ .
- les énergies d'activation décroissent du benzène aux xylènes.

Cette deuxième remarque suggère que, lorsque la densité électronique du noyau aromatique augmente, la barrière à l'addition électrophile est réduite.

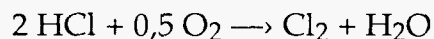
## Les PIC communs à cette famille des composés

Le benzène et ses dérivés simples (toluène, phénol, benzaldéhyde...) sont les PIC communs à tous les composés comprenant un noyau benzénique. Quand un radical phényle est formé, il peut se recombinaison avec un atome d'hydrogène pour former le benzène. Mais l'atome d'hydrogène n'étant pas l'espèce majoritairement présente d'autres composés sont aussi formés (le chlorophénol par exemple). (Graham, Hall et Dellinger, [4])

Le MCBz et le chlorophénol, formé par attaque de OH sur le MCBz sont aussi des PIC communs. D'après Sarofim et al. [réf] du MCBz peut être formé au cours de l'incinération. En effet, on le retrouve dans les effluents d'incinérateurs dans lesquels il n'a pas été introduit.

Une théorie propose la chloration sur des surfaces de précurseurs non chlorés.

L'agent chlorant potentiel étant  $\text{Cl}_2$  et non HCl qui n'est pas en mesure d'engendrer cette réaction. Le chlore serait formé par la réaction de Deacon :



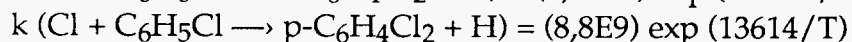
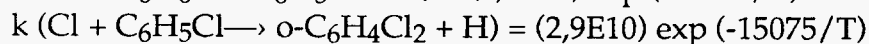
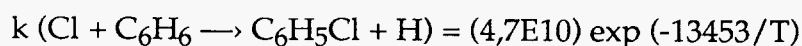
Une fois que le MCBz est formé, si la température n'est pas assez élevée il ne sera pas détruit.

Il faut souligner que ce type de chloration par  $\text{Cl}_2$  n'est possible que si la température est assez basse pour permettre l'absorption sur la surface : elle nécessite l'existence de sites réactionnels avoisinant les  $316^\circ\text{C}$ .

D'après Lamb et al. [5], la formation de MCBz ne représente pas de risques supplémentaires important pour la santé, toutefois il est intéressant d'étudier ce processus de formation qui peut sans doute être applicable à la chloration d'autres hydrocarbures.

Ils soulignent que la réaction de Deacon est très rapide entre  $454$  et  $649^\circ\text{C}$  en présence de catalyse au cuivre ou en présence d'oxydes ou d'hydroxydes de métaux alcalins du deuxième groupe ( $\text{CaO}$ ,  $\text{Ca}(\text{OH})_2$ ). De plus contrairement à ce qui pourrait être pensé intuitivement une augmentation de température et de la concentration d'oxygène entraînent un accroissement de la formation de  $\text{Cl}_2$ .

Dans l'étude de Cui et al. [11], les constantes de vitesses de chloration sur le noyau benzénique ont été calculées à partir des constantes de vitesse de remplacement d'un atome d'hydrogène par un atome de chlore et du calcul de la constante d'équilibre. Les résultats sont les suivants (en  $\text{L}/(\text{mol}\cdot\text{s})$ ) :



Ces additions de chlore étant bien sûr réversibles, l'hydrogène sera remplacé dans seulement une petite partie des cas.

La très importante remarque suivante est faite :

Les atomes de chlore sont très réactifs à haute température, l'expression suivante (dans les mêmes unités que précédemment) :



donne, à 812°C, une valeur de k égale à 9,1E9, c'est à dire une valeur 10 000 fois plus grande que celle que l'on obtiendrait pour le remplacement de l'hydrogène par du chlore sur le noyau benzénique. On en conclue que la formation d'aromatiques polychlorés dans un incinérateur ne pourra se faire qu'en présence de très grandes quantités de chlore ou en présence d'un produit catalyseur de la chloration.

Etant donné que de tels produits polychlorés, comme les PCDD/PCDF, sont rejetés des installations municipales d'incinération, dans lesquelles la présence de quantités nécessaires de chlore est improbable, on peut supposer que ce processus de remplacement n'est pas à l'origine de la formation de ces produits. L'hypothèse de la présence de précurseur chlorés serait donc la plus vraisemblable.

## REFERENCES

- [1] WU Y. G. and J.W. BOZELLI  
Hazard. Waste and Hazard. Mater. 10, n°4, p 381-395, 1993
- [2] HERRON J.T.  
J. Phys. Chem. 17, n°3, p 967-1026, 1988
- [3] HO W., Q. YU and J.M. BOZELLI  
Combust. Sci. and Techn. 85, p23-63, 1992
- [4] GRAHAM J.L., D.L. HALL and B. DELLINGER  
Environ. Sci. Technol. 20, p 703-710, 1986
- [5] LAMB C.W., F.M MILLER., A ROTH, B. DELLINGER and S. SIDHU  
Hazard. Waste and Hazard. Mater. 11, n°1, p 201-215, 1994
- [6] LEE K., H.J. JAHNES and D.C. MACAULEY  
Thermal Oxidation of Selected Organics Compounds  
Union Carbide, 1978
- [7] TSANG W. and J.D. BURGESS.  
Combust. Sci. and Techn. 82, p31-47, 1992
- [8] TULLY F.P. and al  
J. Phys. Chem. 85, p 2262-2269, 1981
- [9] NICOVICH J.M., C.A. GUMP, A.R. RAVISHANKARA  
J. Phys. Chem. 88, p 2534-2541, 1984
- [10] NICOVICH J.M., C.A. GUMP, A.R. RAVISHANKARA  
J. Phys. Chem. 86, p 1684-1690, 1982
- [11] CUI J.P., Y.Z. HE and W.J. TSANG  
J. Phys. Chem. 93, n°12, p 724-712, 1989
- [12] ALTWICKER E.R.  
Chemosphere 19, n° 8-9, p 1233-1241, 1989
- [13] ROBAUGH D., W. TSANG  
J. Phys. Chem. 90, p 4159-4163, 1986
- [14] FISCHER E.M., KOSCHLAND C.P.  
Combust. Sci. and Techn. 85, p313-325, 1992

**ANNEXE 4**  
**FICHES DECHET**

---

Formule brute

Formule semi-développée

Masse molaire (nb de moles par kg)

% des différents éléments

Caractéristiques du composé

Usage courant, type d'industrie génératrice du déchet

### Propriétés physiques

- Densité du liquide ou du solide par rapport à l'eau, du gaz par rapport à l'air à 20 °C
- Point de fusion
- Point d'ébullition à pression atmosphérique
- Solubilité dans l'eau
- Les paramètres de l'azéotrope avec l'eau quand il existe
- Viscosité en Pa.s (1 centipoise = E-3 Pa.s) à 20 °C
- Viscosité en fonction de la température avec  $R = 8,31441 \text{ J/mol/K}$
- Tension superficielle en mN/m à la température ambiante (ou proche de l'ambiante)

### Caractéristiques chimiques

Référence au groupe de réactivité cité dans l'étude concernant le stockage

Quelques réactions chimiques caractéristiques du composé étudié. Il faut y ajouter l'observation du tableau de réactions croisées entre les différents groupes de réactivité

### Inflammation

- Point éclair (point d'inflammation) en °C. En cas de divergence dans les données de la littérature, la valeur la plus basse est donnée
- Température d'autoinflammation en °C. Donnée assez variable suivant les sources
- Limite inférieure d'inflammabilité en % des vapeurs dans l'air
- Limite supérieure d'inflammabilité en % des vapeurs dans l'air
- Densité de la vapeur par rapport à l'air
- Indice d'évaporation : c'est le temps relatif mis par une certaine quantité de substance pour s'évaporer totalement par rapport à la même quantité d'éther éthylique

### Combustion

- Stoechiométrie de la réaction de combustion totale du carbone et de l'hydrogène de la substance sans oxydation de l'azote ou des halogènes
- Enthalpie de combustion en kJ/mole
- PCS en kJ/kg
- PCI en kJ/kg
- T99 : C'est la température nécessaire pour détruire, en présence de la quantité suffisante d'oxygène, 99 % de la substance en « t » secondes. Cette valeur est donnée à titre indicatif d'après les travaux de Lee, Hansen et Macauley. Elle dépend de la structure chimique et de la température d'autoinflammation dont malheureusement la valeur est souvent connue avec peu de précision
- T99.9 et T99.99 sont respectivement les températures nécessaires pour détruire 99,9 et 99,99 % de la substance
- Les paramètres cinétiques sont en général, ceux de la réaction d'initiation de la combustion si on considère que cell-ci est une réaction de pseudo-premier ordre. C'est généralement la vitesse d'arrachement d'un atome d'hydrogène par l'oxygène moléculaire.

### Explosivité

- On donne ici les valeurs inférieures et supérieures de pourcentage de vapeur dans l'air citées dans les fiches de sécurité. Elles diffèrent généralement assez peu des valeurs d'inflammation

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique de la substance dans son état standard (température ambiante et pression atmosphérique)
- Chaleur spécifique de la vapeur considérée comme un gaz parfait en fonction de la température
- Chaleur spécifique de la vapeur à 25 °C
- Enthalpie de vaporisation à la température d'ébullition (sauf mention contraire)
- Enthalpie de fusion à la température de fusion
- Enthalpie de formation de la substance dans les conditions standard sous forme gazeuse (sauf mention contraire)
- La tension de vapeur à une température proche de l'ambiante en Pa (1 Pa = 7,501 E-3 mm de Hg, 1 milibar = E2 Pa)
- La tension de vapeur en fonction de la température. L'équation donne la pression en mm de Hg, il faut prendre  $R = 1,987 \text{ cal/mol/K}$
- Température critique en °C
- Pression critique en Pa

### Sécurité

Principaux dangers encourus par la manipulation de la substance. Des données complémentaires peuvent être trouvées dans les fiches sécurité.

La valeur limite de la concentration des vapeurs dans l'air correspond à une exposition moyenne (elle n'est pas cumulée pour un temps d'exposition donné)

### Stockage

Conseils sur le stockage de risque minimum





M = 44,05 (22,7 mole/kg)

C : 54,53%

H : 9,15%

O : 36,32%

Liquide incolore d'odeur piquante légèrement fruitée

Industrie des teintures, fabrication des matières plastiques. Synthèse organique

## Propriétés physiques

- Densité 0,783
- Point de fusion -123,5 °C
- Point d'ébullition 20,2 °C
- Solubilité dans l'eau infiniment soluble
- Viscosité 0,223 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 1,247 E-5 exp (7028/RT) Pa.s
- Tension superficielle 31,96 mN/m

## Caractéristiques chimiques

Fonction aldéhyde (groupe 5)

Nombreuses réactions de condensation catalysées par les acides ou les bases. Ces réactions sont exothermiques (suffisamment pour enflammer le mélange) et conduisent à des produits plus lourds (oligomères) colorés et très visqueux. Ces réactions produisent également de l'eau.

Les aldéhydes réagissent facilement avec tous les oxydants (oxygène de l'air, oxydants minéraux, acides minéraux oxydants) pour donner notamment de l'acide acétique. Celui-ci est une impureté majeure de l'acétaldéhyde.

## Inflammation

- Point éclair -37 °C
- Température d'autoinflammation 175 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité 4,0 % dans l'air
- Limite supérieure d'inflammabilité 60 % dans l'air
- Densité de la vapeur 1,52

## Combustion

- Stoechiométrie 2,5 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion 1192 kJ/mole
- PCS 27060 kJ/kg
- PCI 25214 kJ/kg
- T99 494°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 511°C - 17,78 Log t
- T99.99 522°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques  $k = 7,2 E12 \exp (-990/T)$

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air 4 %
- Limite supérieure dans l'air 57 %

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide)
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)  $1,752E-1+4,138E-3T-2,286E-6T^2+5,403E-10T^3$  J/g/K
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 1,220 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation 25,76 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion
- Enthalpie de formation -166,2 kJ/mole
- Tension de vapeur 533 E2 Pa à 4,9 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = - 0,05223 * 30394 /T + 8,3276$
- Température critique 181,5 °C
- Pression critique 63,2 E5 Pa

### Sécurité

Extrêmement inflammable.

Vapeurs irritantes pour la peau, les muqueuses respiratoires et oculaires.

Le liquide entraîne de graves brûlures à la peau et aux yeux.

Valeur limite de la concentration dans l'air : 100 ppm

### Stockage

Récipients métalliques

Conserver dans un endroit bien ventilé à l'abri de la chaleur.

Isoler des produits oxydants.

Local antidéflagrant

## Acétate d'éthyle

C<sub>4</sub>H<sub>8</sub>O



M = 88,11 (11,35 mole/kg)

C : 54,53%

H : 9,15%

O : 36,32%

Liquide incolore, odeur agréable et fruitée  
Industrie des peintures et des vernis. Solvant

### Propriétés physiques

- Densité 0,901
- Point de fusion -82,4 °C
- Point d'ébullition 77,1 °C
- Solubilité dans l'eau 85 g/l. Hygroscopique
- Azéotrope avec l'eau 8,5% d'eau. Eb = 70,4°C
- Viscosité 0,452 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 1,330 E-5 exp (8591/RT) Pa.s
- Tension superficielle 23,97 mN/m

### Caractéristiques chimiques

Fonction ester (groupe 13)

S'hydrolyse lentement dans l'eau en acide acétique et éthanol. En présence de base, réaction beaucoup plus rapide (saponification). Ces réactions ne provoquent qu'un échauffement modéré.

Les esters réagissent avec les amines, les mercaptans et les alcools par échange fonctionnel, réactions en général athermiques, production d'éthanol

### Inflammation

- Point éclair -4 °C
- Température d'autoinflammation 425 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité 2,0 % dans l'air
- Limite supérieure d'inflammabilité 11,5 % dans l'air
- Densité de la vapeur 3,04
- Indice d'évaporation 3

### Combustion

- Stoechiométrie 5 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion 2273 kJ/mole
- PCS 25797 kJ/kg
- PCI 23951 kJ/kg
- T99 600°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 610°C - 17,78 Log t
- T99.99 621°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques k = 1,4 E13 exp (-2500/T)

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air 2,5 %
- Limite supérieure dans l'air 9 %

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide) 1,919 J/g/°C
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)  $8,211E-2+4,621E-3T-2,374E-6T^2+3,24E-10T^3$  J/g/K
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 1,257 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation 31,94 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion 10,5 kJ/mole
- Enthalpie de formation -426,4 kJ/mole
- Tension de vapeur 97,3 E2 Pa à 20 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = - 0,05223 * 36759 /T + 8,3898$
- Température critique 250 °C
- Pression critique 38 E5 Pa

### Sécurité

Très inflammable.

Vapeurs toxiques

Le contact du liquide avec la peau et les yeux peut provoquer des irritations

Valeur limite de la concentration dans l'air : 400 ppm

### Stockage

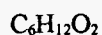
Récipients métalliques.

Eloigner des produits oxydants et des sources de chaleur

Local antidéflagrant.

Protéger des chocs

## Acétate d'isobutyle



M = 116,16 (8,61 mole/kg)

C : 62,04%

H : 10,41%

O : 27,55%

Liquide incolore, odeur de banane  
Solvant des vernis cellulosiques et du celluloïd

### Propriétés physiques

- Densité 0,871
- Point de fusion -98 °C
- Point d'ébullition 118 °C
- Solubilité dans l'eau 6 g/l
- Azéotrope avec l'eau 16,5% d'eau Eb = 87,4°C
- Viscosité 0,705 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 1,072 E-5 exp (10203/RT) Pa.s
- Tension superficielle 23,56 mN/m

### Caractéristiques chimiques

Fonction ester (groupe 13)

S'hydrolyse lentement dans l'eau en acide acétique et isobutanol. En présence de base, réaction beaucoup plus rapide (saponification). Ces réactions ne provoquent qu'un échauffement modéré.

Les esters réagissent avec les amines, les mercaptans et les alcools par échange fonctionnel, réactions en général athermiques, production d'isobutanol

### Inflammation

- Point éclair 17 °C
- Température d'autoinflammation 420 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité 1,3 % dans l'air
- Limite supérieure d'inflammabilité 10,5 % dans l'air
- Densité de la vapeur 4,0
- Indice d'évaporation 7,7

### Combustion

- Stoechiométrie 8 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion
- PCS
- PCI
- T99 582°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 587°C - 17,78 Log t
- T99.99 597°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air 1,6 %
- Limite supérieure dans l'air 10,5 %

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide) 1,919 J/g°C
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)  $6,293E-2+4,709E-3T-2,218E-6T^2+9,478E-11T^3$  J/g/K
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 1,272 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation 38,9 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion
- Enthalpie de formation
- Tension de vapeur 13,3 E2 Pa à 45,4 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = - 0,05223 * 38900 /T + 8,0952$

### Sécurité

Très inflammable.

Vapeurs toxiques.

Le contact du liquide avec la peau et les yeux provoque des irritations.

Valeur limite de la concentration dans l'air : 150 ppm

### Stockage

Récipients métalliques.

Eloigner des produits oxydants et des sources de chaleur

Local antidéflagrant.

Protéger des chocs

## Acétate d'isopropyle



M = 102,13 (9,79 mole/kg)

C : 58,80%

H : 9,87%

O : 31,33%

Liquide incolore, odeur légèrement fruitée  
Industrie des peintures et des vernis (solvant), parfumerie

### Propriétés physiques

- Densité 0,872
- Point de fusion -73,4 °C
- Point d'ébullition 90 °C
- Solubilité dans l'eau 30 g/l
- Azéotrope avec l'eau 10,5% d'eau Eb = 76,6°C
- Viscosité
- Tension superficielle 22,30 mN/m

### Caractéristiques chimiques

Fonction ester (groupe 13)

S'hydrolyse lentement dans l'eau en acide acétique et isopropanol. En présence de base, réaction beaucoup plus rapide (saponification). Ces réactions ne provoquent qu'un échauffement modéré.

Les esters réagissent avec les amines, les mercaptans et les alcools par échange fonctionnel, réactions en général athermiques, production d'isopropanol

### Inflammation

- Point éclair 2 °C
- Température d'autoinflammation 460 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité 1,8 % dans l'air
- Limite supérieure d'inflammabilité 8 % dans l'air
- Densité de la vapeur 3,52
- Indice d'évaporation 4

### Combustion

- Stoechiométrie 6,5 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion 2915 kJ/mole
- PCS 28542 kJ/kg
- PCI 26551 kJ/kg
- T99 611°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 618°C - 17,78 Log t
- T99.99 628°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air 1,8 %
- Limite supérieure dans l'air 8 %

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide)
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C
- Chaleur latente de vaporisation 32,93 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion
- Enthalpie de formation -481,7 kJ/mole
- Tension de vapeur 80 E2 Pa à 25 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = - 0,05223 * 36783 /T + 8,2124$

### Sécurité

Très inflammable.

Vapeurs toxiques.

Effets narcotiques à forte concentration.

Le contact du liquide avec la peau, les muqueuses et les yeux provoque des irritations.

Valeur limite de la concentration dans l'air : 250 ppm

### Stockage

Récipients métalliques.

Eloigner des produits oxydants et des sources de chaleur

Local antidéflagrant.

Protéger des chocs



## Acétate de méthyle



M = 74,08 (13,50 mole/kg)

C : 48,64%

H : 8,16%

O : 43,19%

Liquide incolore, odeur parfumée

Fabrication des laques, parfums de fruits artificiels

Solvant pour nitrocellulose et acétate de cellulose

### Propriétés physiques

- Densité 0,933
- Point de fusion -98,1 °C
- Point d'ébullition 57 °C
- Solubilité dans l'eau Soluble
- Viscosité 0,409 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 1,621 E-5 exp (7867/RT) Pa.s
- Tension superficielle 25,37 mN/m

### Caractéristiques chimiques

Fonction ester (groupe 13)

S'hydrolyse lentement dans l'eau en acide acétique et méthanol. En présence de base, réaction beaucoup plus rapide (saponification). Ces réactions ne provoquent qu'un échauffement modéré, mais les produits sont très volatils.

Les esters réagissent avec les amines, les mercaptans et les alcools par échange fonctionnel, réactions en général athermiques, production de méthanol.

### Inflammation

- Point éclair -10 °C
- Température d'autoinflammation 454 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité 3,1 % dans l'air
- Limite supérieure d'inflammabilité 16 % dans l'air
- Densité de la vapeur 2,55
- Indice d'évaporation 2

### Combustion

- Stoechiométrie 3,5 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion 1626 kJ/mole
- PCS 21949 kJ/kg
- PCI 20303 kJ/kg
- T99 623°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 635°C - 17,78 Log t
- T99.99 647°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques  $k = 1 \text{ E}13 \text{ exp } (-2900/T)$

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air 3,1 %
- Limite supérieure dans l'air 16 %

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide) 1,956 J/g/°C
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)  $2,234E-1+3,031E-3T-5,861E-7T^2+3,934E-10T^3$  J/g/K
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 1,085 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation 30,32 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion
- Enthalpie de formation -411,9 kJ/mole
- Tension de vapeur 267 E2 Pa à 24 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = - 0,05223 * 34196 /T + 8,3134$
- Température critique 233,7 °C
- Pression critique 46,3 E5 Pa

### Sécurité

Très inflammable

Irritant pour l'appareil respiratoire et les yeux

Narcotique à haute concentration

Valeur limite de la concentration dans l'air : 200 ppm

### Stockage

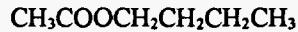
Récipients métalliques.

Eloigner des produits oxydants et des sources de chaleur

Local antidéflagrant.

Protéger des chocs

## Acétate de n-butyle



M = 116,16 (8,61 mole/kg)

C : 62,04%

H : 10,41%

O : 27,55%

Liquide incolore, odeur fruitée

Fabrication des laques, cuir artificiel, films photographiques

Verres organiques, plastiques

### Propriétés physiques

- Densité 0,882
- Point de fusion -76,3 °C
- Point d'ébullition 125 °C
- Solubilité dans l'eau 8 g/l
- Azéotrope avec l'eau 28,5% d'eau Eb = 90,2°C
- Viscosité 0,726 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 1,068 E-5 exp (10280/RT) Pa.s
- Tension superficielle 25,41 mN/m

### Caractéristiques chimiques

Fonction ester (groupe 13)

S'hydrolyse lentement dans l'eau en acide acétique et butanol. En présence de base, réaction beaucoup plus rapide (saponification). Ces réactions ne provoquent qu'un échauffement modéré.

Les esters réagissent avec les amines, les mercaptans et les alcools par échange fonctionnel, réactions en général athermiques, production de butanol.

### Inflammation

- Point éclair 22 °C
- Température d'autoinflammation 420 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité 1,7 % dans l'air
- Limite supérieure d'inflammabilité 7,6 % dans l'air
- Densité de la vapeur 4,0
- Indice d'évaporation 14

### Combustion

- Stoechiométrie 8 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion 3590 kJ/mole
- PCS 30906 kJ/kg
- PCI 28805 kJ/kg
- T99 582°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 587°C - 17,78 Log t
- T99.99 597°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air 1,7 %
- Limite supérieure dans l'air 7,6 %

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide)
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)  $1,173E-1+4,725E-3T-1,961E-6T^2+6,81E-12T^3$  J/g/K
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 1,351 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation 36,28 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion
- Enthalpie de formation -485,6 kJ/mole
- Tension de vapeur 20 E2 Pa à 25 °C
- Température critique 306 °C

### Sécurité

Très inflammable

Vapeurs toxiques

Le contact du liquide avec la peau et les yeux provoque des irritations

Valeur limite de la concentration dans l'air : 150 ppm

### Stockage

Récipients métalliques.

Eloigner des produits oxydants et des sources de chaleur

Local antidéflagrant.

Protéger des chocs

## Acétate de n-propyle



M = 102,13 (9,79 mole/kg)

C : 58,80%

H : 9,87%

O : 31,33%

Liquide incolore, odeur agréable (poire)

Parfumerie

Solvant pour résines, dérivés de la cellulose, plastiques

### Propriétés physiques

- Densité 0,888
- Point de fusion -95 °C
- Point d'ébullition 101,6 °C
- Solubilité dans l'eau 16 g/l
- Viscosité 0,583 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 1,329 E-5 exp (9216/RT) Pa.s
- Tension superficielle 24,36 mN/m

### Caractéristiques chimiques

Fonction ester (groupe 13)

S'hydrolyse lentement dans l'eau en acide acétique et propanol. En présence de base, réaction beaucoup plus rapide (saponification). Ces réactions ne provoquent qu'un échauffement modéré.

Les esters réagissent avec les amines, les mercaptans et les alcools par échange fonctionnel, réactions en général athermiques, production de propanol.

### Inflammation

- Point éclair 13 °C
- Température d'autoinflammation 450 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité 1,7 % dans l'air
- Limite supérieure d'inflammabilité 8 % dans l'air
- Densité de la vapeur 3,52
- Indice d'évaporation 6

### Combustion

- Stoechiométrie 6,5 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion
- PCS
- PCI
- T99 606°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 613°C - 17,78 Log t
- T99.99 623°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air 1,9 %
- Limite supérieure dans l'air 6,3 %

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide)
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)  $1,51E-1+4,407E-3T-1,651E-6T^2-1,409E-10T^3$  J/g/K
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 1,314 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation 33,92 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion
- Enthalpie de formation
- Tension de vapeur 53,3 E2 Pa à 28,8 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = - 0,05223 * 39682 /T + 8,446$

### Sécurité

Très inflammable  
Vapeurs irritantes pour la peau et les yeux  
Valeur limite de la concentration dans l'air : 200 ppm

### Stockage

Récipients métalliques.  
Eloigner des produits oxydants et des sources de chaleur  
Local antidéflagrant.  
Protéger des chocs

## Acétate de vinyle



M = 86,09 (11,62 mole/kg)

C : 55,81%

H : 7,03%

O : 37,17%

Liquide incolore, odeur douce et agréable  
Monomère dans la fabrication des résines  
Intermédiaire pour la préparation des colles

### Propriétés physiques

- Densité 0,932
- Point de fusion -93 °C
- Point d'ébullition 72,7 °C
- Solubilité dans l'eau 20 g/l
- Viscosité 0,568 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 1,558 E-5 exp (8766/RT) Pa.s
- Tension superficielle 23,95 mN/m

### Caractéristiques chimiques

Fonction ester insaturé (groupe 13 et 103)

Se polymérise rapidement à la lumière ou en présence d'un initiateur radicalaire, ou encore en milieu acide.

S'hydrolyse lentement dans l'eau en acide acétique et en acétaldéhyde. Réaction plus rapide en présence de base (saponification) qui se complique des réactions de condensation de l'acétaldéhyde.

Toutes ces réactions sont exothermiques et peuvent déclencher l'inflammation du réactif et de ses produits de réaction.

### Inflammation

- Point éclair -8 °C
- Température d'autoinflammation 402 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité 2,6 % dans l'air
- Limite supérieure d'inflammabilité 13,4 % dans l'air
- Densité de la vapeur 3
- Indice d'évaporation 3

### Combustion

- Stoechiométrie 4,5 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion
- PCS
- PCI
- T99 602°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 614°C - 17,78 Log t
- T99.99 629°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air 2,6 %
- Limite supérieure dans l'air 13,6 %

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide)
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)  $1,761E-1+3,247E-3T-1,023E-6T^2-1,928E-10T^3$  J/g/K
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 1,048 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation 30,5 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion
- Enthalpie de formation -314,9 kJ/mole
- Tension de vapeur 131,5 E2 Pa à 23,3 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = - 0,05223 * 35426 /T + 8,2421$

### Sécurité

Extrêmement inflammable

Le contact du liquide avec la peau peut provoquer des irritations

### Stockage

Récipients métalliques.

Eloigner des produits oxydants et des sources de chaleur

Local antidéflagrant.

Protéger des chocs





M = 58,08 (17,22 mole/kg)

C : 62,04%

H : 10,41%

O : 27,55%

Liquide incolore, odeur agréable légèrement âcre caractéristique, goût douceâtre  
Solvant, intermédiaire de synthèse

## Propriétés physiques

- Densité 0,785
- Point de fusion -94,7 °C
- Point d'ébullition 56,1 °C
- Solubilité dans l'eau infiniment soluble
- Viscosité 0,322 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 1,582 E-5 exp (7344/RT) Pa.s
- Tension superficielle 24,02 mN/m

## Caractéristiques chimiques

Fonction cétone (groupe 19)

Réactions de condensation catalysées par les acides ou les bases avec production d'eau et de sous-produits de masse moléculaire élevée. Réactions faiblement exothermiques.

Les acides minéraux oxydants peuvent à haute température couper la molécule avec production d'acide acétique et de gaz carbonique.

## Inflammation

- Point éclair -18 °C
- Température d'autoinflammation 538 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité 2,6 % dans l'air
- Limite supérieure d'inflammabilité 12,8 % dans l'air
- Densité de la vapeur 2,00

## Combustion

- Stoechiométrie 4 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion 1790 kJ/mole
- PCS 30820 kJ/kg
- PCI 28719 kJ/kg
- T99 681°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 691°C - 17,78 Log t
- T99.99 700°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques  $k = 1 E13 \exp (-3000/T)$

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air 2,5 %
- Limite supérieure dans l'air 12,8 %

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide) 2,257 J/g/°C
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)  $1,085E-1+4,487E-3T-2,157E-6T^2+3,509E-10T^3$  J/g/K
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 1,263 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation 29,10 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion 5,7 kJ/mole
- Enthalpie de formation -216,5 kJ/mole
- Tension de vapeur 267 E2 Pa à 22,7 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = -0,05223 * 33410 / T + 8,2003$
- Température critique 235 °C
- Pression critique 47 E5 Pa

### Sécurité

Extrêmement inflammable

Le contact du liquide avec la peau provoque des irritations

L'inhalation des vapeurs à haute concentration peut avoir une action narcotique

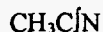
Valeur limite de la concentration dans l'air : 750 ppm

### Stockage

Conserver dans un endroit isolé bien ventilé à l'abri de la chaleur

Isoler des produits oxydants

Local antidéflagrant



M = 41,05 (24,36 mole/kg)

C : 58,51%

H : 7,37%

N : 34,12%

Liquide incolore, odeur étherée agréable  
Solvant dans l'industrie pharmaceutique et en parfumerie  
Intermédiaire en synthèse organique

## Propriétés physiques

- Densité 0,777
- Point de fusion  $-45,7\text{ }^{\circ}\text{C}$
- Point d'ébullition  $81,6\text{ }^{\circ}\text{C}$
- Solubilité dans l'eau infiniment soluble
- Azéotrope avec l'eau  $16,3\%$  d'eau  $E_b = 76,5^{\circ}\text{C}$
- Viscosité  $0,355\text{ E-}3\text{ Pa.s}$
- Viscosité en f(T)  $2,573\text{ E-}5\text{ exp}(6397/RT)\text{ Pa.s}$
- Tension superficielle  $29,29\text{ mN/m}$

## Caractéristiques chimiques

Fonction nitrile (groupe 26)

S'hydrolyse en acide acétique en présence d'acide ou de base avec production d'ammoniac

Oxydation violente avec les acides minéraux avec production de gaz toxiques (acide cyanhydrique, oxydes d'azote).

Réaction explosive avec l'acide nitrique

## Inflammation

- Point éclair  $12,8\text{ }^{\circ}\text{C}$
- Température d'autoinflammation  $524\text{ }^{\circ}\text{C}$
- Limite inférieure d'inflammabilité  $4,4\%$  dans l'air
- Limite supérieure d'inflammabilité  $16\%$  dans l'air
- Densité de la vapeur 1,42

## Combustion

- Stoechiométrie 2,75 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion  $1264\text{ kJ/mole}$
- PCS  $30792\text{ kJ/kg}$
- PCI  $29305\text{ kJ/kg}$
- T99  $715^{\circ}\text{C} - 18,17\text{ Log } t$  (t en sec.)
- T99.9  $731^{\circ}\text{C} - 17,78\text{ Log } t$
- T99.99  $741^{\circ}\text{C} - 17,39\text{ Log } t$
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air 3 %
- Limite supérieure dans l'air 16 %

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide) 2,261 J/g°C
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)  $4,989E-1+2,914E-3T-1,094E-6T^2+7,803E-11T^3$  J/g/K
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 1,272 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation 29,75 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion
- Enthalpie de formation 87,8 kJ/mole
- Tension de vapeur 133 E2 Pa à 27 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = - 0,05223 \cdot 34183 /T + 7,9387$

### Sécurité

Très inflammable

Très toxique par ingestion, inhalation des vapeurs et par absorption percutanée

Peut provoquer des intoxications mortelles

Valeur limite de la concentration dans l'air : 40 ppm

### Stockage

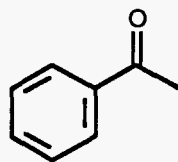
Récipients métalliques.

Eloigner des produits oxydants et des sources de chaleur

Local antidéflagrant.

Protéger des chocs

C<sub>8</sub>H<sub>8</sub>O



M = 120,15 (8,32 mole/kg)

C : 79,97%

H : 6,71%

O : 13,32%

Liquide (solide fondant à 20°C) incolore ou légèrement brun d'odeur âcre  
Plastifiant pour vernis, parfumerie (fleur d'oranger) et industrie pharmaceutique  
Photosensibilisateur, catalyseur pour la polymérisation des oléfines

## Propriétés physiques

- Densité 1,028
- Point de fusion 20,5 °C
- Point d'ébullition 202,0 °C
- Solubilité dans l'eau très faible
- Viscosité 1,763 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 1,312 E-5 exp (11943/RT) Pa.s
- Tension superficielle 39,61 mN/m

## Caractéristiques chimiques

Fonction cétone (groupe 19)

Réactions de condensation catalysées par les acides ou les bases avec production d'eau et de sous-produits de masse moléculaire élevée. Réactions faiblement exothermiques.

Les acides minéraux oxydants peuvent à haute température couper la molécule avec production d'acide benzoïque et de gaz carbonique.

## Inflammation

- Point éclair 77 °C
- Température d'autoinflammation 570 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité
- Limite supérieure d'inflammabilité
- Densité de la vapeur 4,1

## Combustion

- Stoechiométrie 9,5 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion 4149 kJ/mole
- PCS 34532 kJ/kg
- PCI 33178 kJ/kg
- T99 691°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 700°C - 17,78 Log t
- T99.99 710°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air
- Limite supérieure dans l'air

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide) 1,981 J/g/°C
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)  $-2,462E-1+5,335E-3T-3,388E-6T^2+8,092E-10T^3$  J/g/K
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 1,064 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation 42,8 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion
- Enthalpie de formation
- Tension de vapeur 1,31 E2 Pa à 37,1 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = - 0,05223 * 49071 /T + 8,2937$

### Sécurité

Peut prendre feu  
Peut avoir des effets narcotiques à forte concentration

### Stockage

Récipients en bois, en matière plastique ou en métal  
Protéger des chocs  
Conserver dans un endroit frais  
Eloigner des produits oxydants  
Local antidéflagrant

## Acétylacétate d'éthyle



M = 130,14 (7,68 mole/kg)

C : 55,37%

H : 7,75%

O : 36,88%

Liquide incolore d'odeur fruitée  
Solvant, préparation des matières colorantes  
Industrie des parfums

### Propriétés physiques

- Densité 1,025
- Point de fusion -45 °C
- Point d'ébullition 180 °C
- Solubilité dans l'eau 30 g/l
- Viscosité
- Tension superficielle 32,39 mN/m

### Caractéristiques chimiques

Fonction ester cétonique (groupe 13 et 19)

S'hydrolyse lentement dans l'eau avec formation d'éthanol et d'acide acétylacétique, celui-ci n'est pas stable et se décompose en acétone (extrêmement inflammable) et en gaz carbonique. Cette décomposition peut donc s'accompagner d'une forte augmentation de pression. L'hydrolyse est accélérée par les bases (saponification).

### Inflammation

- Point éclair 85°C
- Température d'autoinflammation
- Limite inférieure d'inflammabilité
- Limite supérieure d'inflammabilité
- Densité de la vapeur 4,5

### Combustion

- Stoechiométrie 7 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion 2887 kJ/mole
- PCS 22184 kJ/kg
- PCI 20620 kJ/kg
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air
- Limite supérieure dans l'air

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide) 1,994 J/g/°C
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C
- Chaleur latente de vaporisation
- Chaleur latente de fusion
- Enthalpie de formation
- Tension de vapeur 1,31 E2 Pa à 28,5°C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = - 0,05223 * 49533 /T + 8,5983$

### Sécurité

Peut prendre feu  
Vapeurs irritantes  
Peut provoquer des arrêts respiratoires à très forte concentration

### Stockage

Récipients métalliques.  
Eloigner des produits oxydants et des sources de chaleur  
Local antidéflagrant.  
Protéger des chocs



## Acétylacétone



M = 100,12 (9,99 mole/kg)

C : 59,98%

H : 8,05%

O : 31,96%

Liquide incolore ou légèrement jaune d'odeur agréable

Utilisé sous forme de dérivé organométallique comme additif dans les carburants et lubrifiants, encres, fongicides, insecticides et colorants.

### Propriétés physiques

- Densité 0,972
- Point de fusion -23 °C
- Point d'ébullition 139 °C
- Solubilité dans l'eau 120 g/l
- Viscosité
- Tension superficielle 30,99 mN/m

### Caractéristiques chimiques

Fonction cétone (groupe 19)

La présence des deux groupes cétoniques rend ce composé particulièrement réactif. Nombreuses réactions de condensation catalysées par les acides ou par les bases avec formation d'eau et de produits lourds. En présence d'acide fort l'acétylacétone se coupe avec formation d'acétone (extrêmement inflammable).

### Inflammation

- Point éclair 34 °C
- Température d'autoinflammation
- Limite inférieure d'inflammabilité
- Limite supérieure d'inflammabilité
- Densité de la vapeur
- Indice d'évaporation

### Combustion

- Stoechiométrie 6 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion 2687 kJ/mole
- PCS 26838 kJ/kg
- PCI 25214 kJ/kg
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air
- Limite supérieure dans l'air

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide)
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C
- Chaleur latente de vaporisation 34,30 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion
- Enthalpie de formation -380,6 KJ/mole
- Tension de vapeur

### Sécurité

Inflammable

Le contact du liquide avec la peau et les muqueuses provoque des irritations

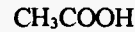
### Stockage

Eloigner des produits oxydants et des sources de chaleur

Local antidéflagrant.

Protéger des chocs

## Acide acétique



M = 60,05 (16,65 mole/kg)

C : 40,00%

H : 6,71%

O : 53,28%

Liquide incolore d'odeur piquante caractéristique (vinaigre)  
Solvant, produit de départ dans la fabrication de nombreux acétates  
Acidulant et conservateur. Teintures

### Propriétés physiques

- Densité 1,044
- Point de fusion 16,7 °C
- Point d'ébullition 117,9 °C
- Solubilité dans l'eau infiniment soluble
- Viscosité 1,181 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 1,408 E-5 exp (10797/RT) Pa.s
- Tension superficielle 27,59 mN/m

### Caractéristiques chimiques

Fonction acide (groupe 3)  
Réagit avec les alcools et les amines avec formation d'eau.  
Réagit avec tous les composés basiques avec formation de sels.  
Peut catalyser un grand nombre de réactions de condensation exothermiques.

### Inflammation

- Point éclair 39 °C
- Température d'autoinflammation 463 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité 4,0 % dans l'air
- Limite supérieure d'inflammabilité 20 % dans l'air
- Densité de la vapeur 2,07
- Indice d'évaporation 24

### Combustion

- Stoechiométrie 2 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion 875 kJ/mole
- PCS 14571 kJ/kg
- PCI 13217 kJ/kg
- T99 636°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 649°C - 17,78 Log t
- T99.99 662°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air 5,4 %
- Limite supérieure dans l'air 16 %

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide) 1,956 J/g/°C
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)  $8,06E-2+4,245E-3T-2,919E-6T^2+8,241E-10T^3$  J/g/K
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 1,108 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation 23,70 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion 11,5 kJ/mole
- Enthalpie de formation -437,7 kJ/mole
- Tension de vapeur 26,7 E2 Pa à 29,9 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = - 0,05223 * 40860 /T + 8,3435$
- Température critique 321,6 °C
- Pression critique 57,2 E5 Pa

### Sécurité

Inflammable

Les vapeurs forment des mélanges explosifs avec l'air

Les vapeurs sont irritantes pour la peau, les muqueuses respiratoires et oculaires

Le liquide cause de graves brûlures à la peau et aux yeux

L'ingestion peut provoquer une intoxication mortelle

Valeur limite de la concentration dans l'air : 10 ppm

### Stockage

Entreposer dans un endroit ventilé

Eloigner des sources de chaleur

## Acide acrylique



M = 72,06 (13,88 mole/kg)

C : 50,00%

H : 5,60%

O : 44,40%

Liquide incolore ou jaune d'odeur piquante  
Industrie des peintures

### Propriétés physiques

- Densité 1,062
- Point de fusion 14 °C
- Point d'ébullition 141,0 °C
- Solubilité dans l'eau infiniment soluble
- Viscosité 1,300 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 4,107 E-6 exp (14033/RT) Pa.s
- Tension superficielle 28,10 mN/m

### Caractéristiques chimiques

Fonction acide insaturé (groupe 3 et 103)

Réagit avec les alcools et les amines avec formation d'eau.

Réagit avec tous les composés basiques avec formation de sels.

Peut catalyser un grand nombre de réactions de condensation exothermiques.

Composé polymérisable en présence de métaux, de chaleur ou d'initiateur radicalaire

### Inflammation

- Point éclair 49 °C
- Température d'autoinflammation 438 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité 2,4 % dans l'air
- Limite supérieure d'inflammabilité 8,0 % dans l'air
- Densité de la vapeur 2,5
- Indice d'évaporation

### Combustion

- Stoechiométrie 3 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion 1369 kJ/mole
- PCS 18998 kJ/kg
- PCI 17868 kJ/kg
- T99 621°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 635°C - 17,78 Log t
- T99.99 650°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air
- Limite supérieure dans l'air

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide)
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)  $2,417E-2+4,428E-3T-3,264E-6T^2+9,679E-10T^3$  J/g/K
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 1,080 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation 45,8 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion 11,2 kJ/mole
- Enthalpie de formation -383,8 (l) kJ/mole
- Tension de vapeur
- Tension de vapeur en f(T)

### Sécurité

Inflammable

Peut se polymériser avec une réaction explosive

Vapeurs irritantes et toxiques

Le contact du liquide cause des brûlures à la peau et aux yeux

### Stockage

Récipients métalliques.

Conserver à l'abri de la chaleur (la chaleur peut déclencher la polymérisation) dans un endroit bien ventilé

Local antidéflagrant.

Protéger des chocs

## Acide butyrique



M = 88,11 (11,35 mole/kg)

C : 54,53%

H : 9,15%

O : 36,32%

Liquide incolore huileux d'odeur rance  
Fabrication des esters (parfumerie)

### Propriétés physiques

- Densité 0,952
- Point de fusion -5,2 °C
- Point d'ébullition 163,3 °C
- Solubilité dans l'eau infiniment soluble
- Azéotrope avec l'eau 97% d'eau Eb = 99,4°C
- Viscosité 1,587 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 1,103 E-5 exp (12109/RT) Pa.s
- Tension superficielle 26,51 mN/m

### Caractéristiques chimiques

Fonction acide (groupe 3)

Réagit avec les alcools et les amines avec formation d'eau.

Réagit avec tous les composés basiques avec formation de sels.

Peut catalyser un grand nombre de réactions de condensation exothermiques.

### Inflammation

- Point éclair 72 °C
- Température d'autoinflammation 443 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité 2 % dans l'air
- Limite supérieure d'inflammabilité 10 % dans l'air
- Densité de la vapeur 3
- Indice d'évaporation

### Combustion

- Stoechiométrie 5 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion 2191 kJ/mole
- PCS 24867 kJ/kg
- PCI 23021 kJ/kg
- T99 610°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 619°C - 17,78 Log t
- T99.99 630°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air 2 %
- Limite supérieure dans l'air 10 %

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide) 2,153 J/g/°C
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)  $1,332E-1+4,695E-3T-2,758E-6T^2+6,277E-10T^3$  J/g/K
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 1,304 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation 40,45 kJ/mole à 25 °C
- Chaleur latente de fusion 11,1 kJ/mole
- Enthalpie de formation -475,8 kJ/mole
- Tension de vapeur 1,31 E2 Pa à 25,5 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = - 0,05223 * 52072 /T + 9,1252$

### Sécurité

Inflammable

Vapeurs irritantes pour les yeux, la peau et les muqueuses respiratoires

Le contact avec le liquide provoque des irritations et des brûlures

### Stockage

Conserver en plein air ou dans un endroit bien ventilé

Eloigner des sources de feu, des produits oxydants ou combustibles

Protéger des chocs



## Acide formique



M = 46,03 (21,73 mole/kg)

C : 26,10%

H : 4,38%

O : 69,52%

Liquide incolore, odeur âcre et pénétrante  
Tannerie, industrie alimentaire  
Industrie des teintures, chimie organique

### Propriétés physiques

- Densité 1,214
- Point de fusion 8,4 °C
- Point d'ébullition 100,6 °C
- Solubilité dans l'eau infiniment soluble
- Azéotrope avec l'eau 22,6% d'eau Eb = 107,2°C
- Viscosité 1,785 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 5,995 E-6 exp (13882/RT) Pa.s
- Tension superficielle 37,67 mN/m

### Caractéristiques chimiques

Fonction acide (groupe 3)

Réagit avec les alcools et les amines avec formation d'eau.

Réagit avec tous les composés basiques avec formation de sels.

Peut catalyser un grand nombre de réactions de condensation exothermiques.

En présence d'acide fort, peut se décomposer avec formation d'oxyde de carbone

### Inflammation

- Point éclair 46,5 °C
- Température d'autoinflammation 480 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité 14,3 % dans l'air
- Limite supérieure d'inflammabilité 34 % dans l'air
- Densité de la vapeur 1,59
- Indice d'évaporation 55

### Combustion

- Stoechiométrie 0,5 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion 262 kJ/mole
- PCS 5692 kJ/kg
- PCI 4808 kJ/kg
- T99 653°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 668°C - 17,78 Log t
- T99.99 682°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air
- Limite supérieure dans l'air

### Données thermodynamiques

• Chaleur spécifique (liquide)	2,199 J/g/°C
• Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)	$2,544E-1+2,950E-3T-1,827E-6T^2+4,382E-10T^3$ J/g/K
• Chaleur spécifique du gaz à 25 °C	0,983 J/g/K
• Chaleur latente de vaporisation	22,69 kJ/mole
• Chaleur latente de fusion	12,7 kJ/mole
• Enthalpie de formation	-362,3 kJ/mole
• Tension de vapeur	44,1 E2 Pa à 20 °C
• Tension de vapeur en f(T)	$\log_{10}(p) = - 0,05223 * 41392 /T + 8,7795$

### Sécurité

Inflammable

Les vapeurs provoquent des irritations graves pour les yeux, les muqueuses respiratoires et pour la peau

Le contact du liquide entraîne des irritations et des brûlures

Valeur limite de la concentration dans l'air : 5 ppm

### Stockage

Conserver en plein air ou dans un endroit bien ventilé

Eloigner des sources de feu, des produits oxydants ou combustibles

Protéger des chocs

## Alcool méthylique

CH<sub>4</sub>O

CH<sub>3</sub>OH

M = 32,04 (31,21 mole/kg)

C : 37,48%

H : 12,58%

O : 49,93%

Liquide incolore, odeur faible  
Solvant industriel  
Grand intermédiaire de synthèse, esters méthyliques  
Carburant

### Propriétés physiques

- Densité 0,791
- Point de fusion -97,8 °C
- Point d'ébullition 64,7 °C
- Solubilité dans l'eau infiniment soluble
- Viscosité 0,580 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 7,404 E-6 exp (10631/RT) Pa.s
- Tension superficielle 22,50 mN/m

### Caractéristiques chimiques

Fonction alcool (groupe 4)

Estérification par les acides minéraux ou organiques avec formation d'eau. Les oxydants transforment le méthanol en formol et acide formique, réaction exothermique avec dégagement gazeux (formol).

Réagit avec les métaux réducteurs et les hydrures métalliques avec formation d'hydrogène, risque d'inflammation et d'explosion.

### Inflammation

- Point éclair 11 °C
- Température d'autoinflammation 385 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité 6,7 % dans l'air
- Limite supérieure d'inflammabilité 36 % dans l'air
- Densité de la vapeur 1,11
- Indice d'évaporation 6,3

### Combustion

- Stoechiométrie 3,75 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion 726 kJ/mole
- PCS 22658 kJ/kg
- PCI 16312 kJ/kg
- T99 1313°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 1347°C - 17,78 Log t
- T99.99 1394°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques  $k = 2 \text{ E}13 \text{ exp } (-2520/T)$

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air 5,5 %
- Limite supérieure dans l'air 26,5 %

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide)
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)  $6,601E-1+2,213E-3T+8,074E-7T^2-8,901E-10T^3$  J/g/K
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 1,368 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation 35,21 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion 3,21 kJ/mole
- Enthalpie de formation -201 kJ/mole
- Tension de vapeur 128 E2 Pa à 20 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = - 0,05223 * 39075 /T + 8,9312$
- Température critique 240 °C
- Pression critique 78,5 E5 Pa

### Sécurité

Facilement inflammable

Vapeurs toxiques

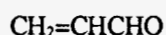
Valeur limite de la concentration dans l'air : 200 ppm

### Stockage

Conserver dans un endroit isolé, bien ventilé à l'abri de la chaleur

Isoler des produits oxydants

Local antidéflagrant



M = 56,06 (17,84 mole/kg)

C : 64,27%

H : 7,19%

O : 28,54%

Liquide incolore (se colore en jaune par exposition à la lumière). Odeur âcre pénétrante

Industrie des colorants

Industrie des caoutchoucs

## Propriétés physiques

- Densité 0,841
- Point de fusion -87,0 °C
- Point d'ébullition 53 °C
- Solubilité dans l'eau 400 g/l
- Azéotrope avec l'eau 2,6 % d'eau Eb = 52,4°C
- Viscosité 0,344 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 1,630 E-5 exp (7431/RT) Pa.s
- Tension superficielle

## Caractéristiques chimiques

Fonction aldéhyde insaturé (groupe 5 et 103)

Nombreuses réactions de condensation catalysées par les acides ou les bases. Ces réactions sont exothermiques (suffisamment pour enflammer le mélange) et conduisent à des produits plus lourds (oligomères) colorés et très visqueux. Ces réactions produisent également de l'eau.

Les aldéhydes réagissent facilement avec tous les oxydants (oxygène de l'air, oxydants minéraux, acides minéraux oxydants) pour donner notamment de l'acide acrylique.

L'acroleïne se polymérise facilement en présence de lumière, de base ou d'acide. Réaction exothermique.

## Inflammation

- Point éclair -26 °C
- Température d'autoinflammation 220 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité 2,8 % dans l'air
- Limite supérieure d'inflammabilité 31 % dans l'air
- Densité de la vapeur 1,94
- Indice d'évaporation

## Combustion

- Stoechiométrie 3,5 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion 1628 kJ/mole
- PCS 29040 kJ/kg
- PCI 27590 kJ/kg
- T99 516°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 533°C - 17,78 Log t
- T99.99 546°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques 1,41 E10 exp (-35500/RT)

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air 2,8 %
- Limite supérieure dans l'air 31 %

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide)
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)  $2,135E-1+3,757E-3T-1,91E-6T^2+3,4E-10T^3$  J/g/K
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 1,172 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation 31,9 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion
- Enthalpie de formation -85,7 kJ/mole
- Tension de vapeur 357 E2 Pa à 25 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = - 0,05223 * 31905 /T + 8,0338$

### Sécurité

Liquide particulièrement inflammable

Très toxique

Vapeurs extrêmement irritantes pour les muqueuses (yeux et voies respiratoires)

Le liquide occasionne de graves brûlures

Valeur limite de la concentration dans l'air : 0,1 ppm

### Stockage

A conserver dans un endroit bien ventilé, à l'abri de la chaleur

Isoler des produits oxydants et des acides

Local antidéflagrant

## Acrylate d'éthyle



M = 100,12 (9,99 mole/kg)

C : 59,98%

H : 8,05%

O : 31,96%

Liquide incolore d'odeur pénétrante  
Intermédiaire de synthèse organique  
Industrie des plastiques

### Propriétés physiques

- Densité 0,925
- Point de fusion < -72 °C
- Point d'ébullition 100 °C
- Solubilité dans l'eau 20 g/l
- Azéotrope avec l'eau 45% d'eau Eb = 81°C
- Viscosité 0,615 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 1,970 E-5 exp (8386/RT) Pa.s
- Tension superficielle

### Caractéristiques chimiques

Fontion ester insaturé (groupe 13 et 103)

S'hydrolyse lentement dans l'eau en acide acrylique et éthanol. En présence de base, réaction beaucoup plus rapide (saponification). Ces réactions ne provoquent qu'un échauffement modéré.

Les esters réagissent avec les amines, les mercaptans et les alcools par échange fonctionnel, réactions en général athermiques, production d'éthanol

L'acrylate d'éthyle se polymérise en présence de chaleur ou d'initiateur radicalaire, réaction exothermique

### Inflammation

- Point éclair 9 °C
- Température d'autoinflammation 372 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité 1,4 % dans l'air
- Limite supérieure d'inflammabilité 14 % dans l'air
- Densité de la vapeur 3,45
- Indice d'évaporation

### Combustion

- Stoechiométrie 6 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion
- PCS
- PCI
- T99 583°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 594°C - 17,78 Log t
- T99.99 607°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques k = 9,15 E10 exp (-45000/RT)

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air 1,8 %
- Limite supérieure dans l'air 5 %

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide)
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)  $1,679E-1+3,686E-3T-1,38E-6T^2-5,725E-11T^3$  J/g/K
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 1,142 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation 38,7 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion
- Enthalpie de formation
- Tension de vapeur 39,2 E2 Pa à 20 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = - 0,05223 * 38727 /T + 8,3471$

### Sécurité

Très inflammable

Peut se polymériser avec réaction violente à la chaleur

Assez toxique

Vapeurs irritantes pour les muqueuses, les yeux et la peau

Valeur limite de la concentration dans l'air : 5 ppm

### Stockage

Récipients métalliques

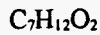
Conserver dans un endroit isolé à l'abri de la chaleur (la chaleur peut provoquer une polymérisation explosive) et bien ventilé

Protéger des chocs

Local antidéflagrant



## Acrylate de butyle



M = 128,17 (7,80 mole/kg)

C : 65,60%

H : 9,44%

O : 24,97%

Liquide incolore, odeur piquante

Monomère dans la fabrication des résines et polymères (textiles).

Formulation des peintures

### Propriétés physiques

- Densité 0,898
- Point de fusion
- Point d'ébullition 145 °C
- Solubilité dans l'eau 8 g/l
- Viscosité
- Tension superficielle

### Caractéristiques chimiques

Fontion ester insaturé (groupe 13 et 103)

S'hydrolyse lentement dans l'eau en acide acrylique et butanol. En présence de base, réaction beaucoup plus rapide (saponification). Ces réactions ne provoquent qu'un échauffement modéré.

Les esters réagissent avec les amines, les mercaptans et les alcools par échange fonctionnel, réactions en général athermiques, production de butanol

L'acrylate de butyle se polymérise en présence de bases ou d'initiateur radicalaire, réaction exothermique

### Inflammation

- Point éclair
- Température d'autoinflammation
- Limite inférieure d'inflammabilité
- Limite supérieure d'inflammabilité
- Densité de la vapeur
- Indice d'évaporation

### Combustion

- Stoechiométrie 9 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion
- PCS
- PCI
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air
- Limite supérieure dans l'air

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide)
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C
- Chaleur latente de vaporisation
- Chaleur latente de fusion
- Enthalpie de formation
- Tension de vapeur 6,58 E2 Pa à 23,5 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = - 0,05223 * 42638 /T + 8,2051$

### Sécurité

Inflammable

Peut se polymériser avec réaction explosive à la chaleur

Assez toxique

Vapeurs irritantes pour les muqueuses, les yeux et la peau

### Stockage

Récipients métalliques

Conserver dans un endroit isolé à l'abri de la chaleur (la chaleur peut provoquer une polymérisation explosive) et bien ventilé

Protéger des chocs

Local antidéflagrant

## Acrylate de méthyle



M = 86,09 (11,62 mole/kg)

C : 55,81%

H : 7,03%

O : 37,17%

Liquide incolore, odeur âcre et piquante  
Monomère dans la fabrication des textiles synthétiques, films plastiques

### Propriétés physiques

- Densité 0,956
- Point de fusion -76,5 °C
- Point d'ébullition 80 °C
- Solubilité dans l'eau 60 g/l
- Azéotrope avec l'eau 9,5% d'eau Eb = 73°C
- Viscosité 0,501 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 1,450 E-5 exp (8335/RT) Pa.s
- Tension superficielle

### Caractéristiques chimiques

Fontion ester insaturé (groupe 13 et 103)

S'hydrolyse lentement dans l'eau en acide acrylique et méthanol. En présence de base, réaction beaucoup plus rapide (saponification). Ces réactions ne provoquent qu'un échauffement modéré.

Les esters réagissent avec les amines, les mercaptans et les alcools par échange fonctionnel, réactions en général athermiques, production de méthanol

L'acrylate de méthyle se polymérise en présence de bases ou d'initiateur radicalaire, réaction exothermique

### Inflammation

- Point éclair -3 °C
- Température d'autoinflammation 468 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité 2,8 % dans l'air
- Limite supérieure d'inflammabilité 25 % dans l'air
- Densité de la vapeur 2,95
- Indice d'évaporation

### Combustion

- Stoechiométrie 4,5 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion
- PCS
- PCI
- T99 638°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 649°C - 17,78 Log t
- T99.99 663°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air 2,6 %
- Limite supérieure dans l'air 18,6 %

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide)
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)  $1,761E-1+3,248E-3T+-1,023E-6T^2+-1,928E-10T^3$  J/g/K
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 1,048 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation 31,26 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion
- Enthalpie de formation -293,0 kJ/mole
- Tension de vapeur 90,7 E2 Pa à 20 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = - 0,05223 * 35960 /T + 8,2268$

### Sécurité

Extrêmement inflammable  
Peut se polymériser avec réaction explosive à la chaleur  
Assez toxique  
Vapeurs irritantes pour les muqueuses, les yeux et la peau  
Valeur limite de la concentration dans l'air : 10 ppm

### Stockage

Récipients métalliques  
Conserver dans un endroit isolé à l'abri de la chaleur (la chaleur peut provoquer une polymérisation explosive) et bien ventilé  
Protéger des chocs  
Local antidéflagrant

## Acrylonitrile

C<sub>3</sub>H<sub>3</sub>N



M = 53,06 (18,85 mole/kg)

C : 67,90%

H : 5,70%

N : 26,40%

Liquide incolore (jaunit lentement à la lumière)

Monomère utilisé dans la fabrication des fibres acryliques, adhésifs

Intermédiaire de synthèse

### Propriétés physiques

- Densité 0,806
- Point de fusion -83,5 °C
- Point d'ébullition 77,3 °C
- Solubilité dans l'eau 74 g/l
- Azéotrope avec l'eau 14,3% d'eau Eb = 70,6°C
- Viscosité 0,346 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 2,336 E-5 exp (6572/RT) Pa.s
- Tension superficielle 27,22 mN/m

### Caractéristiques chimiques

Fonction nitrile insaturé (groupe 26 et 103)

S'hydrolyse en acide acrylique en présence d'acide ou de base avec production d'ammoniac

Oxydation violente avec les acides minéraux avec production de gaz toxiques (acide cyanhydrique, oxydes d'azote).

L'acrylonitrile se polymérise en présence de base ou d'initiateur radicalaire, réaction exothermique

### Inflammation

- Point éclair 0 °C
- Température d'autoinflammation 480 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité 3 % dans l'air
- Limite supérieure d'inflammabilité 17 % dans l'air
- Densité de la vapeur 1,83
- Indice d'évaporation

### Combustion

- Stoechiométrie 3,75 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion
- PCS
- PCI
- T99 698°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 715°C - 17,78 Log t
- T99.99 727°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air 3 %
- Limite supérieure dans l'air 17 %

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide)
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)  $2,015E-1+4,161E-3T+-2,949E-6T^2+8,671E-10T^3$  J/g/K
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 1,203 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation 33,2 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion
- Enthalpie de formation 180,6 kJ/mole
- Tension de vapeur 110,7 E2 Pa à 20 °C
- Température critique 246 °C
- Pression critique 34,9 E5 Pa

### Sécurité

Extrêmement inflammable  
Toxique par inhalation ou absorption par la peau  
Le liquide provoque des brûlures  
Valeur limite de la concentration dans l'air : 2 ppm

### Stockage

Entreposer dans un endroit isolé et très bien ventilé  
Local antidéflagrant  
Inscription « PRODUIT TOXIQUE » sur le dépôt

## Alcool allylique



M = 58,08 (17,22 mole/kg)

C : 62,04%

H : 10,41%

O : 27,55%

Liquide incolore, odeur piquante (moutarde)

Fabrication des esters allyliques, gaz de combat, résines, plastifiants

### Propriétés physiques

- Densité 0,854
- Point de fusion -50 °C
- Point d'ébullition 96,5 °C
- Solubilité dans l'eau infiniment soluble
- Azéotrope avec l'eau 27,7% d'eau Eb = 88,9°C
- Viscosité 1,341 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 2,671 E-6 exp (15157/RT) Pa.s
- Tension superficielle 25,73 mN/m

### Caractéristiques chimiques

Fonction alcool insaturé (groupe 4)

Estérification par les acides minéraux ou organiques avec formation d'eau. Les oxydants transforment l'alcool allylique en acroleïne et acide acrylique, réaction exothermique

Réagit avec les métaux réducteurs et les hydrures métalliques avec formation d'hydrogène, risque d'inflammation et d'explosion.

### Inflammation

- Point éclair 21 °C
- Température d'autoinflammation 375 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité 2,5 % dans l'air
- Limite supérieure d'inflammabilité 18 % dans l'air
- Densité de la vapeur 2
- Indice d'évaporation

### Combustion

- Stoechiométrie 4 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion 1849 kJ/mole
- PCS 31835 kJ/kg
- PCI 29735 kJ/kg
- T99 632°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 648°C - 17,78 Log t
- T99.99 661°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air 2,5 %
- Limite supérieure dans l'air 18 %

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide) 2,780 J/g/°C
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)  $-1,903E-2+5,417E-3T+3,499E-6T^2+9,162E-10T^3$  J/g/K
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 1,309 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation 44,3 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion
- Enthalpie de formation -124,5 kJ/mole
- Tension de vapeur 53,3 E2 Pa à 33 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = - 0,05223 * 44239 /T + 9,1424$
- Température critique 271,9 °C

### Sécurité

Facilement inflammable

Vapeurs extrêmement irritantes pour les muqueuses et pour la peau

Les dégâts aux poumons et aux yeux peuvent apparaître bien après l'accident

Le contact avec le liquide entraîne de graves brûlures

Valeur limite de la concentration dans l'air : 2 ppm

### Stockage

Conserver dans un endroit isolé, bien ventilé, à l'abri de la chaleur

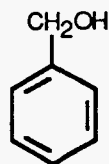
Isoler des produits oxydants

Local antidéflagrant



## Alcool benzylique

C<sub>7</sub>H<sub>8</sub>O



M = 108,14 (9,25 mole/kg)

C : 77,75%

H : 7,46%

O : 14,79%

Liquide incolore, odeur faiblement aromatique  
Fabrication des esters benzyliques (parfumerie et pharmacie)  
Solvant de la gélatine, caséine et acétate de cellulose

### Propriétés physiques

- Densité 1,045
- Point de fusion -15,2 °C
- Point d'ébullition 204,7 °C
- Solubilité dans l'eau 40 g/l
- Azéotrope avec l'eau 91% d'eau Eb = 100°C
- Viscosité 5,81 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 1,036 E-6 exp (21039/RT) Pa.s
- Tension superficielle 28,58 mN/m

### Caractéristiques chimiques

Fonction alcool (groupe 4)

Estérification par les acides minéraux ou organiques avec formation d'eau. Les oxydants transforment l'alcool benzylique en benzaldéhyde et acide benzoïque, réaction exothermique

Réagit avec les métaux réducteurs et les hydrures métalliques avec formation d'hydrogène, risque d'inflammation et d'explosion.

### Inflammation

- Point éclair 93 °C
- Température d'autoinflammation 435 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité
- Limite supérieure d'inflammabilité
- Densité de la vapeur 3,72
- Indice d'évaporation 1750

### Combustion

- Stoechiométrie 8,5 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion 3738 kJ/mole
- PCS 34566 kJ/kg
- PCI 33061 kJ/kg
- T99 633°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 647°C - 17,78 Log t
- T99.99 657°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air 1,3 %
- Limite supérieure dans l'air 13 %

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide) 2,136 J/g/°C
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)  $-6,841E-2+5,068E-3T+3,104E-6T^2+7,186E-10T^3$  J/g/K
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 1,185 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation 58,9 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion 8,97 kJ/mole
- Enthalpie de formation -100,4 kJ/mole
- Tension de vapeur 0,13 E2 Pa à 20 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = -0,05223 * 58950 / T + 9,3924$

### Sécurité

Peu inflammable  
Vapeurs irritantes pour les muqueuses et pour la peau  
Le contact du liquide entraîne des irritations

### Stockage

Protéger des chocs  
Éloigner des produits oxydants et des sources de chaleur

## Alcool éthylique



M = 46,07 (21,71 mole/kg)

C : 52,14%

H : 13,13%

O : 34,73%

Liquide incolore, odeur agréable

Solvant, fabrication des esters éthyliques (pharmacie, parfumerie)

### Propriétés physiques

- Densité 0,785
- Point de fusion -114,1 °C
- Point d'ébullition 78,3 °C
- Solubilité dans l'eau infiniment soluble
- Azéotrope avec l'eau 4% d'eau Eb = 78,17°C
- Viscosité 1,186 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 5,702 E-6 exp (13010/RT) Pa.s
- Tension superficielle 22,39 mN/m

### Caractéristiques chimiques

Fonction alcool (groupe 4)

Estérification par les acides minéraux ou organiques avec formation d'eau. Les oxydants transforment l'éthanol en aldéhyde acétique et acide acétique, réaction exothermique.

Réagit avec les métaux réducteurs et les hydrures métalliques avec formation d'hydrogène, risque d'inflammation et d'explosion.

### Inflammation

- Point éclair 12 °C
- Température d'autoinflammation 363 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité 3,3 % dans l'air
- Limite supérieure d'inflammabilité 19 % dans l'air
- Densité de la vapeur 1,59
- Indice d'évaporation 8,3

### Combustion

- Stoechiométrie 3 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion 1367 kJ/mole
- PCS 29672 kJ/kg
- PCI 27023 kJ/kg
- T99 644°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 660°C - 17,78 Log t
- T99.99 672°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques  $k = 6 E5 \exp (-930/T)$

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air 3,3 %
- Limite supérieure dans l'air 19 %

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide) 2,429 J/g/°C
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)  $1,957E-1+4,647E-3T-1,821E-6T^2+2,98E-11T^3$  J/g/K
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 1,420 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation 38,56 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion 5,01 kJ/mole
- Enthalpie de formation -235,1 kJ/mole
- Tension de vapeur 53,3 E2 Pa à 19,0 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = - 0,05223 * 42672 /T + 9,2284$
- Température critique 243,1 °C
- Pression critique 63,1 E5 Pa

### Sécurité

Facilement inflammable

Vapeurs toxiques

Valeur limite de la concentration dans l'air : 1000 ppm

### Stockage

Conserver dans un endroit bien ventilé

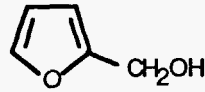
Eloigner des produits oxydants et des sources de chaleur

Protéger des chocs

Local antidéflagrant

## Alcool furfurylique

C<sub>3</sub>H<sub>6</sub>O<sub>2</sub>



M = 98,10 (10,19 mole/kg)

C : 61,21%

H : 6,17%

O : 32,62%

Liquide, odeur faible de brûlé

Solvant, fabrication d'agents mouillants et de résines

### Propriétés physiques

- Densité 1,128
- Point de fusion
- Point d'ébullition 170 °C
- Solubilité dans l'eau Infiniment soluble (instable dans l'eau)
- Azéotrope avec l'eau 80% d'eau Eb = 98,5°C
- Viscosité
- Tension superficielle 38 mN/m

### Caractéristiques chimiques

Fonction alcool (groupe 4)

Estérification par les acides minéraux ou organiques avec formation d'eau. Les oxydants transforment l'alcool furfurylique en furfural, réaction exothermique

Réagit avec les métaux réducteurs et les hydrures métalliques avec formation d'hydrogène, risque d'inflammation et d'explosion.

L'alcool furfurylique s'hydrolyse dans l'eau. Il se résinifie rapidement en milieu acide (réaction exothermique)

### Inflammation

- Point éclair 65 °C
- Température d'autoinflammation 490 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité 1,8 % dans l'air
- Limite supérieure d'inflammabilité 16,3 % dans l'air
- Densité de la vapeur 3,37
- Indice d'évaporation 443

### Combustion

- Stoechiométrie 5,5 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion
- PCS
- PCI
- T99 668°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 685°C - 17,78 Log t
- T99.99 700°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air 1,8 %
- Limite supérieure dans l'air 16,3 %

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide)
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C
- Chaleur latente de vaporisation
- Chaleur latente de fusion
- Enthalpie de formation -211,8 kJ/mole
- Tension de vapeur 1,3 E2 Pa à 31,8 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = - 0,05223 * 53606 /T + 9,1984$

### Sécurité

Inflammable  
Vapeurs irritantes pour les muqueuses, les yeux et la peau  
Toxique  
Valeur limite de la concentration dans l'air : 10 ppm

### Stockage

Conserver dans un endroit bien ventilé  
Eloigner des produits oxydants et des sources de chaleur  
Protéger des chocs  
Local antidéflagrant

## Alcool isobutylique

C<sub>4</sub>H<sub>10</sub>O



M = 74,12 (13,49 mole/kg)

C : 64,82%

H : 13,60%

O : 21,58%

Liquide incolore, odeur faible d'alcool amylique  
Fabrication des esters (essences à odeur de fruits)  
Solvant des peintures et des vernis

### Propriétés physiques

- Densité 0,798
- Point de fusion -108 °C
- Point d'ébullition 107,9 °C
- Solubilité dans l'eau 50 g/l
- Viscosité 4,00 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 3,227 E-7 exp (22974/RT) Pa.s
- Tension superficielle 22,94 mN/m

### Caractéristiques chimiques

Fonction alcool (groupe 4)

Estérification par les acides minéraux ou organiques avec formation d'eau. Les oxydants transforment l'isobutanol en isobutyraldéhyde et acide isobutyrique, réaction exothermique

Réagit avec les métaux réducteurs et les hydrures métalliques avec formation d'hydrogène, risque d'inflammation et d'explosion.

### Inflammation

- Point éclair 28 °C
- Température d'autoinflammation
- Limite inférieure d'inflammabilité 1,7 %
- Limite supérieure d'inflammabilité 10,9 %
- Densité de la vapeur 2,55
- Indice d'évaporation 24

### Combustion

- Stoechiométrie 6 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion 2668 kJ/mole
- PCS 35996 kJ/kg
- PCI 33252 kJ/kg
- Paramètres cinétiques  $k = 3,7 E12 \exp (-1100/T)$

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air 1,7 %
- Limite supérieure dans l'air 10,9 %

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide) 2,993 J/g/°C
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)  $-1,04E-1+6,326E-3T-3,891E-6T^2+9,756E-10T^3$  J/g/K
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 1,462 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation 41,82 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion
- Enthalpie de formation -288,6 kJ/mole
- Tension de vapeur 13,3 E2 Pa à 21,7 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = -0,05223 * 47443 / T + 9,4014$
- Température critique 265 °C
- Pression critique 48 E5 Pa

### Sécurité

Inflammable

Vapeurs toxiques

Le contact du liquide avec les yeux provoque des irritations graves

Valeur limite de la concentration dans l'air : 50 ppm

### Stockage

Conserver dans un endroit bien ventilé

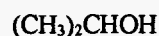
Eloigner des produits oxydants et des sources de chaleur

Protéger des chocs

Local antidéflagrant



## Alcool isopropylique



M = 60,10 (16,64 mole/kg)

C : 59,96%

H : 13,42%

O : 26,62%

Liquide incolore, odeur ressemblant à un mélange d'éthanol et d'acétone

Mélanges réfrigérants, solvant des gommés des résines et des huiles essentielles (extraction)

Intermédiaire de synthèse

### Propriétés physiques

- Densité 0,781
- Point de fusion -88,5 °C
- Point d'ébullition 82,3 °C
- Solubilité dans l'eau infiniment soluble
- Azéotrope avec l'eau 12,6% d'eau Eb = 80,3°C
- Viscosité 2,35 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 3,169 E-7 exp (21724/RT) Pa.s
- Tension superficielle 21,32 mN/m

### Caractéristiques chimiques

Fonction alcool (groupe 4)

Estérification par les acides minéraux ou organiques avec formation d'eau. Les oxydants transforment l'alcool isopropylique en acétone (extrêmement inflammable), réaction exothermique

Réagit avec les métaux réducteurs et les hydrures métalliques avec formation d'hydrogène, risque d'inflammation et d'explosion.

### Inflammation

- Point éclair 11 °C
- Température d'autoinflammation 395 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité 2 % dans l'air
- Limite supérieure d'inflammabilité 12 % dans l'air
- Densité de la vapeur 2,07
- Indice d'évaporation 21

### Combustion

- Stoechiométrie 4,5 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion 2006 kJ/mole
- PCS 33378 kJ/kg
- PCI 30670 kJ/kg
- T99 637°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 650°C - 17,78 Log t
- T99.99 660°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air 2 %
- Limite supérieure dans l'air 11,8 %

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide)
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)  $5,396E-1+3,136E-3T+1,066E-6T^2+-1,541E-9T^3$  J/g/K
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 1,528 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation 39,85 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion 5,37 kJ/mole
- Enthalpie de formation -260,9 kJ/mole
- Tension de vapeur 53,3 E2 Pa à 23,8 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = - 0,05223 * 44492 /T + 9,4264$
- Température critique 234,9 °C
- Pression critique 53 E5 Pa

### Sécurité

Facilement inflammable

Vapeurs toxiques

Valeur limite de la concentration dans l'air : 400 ppm

### Stockage

Conserver dans un endroit bien ventilé

Eloigner des produits oxydants et des sources de chaleur

Protéger des chocs

Local antidéflagrant

## Alcool n-butylique

C<sub>4</sub>H<sub>10</sub>O



M = 74,12 (13,49 mole/kg)

C : 64,82%

H : 13,60%

O : 21,58%

Liquide incolore très réfringent, odeur faible d'huile

Solvant des graisses, résines, cires

Fabrication des laques, détergents et esters

### Propriétés physiques

- Densité 0,806
- Point de fusion -89,3 °C
- Point d'ébullition 117,7 °C
- Solubilité dans l'eau 91 g/l
- Azéotrope avec l'eau 42,5% d'eau Eb = 92,7°C
- Viscosité 2,922 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 1,158 E-6 exp (19092/RT) Pa.s
- Tension superficielle 25,39 mN/m

### Caractéristiques chimiques

Fonction alcool (groupe 4)

Estérification par les acides minéraux ou organiques avec formation d'eau. Les oxydants transforment le butano en ebutyraldéhyde et acide butyrique, réaction exothermique.

Réagit avec les métaux réducteurs et les hydrures métalliques avec formation d'hydrogène, risque d'inflammation et d'explosion.

### Inflammation

- Point éclair 29 °C
- Température d'autoinflammation 343 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité 1,4 % dans l'air
- Limite supérieure d'inflammabilité 11,2 % dans l'air
- Densité de la vapeur 2,55
- Indice d'évaporation 33

### Combustion

- Stoechiométrie 6 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion 2676 kJ/mole
- PCS 36104 kJ/kg
- PCI 33360 kJ/kg
- T99 593°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 604°C - 17,78 Log t
- T99.99 614°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques k = 3 E13 exp (-1800/T)

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air 1,45 %
- Limite supérieure dans l'air 11,25 %

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide) 2,199 J/g/°C
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)  $4,406E-2+5,64E-3T+-3,025E-6T^2+6,321E-10T^3$  J/g/K
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 1,473 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation 43,29 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion 9,37 kJ/mole
- Enthalpie de formation -283,4 kJ/mole
- Tension de vapeur 5,8 E2 Pa à 20 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = -0,05223 * 49526 / T + 9,5251$
- Température critique 287 °C
- Pression critique 48,4 E5 Pa

### Sécurité

Inflammable

Vapeurs toxiques

Le contact du liquide avec les yeux provoque des irritations graves

Valeur limite de la concentration dans l'air : 50 ppm

### Stockage

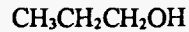
Conserver dans un endroit bien ventilé

Eloigner des produits oxydants et des sources de chaleur

Protéger des chocs

Local antidéflagrant

## Alcool propylique



M = 60,10 (16,64 mole/kg)

C : 59,96%

H : 13,42%

O : 26,62%

Liquide incolore, odeur d'alcool, stupéfiant léger  
Solvant des résines et des esters de cellulose

### Propriétés physiques

- Densité 0,799
- Point de fusion -126,2 °C
- Point d'ébullition 97,2 °C
- Solubilité dans l'eau infiniment soluble
- Azéotrope avec l'eau 18,3% d'eau Eb = 87°C
- Viscosité 2,195 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 1,221 E-6 exp (18265/RT) Pa.s
- Tension superficielle 23,71 mN/m

### Caractéristiques chimiques

Fonction alcool (groupe 4)

Estérification par les acides minéraux ou organiques avec formation d'eau. Les oxydants transforment le propanol en aldéhyde propionique et en acide propionique, réaction exothermique.

Réagit avec les métaux réducteurs et les hydrures métalliques avec formation d'hydrogène, risque d'inflammation et d'explosion.

### Inflammation

- Point éclair 15 °C
- Température d'autoinflammation 370 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité 2,1 % dans l'air
- Limite supérieure d'inflammabilité 13,6 % dans l'air
- Densité de la vapeur 2,08
- Indice d'évaporation 16

### Combustion

- Stoechiométrie 4,5 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion 2021 kJ/mole
- PCS 33627 kJ/kg
- PCI 30920 kJ/kg
- T99 623°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 637°C - 17,78 Log t
- T99.99 647°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air 2,1 %
- Limite supérieure dans l'air 13,5 %

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide) 2,449 J/g/°C
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)  $4,11E-2+5,532E-3T-3,087E-6T^2+7,148E-10T^3$  J/g/K
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 1,435 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation 41,44 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion 5,19 kJ/mole
- Enthalpie de formation -255,7 kJ/mole
- Tension de vapeur 26,6 E2 Pa à 25,3 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = - 0,05223 * 46850 /T + 9,4978$

### Sécurité

Facilement inflammable

Vapeurs toxiques

Valeur limite de la concentration dans l'air : 200 ppm

### Stockage

Conserver dans un endroit bien ventilé

Eloigner des produits oxydants et des sources de chaleur

Protéger des chocs

Local antidéflagrant

## Aldéhyde propionique



M = 58,08 (17,22 mole/kg)

C : 62,04%

H : 10,41%

O : 27,55%

Liquide incolore, odeur suffocante  
Intermédiaire de synthèse

### Propriétés physiques

- Densité 0,791
- Point de fusion -80 °C
- Point d'ébullition 47,9 °C
- Solubilité dans l'eau 160 g/l
- Azéotrope avec l'eau 2% d'eau Eb = 47,5°C
- Viscosité 0,403 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 2,717 E-5 exp (6575/RT) Pa.s
- Tension superficielle 29,82 mN/m

### Caractéristiques chimiques

Fonction aldéhyde (groupe 5)

Nombreuses réactions de condensation catalysées par les acides ou les bases. Ces réactions sont exothermiques (suffisamment pour enflammer le mélange) et conduisent à des produits plus lourds (oligomères) colorés et très visqueux. Ces réactions produisent également de l'eau.

Les aldéhydes réagissent facilement avec tous les oxydants (oxygène de l'air, oxydants minéraux, acides minéraux oxydants) pour donner notamment des acides. L'acide propionique est une impureté majeure du propionaldéhyde

### Inflammation

- Point éclair -30 °C
- Température d'autoinflammation 205 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité 2,6 % dans l'air
- Limite supérieure d'inflammabilité 17 % dans l'air
- Densité de la vapeur 2
- Indice d'évaporation

### Combustion

- Stoechiométrie 4 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion 1823 kJ/mole
- PCS 31388 kJ/kg
- PCI 29288 kJ/kg
- T99 502°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 517°C - 17,78 Log t
- T99.99 527°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques k = 7,8 E12 exp (-870/T)

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air
- Limite supérieure dans l'air

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide) 2,182 J/g/°C
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)  $2,018E-1+4,501E-3T-2,238E-6T^2+3,660E-10T^3$  J/g/K
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 1,354 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation 28,31 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion
- Enthalpie de formation -205,4 kJ/mole
- Tension de vapeur
- Tension de vapeur en f(T)

### Sécurité

Extrêmement inflammable.

Vapeurs irritantes pour la peau, les muqueuses respiratoires et oculaires.

Le liquide entraîne de graves brûlures à la peau et aux yeux.

### Stockage

Récipients métalliques

Conserver dans un endroit bien ventilé à l'abri de la chaleur.

Isoler des produits oxydants.

Local antidéflagrant



## Anhydride acétique



M = 102,09 (9,80 mole/kg)

C : 47,06%

H : 5,92%

O : 47,01%

Liquide incolore très réfringent, odeur acétique forte

Agent d'acétylation, solvant, déshydratant

Intermédiaire de synthèse organique

### Propriétés physiques

- Densité 1,082
- Point de fusion -73,1 °C
- Point d'ébullition 136,4 °C
- Solubilité dans l'eau détruit par l'eau
- Viscosité 0,921 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 1,928 E-5 exp (9422/RT) Pa.s
- Tension superficielle 32,65 mN/m

### Caractéristiques chimiques

Fonction anhydride

Réagit rapidement avec l'eau (formation d'acide acétique) et avec tous les composés à hydrogène mobile (alcools, amines, mercaptans,...) avec formation d'esters, d'amides etc...Réactions exothermiques

### Inflammation

- Point éclair 49 °C
- Température d'autoinflammation 315 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité 2,7 % dans l'air
- Limite supérieure d'inflammabilité 10,3 % dans l'air
- Densité de la vapeur 3,52
- Indice d'évaporation 31

### Combustion

- Stoechiométrie 4 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion 1807 kJ/mole
- PCS 17700 kJ/kg
- PCI 16506 kJ/kg
- T99 503°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 514°C - 17,78 Log t
- T99.99 528°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air 2,7 %
- Limite supérieure dans l'air 10,1 %

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide)
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)  $-2,266E-1+4,983E-3T+-3,507E-6T^2+9,634E-10T^3$  J/g/K
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 0,972 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation 36,9 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion
- Enthalpie de formation -622,1 kJ/mole
- Tension de vapeur 17,3 E2 Pa à 40 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = - 0,05223 * 45240 /T + 8,6334$

### Sécurité

Inflammable

Vapeurs très irritantes pour les muqueuses et pour les yeux

Le liquide cause des brûlures par contact avec la peau, les yeux et les muqueuses

Réaction violente avec l'eau

Valeur limite de la concentration dans l'air : 5 ppm

### Stockage

Conserver dans un endroit isolé, bien ventilé, à l'abri de la chaleur

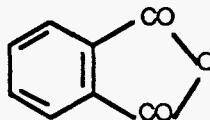
Eloigner des produits oxydants

Protéger des chocs

Prévoir des matériaux ou un revêtement résistant à l'action chimique du liquide

## Anhydride phtalique

$C_8H_4O_3$



M = 148,11 (6,75 mole/kg)

C : 64,87%

H : 2,72%

O : 32,41%

Solide blanc (aiguilles)

Fabrication des phtalates, phtaléines, résines, indigo artificiel

### Propriétés physiques

- Densité 1,53
- Point de fusion 130,8 °C
- Point d'ébullition 295 °C
- Solubilité dans l'eau détruit par l'eau
- Viscosité
- Tension superficielle

### Caractéristiques chimiques

Fonction anhydride

Réagit rapidement avec l'eau (formation d'acide phtalique) et avec tous les composés à hydrogène mobile (alcools, amines, mercaptans,...) avec formation d'esters, d'amides etc...Réactions exothermiques

### Inflammation

- Point éclair 151 °C
- Température d'autoinflammation 570 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité 1,7 % dans l'air
- Limite supérieure d'inflammabilité 10,5 % dans l'air
- Densité de la vapeur 5,10
- Indice d'évaporation

### Combustion

- Stoechiométrie 7,5 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion 3275 kJ/mole
- PCS 22109 kJ/kg
- PCI 21561 kJ/kg
- T99 641°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 650°C - 17,78 Log t
- T99.99 664°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air 1,7 %
- Limite supérieure dans l'air 10,5 %

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide)
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)  $-3,008E-2+4,416E-3T+-2,892E-6T^2+6,813E-10T^3$  J/g/K
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 1,047 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation 50,7 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion 22,9 kJ/mole
- Enthalpie de formation -1427 kJ/mole
- Tension de vapeur 1,3 E2 Pa à 96,5 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = - 0,05223 * 58224 /T + 8,3856$

### Sécurité

Peu inflammable

Peut provoquer des brûlures

Si le produit est chauffé, les vapeurs sont irritantes pour la peau, les muqueuses et les yeux

Réagit avec l'eau

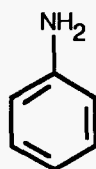
Valeur limite de la concentration dans l'air : 1 ppm

### Stockage

Conserver dans un endroit ventilé à l'abri de l'humidité

Eloigner des sources de feu, de chaleur et d'étincelles

Protéger des chocs

C<sub>6</sub>H<sub>7</sub>N

M = 93,13 (10,74 mole/kg)

C : 77,38%

H : 7,58%

N : 15,04%

Liquide huileux, brunit rapidement à l'air et à la lumière, odeur caractéristique  
 Colorants de synthèse, résines, vernis  
 Intermédiaire de synthèse (pharmacie), solvant

### Propriétés physiques

- Densité 1,022
- Point de fusion -6,3 °C
- Point d'ébullition 184,1 °C
- Solubilité dans l'eau 35 g/l
- Azéotrope avec l'eau 80,8% d'eau Eb = 98,6°C
- Viscosité 4,69 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 1,071 E-6 exp (20436/RT) Pa.s
- Tension superficielle 42,67 mN/m

### Caractéristiques chimiques

Fonction amine (groupe 7)

Réagit rapidement avec tous les acides (formation de sels). Les oxydants conduisent à des composés fortement colorés avec dégagement possible d'oxydes d'azote, réactions exothermiques.

Réactions de condensation avec les aldéhydes et les cétones (formation d'eau), réactions catalysées par les acides.

Les amines subissent des réactions d'alkylation avec les dérivés halogénés. Elles réagissent avec les hydrures et les métaux alcalins avec formation d'hydrogène.

### Inflammation

- Point éclair 70 °C
- Température d'autoinflammation 615 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité 1,3 % dans l'air
- Limite supérieure d'inflammabilité 11 % dans l'air
- Densité de la vapeur 3,22
- Indice d'évaporation 200

### Combustion

- Stoechiométrie 7,75 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion 3391 kJ/mole
- PCS 36411 kJ/kg
- PCI 34882 kJ/kg
- T99 796°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 814°C - 17,78 Log t
- T99.99 826°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air 1,3 %
- Limite supérieure dans l'air 22,5 %

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide) 1,998 J/g/°C
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)  $-4,351E-1+6,856E-3T+-5,512E-6T^2+1,753E-9T^3$  J/g/K
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 1,165 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation 42,44 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion 10,5 kJ/mole
- Enthalpie de formation 30,7 (l) kJ/mole
- Tension de vapeur 3,2 E2 Pa à 50 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = - 0,05223 * 51294 /T + 8,7953$

### Sécurité

Inflammable

Risques d'intoxication grave par ingestion, inhalation des vapeurs ou par absorption par la peau

Valeur limite de la concentration dans l'air : 2 ppm

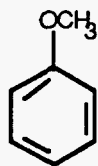
### Stockage

Réipients métalliques

Eloigner des produits oxydants et des sources de chaleur

Protéger des chocs

Local antidéflagrant

C<sub>7</sub>H<sub>8</sub>O

M = 108,14 (9,25 mole/kg)

C : 77,75%

H : 7,46%

O : 14,79%

Liquide incolore, odeur aromatique agréable

Parfumerie, synthèse organique

Propriétés physiques

- Densité 0,996
- Point de fusion -37,5 °C
- Point d'ébullition 155 °C
- Solubilité dans l'eau insoluble
- Azéotrope avec l'eau 40,5% d'eau Eb = 95,5°C
- Viscosité 1,36 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 6,347 E-5 exp (7472/RT) Pa.s
- Tension superficielle 37,3 mN/m

Caractéristiques chimiques

Fonction éther (groupe 14)

Composé stable. Réaction possible avec les acides concentrés, formation d'alcool ou de phénol.

Inflammation

- Point éclair 52 °C
- Température d'autoinflammation 475 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité
- Limite supérieure d'inflammabilité
- Densité de la vapeur 3,7
- Indice d'évaporation

Combustion

- Stoechiométrie 8,5 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion 3783 kJ/mole
- PCS 34982 kJ/kg
- PCI 33477 kJ/kg
- T99 655°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 667°C - 17,78 Log t
- T99.99 678°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air
- Limite supérieure dans l'air

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide) 2,019 J/g°C
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C
- Chaleur latente de vaporisation 38,97 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion
- Enthalpie de formation -67,9 kJ/mole
- Tension de vapeur
- Tension de vapeur en f(T)

### Sécurité

Inflammable

Les vapeurs peuvent provoquer des irritations (yeux et muqueuses)

### Stockage

Eloigner des produits oxydants et des sources de chaleur

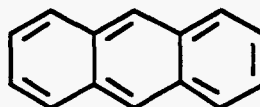
Protéger des chocs

Local antidéflagrant



## Anthracène

C<sub>14</sub>H<sub>10</sub>



M = 178,23 (5,61 mole/kg)

C : 94,34%

H : 5,66%

Solide incolore (tablettes), jaune quand il est impur  
Industrie des colorants

### Propriétés physiques

- Densité 1,28
- Point de fusion 216 °C
- Point d'ébullition 340 °C
- Solubilité dans l'eau insoluble
- Viscosité 0,433 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 5,471 E-5 exp (9858/RT) Pa.s
- Tension superficielle

### Caractéristiques chimiques

Carbure aromatique (groupe 16)

Les oxydants forts transforment l'anthracène en anthraquinone (réaction exothermique)

### Inflammation

- Point éclair 121 °C
- Température d'autoinflammation 540 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité 0,6 % dans l'air
- Limite supérieure d'inflammabilité
- Densité de la vapeur 6,1
- Indice d'évaporation

### Combustion

- Stoechiométrie 16,5 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion 7068 kJ/mole
- PCS 39657 kJ/kg
- PCI 38515 kJ/kg
- T99 627°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 623°C - 17,78 Log t
- T99.99 625°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air
- Limite supérieure dans l'air

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide)
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)  $-3,309E-1+5,644E-3T+3,7E-6T^2+9,011E-10T^3$  J/g/K
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 1,046 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation 70,4 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion 28,9 kJ/mole
- Enthalpie de formation 115,4 (s) kJ/mole
- Tension de vapeur 1,31E2 Pa à 145 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = - 0,05223 * 70678 /T + 8,9959$

### Sécurité

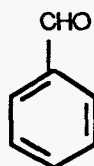
Peu inflammable

### Stockage

Eloigner des produits oxydants

## Benzaldéhyde

C<sub>7</sub>H<sub>6</sub>O



M = 106,12 (9,42 mole/kg)

C : 79,23%

H : 5,70%

O : 15,08%

Liquide incolore très réfringent, jaunit avec le temps, odeur caractéristique d'amande  
Industrie des colorants, parfumerie. Intermédiaire de synthèse

### Propriétés physiques

- Densité 1,042
- Point de fusion -26 °C
- Point d'ébullition 178,1 °C
- Solubilité dans l'eau 2,8 g/l
- Viscosité 1,446 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 6,564 E-6 exp (13149/RT) Pa.s
- Tension superficielle 40,72 mN/m

### Caractéristiques chimiques

Fonction aldéhyde (groupe 5)

Nombreuses réactions de condensation catalysées par les acides ou les bases. Ces réactions sont exothermiques (suffisamment pour enflammer le mélange) et conduisent à des produits plus lourds (oligomères) colorés et très visqueux. Ces réactions produisent également de l'eau.

Les aldéhydes réagissent facilement avec tous les oxydants (oxygène de l'air, oxydants minéraux, acides minéraux oxydants) pour donner notamment des acides. L'acide benzoïque est une impureté majeure du benzaldéhyde

### Inflammation

- Point éclair 63 °C
- Température d'autoinflammation 190 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité
- Limite supérieure d'inflammabilité
- Densité de la vapeur 3,7
- Indice d'évaporation

### Combustion

- Stoechiométrie 8 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion 3525 kJ/mole
- PCS 33217 kJ/kg
- PCI 32067 kJ/kg
- T99 487°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 504°C - 17,78 Log t
- T99.99 515°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques

## Explosivité

- Limite inférieure dans l'air
- Limite supérieure dans l'air

## Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide) 1,789 J/g/°C
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)  $-1,144E-1+4,675E-3T+-2,681E-6T^2+4,869E-10T^3$  J/g/K
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 1,054 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation 48,8 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion
- Enthalpie de formation -40 kJ/mole
- Tension de vapeur 1,31 E2 Pa à 26,2 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = - 0,05223 * 48762 /T + 8,5808$

## Sécurité

Inflammable

L'inhalation des vapeurs provoque une action sur le système nerveux (déresseur pour les doses faibles, convulsions pour les doses fortes)

Le liquide provoque des irritations

## Stockage

Entreposer dans un endroit isolé, bien ventilé, à l'abri de la chaleur

Eloigner des produits oxydants

Local antidéflagrant



M = 78,11 (12,80 mole/kg)

C : 92,26%

H : 7,74%

Liquide incolore, odeur caractéristique

Importante matière première de l'industrie chimique organique (styrène, phénol, aniline, ...)

Propriétés physiques

- Densité 0,874
- Point de fusion 5,5 °C
- Point d'ébullition 80,1 °C
- Solubilité dans l'eau 1,8 g/l
- Azéotrope avec l'eau 8,83% d'eau Eb = 69,25°C
- Viscosité 0,638 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 8,782 E-6 exp (10446/RT) Pa.s
- Tension superficielle 28,81 mN/m

Caractéristiques chimiques

Carbure aromatique (groupe 16)

Le benzène est très stable, il peut néanmoins réagir avec les oxydants puissants (réaction exothermique)

Inflammation

- Point éclair -11 °C
- Température d'autoinflammation 498 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité 1,3 % dans l'air
- Limite supérieure d'inflammabilité 7,9 % dans l'air
- Densité de la vapeur 2,70
- Indice d'évaporation 3

Combustion

- Stoechiométrie 7,5 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion 3268 kJ/mole
- PCS 41838 kJ/kg
- PCI 40277 kJ/kg
- T99 680°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 695°C - 17,78 Log t
- T99.99 703°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques 2,51 E22 exp(-99650/RT)

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air 1 %
- Limite supérieure dans l'air 8 %

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide) 1,697 J/g/°C
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)  $-4,343E-1+6,067E-3T-3,863E-6T^2+9,128E-10T^3$  J/g/K
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 1,055 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation 30,72 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion 9,86 kJ/mole
- Enthalpie de formation 82,8 kJ/mole
- Tension de vapeur 133 E2 Pa à 26,1 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = -0,05223 * 38955 / T + 8,7508$
- Température critique 288,5 °C
- Pression critique 48,3 E5 Pa

### Sécurité

Extrêmement inflammable

Très toxique

Le contact du liquide provoque des irritations

Valeur limite de la concentration dans l'air : 10 ppm

### Stockage

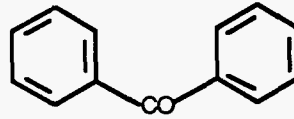
Conserver dans un endroit bien ventilé

Eloigner des produits oxydants

Local antidéflagrant

## Benzophénone

C<sub>13</sub>H<sub>10</sub>O



M = 182,22 (5,49 mole/kg)

C : 85,69%

H : 5,53%

O : 8,78%

Solide blanc (prismes), odeur faible de géranium  
Synthèse (antihistaminiques, insecticides, ...), parfumerie (fixatif)

### Propriétés physiques

- Densité 1,146
- Point de fusion 48,1 °C
- Point d'ébullition 305,9 °C
- Solubilité dans l'eau insoluble
- Viscosité 1,93 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 2,579 E-6 exp (20536/RT) Pa.s
- Tension superficielle 44,05 mN/m

### Caractéristiques chimiques

Fonction cétone (groupe 19)

L'acétophénone est une cétone particulièrement peu réactive. On peut observer quelques réactions de condensation (formation d'eau), réactions catalysées par les acides ou les bases  
Les oxydants forts peuvent couper la molécule avec formation d'acide benzoïque

### Inflammation

- Point éclair
- Température d'autoinflammation
- Limite inférieure d'inflammabilité
- Limite supérieure d'inflammabilité
- Densité de la vapeur
- Indice d'évaporation

### Combustion

- Stoechiométrie 15 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion 6510 kJ/mole
- PCS 35726 kJ/kg
- PCI 34610 kJ/kg
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air
- Limite supérieure dans l'air

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide) 1,601 J/g/°C
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C
- Chaleur latente de vaporisation
- Chaleur latente de fusion
- Enthalpie de formation -41,8 (s) kJ/mole
- Tension de vapeur 1,31 E2 Pa à 108,2 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = - 0,05223 * 61598 / T + 8,4573$

### Sécurité

Peu inflammable

### Stockage

Local bien ventilé



## Bromoforme

CHBr<sub>3</sub>

CHBr<sub>3</sub>

M = 252,75 (3,96 mole/kg)

C : 4,75%

H : 0,40%

Br : 94,85%

Liquide incolore, odeur de chloroforme  
Séparation des solides par densité

### Propriétés physiques

- Densité 2,876
- Point de fusion 8,1 °C
- Point d'ébullition 149,6 °C
- Solubilité dans l'eau 1,2 g/l
- Viscosité 2,01 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 3,171 E-5 exp (10111/RT) Pa.s
- Tension superficielle 44,87 mN/m

### Caractéristiques chimiques

Fonction dérivé halogéné (groupe 17)

En présence d'oxydant fort ou d'une température élevée, on peut constater la formation de brome, d'acide bromhydrique et de bromure de carbonyle (COBr<sub>2</sub>, analogue bromé du phosgène)

### Inflammation

- Point éclair
- Température d'autoinflammation
- Limite inférieure d'inflammabilité
- Limite supérieure d'inflammabilité
- Densité de la vapeur 8,7
- Indice d'évaporation

### Combustion

- Stoechiométrie 1,25 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion
- PCS
- PCI
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air
- Limite supérieure dans l'air

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide)
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 0,281 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation 39,66 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion
- Enthalpie de formation -91,1 kJ/mole
- Tension de vapeur 6,67 E2 Pa à 20 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = -0,05223 * 40461 / T + 7,8758$

### Sécurité

Non inflammable

Se décompose à la chaleur avec production de dérivés toxiques

Vapeurs lacrymogènes

A forte concentration, l'inhalation des vapeurs peut entraîner une narcose avec syncope

Le contact du liquide avec la peau, les muqueuses et les yeux entraîne des irritations

Un contact prolongé peut provoquer une atteinte hépatique

Valeur limite de la concentration dans l'air : 0,5 ppm

### Stockage

Entreposer à l'abri de la chaleur dans un endroit bien ventilé (ventilation basse)

Protéger des chocs

## Bromure d'éthyle



M = 108,98 (9,17 mole/kg)

C : 22,04%

H : 4,62%

Br : 73,34%

Liquide incolore, odeur étherée  
Agent d'alkylation, anesthésique, réfrigérant

### Propriétés physiques

- Densité 1,451
- Point de fusion -118,6 °C
- Point d'ébullition 38,4 °C
- Solubilité dans l'eau 10 g/l
- Viscosité 0,385 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 2,110 E-5 exp (7079/RT) Pa.s
- Tension superficielle 27,5 mN/m

### Caractéristiques chimiques

Fonction dérivé halogéné (groupe 17)

L'action prolongée de l'eau conduit à la formation d'éthanol et d'acide bromhydrique.  
Réagit avec les amines et les autres composés alkylables.

### Inflammation

- Point éclair
- Température d'autoinflammation 510 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité 6,7 % dans l'air
- Limite supérieure d'inflammabilité 11 % dans l'air
- Densité de la vapeur 3,8
- Indice d'évaporation

### Combustion

- Stoechiométrie 3,25 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion 1423 kJ/mole
- PCS 13057 kJ/kg
- PCI 12125 kJ/kg
- T99 711°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 724°C - 17,78 Log t
- T99.99 732°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques  $k = 3,1 E13 \exp (-3260/T)$

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air 6,75 %
- Limite supérieure dans l'air 11,25 %

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide) 0,899 J/g/°C
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)  $6,108E-2+2,155E-3T-1,351E-6T^2+3,491E-10T^3$  J/g/K
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 0,592 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation 23,91 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion
- Enthalpie de formation -61,9 kJ/mole
- Tension de vapeur 526 E2 Pa à 21 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = -0,05223 * 30228 / T + 7,9857$

### Sécurité

Inflammable  
Vapeurs toxiques et irritantes  
Narcotique à haute concentration

### Stockage

Conserver dans un endroit isolé, bien ventilé à l'abri de la chaleur  
Isoler des produits oxydants  
Local antidéflagrant

C<sub>4</sub>H<sub>11</sub>N



M = 73,14 (13,67 mole/kg)

C : 65,69%

H : 15,16%

N : 19,15%

Liquide incolore, odeur ammoniaquée

Intermédiaire de synthèse (pharmacie, émulsifiants, insecticides), tannage

## Propriétés physiques

- Densité 0,735
- Point de fusion -49,1 °C
- Point d'ébullition 77,4 °C
- Solubilité dans l'eau infiniment soluble
- Viscosité 0,500 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 1,225 E-5 exp (9039/RT) Pa.s
- Tension superficielle 24,00 mN/m

## Caractéristiques chimiques

Fonction amine (groupe 7)

Réagit rapidement avec tous les acides (formation de sels). Les oxydants conduisent à des composés fortement colorés avec dégagement possible d'oxydes d'azote, réactions exothermiques.

Réactions de condensation avec les aldéhydes et les cétones (formation d'eau), réactions catalysées par les acides. Les amines subissent des réactions d'alkylation avec les dérivés halogénés. Elles réagissent avec les hydrures et les métaux alcalins avec formation d'hydrogène.

## Inflammation

- Point éclair -12 °C
- Température d'autoinflammation 310 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité 1,7 % dans l'air
- Limite supérieure d'inflammabilité 9,8 % dans l'air
- Densité de la vapeur 2,5
- Indice d'évaporation

## Combustion

- Stoechiométrie 6,75 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion 2970 kJ/mole
- PCS 40607 kJ/kg
- PCI 37549 kJ/kg
- T99 645°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 661°C - 17,78 Log t
- T99.99 673°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air
- Limite supérieure dans l'air

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide)
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)  $6,944E-2+6,12E-3T+-3,291E-6T^2+1,039E-9T^3$  J/g/K
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 1,628 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation 31,81 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion
- Enthalpie de formation -92,0 kJ/mole
- Tension de vapeur
- Tension de vapeur en f(T)

### Sécurité

Extrêmement inflammable

Vapeurs irritantes pour la peau, les muqueuses oculaires et respiratoires

Le contact du liquide avec la peau cause des irritations et des brûlures

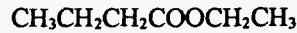
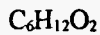
### Stockage

Conserver dans un endroit bien ventilé

Eloigner des produits oxydants

Local antidéflagrant

## Butyrate d'éthyle



M = 116,16 (8,61 mole/kg)

C : 62,04%

H : 10,41%

O : 27,55%

Liquide incolore, odeur d'ananas  
Parfumerie, arôme (rhum)

### Propriétés physiques

- Densité 0,879
- Point de fusion -93 °C
- Point d'ébullition 120 °C
- Solubilité dans l'eau 6,7 g/l
- Azéotrope avec l'eau 21,5% d'eau Eb = 87,9°C
- Viscosité 0,662 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 1,431 E-5 exp (9346/RT) Pa.s
- Tension superficielle 24,46 mN/m

### Caractéristiques chimiques

Fonction ester (groupe 13)

S'hydrolyse lentement dans l'eau en acide butyrique et éthanol En présence de base, réaction beaucoup plus rapide (saponification). Ces réactions ne provoquent qu'un échauffement modéré.

Les esters réagissent avec les amines, les mercaptans et les alcools par échange fonctionnel, réactions en général athermiques, production d'éthanol

### Inflammation

- Point éclair 24 °C
- Température d'autoinflammation 460 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité
- Limite supérieure d'inflammabilité
- Densité de la vapeur 4
- Indice d'évaporation

### Combustion

- Stoechiométrie 8 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion 3558 kJ/mole
- PCS 30630 kJ/kg
- PCI 28530 kJ/kg
- T99 603°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 608°C - 17,78 Log t
- T99.99 618°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air
- Limite supérieure dans l'air

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide) 1,919 J/g/°C
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)  $1,825E-1+4,242E-3T+-1,668E-6T^2+3,064E-11T^3$  J/g/K
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 1,302 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation 39,6 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion
- Enthalpie de formation
- Tension de vapeur 13,1 E2 Pa à 15,3 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = - 0,05223 * 39603 /T + 8,1597$

### Sécurité

Très inflammable

Vapeurs toxiques

Le contact du liquide avec la peau et les yeux provoque des irritations

### Stockage

Récipients métalliques.

Eloigner des produits oxydants et des sources de chaleur

Local antidéflagrant.

Protéger des chocs



## Chlorhydrine du glycol

$C_2H_5ClO$

$ClCH_2CH_2OH$

M = 80,51 (12,42 mole/kg)

C : 29,84%

H : 6,26%

O : 19,87%

Cl : 44,03%

Liquide incolore

Solvant, fabrication d'insecticides, traitements agricoles

### Propriétés physiques

- Densité 1,197
- Point de fusion -67 °C
- Point d'ébullition 128 °C
- Solubilité dans l'eau infiniment soluble
- Viscosité 3,44 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 1,978 E-6 exp (18184/RT) Pa.s
- Tension superficielle 38,90 mN/m

### Caractéristiques chimiques

Fonction alcool halogéné (groupe 4 et 17)

Estérification par les acides minéraux ou organiques avec formation d'eau. Les oxydants transforment les alcools en aldéhydes et acides, réaction exothermique.

Réagit avec les métaux réducteurs et les hydrures métalliques avec formation d'hydrogène, risque d'inflammation et d'explosion.

S'hydrolyse lentement avec formation d'acide chlorhydrique. Agent d'alkylation

### Inflammation

- Point éclair 60 °C
- Température d'autoinflammation 425 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité 4,9 % dans l'air
- Limite supérieure d'inflammabilité 15,9 % dans l'air
- Densité de la vapeur 2,8
- Indice d'évaporation

### Combustion

- Stoechiométrie 2,75 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion
- PCS
- PCI
- T99 652°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 667°C - 17,78 Log t
- T99.99 678°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air
- Limite supérieure dans l'air

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide)
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C
- Chaleur latente de vaporisation
- Chaleur latente de fusion
- Enthalpie de formation -293,8 (l) kJ/mole
- Tension de vapeur 6,58 E2 Pa à 19,0 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = -0,05223 * 44924 / T + 8,7306$

### Sécurité

Inflammable

Très toxique, l'inhalation des vapeurs peut être fatale

Provoque des nausées, maux de tête et suffocation. Stupéfiant

Le liquide est plus toxique par contact avec la peau que par ingestion

Irritant pour les muqueuses respiratoires

Cause la dégénérescence du foie et des reins

### Stockage

Inflammable

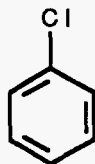
Conserver dans un endroit isolé, bien ventilé à l'abri de la chaleur

Protéger des chocs

Eloigner des oxydants

## Chlorobenzène

C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>Cl



M = 112,56 (8,88 mole/kg)

C : 64,03%

H : 4,48%

Cl : 31,50%

Liquide incolore très réfringent, odeur faiblement aromatique  
Solvant, liquide thermique, intermédiaire dans la synthèse du DDT

### Propriétés physiques

- |                         |                              |
|-------------------------|------------------------------|
| • Densité               | 1,106                        |
| • Point de fusion       | -45 °C                       |
| • Point d'ébullition    | 132 °C                       |
| • Solubilité dans l'eau | insoluble                    |
| • Azéotrope avec l'eau  | 28,4% d'eau Eb = 90,2°C      |
| • Viscosité             | 0,807 E-3 Pa.s               |
| • Viscosité en f(T)     | 2,015 E-5 exp (8994/RT) Pa.s |
| • Tension superficielle | 33,59 mN/m                   |

### Caractéristiques chimiques

Dérivé halogéné aromatique (groupe 17)  
Composé très stable. En présence d'oxydant fort ou de chaleur peut produire de l'acide chlorhydrique.

### Inflammation

- |                                      |                  |
|--------------------------------------|------------------|
| • Point éclair                       | 28 °C            |
| • Température d'autoinflammation     | 593 °C           |
| • Limite inférieure d'inflammabilité | 1,3 % dans l'air |
| • Limite supérieure d'inflammabilité | 9,6 % dans l'air |
| • Densité de la vapeur               | 3,88             |
| • Indice d'évaporation               | 12,5             |

### Combustion

- |                           |                                 |
|---------------------------|---------------------------------|
| • Stoechiométrie          | 7,25 moles d'oxygène/mole       |
| • Enthalpie de combustion |                                 |
| • PCS                     |                                 |
| • PCI                     |                                 |
| • T99                     | 723°C - 18,17 Log t (t en sec.) |
| • T99.9                   | 736°C - 17,78 Log t             |
| • T99.99                  | 744°C - 17,39 Log t             |
| • Paramètres cinétiques   |                                 |

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air 1,3 %
- Limite supérieure dans l'air 7,1 %

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide) 1,292 J/g/°C
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)  $-3,011E-1+5,003E-3T+4,017E-6T^2+1,267E-9T^3$  J/g/K
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 0,866 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation 35,19 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion 9,60 kJ/mole
- Enthalpie de formation 52,0 kJ/mole
- Tension de vapeur 11,7 E2 Pa à 20 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = -0,05223 \cdot 40015 / T + 8,0658$

### Sécurité

Facilement inflammable

Liquide et vapeurs toxiques

Valeur limite de la concentration dans l'air : 75 ppm

### Stockage

Conserver dans un endroit isolé, bien ventilé, à l'abri de la chaleur

Isoler des produits oxydants

Local antidéflagrant

## Chloroforme

CHCl<sub>3</sub>

CHCl<sub>3</sub>

M = 119,37 (8,38 mole/kg)

C : 10,06%

H : 0,84%

Cl : 89,09%

Liquide incolore, odeur douceâtre caractéristique  
Solvant

### Propriétés physiques

- Densité 1,480
- Point de fusion -63,5 °C
- Point d'ébullition 61,7 °C
- Solubilité dans l'eau 7,4 g/l
- Azéotrope avec l'eau 2,8% d'eau Eb = 56,1°C
- Viscosité 0,562 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 3,367 E-5 exp (6860/RT) Pa.s
- Tension superficielle 26,67 mN/m

### Caractéristiques chimiques

Fonction dérivé halogéné (groupe 17)

En présence d'oxydant fort ou d'une température élevée, on peut constater la formation de chlore, d'acide chlorhydrique et de phosgène

### Inflammation

- Point éclair
- Température d'autoinflammation
- Limite inférieure d'inflammabilité
- Limite supérieure d'inflammabilité
- Densité de la vapeur 4,12
- Indice d'évaporation

### Combustion

- Stoechiométrie 1,25 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion 373 kJ/mole
- PCS 3125 kJ/kg
- PCI 2955 kJ/kg
- Paramètres cinétiques  $k = 3 \cdot 10^{12} \exp(-2500/T)$

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air
- Limite supérieure dans l'air

### Données thermodynamiques

• Chaleur spécifique (liquide)	0,978 J/g/°C
• Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)	$2,011E-1+1,586E-3T+-1,542E-6T^2+5,577E-10T^3$ J/g/K
• Chaleur spécifique du gaz à 25 °C	0,551 J/g/K
• Chaleur latente de vaporisation	29,24 kJ/mole
• Chaleur latente de fusion	9,20 kJ/mole
• Enthalpie de formation	-100,3 kJ/mole
• Tension de vapeur	213 E2 Pa à 20 °C
• Tension de vapeur en f(T)	$\log_{10}(p) = - 0,05223 * 33132 /T + 8,0901$

### Sécurité

Non inflammable

L'inhalation des vapeurs à haute concentration provoque des nausées, des vomissements et peut entraîner une narcose avec syncope

Le contact du liquide avec la peau, les muqueuses et les yeux entraîne des irritations

Valeur limite de la concentration dans l'air : 10 ppm

### Stockage

Entreposer à l'abri de la lumière et de la chaleur dans un endroit bien ventilé

Protéger des chocs

## Chloroformiate d'éthyle



M = 108,52 (9,21 mole/kg)

C : 33,20%

H : 4,64%

O : 29,49%

Cl : 32,67%

Liquide incolore  
Intermédiaire de synthèse

### Propriétés physiques

- Densité 1,140
- Point de fusion -80,6 °C
- Point d'ébullition 95 °C
- Solubilité dans l'eau réagit au contact de l'eau
- Viscosité
- Tension superficielle 26,70 mN/m

### Caractéristiques chimiques

Fonction ester halogéné (groupe 13 et 17)

S'hydrolyse lentement dans l'eau en gaz carbonique, acide chlorhydrique et éthanol. En présence de base, réaction beaucoup plus rapide (saponification). Ces réactions ne provoquent qu'un échauffement modéré.

Les esters réagissent avec les amines, les mercaptans et les alcools par échange fonctionnel, réactions en général athermiques, production d'éthanol

La présence du chlore permet à ce composé d'être un bon agent d'alkylation (réaction avec les alcools, les amines, les mercaptans, ...)

### Inflammation

- Point éclair
- Température d'autoinflammation
- Limite inférieure d'inflammabilité
- Limite supérieure d'inflammabilité
- Densité de la vapeur
- Indice d'évaporation

### Combustion

- Stoechiométrie 3,25 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion
- PCS
- PCI
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air
- Limite supérieure dans l'air

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide)
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C
- Chaleur latente de vaporisation
- Chaleur latente de fusion
- Enthalpie de formation -462,9 kJ/mole
- Tension de vapeur

### Sécurité

Inflammable

Irritant pour les muqueuses oculaires et respiratoires

Provoque des arrêts respiratoires à haute concentration

### Stockage

Conserver dans un endroit isolé, bien ventilé à l'abri de la chaleur

Isoler des produits oxydants

Local antidéflagrant



## Chlorure d'acétyle



M = 78,50 (12,74 mole/kg)

C : 30,60%

H : 3,85%

O : 20,38%

Cl : 45,16%

Liquide incolore, odeur piquante  
Agent d'acétylation

### Propriétés physiques

- Densité 1,104
- Point de fusion -112 °C
- Point d'ébullition 51,5 °C
- Solubilité dans l'eau réagit au contact de l'eau
- Viscosité
- Tension superficielle

### Caractéristiques chimiques

Chlorure d'acide (groupe 17)

Réagit violemment avec l'eau avec formation d'acide acétique et d'acide chlorhydrique  
Agent d'acétylation des alcools, des amines, des mercaptans, ...

### Inflammation

- Point éclair 4 °C
- Température d'autoinflammation 390 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité
- Limite supérieure d'inflammabilité
- Densité de la vapeur 2,7
- Indice d'évaporation

### Combustion

- Stoechiométrie 2,25 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion
- PCS
- PCI
- T99 585°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 599°C - 17,78 Log t
- T99.99 608°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air
- Limite supérieure dans l'air

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide) 1,417 J/g/°C
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)  $3,187E-1+2,18E-3T-1,256E-6T^2+2,827E-10T^3$  J/g/K
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 0,864 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation 28,4 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion
- Enthalpie de formation -275,0 kJ/mole
- Tension de vapeur 263 E2 Pa à 16,1 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = - 0,05223 * 39715 /T + 9,4307$

### Sécurité

Très inflammable

Le liquide cause des brûlures par contact avec la peau, les yeux et les muqueuses

Vapeurs très irritantes pour les muqueuses et pour la peau

Risque d'intoxication à forte concentration

Réagit violemment au contact de l'eau avec projection du liquide et production d'acides chlorhydrique et acétique

### Stockage

Conserver dans des récipients hermétiquement fermés dans un endroit bien ventilé à l'abri de la chaleur  
Local antidéflagrant

## Chlorure d'allyle



M = 76,52 (13,07 mole/kg)

C : 47,09%

H : 6,59%

Cl : 46,33%

Liquide incolore, odeur piquante très déplaisante  
Agent d'alkylation

### Propriétés physiques

- Densité 0,938
- Point de fusion -134,5 °C
- Point d'ébullition 44 °C
- Solubilité dans l'eau réagit au contact de l'eau
- Viscosité 0,333 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 1,975 E-5 exp (6882/RT) Pa.s
- Tension superficielle 23,61 mN/m

### Caractéristiques chimiques

Fonction dérivé halogéné (groupe 17)

L'action prolongée de l'eau conduit à la formation d'alcool allylique et d'acide chlorhydrique.  
Réagit avec les amines et les autres composés alkylables.

### Inflammation

- Point éclair -32 °C
- Température d'autoinflammation 485 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité 2,9 % dans l'air
- Limite supérieure d'inflammabilité 11,1 % dans l'air
- Densité de la vapeur 2,6
- Indice d'évaporation

### Combustion

- Stoechiométrie 4,25 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion
- PCS
- PCI
- T99 688°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 701°C - 17,78 Log t
- T99.99 711°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air 3,2 %
- Limite supérieure dans l'air 11,2 %

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide) 1,308 J/g/°C
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)  $3,305E-2+3,982E-3T+-2,977E-6T^2+9,531E-10T^3$  J/g/K
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 0,981 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation 27,59 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion
- Enthalpie de formation
- Tension de vapeur 26,3 E2 Pa à 21,7 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = - 0,05223 * 30869 /T + 7,9862$

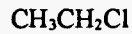
### Sécurité

Extrêmement inflammable  
Irritant pour les muqueuses oculaires et respiratoires  
Provoque des arrêts respiratoires à haute concentration

### Stockage

Conserver dans un endroit isolé, bien ventilé à l'abri de la chaleur  
Isoler des produits oxydants  
Local antidéflagrant

## Chlorure d'éthyle



M = 64,52 (15,50 mole/kg)

C : 37,23%

H : 7,81%

Cl : 54,96%

Gaz, odeur éthérée

Réfrigérant, agent d'alkylation, fabrication du plomb tétraéthyl

### Propriétés physiques

- Densité 0,917
- Point de fusion -139 °C
- Point d'ébullition 13 °C
- Solubilité dans l'eau 5,7 g/l
- Viscosité 0,311 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 2,080 E-5 exp (6144/RT) Pa.s
- Tension superficielle 20,58 mN/m

### Caractéristiques chimiques

Fonction dérivé halogéné (groupe 17)

L'action prolongée de l'eau conduit à la formation d'éthanol et d'acide chlorhydrique.

Réagit avec les amines et les autres composés alkylables.

### Inflammation

- Point éclair -50 °C
- Température d'autoinflammation 515 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité 3,8 % dans l'air
- Limite supérieure d'inflammabilité 15,4 % dans l'air
- Densité de la vapeur 2,2
- Indice d'évaporation

### Combustion

- Stoechiométrie 3,25 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion 1324 kJ/mole
- PCS 20521 kJ/kg
- PCI 18945 kJ/kg
- T99 714°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 727°C - 17,78 Log t
- T99.99 735°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques  $k = 4,8 E13 \exp (-3330/T)$

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air 3,6 %
- Limite supérieure dans l'air 14,8 %

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide)
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)  $-8,566E-3+4,039E-3T-2,825E-6T^2+8,599E-10T^3$  J/g/K
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 0,965 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation 26,4 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion 4,45 kJ/mole
- Enthalpie de formation -104,9 kJ/mole
- Tension de vapeur 526 E2 Pa à -3,9 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = - 0,05223 * 28176 /T + 8,0831$

### Sécurité

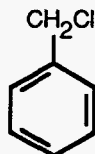
Extrêmement inflammable  
Le contact prolongé avec le liquide peut provoquer des gelures  
Les vapeurs sont nocives

### Stockage

Conserver dans un endroit isolé, bien ventilé à l'abri de la chaleur  
Isoler des produits oxydants  
Local antidéflagrant

## Chlorure de benzyle

C<sub>7</sub>H<sub>7</sub>Cl



M = 126,58 (7,90 mole/kg)

C : 66,42%

H : 5,57%

Cl : 28,01%

Liquide réfringent, odeur irritante  
Agent d'alkylation, intermédiaire de synthèse

### Propriétés physiques

- Densité 1,100
- Point de fusion -39 °C
- Point d'ébullition 179,3 °C
- Solubilité dans l'eau insoluble
- Viscosité 1,382 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 1,099 E-5 exp (11783/RT) Pa.s
- Tension superficielle 39,92 mN/m

### Caractéristiques chimiques

Fonction dérivé halogéné (groupe 17)

L'action prolongée de l'eau conduit à la formation d'alcool benzylique et d'acide chlorhydrique.  
Réagit avec les amines et les autres composés alkylables.

### Inflammation

- Point éclair 67 °C
- Température d'autoinflammation 585 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité 1,1 % dans l'air
- Limite supérieure d'inflammabilité
- Densité de la vapeur 4,4
- Indice d'évaporation 48

### Combustion

- Stoechiométrie 8,75 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion 3705 kJ/mole
- PCS 29270 kJ/kg
- PCI 28146 kJ/kg
- T99 720°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 730°C - 17,78 Log t
- T99.99 738°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air 1,1 %
- Limite supérieure dans l'air

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide) 1,350 J/g/°C
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C
- Chaleur latente de vaporisation
- Chaleur latente de fusion
- Enthalpie de formation 18,9 kJ/mole
- Tension de vapeur 1,31 E2 Pa à 22 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = - 0,05223 * 46674 /T + 8,2906$

### Sécurité

Inflammable

Le liquide occasionne des brûlures

Les vapeurs sont extrêmement irritantes

Valeur limite de la concentration dans l'air : 1 ppm

### Stockage

Récipients métalliques

Eloigner des produits oxydants et des sources de chaleur



## Chlorure de méthylène



M = 84,93 (11,77 mole/kg)

C : 14,14%

H : 2,37%

Cl : 83,48%

Liquide incolore

Solvant (acétate de cellulose, agro-alimentaire, dégraissage)

### Propriétés physiques

- Densité 1,316
- Point de fusion -95,1 °C
- Point d'ébullition 39,8 °C
- Solubilité dans l'eau 20 g/l
- Viscosité 0,536 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 2,706 E-5 exp (6785/RT) Pa.s
- Tension superficielle 27,84 mN/m

### Caractéristiques chimiques

Fonction dérivé halogéné (groupe 17)

En présence d'oxydant fort ou d'une température élevée, on peut constater la formation de chlore, d'acide chlorhydrique et de phosgène

### Inflammation

- Point éclair
- Température d'autoinflammation 556 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité 13 % dans l'air
- Limite supérieure d'inflammabilité 22 % dans l'air
- Densité de la vapeur 2,93
- Indice d'évaporation 1,8

### Combustion

- Stoechiométrie 1,5 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion 446 kJ/mole
- PCS 5251 kJ/kg
- PCI 4773 kJ/kg
- T99 719°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 733°C - 17,78 Log t
- T99.99 741°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques k = 6 E12 exp (-2900/T)

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'oxygène 15,5 %
- Limite supérieure dans l'oxygène 66,4 %

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide)
- Chaleur spécifique (gaz parfait) ou  $f(T)$   $1,525E-1+1,911E-3T+-1,533E-6T^2+4,955E-10T^3$  J/g/K
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 0,599 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation 28,06 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion 6,0 kJ/mole
- Enthalpie de formation -87,8 KJ/mole
- Tension de vapeur 465 E2 Pa à 20 °C
- Tension de vapeur en  $f(T)$   $\log_{10}(p) = - 0,05223 * 31668 /T + 8,1832$
- Température critique 245 °C
- Pression critique 60,9 E5 Pa

### Sécurité

Pratiquement ininflammable à température ordinaire

Le contact avec le liquide provoque des irritations (peau, muqueuses et yeux)

L'inhalation des vapeurs peut entraîner des irritations et engendrer des nausées

A haute concentration, les vapeurs peuvent provoquer des syncopes

Valeur limite de la concentration dans l'air : 100 ppm

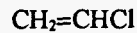
### Stockage

Entreposer dans un endroit frais et bien ventilé

Protéger des chocs

Protéger de la lumière (formation de phosgène)

## Chlorure de vinyle



M = 62,50 (16,00 mole/kg)

C : 38,44%

H : 4,84%

Cl : 56,72%

Gaz incolore

Industrie des plastiques, réfrigérant, synthèse organique

### Propriétés physiques

- Densité 0,901 (liquide à 3,4 E5 Pa)
- Point de fusion -153,8 °C
- Point d'ébullition -13,4 °C
- Solubilité dans l'eau faible
- Viscosité 0,438 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 2,199 E-5 exp (5301/RT) Pa.s
- Tension superficielle

### Caractéristiques chimiques

Fonction dérivé halogéné (groupe 17)

En présence d'oxydant fort ou d'une température élevée, on peut constater la formation de chlore, d'acide chlorhydrique et de phosgène

Se polymérise en présence de lumière ou d'un catalyseur

### Inflammation

- Point éclair -78 °C
- Température d'autoinflammation 470 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité 3,6 % dans l'air
- Limite supérieure d'inflammabilité 33 % dans l'air
- Densité de la vapeur 2,15
- Indice d'évaporation

### Combustion

- Stoechiométrie 2,75 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion
- PCS
- PCI
- T99 719°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 734°C - 17,78 Log t
- T99.99 744°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air 3,8 %
- Limite supérieure dans l'air 29,3 %

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide)
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)  $9,518E-2+3,23E-3T-2,458E-6T^2+7,637E-10T^3$  J/g/K
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 0,860 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation 26,2 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion
- Enthalpie de formation 31,3 kJ/mole
- Tension de vapeur 3,4 E5 Pa à 20 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = -0,05223 * 26056 / T + 8,1710$
- Température critique 158,4 °C
- Pression critique 534 E5 Pa

### Sécurité

Extrêmement inflammable  
La chaleur peut provoquer une réaction explosive  
Dégage des gaz irritants en brûlant  
Le contact avec le gaz liquéfié provoque des gelures  
Les vapeurs sont très toxiques  
Risques d'arrêt respiratoire à haute concentration  
Valeur limite de la concentration dans l'air : 5 ppm

### Stockage

Conditions de stockage habituelles des gaz dangereux  
Protéger des élévations de température

## Crotonaldéhyde

C<sub>4</sub>H<sub>6</sub>O



M = 70,09 (14,27 mole/kg)

C : 68,55%

H : 8,63%

O : 22,83%

Liquide incolore, lacrymogène

Intermédiaire de synthèse, vulcanisation, détection des fuites (conduites de gaz)

### Propriétés physiques

- Densité 0,853
- Point de fusion -76,5 °C
- Point d'ébullition 104,0 °C
- Solubilité dans l'eau 181 g/l
- Viscosité
- Tension superficielle

### Caractéristiques chimiques

Fonction aldéhyde insaturé (groupe 5 et 103)

Nombreuses réactions de condensation catalysées par les acides ou les bases. Ces réactions sont exothermiques (suffisamment pour enflammer le mélange) et conduisent à des produits plus lourds (oligomères) colorés et très visqueux. Ces réactions produisent également de l'eau.

Les aldéhydes réagissent facilement avec tous les oxydants (oxygène de l'air, oxydants minéraux, acides minéraux oxydants) pour donner ici de l'acide crotonique.

Le crotonaldéhyde se polymérise en présence de lumière, de base ou d'acide. Réaction exothermique.

### Inflammation

- Point éclair 13 °C
- Température d'autoinflammation 207 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité
- Limite supérieure d'inflammabilité
- Densité de la vapeur 2,41
- Indice d'évaporation

### Combustion

- Stoechiométrie 5 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion 2266 kJ/mole
- PCS 32330 kJ/kg
- PCI 30589 kJ/kg
- T99 510°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 525°C - 17,78 Log t
- T99.99 537°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air
- Limite supérieure dans l'air

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide)
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C
- Chaleur latente de vaporisation
- Chaleur latente de fusion
- Enthalpie de formation -100,6 kJ/mole
- Tension de vapeur

### Sécurité

Inflammable

Très toxique, lacrymogène

Vapeurs extrêmement irritantes pour les muqueuses (yeux et voies respiratoires)

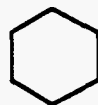
Le liquide occasionne de graves brûlures

### Stockage

A conserver dans un endroit bien ventilé, à l'abri de la chaleur

Isoler des produits oxydants et des acides

Local antidéflagrant



M = 84,16 (11,88 mole/kg)

C : 86,63%

H : 14,37%

Liquide incolore, odeur d'hydrocarbure  
Solvant (laques, résines, extraction des huiles essentielles)  
Intermédiaire dans la synthèse du cyclohexanol/cyclohexanone (nylon)

### Propriétés physiques

- Densité 0,774
- Point de fusion 6,6 °C
- Point d'ébullition 80,7 °C
- Solubilité dans l'eau très faible
- Azéotrope avec l'eau 8,4% d'eau Eb = 69,5°C
- Viscosité 0,965 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 6,058 E-6 exp (12361/RT) Pa.s
- Tension superficielle 25,24 mN/m

### Caractéristiques chimiques

Hydrocarbure saturé (groupe 29)  
Composé assez inerte chimiquement. Peut toutefois subir l'action d'oxydants forts avec formation de gaz carbonique et dégagement de chaleur

### Inflammation

- Point éclair -20 °C
- Température d'autoinflammation 245 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité 1,3 % dans l'air
- Limite supérieure d'inflammabilité 8 % dans l'air
- Densité de la vapeur 2,98
- Indice d'évaporation 3,5

### Combustion

- Stoechiométrie 9,07 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion 3920 kJ/mole
- PCS 46578 kJ/kg
- PCI 43679 kJ/kg
- T99 511°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 519°C - 17,78 Log t
- T99.99 523°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques  $k = 2,6 E6 \exp (-1290/T)$

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air 1,2 %
- Limite supérieure dans l'air 8,3 %

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide)
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)  $-6,481E-1+7,264E-3T+2,998E-6T^2+1,57E-10T^3$  J/g/K
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 1,254 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation 29,87 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion 2,68 kJ/mole
- Enthalpie de formation -123,0 kJ/mole
- Tension de vapeur 162 E2 Pa à 30 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = - 0,05223 * 35216 /T + 8,1345$

### Sécurité

Extrêmement inflammable

Peu toxique

A très forte concentration peut provoquer des syncopes

Valeur limite de la concentration dans l'air : 300 ppm

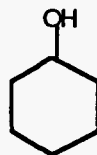
### Stockage

Conserver dans un endroit bien ventilé

Eloigner des produits oxydants

Local antidéflagrant





M = 100,16 (9,98 mole/kg)

C : 71,95%

H : 12,08%

O : 15,97%

Solide hygroscopique, odeur de camphre  
Solvant (résines alkyle, ethyl cellulose).  
Intermédiaire de synthèse (celluloid, insecticides)

### Propriétés physiques

- Densité 0,962
- Point de fusion 24 °C
- Point d'ébullition 161 °C
- Solubilité dans l'eau 36 g/l
- Viscosité 1,607 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 1,593 E-9 exp (42891/RT) Pa.s
- Tension superficielle 33,40 mN/m

### Caractéristiques chimiques

Fonction alcool (groupe 4)

Estérification par les acides minéraux ou organiques avec formation d'eau. Les oxydants transforment le cyclohexanol en cyclohexanone, réaction exothermique

Réagit avec les métaux réducteurs et les hydrures métalliques avec formation d'hydrogène, risque d'inflammation et d'explosion.

### Inflammation

- Point éclair 67 °C
- Température d'autoinflammation 300 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité
- Limite supérieure d'inflammabilité
- Densité de la vapeur 3,45
- Indice d'évaporation 400

### Combustion

- Stoechiométrie 8,5 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion 3728 kJ/mole
- PCS 37220 kJ/kg
- PCI 34783 kJ/kg
- T99 530°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 537°C - 17,78 Log t
- T99.99 544°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air
- Limite supérieure dans l'air

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide) 1,743 J/g/°C
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)  $-5,544E-1+7,202E-3T+4,079E-6T^2+8,222E-10T^3$  J/g/K
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 1,251 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation 62,01 kJ/mole à 25 °C
- Chaleur latente de fusion 1,76 kJ/mole
- Enthalpie de formation -357,8 (l) kJ/mole
- Tension de vapeur 1,3 E2 Pa à 21 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = -0,05223 * 49924 /T + 8,9094$

### Sécurité

Inflammable

Vapeurs irritantes pour la peau et les muqueuses oculaires et respiratoires

A haute concentration peut entraîner des troubles nerveux avec effet narcotique

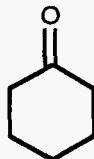
Valeur limite de la concentration dans l'air : 50 ppm

### Stockage

Conserver dans un endroit isolé, bien ventilé à l'abri de la chaleur

Isoler des produits oxydants

Local antidéflagrant

C<sub>6</sub>H<sub>10</sub>O

M = 98,15 (10,19 mole/kg)

C : 73,43%

H : 10,27%

O : 16,30%

Liquide huileux, odeur vaguement mentholée  
 Solvant pour les dérivés de la cellulose et des résines  
 Fabrication de l'acide adipique (nylon)

### Propriétés physiques

- Densité 0,948
- Point de fusion -16,4 °C
- Point d'ébullition 155,7 °C
- Solubilité dans l'eau 150 g/l (à 10°C)
- Viscosité 2,217 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 4,569 E-6 exp (15074/RT) Pa.s
- Tension superficielle 35,19 mN/m

### Caractéristiques chimiques

Fonction cétone (groupe 19)

Réactions de condensation catalysées par les acides ou les bases avec production d'eau et de sous-produits de masse moléculaire élevée. Réactions faiblement exothermiques.

Les acides minéraux oxydants peuvent à haute température couper la molécule avec production d'acide adipique et de gaz carbonique.

### Inflammation

- Point éclair 43 °C
- Température d'autoinflammation 420 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité 1,1 % dans l'air
- Limite supérieure d'inflammabilité 9,4 % dans l'air
- Densité de la vapeur 3,4
- Indice d'évaporation 40

### Combustion

- Stoechiométrie 8 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion 3519 kJ/mole
- PCS 35853 kJ/kg
- PCI 33781 kJ/kg
- T99 578°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 583°C - 17,78 Log t
- T99.99 589°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques  $k = 3 \text{ E}13 \text{ exp} (-2300/T)$

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air 1,3 %
- Limite supérieure dans l'air 9,4 %

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide) 1,810 J/g/°C
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)  $-3,852E-1+5,643E-3T+-1,99E-6T^2+-1,563E-10T^3$  J/g/K
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 1,116 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation 45,06 kJ/mole à 25 °C
- Chaleur latente de fusion
- Enthalpie de formation -226,1 kJ/mole
- Tension de vapeur 6,7 E2 Pa à 26,4 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = - 0,05223 * 41984 /T + 8,0202$

### Sécurité

Inflammable

Vapeurs irritantes pour les muqueuses oculaires et respiratoires

Action narcotique à haute concentration

Valeur limite de la concentration dans l'air : 25 ppm

### Stockage

Conserver dans un endroit isolé, bien ventilé à l'abri de la chaleur

Isoler des produits oxydants

Local antidéflagrant

## Cyclopentadiène

C<sub>5</sub>H<sub>6</sub>



M = 66,10 (15,13 mole/kg)

C : 90,85%

H : 9,15%

Liquide incolore

Fabrication de résines. Intermédiaire de synthèse

### Propriétés physiques

- Densité 0,802
- Point de fusion -97,2 °C
- Point d'ébullition 40,8 °C
- Solubilité dans l'eau insoluble
- Viscosité
- Tension superficielle

### Caractéristiques chimiques

Carbure insaturé (groupe 28)

Se dimérise très facilement pour donner le dicyclopentadiène, plus facile à manipuler (F = 32,5°C)

Réagit facilement avec les composés insaturés (acrylates, acroleine, acrylonitrile, ...). Réaction faiblement exothermique qui conduit à des produits plus lourds

### Inflammation

- Point éclair
- Température d'autoinflammation
- Limite inférieure d'inflammabilité
- Limite supérieure d'inflammabilité
- Densité de la vapeur
- Indice d'évaporation

### Combustion

- Stoechiométrie 6,5 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion 2931 kJ/mole
- PCS 44342 kJ/kg
- PCI 42496 kJ/kg
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air
- Limite supérieure dans l'air

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide)
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C
- Chaleur latente de vaporisation
- Chaleur latente de fusion
- Enthalpie de formation 134,3 kJ/mole
- Tension de vapeur

### Sécurité

Très inflammable

Valeur limite de la concentration dans l'air : 75 ppm

### Stockage

Conserver dans un endroit isolé, bien ventilé à l'abri de la chaleur

Isoler des produits oxydants

Local antidéflagrant

## Dibutyléther

C<sub>8</sub>H<sub>18</sub>O

(CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>O

M = 130,22 (7,68 mole/kg)

C : 73,78%

H : 13,93%

O : 12,29%

Liquide incolore

Solvant

### Propriétés physiques

- Densité 0,769
- Point de fusion -98 °C
- Point d'ébullition 142 °C
- Solubilité dans l'eau insoluble
- Azéotrope avec l'eau 33% d'eau Eb = 92,9°C
- Viscosité 0,689 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 1,113 E-5 exp (10059/RT) Pa.s
- Tension superficielle 22,44 mN/m

### Caractéristiques chimiques

Fonction éther (groupe 14)

Assez inerte chimiquement, réagit cependant avec les acides forts pour donner des alcools et des esters minéraux.

Sensible également aux oxydants forts, forme des acides

### Inflammation

- Point éclair 25 °C
- Température d'autoinflammation 194 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité 1,5 % dans l'air
- Limite supérieure d'inflammabilité 7,6 % dans l'air
- Densité de la vapeur 4,5
- Indice d'évaporation 19

### Combustion

- Stoechiométrie 12 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion
- PCS
- PCI
- T99 470°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 474°C - 17,78 Log t
- T99.99 480°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air
- Limite supérieure dans l'air

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide)
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C
- Chaleur latente de vaporisation 36,49 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion
- Enthalpie de formation -333,4 kJ/mole
- Tension de vapeur

### Sécurité

Inflammable

### Stockage

Conserver dans un endroit isolé, bien ventilé à l'abri de la chaleur  
Isoler des produits oxydants  
Local antidéflagrant



## Dichloroéthane



M = 98,85 (10,11 mole/kg)

C : 24,28%

H : 4,07%

Cl : 71,65%

Liquide incolore, odeur plaisante  
Solvant (cires, gommés, graisses, agro-alimentaire)

### Propriétés physiques

- Densité 1,246
- Point de fusion -35,7 °C
- Point d'ébullition 83,5 °C
- Solubilité dans l'eau 8,3 g/l
- Viscosité 0,816 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 1,972 E-5 exp (9074/RT) Pa.s
- Tension superficielle 32,57 mN/m

### Caractéristiques chimiques

Fonction dérivé halogéné (groupe 17)

En présence d'oxydant fort ou d'une température élevée, on peut constater la formation de chlore et d'acide chlorhydrique

### Inflammation

- Point éclair 13 °C
- Température d'autoinflammation 410 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité 6,2 % dans l'air
- Limite supérieure d'inflammabilité 16 % dans l'air
- Densité de la vapeur 3,42
- Indice d'évaporation 4,1

### Combustion

- Stoechiométrie 3 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion
- PCS
- PCI
- T99 633°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 647°C - 17,78 Log t
- T99.99 654°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques  $k = 5 \text{ E}12 \text{ exp } (-2500/T)$

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air 6,2 %
- Limite supérieure dans l'air 15,9 %

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide)
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)  $2,073E-1+2,337E-3T+-1,455E-6T^2+3,428E-10T^3$  J/g/K
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 0,784 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation 31,98 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion 8,74 kJ/mole
- Enthalpie de formation -165,9 (l) kJ/mole
- Tension de vapeur 85,3 E2 Pa à 20 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = -0,05223 * 35126 /T + 8,0606$
- Température critique 290 °C
- Pression critique 53 E5 Pa

### Sécurité

Très inflammable

Vapeurs nocives (nausées, vomissements, risques d'œdème aigu du poumon) et effet narcotique

Le contact du liquide avec la peau entraîne des irritations

Valeur limite de la concentration dans l'air : 10 ppm

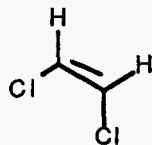
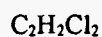
### Stockage

Conserver dans un endroit isolé, bien ventilé à l'abri de la chaleur

Isoler des produits oxydants

Local antidéflagrant

## Dichloroéthylène



M = 96,95 (10,31 mole/kg)

C : 24,78%

H : 2,08%

Cl : 73,14%

Liquide incolore, odeur âcre et éthérée  
Solvant (graisses, camphre, phénol)

### Propriétés physiques

- Densité 1,284
- Point de fusion -80,5 °C
- Point d'ébullition 60,3 °C
- Solubilité dans l'eau insoluble
- Viscosité 0,576 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 2,528 E-5 exp (7099/RT) Pa.s
- Tension superficielle

### Caractéristiques chimiques

Fonction dérivé halogéné (groupe 17)

En présence d'oxydant fort ou d'une température élevée, on peut constater la formation de chlore, d'acide chlorhydrique et de phosgène

### Inflammation

- Point éclair 2 °C
- Température d'autoinflammation 460 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité 5,6 % dans l'air
- Limite supérieure d'inflammabilité 12,8 % dans l'air
- Densité de la vapeur 3,34
- Indice d'évaporation

### Combustion

- Stoechiométrie 2,5 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion
- PCS
- PCI
- T99 689°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 704°C - 17,78 Log t
- T99.99 713°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air 9,7 %
- Limite supérieure dans l'air 12,8 %

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide)
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)  $1,198E-1+2,432E-3T+-2,166E-6T^2+7,47E-10T^3$  J/g/K
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 0,672 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation 31,0 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion
- Enthalpie de formation 4,6 kJ/mole
- Tension de vapeur 267 E2 Pa à 24,7 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = - 0,05223 * 33461 /T + 8,1733$

### Sécurité

Très inflammable

Le contact du liquide est irritant pour les muqueuses oculaires et respiratoires

Les vapeurs ont un effet narcotique et peuvent provoquer des contractions spasmodiques et des convulsions

Valeur limite de la concentration dans l'air : 100 ppm

### Stockage

Conserver dans un endroit bien ventilé à l'abri de la lumière, de la chaleur et de l'humidité

Local antidéflagrant

## Diéthanolamine

$C_4H_{11}NO_2$

$(HOCH_2CH_2)_2NH$

M = 105,14 (9,51 mole/kg)

C : 45,70%

H : 10,55%

O : 30,43%

N : 13,32%

Prismes déliquescents ou liquide visqueux, odeur ammoniacale  
Agent de complexation, émulsifiant, synthèse organique  
Capteur de  $CO_2$  et de  $H_2S$

### Propriétés physiques

- Densité 1,088
- Point de fusion 28 °C
- Point d'ébullition 268,8 °C
- Solubilité dans l'eau infiniment soluble
- Viscosité
- Tension superficielle

### Caractéristiques chimiques

fonction amino-alcool (groupe 4 et 7)

La fonction alcool peut être estérifiée ou déshydratée dans les conditions habituelles

La fonction amine réagit avec tous les acides, avec formation de sels

Le composé est sensible aux oxydants avec dégradation exothermique de la molécule et formation d'acides et de produits lourds

### Inflammation

- Point éclair 172 °C
- Température d'autoinflammation 660 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité
- Limite supérieure d'inflammabilité
- Densité de la vapeur 3,6
- Indice d'évaporation 135

### Combustion

- Stoechiométrie 5,75 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion
- PCS
- PCI
- T99 808°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 819°C - 17,78 Log t
- T99.99 835°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air
- Limite supérieure dans l'air

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide)
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C
- Chaleur latente de vaporisation
- Chaleur latente de fusion
- Enthalpie de formation
- Tension de vapeur < 0,01 E2 Pa à 20 °C

### Sécurité

Peu inflammable

Irritant pour la peau et les muqueuses oculaires et respiratoires

Peut provoquer des irritations allergiques

Valeur limite de la concentration dans l'air : 3 ppm

### Stockage

Récipients métalliques avec préchauffage

Local bien ventilé à l'abri de l'humidité

Eloigner des produits oxydants et des acides

## Diéthyl éther



M = 46,07 (21,71 mole/kg)

C : 52,14%

H : 13,13%

O : 34,73%

Liquide incolore, odeur caractéristique  
Solvant, synthèse organique

### Propriétés physiques

- Densité 0714
- Point de fusion -116,2 °C
- Point d'ébullition 34,51 °C
- Solubilité dans l'eau 84 g/l
- Viscosité 0,225 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 1,403 E-5 exp (6760/RT) Pa.s
- Tension superficielle 16,55 mN/m

### Caractéristiques chimiques

Fonction éther (groupe 14)

Assez inerte chimiquement, réagit cependant avec les acides forts pour donner des alcools et des esters minéraux.  
Sensible également aux oxydants forts, forme des acides

### Inflammation

- Point éclair -45 °C
- Température d'autoinflammation 160 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité 1,9 % dans l'air
- Limite supérieure d'inflammabilité 36 % dans l'air
- Densité de la vapeur 2,6
- Indice d'évaporation 1

### Combustion

- Stoechiométrie 3 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion 2751 kJ/mole
- PCS 59713 kJ/kg
- PCI 57065 kJ/kg
- T99 534°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 553°C - 17,78 Log t
- T99.99 566°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques k = 6 E13 exp (-2000/T)

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air 1,85 %
- Limite supérieure dans l'air 48 %

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide) 2,211 J/g/°C
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)  $4,649E-1+7,291E-3T-2,247E-6T^2+2,031E-10T^3$  J/g/K
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 2,433 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation 26,52 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion 7,30 kJ/mole
- Enthalpie de formation -272,5 (l) kJ/mole
- Tension de vapeur 586 E2 Pa à 20 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = -0,05223 * 30905 / T + 8,1632$
- Température critique 35,51 °C
- Pression critique 0,26 E5 Pa

### Sécurité

Liquide extrêmement inflammable  
Forme des mélanges explosifs avec l'air  
Vapeurs toxiques  
Narcotique puissant  
Formation possible de peroxydes explosifs  
Valeur limite de la concentration dans l'air : 400 ppm

### Stockage

Récipients métalliques  
Eloigner des produits oxydants et des sources de chaleur  
Protéger des chocs  
Local antidéflagrant



## Diéthylamine

C<sub>4</sub>H<sub>11</sub>N

(CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>NH

M = 73,14 (13,67 mole/kg)

C : 65,69%

H : 15,16%

N : 19,15%

Liquide incolore, odeur d'ammoniac

Agent de flottation, intermédiaire de synthèse (colorants, pharmacie)

### Propriétés physiques

- Densité 0,702
- Point de fusion -49,8 °C
- Point d'ébullition 55,5 °C
- Solubilité dans l'eau infiniment soluble
- Viscosité 0,354 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 8,573 E-6 exp (9073/RT) Pa.s
- Tension superficielle 20,42 mN/m

### Caractéristiques chimiques

Fonction amine (groupe 7)

Réagit rapidement avec tous les acides (formation de sels). Les oxydants conduisent à des composés fortement colorés avec dégagement possible d'oxydes d'azote, réactions exothermiques.

Réactions de condensation avec les aldéhydes et les cétones (formation d'eau), réactions catalysées par les acides.

Les amines subissent des réactions d'alkylation avec les dérivés halogénés. Elles réagissent avec les hydrures et les métaux alcalins avec formation d'hydrogène.

### Inflammation

- Point éclair -23 °C
- Température d'autoinflammation 310 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité 1,8 % dans l'air
- Limite supérieure d'inflammabilité 10,1 % dans l'air
- Densité de la vapeur 2,53
- Indice d'évaporation

### Combustion

- Stoechiométrie 6,75 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion 2997 kJ/mole
- PCS 40976 kJ/kg
- PCI 37918 kJ/kg
- T99 645°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 661°C - 17,78 Log t
- T99.99 673°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air 1,7 %
- Limite supérieure dans l'air 10,1 %

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide) 2,165 J/g/°C
- Chaleur spécifique (gaz parfait) ou f(T)  $2,788E-2+6,057E-3T+-2,985E-6T^2+4,995E-10T^3$  J/g/K
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 1,581 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation 29,06 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion
- Enthalpie de formation -72,5 kJ/mole
- Tension de vapeur 260 E2 Pa à 20 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = - 0,05223 * 32043 /T + 7,9861$

### Sécurité

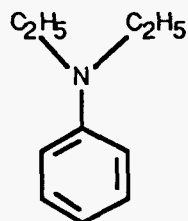
Extrêmement inflammable  
Vapeurs extrêmement irritantes pour la peau, les yeux et les voies respiratoires  
Le contact avec le liquide peut provoquer des brûlures  
Valeur limite de la concentration dans l'air : 10 ppm

### Stockage

Conserver dans un endroit isolé, bien ventilé à l'abri de la chaleur  
Isoler des produits oxydants  
Local antidéflagrant

## Diéthylaniline

C<sub>10</sub>H<sub>13</sub>N



M = 149,23 (6,70 mole/kg)

C : 80,48%

H : 10,13%

N : 9,39%

Liquide jaune pâle

Intermédiaire dans la synthèse de colorants

### Propriétés physiques

- Densité 0,930
- Point de fusion -38 °C
- Point d'ébullition 215 °C
- Solubilité dans l'eau 14 g/l
- Viscosité 1,95 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) exp (/RT) Pa.s
- Tension superficielle 34,51 mN/m

### Caractéristiques chimiques

Fonction amine (groupe 7)

Réagit rapidement avec tous les acides (formation de sels). Les oxydants conduisent à des composés fortement colorés avec dégagement possible d'oxydes d'azote, réactions exothermiques.

Les amines subissent des réactions d'alkylation avec les dérivés halogénés.

### Inflammation

- Point éclair 85 °C
- Température d'autoinflammation 630 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité
- Limite supérieure d'inflammabilité
- Densité de la vapeur 5
- Indice d'évaporation

### Combustion

- Stoechiométrie 13,75 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion 6068 kJ/mole
- PCS 40662 kJ/kg
- PCI 38618 kJ/kg
- T99 790°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 798°C - 17,78 Log t
- T99.99 808°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air
- Limite supérieure dans l'air

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide) 1,889 J/g/°C
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C
- Chaleur latente de vaporisation
- Chaleur latente de fusion
- Enthalpie de formation
- Tension de vapeur 1,31 E2 Pa à 49,7 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = - 0,05223 * 52450 / T + 8,5016$

### Sécurité

Inflammable

### Stockage

Local bien ventilé



M = 86,13 (11,61 mole/kg)

C : 69,72%

H : 11,70%

O : 18,57%

Liquide incolore, odeur d'acétone  
Intermédiaire de synthèse**Propriétés physiques**

- Densité 0,809
- Point de fusion -39,4 °C
- Point d'ébullition 101,8 °C
- Solubilité dans l'eau 40 g/l
- Viscosité 0,464 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 1,866 E-5 exp (7834/RT) Pa.s
- Tension superficielle 24,74 mN/m

**Caractéristiques chimiques**

Fonction cétone (groupe 19)

Réactions de condensation catalysées par les acides ou les bases avec production d'eau et de sous-produits de masse moléculaire élevée. Réactions faiblement exothermiques.

Les acides minéraux oxydants peuvent à haute température couper la molécule avec production d'acide propionique et de gaz carbonique.

**Inflammation**

- Point éclair 12 °C
- Température d'autoinflammation 450 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité 1,6 % dans l'air
- Limite supérieure d'inflammabilité
- Densité de la vapeur 3
- Indice d'évaporation

**Combustion**

- Stoechiométrie 7 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion 3100 kJ/mole
- PCS 35992 kJ/kg
- PCI 33632 kJ/kg
- T99 618°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 625°C - 17,78 Log t
- T99.99 633°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques  $k = 3 E11 \exp (-1000/T)$

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air
- Limite supérieure dans l'air

### Données thermodynamiques

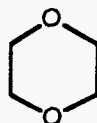
- Chaleur spécifique (liquide) 2,328 J/g°C
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)  $3,484E-1+4,573E-3T+-2,214E-6T^2+3,945E-10T^3$  J/g/K
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 1,525 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation 33,44 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion
- Enthalpie de formation -308,5 (l) kJ/mole
- Tension de vapeur

### Sécurité

Très inflammable  
Vapeurs toxiques  
Peut provoquer des comas à haute concentration

### Stockage

Récipients métalliques  
Éloigner des produits oxydants et des sources de chaleur  
Protéger des chocs  
Local antidéflagrant



M = 88,11 (11,35 mole/kg)

C : 54,53%

H : 9,15%

O : 36,32%

Liquide incolore, odeur plaisante faible

Solvant très général des dérivés organique et quelques composés minéraux

### Propriétés physiques

- Densité 1,034
- Point de fusion 11,8 °C
- Point d'ébullition 101 °C
- Solubilité dans l'eau infiniment soluble
- Azéotrope avec l'eau 18,4% d'eau Eb = 87,8°C
- Viscosité 1,300 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 7,267 E-6 exp (12642/RT) Pa.s
- Tension superficielle 33,26 mN/m

### Caractéristiques chimiques

Fonction éther (groupe 14)

Assez inerte chimiquement, réagit cependant avec les acides forts pour donner des alcools et des esters minéraux.

Sensible également aux oxydants forts, forme des acides

### Inflammation

- Point éclair 12,2 °C
- Température d'autoinflammation 180 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité 2,0 %
- Limite supérieure d'inflammabilité 22 %
- Densité de la vapeur 3,03
- Indice d'évaporation

### Combustion

- Stoechiométrie 5 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion 2364 kJ/mole
- PCS 26830 kJ/kg
- PCI 24984 kJ/kg
- T99 468°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 481°C - 17,78 Log t
- T99.99 493°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air 1,97 %
- Limite supérieure dans l'air 22 %

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide)
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)  $-6,08E-1+6,795E-3T+-4,636E-6T^2+1,205E-9T^3$  J/g/K
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 1,037 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation 34,16 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion 12,8 kJ/mole
- Enthalpie de formation -315,8 kJ/mole
- Tension de vapeur 53,3 E2 Pa à 25,2 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = - 0,05223 * 35744 / T + 7,8642$

### Sécurité

Liquide facilement inflammable  
Formation possible de peroxydes explosifs  
Vapeurs irritantes pour les yeux, la peau et les poumons  
Valeur limite de la concentration dans l'air : 25 ppm

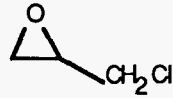
### Stockage

Conserver dans un endroit isolé, bien ventilé à l'abri de la chaleur  
Isoler des produits oxydants  
Local antidéflagrant



## Epichlorhydrine

C<sub>3</sub>H<sub>5</sub>ClO



M = 92,52 (10,81 mole/kg)

C : 38,95%

H : 5,45%

O : 17,29%

Cl : 38,32%

Liquide incolore

Solvant des résines naturelles et synthétiques

Fabrication des résines époxy

### Propriétés physiques

- Densité 1,181
- Point de fusion -25,6 °C
- Point d'ébullition 117,9 °C
- Solubilité dans l'eau insoluble
- Viscosité
- Tension superficielle 36,04 mN/m

### Caractéristiques chimiques

Epoxyde halogéné (groupe 17 et 34)

Réaction facile avec tous les réactifs nucléophiles (eau, alcools, amines, ...) qui ouvrent le cycle. Formation exothermique de composés polyfonctionnels. En présence de base, la réaction est fortement accélérée, réaction proche d'une polymérisation

L'halogène est réactif et peut conduire à des réactions d'alkylation

### Inflammation

- Point éclair 31 °C
- Température d'autoinflammation 411 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité 3,8 % dans l'air
- Limite supérieure d'inflammabilité 21 % dans l'air
- Densité de la vapeur 3,19
- Indice d'évaporation 13

### Combustion

- Stoechiométrie 3,75 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion
- PCS
- PCI
- T99 597°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 608°C - 17,78 Log t
- T99.99 617°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air 3,8 %
- Limite supérieure dans l'air 21 %

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide)
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(')
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C
- Chaleur latente de vaporisation
- Chaleur latente de fusion
- Enthalpie de formation -107,8 kJ/mole
- Tension de vapeur 17,3 E2 Pa à 20 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = - 0,05223 * 41054 /T + 8,3888$

### Sécurité

Inflammable

Brûle en dégageant un gaz irritant

Le liquide provoque des brûlures sévères

Vapeurs extrêmement irritantes pour les muqueuses (peau, yeux et poumons)

Valeur limite de la concentration dans l'air : 2 ppm

### Stockage

Conserver dans un endroit isolé et bien ventilé

Eloigner des produits oxydants, des acides, des bases et des chlorures métalliques

Local antidéflagrant

## Ethanolamine



M = 61,08 (16,37 mole/kg)

C : 39,33%

H : 11,55%

O : 26,19%

N : 22,93%

Liquide visqueux très hygroscopique, odeur d'ammoniac

Elimination du  $\text{CO}_2$  et de l' $\text{H}_2\text{S}$  du gaz naturel

Emulsifiant, intermédiaire de synthèse

### Propriétés physiques

- Densité 1,011
- Point de fusion 10,3 °C
- Point d'ébullition 170,8 °C
- Solubilité dans l'eau infiniment soluble
- Viscosité 18,95 E-3 Pa.s
- Tension superficielle 48,30 mN/m

### Caractéristiques chimiques

fonction amino-alcool (groupe 4 et 7)

La fonction alcool peut être estérifiée ou déshydratée dans les conditions habituelles

La fonction amine réagit avec tous les acides, avec formation de sels

Le composé est sensible aux oxydants avec dégradation exothermique de la molécule et formation d'acides et de produits lourds

### Inflammation

- Point éclair 85 °C
- Température d'autoinflammation 410 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité
- Limite supérieure d'inflammabilité
- Densité de la vapeur 2,11
- Indice d'évaporation

### Combustion

- Stoechiométrie 3,25 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion
- PCS
- PCI
- T99 744°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 765°C - 17,78 Log t
- T99.99 783°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air
- Limite supérieure dans l'air

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide)
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)  $1,524E-1+4,926E-3T+-2,976E-6T^2+7,623E-10T^3$  J/g/K
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 1,376 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation 41,5 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion
- Enthalpie de formation
- Tension de vapeur 0,5 E2 Pa à 20 °C

### Sécurité

Peu inflammable

Irritant pour la peau et les muqueuses oculaires et respiratoires

Peut provoquer des irritations allergiques

Valeur limite de la concentration dans l'air : 3 ppm

### Stockage

Récipients métalliques avec préchauffage

Local bien ventilé à l'abri de l'humidité

Eloigner des produits oxydants et des acides

## Ethoxyéthanol



M = 90,12 (11,10 mole/kg)

C : 53,31%

H : 11,18%

O : 35,51%

Liquide incolore pratiquement inodore  
Solvant (nitrocellulose, laques), stabilisant d'émulsions

### Propriétés physiques

- Densité 0,931
- Point de fusion -70 °C
- Point d'ébullition 135 °C
- Solubilité dans l'eau infiniment soluble
- Azéotrope avec l'eau
- Viscosité
- Viscosité en f(T)
- Tension superficielle 28,80 mN/m

### Caractéristiques chimiques

Fonction alcool-éther (groupes 4 et 14)

Estérification par les acides minéraux ou organiques avec formation d'eau. Les oxydants transforment l'alcool en aldéhyde et en acide, réaction exothermique

Réagit avec les métaux réducteurs et les hydrures métalliques avec formation d'hydrogène, risque d'inflammation et d'explosion.

La fonction éther peut être coupée par les acides forts avec formation d'esters minéraux

### Inflammation

- Point éclair 43 °C
- Température d'autoinflammation 235 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité 1,7 % dans l'air
- Limite supérieure d'inflammabilité 15,6 % dans l'air
- Densité de la vapeur 3,10
- Indice d'évaporation 43

### Combustion

- Stoechiométrie 5,5 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion
- PCS
- PCI
- T99 522°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 535°C - 17,78 Log t
- T99.99 547°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air 2,6 %
- Limite supérieure dans l'air 15,7 %

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide)
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en (l')
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C
- Chaleur latente de vaporisation 39,22 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion
- Enthalpie de formation
- Tension de vapeur 7 E2 Pa à 25 °C

### Sécurité

Inflammable

Valeur limite de la concentration dans l'air : 100 ppm

### Stockage

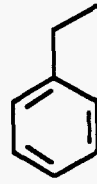
Conserver dans un endroit isolé, bien ventilé

Isoler des produits oxydants

Protéger des chocs

Local antidéflagrant

C<sub>8</sub>H<sub>10</sub>



M = 106,17 (9,42 mole/kg)

C : 90,51%

H : 9,49%

Liquide incolore, odeur aromatique  
Précurseur industriel du styrène, solvant des résines

### Propriétés physiques

- Densité 0,863
- Point de fusion -95,0 °C
- Point d'ébullition 136,2 °C
- Solubilité dans l'eau insoluble
- Azéotrope avec l'eau 33% d'eau Eb = 92°C
- Viscosité 0,675 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 1,689 E-5 exp (8988/RT) Pa.s
- Tension superficielle 29,29 mN/m

### Caractéristiques chimiques

Carbure aromatique (groupe 16)  
Composé stable. Les oxydants puissants peuvent conduire à l'acide benzoïque

### Inflammation

- Point éclair 15 °C
- Température d'autoinflammation 430 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité 1 % dans l'air
- Limite supérieure d'inflammabilité 6,7 % dans l'air
- Densité de la vapeur 3,7
- Indice d'évaporation 14

### Combustion

- Stoechiométrie 10,5 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion 4565 kJ/mole
- PCS 42997 kJ/kg
- PCI 41082 kJ/kg
- T99 641°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 652°C - 17,78 Log t
- T99.99 659°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air
- Limite supérieure dans l'air

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide) 1,710 J/g/°C
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)  $-4,06E-1+6,661E-3T+-4,531E-6T^2+1,225E-9T^3$  J/g/K
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 1,209 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation 35,57 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion 9,18 kJ/mole
- Enthalpie de formation 29,8 kJ/mole
- Tension de vapeur 13,1 E2 Pa à 25,9 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = - 0,05223 * 40737 /T + 8,1126$

### Sécurité

Très inflammable

Vapeurs irritantes pour les muqueuses oculaires et respiratoires

Risque de paralysie du centre respiratoire à haute concentration

### Stockage

Récipients métalliques

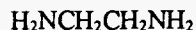
Eloigner des produits oxydants et des sources de chaleur

Protéger des chocs

Local antidéflagrant



## Ethylènediamine



M = 60,10 (16,64 mole/kg)

C : 39,97%

H : 13,42%

N : 46,61%

Liquide épais et incolore, odeur d'ammoniac  
Solvant (caseine, albumine), émulsifiant, stabilisant des latex  
Inhibiteurs dans les solutions antigel

### Propriétés physiques

- Densité 0,898
- Point de fusion 8,5 °C
- Point d'ébullition 116 °C
- Solubilité dans l'eau infiniment soluble
- Viscosité 1,624 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 2,218 E-6 exp (16077/RT) Pa.s
- Tension superficielle 41,97 mN/m

### Caractéristiques chimiques

Fonction amine (groupe 7)

Réagit rapidement avec tous les acides (formation de sels). Les oxydants conduisent à des composés fortement colorés avec dégagement possible d'oxydes d'azote, réactions exothermiques.

Réactions de condensation avec les aldéhydes et les cétones (formation d'eau), réactions catalysées par les acides. Les amines subissent des réactions d'alkylation avec les dérivés halogénés. Elles réagissent avec les hydrures et les métaux alcalins avec formation d'hydrogène.

L'éthylènediamine est une base forte et capte le gaz carbonique pour former un carbonate insoluble

### Inflammation

- Point éclair 43 °C
- Température d'autoinflammation
- Limite inférieure d'inflammabilité
- Limite supérieure d'inflammabilité
- Densité de la vapeur
- Indice d'évaporation

### Combustion

- Stoechiométrie 4 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion 1892 kJ/mole
- PCS 31481 kJ/kg
- PCI 28773 kJ/kg
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air
- Limite supérieure dans l'air

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide)
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)  $6,373E-1+4,005E-3T+-7,218E-7T^2+-6569E-10T^3$  J/g/K
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 1,749 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation 37,98 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion
- Enthalpie de formation -26,6 (l) kJ/mole
- Tension de vapeur 13,1 E2 Pa à 21,5 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = - 0,05223 * 43961 /T + 8,7919$

### Sécurité

Inflammable

Vapeurs irritantes pour les muqueuses oculaires et respiratoires

Valeur limite de la concentration dans l'air : 10 ppm

### Stockage

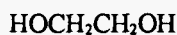
Conserver dans un endroit isolé, bien ventilé à l'abri de la chaleur

Eloigner des acides et des produits oxydants

Protéger des chocs

Local antidéflagrant

## Ethylène glycol



M = 62,07 (16,11 mole/kg)

C : 38,70%

H : 9,74%

O : 51,55%

Liquide incolore légèrement visqueux, très hygroscopique  
Antigel, agent mouillant, solvant, intermédiaire de synthèse

### Propriétés physiques

- Densité 1,109
- Point de fusion -15,6 °C
- Point d'ébullition 198 °C
- Solubilité dans l'eau infiniment soluble
- Viscosité 18,87 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 4,069 E-7 exp (26189/RT) Pa.s
- Tension superficielle 48,43 mN/m

### Caractéristiques chimiques

Fonction alcool (groupe 4)

Estérification par les acides minéraux ou organiques avec formation d'eau. Les oxydants transforment les alcools en aldéhydes et cétones, réaction exothermique

Réagit avec les métaux réducteurs et les hydrures métalliques avec formation d'hydrogène, risque d'inflammation et d'explosion.

### Inflammation

- Point éclair 111 °C
- Température d'autoinflammation 398 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité 3,2 % dans l'air
- Limite supérieure d'inflammabilité 28 % dans l'air
- Densité de la vapeur 2,14
- Indice d'évaporation 600

### Combustion

- Stoechiométrie 2,5 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion 1189 kJ/mole
- PCS 19156 kJ/kg
- PCI 17191 kJ/kg
- T99 650°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 665°C - 17,78 Log t
- T99.99 680°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air 3,2 %
- Limite supérieure dans l'air

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide) 2,387 J/g/°C
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)  $5,752E-1+4E-3T+-2,412E-6T^2+4,849E-10T^3$  J/g/K
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 1,566 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation 58,7 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion 11,2 kJ/mole
- Enthalpie de formation -386,8 kJ/mole
- Tension de vapeur 1,3 E2 Pa à 53 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = - 0,05223 * 58696 /T + 9,3951$

### Sécurité

Liquide peu inflammable  
Peut provoquer des intoxications par ingestion  
Valeur limite de la concentration dans l'air : 50 ppm

### Stockage

Entreposer dans un endroit ventilé à l'abri de la chaleur

## Ethylméthylcétone

C<sub>4</sub>H<sub>8</sub>O



M = 72,11 (13,87 mole/kg)

C : 66,63%

H : 11,18%

O : 22,19%

Liquide incolore, odeur d'acétone

Solvant dans les traitements de surface, fabrication de résines synthétiques incolores

### Propriétés physiques

- Densité 0,800
- Point de fusion -86,3 °C
- Point d'ébullition 79,6 °C
- Solubilité dans l'eau 275 g/l
- Viscosité 0,421 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 1,577 E-5 exp (8003/RT) Pa.s
- Tension superficielle 23,96 mN/m

### Caractéristiques chimiques

Fonction cétone (groupe 19)

Réactions de condensation catalysées par les acides ou les bases avec production d'eau et de sous-produits de masse moléculaire élevée. Réactions faiblement exothermiques.

Les acides minéraux oxydants peuvent à haute température couper la molécule avec production d'acide carboxylique et de gaz carbonique.

### Inflammation

- Point éclair -9 °C
- Température d'autoinflammation 404 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité 1,4 % dans l'air
- Limite supérieure d'inflammabilité 11,4 % dans l'air
- Densité de la vapeur 2,5
- Indice d'évaporation 2,8

### Combustion

- Stoechiométrie 5,5 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion 2444 kJ/mole
- PCS 33893 kJ/kg
- PCI 31637 kJ/kg
- T99 601°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 611°C - 17,78 Log t
- T99.99 620°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques k = 5 E11 exp (-1300/T)

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air 1,8 %
- Limite supérieure dans l'air 11,5 %

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide) 2,295 J/g/°C
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)  $1,517E-1+4,936E-3T+-2,635E-6T^2+5,436E-10T^3$  J/g/K
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 1,403 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation 31,30 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion
- Enthalpie de formation -238,7 kJ/mole
- Tension de vapeur 133 E2 Pa à 25 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = - 0,05223 * 34084 /T + 7,9594$
- Température critique 260 °C
- Pression critique 43,3 E5 Pa

### Sécurité

Très inflammable

Vapeurs toxiques

Peut provoquer des comas à haute concentration

Valeur limite de la concentration dans l'air : 200 ppm

### Stockage

Récipients métalliques

Eloigner des produits oxydants et des sources de chaleur

Protéger des chocs

Local antidéflagrant

## Formiate d'éthyle



M = 74,08 (13,50 mole/kg)

C : 48,64%

H : 8,16%

O : 43,19%

Liquide incolore

Arôme (rhum), solvant pour la nitrocellulose

Fongicide et larvicide, synthèse organique

### Propriétés physiques

- Densité 0,923
- Point de fusion -79 °C
- Point d'ébullition 54 °C
- Solubilité dans l'eau 100 g/l
- Azéotrope avec l'eau 5% d'eau Eb = 52,6°C
- Viscosité 0,394 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 1,732 E-5 exp (7659/RT) Pa.s
- Tension superficielle 23,84 mN/m

### Caractéristiques chimiques

Fonction ester (groupe 13)

S'hydrolyse lentement dans l'eau en acide formique et éthanol. En présence de base, réaction beaucoup plus rapide (saponification). Ces réactions ne provoquent qu'un échauffement modéré.

Les esters réagissent avec les amines, les mercaptans et les alcools par échange fonctionnel, réactions en général athermiques, production d'éthanol

### Inflammation

- Point éclair -20 °C
- Température d'autoinflammation 455 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité 2,8 % dans l'air
- Limite supérieure d'inflammabilité 16 % dans l'air
- Densité de la vapeur 2,6
- Indice d'évaporation

### Combustion

- Stoechiométrie 3,5 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion 1637 kJ/mole
- PCS 22098 kJ/kg
- PCI 20451 kJ/kg
- T99 624°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99,9 635°C - 17,78 Log t
- T99,99 647°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques  $k = 1 \text{ E}13 \text{ exp } (-2600/T)$

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air
- Limite supérieure dans l'air

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide) 2,132 J/g/°C
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)  $3,33E-1+3,126E-3T-2,862E-7T^2+-7,234E-10T^3$  J/g/K
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 1,220 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation 29,9 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion
- Enthalpie de formation
- Tension de vapeur 263 E2 Pa à 20 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = - 0,05223 * 33314 /T + 8,2313$

### Sécurité

Très inflammable

Réaction violente avec les matières oxydantes par exposition à la chaleur ou à la flamme

Toxique par absorption à travers la peau et par inhalation

Irritant pour les yeux et l'appareil respiratoire (conjonctivite, ulcération de la cornée, troubles visuels, anorexie, nausées, convulsions)

### Stockage

Conserver dans un endroit isolé, bien ventilé à l'abri de la chaleur

Isoler des produits oxydants

Local antidéflagrant



## Formiate de méthyle



M = 60,05 (16,65 mole/kg)

C : 40,00%

H : 6,71%

O : 53,28%

Liquide incolore d'odeur agréable  
Synthèse organique, plastifiant, solvant

### Propriétés physiques

- Densité 0,974
- Point de fusion -99,0 °C
- Point d'ébullition 31,5 °C
- Solubilité dans l'eau 300 g/l
- Viscosité 0,348 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 2,086 E-5 exp (6860/RT) Pa.s
- Tension superficielle 25,15 mN/m

### Caractéristiques chimiques

Fonction ester (groupe 13)

S'hydrolyse lentement dans l'eau en acide formique et méthanol. En présence de base, réaction beaucoup plus rapide (saponification). Ces réactions ne provoquent qu'un échauffement modéré.

Les esters réagissent avec les amines, les mercaptans et les alcools par échange fonctionnel, réactions en général athermiques, production de méthanol

### Inflammation

- Point éclair -19 °C
- Température d'autoinflammation 449 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité 4,5 % dans l'air
- Limite supérieure d'inflammabilité 23 % dans l'air
- Densité de la vapeur 2,1
- Indice d'évaporation

### Combustion

- Stoechiométrie 2 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion 1003 kJ/mole
- PCS 16703 kJ/kg
- PCI 15349 kJ/kg
- T99 628°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 642°C - 17,78 Log t
- T99.99 655°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques  $k = 1 \text{ E}13 \text{ exp } (-2900/T)$

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air 5,9 %
- Limite supérieure dans l'air 20 %

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide)
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)  $2,385E-2+4,496E-3T+-2,919E-6T^2+8,241E-10T^3$  J/g/K
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 1,126 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation 27,9 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion
- Enthalpie de formation -349,4 kJ/mole
- Tension de vapeur 526 E2 Pa à 16 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = - 0,05223 * 31404 /T + 8,2902$

### Sécurité

Très inflammable

Réaction violente avec les matières oxydantes par exposition à la chaleur ou à la flamme

Toxique par absorption à travers la peau et par inhalation

Irritant pour les yeux et l'appareil respiratoire (conjonctivite, ulcération de la cornée, troubles visuels, anorexie, nausées, convulsions)

### Stockage

Conserver dans un endroit isolé, bien ventilé à l'abri de la chaleur

Isoler des produits oxydants

Local antidéflagrant

## Formol diméthylacétal



M = 76,10 (13,14 mole/kg)

C : 47,35%

H : 10,60%

O : 42,05%

Liquide incolore, odeur de chloroforme

Parfumerie, fabrication de résines artificielles, solvant spécifique en synthèse organique

### Propriétés physiques

- Densité 0,867
- Point de fusion -105 °C
- Point d'ébullition 41,6 °C
- Solubilité dans l'eau 330 g/l
- Viscosité
- Tension superficielle 21,19 mN/m

### Caractéristiques chimiques

Fonction acétal (groupe 14)

S'hydrolyse rapidement en présence d'acide avec formation de formol et de méthanol

### Inflammation

- Point éclair -32 °C
- Température d'autoinflammation 235 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité 2,2 % dans l'air
- Limite supérieure d'inflammabilité 13,8 % dans l'air
- Densité de la vapeur 2,6
- Indice d'évaporation

### Combustion

- Stoechiométrie 4 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion
- PCS
- PCI
- T99 538°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 553°C - 17,78 Log t
- T99.99 567°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air
- Limite supérieure dans l'air

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide)
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)  $-4,52E-2+1,353E-3T+-8,476E-7T^2+2,011E-10T^3$  J/g/K
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 0,288 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation 27,6 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion
- Enthalpie de formation -348,4 kJ/mole
- Tension de vapeur

### Sécurité

Extrêmement inflammable

### Stockage

Conserver dans un endroit isolé, bien ventilé à l'abri de la chaleur  
Isoler des produits oxydants  
Local antidéflagrant



M = 92,09 (10,86 mole/kg)

C : 39,13%

H : 8,76%

O : 52,12%

Liquide incolore sirupeux

Solvant, plastifiant, édulcorant, nombreuses applications comme additif

## Propriétés physiques

- Densité 1,265
- Point de fusion 17,8 °C
- Point d'ébullition 290,0 °C
- Solubilité dans l'eau infiniment soluble
- Viscosité 2,374 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 2,472 E-20 exp (10506/RT) Pa.s
- Tension superficielle 65,28 mN/m

## Caractéristiques chimiques

Fonction alcool (groupe 4)

Estérification par les acides minéraux ou organiques avec formation d'eau. Les oxydants transforment les alcools en aldéhydes et cétones, réaction exothermique

Réagit avec les métaux réducteurs et les hydrures métalliques avec formation d'hydrogène, risque d'inflammation et d'explosion.

## Inflammation

- Point éclair 199 °C
- Température d'autoinflammation 370 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité
- Limite supérieure d'inflammabilité
- Densité de la vapeur 3,1
- Indice d'évaporation

## Combustion

- Stoechiométrie 3,5 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion 1659 kJ/mole
- PCS 18015 kJ/kg
- PCI 16248 kJ/kg
- T99 598°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 611°C - 17,78 Log t
- T99.99 627°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air
- Limite supérieure dans l'air

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide) 2,257 J/g/°C
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)  $9,148E-2+4,824E-3T+-3,43E-6T^2+1,018E-9T^3$  J/g/K
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 1,251 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation 76,1 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion 18,5 kJ/mole
- Enthalpie de formation -665,3 (l) kJ/mole
- Tension de vapeur 1,31 E2 Pa à 125,5 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = - 0,05223 * 76086 /T + 10,0165$

### Sécurité

Peu inflammable

### Stockage

Eloigner des produits oxydants

# Heptane



M = 100,21 (9,98 mole/kg)

C : 83,90%

H : 16,10%

Liquide incolore  
Solvant

## Propriétés physiques

- Densité 0,680
- Point de fusion -90,6 °C
- Point d'ébullition 98,4 °C
- Solubilité dans l'eau insoluble
- Azéotrope avec l'eau 12,9% d'eau Eb = 79,2°C
- Viscosité 0,409 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 1,324 E-5 exp (8361/RT) Pa.s
- Tension superficielle 20,14 mN/m

## Caractéristiques chimiques

Hydrocarbure saturé (groupe 29)

Composé assez inerte chimiquement. Peut toutefois subir l'action d'oxydants forts avec formation de gaz carbonique et dégagement de chaleur

## Inflammation

- Point éclair -5 °C
- Température d'autoinflammation 204 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité 1,05 % dans l'air
- Limite supérieure d'inflammabilité 6,7 % dans l'air
- Densité de la vapeur 3,5
- Indice d'évaporation

## Combustion

- Stoechiométrie 11 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion 4817 kJ/mole
- PCS 48069 kJ/kg
- PCI 44821 kJ/kg
- T99 497°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 504°C - 17,78 Log t
- T99.99 508°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques  $k = 9,3 E4 \exp (-880/T)$

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air 1 %
- Limite supérieure dans l'air 6 %

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide) 1,526 J/g/°C
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)  $-5,135E-2+6,748E-3T-3,643E-6T^2+7,642E-10T^3$  J/g/K
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 1,656 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation 31,77 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion 14,1 kJ/mole
- Enthalpie de formation -187,6 kJ/mole
- Tension de vapeur 53 E2 Pa à 22 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = -0,05223 * 36976 / T + 8,1167$

### Sécurité

Extrêmement inflammable

Valeur limite de la concentration dans l'air : 400 ppm

### Stockage

Conserver dans un endroit isolé, bien ventilé à l'abri de la chaleur

Isoler des produits oxydants

Local antidéflagrant



## *Hydrate de chloral*



M = 165,39 (6,05 mole/kg)

C : 14,52%

H : 1,83%

O : 19,35%

Cl : 64,30%

Solide incolore (tablettes), odeur aromatique très pénétrante  
Fabrication du DDT

### Propriétés physiques

- Densité 1,91
- Point de fusion 57 °C
- Point d'ébullition 98 °C
- Solubilité dans l'eau 8300 g/l
- Viscosité
- Tension superficielle

### Caractéristiques chimiques

Aldéhyde halogéné (groupe 5 et 17)

Bien que sous forme hydratée, le chloral possède la réactivité des aldéhydes. Nombreuses réactions de condensation catalysées par les acides ou les bases avec formation d'eau et de produits lourds, réactions exothermiques.

Le chloral réagit avec tous les oxydants pour conduire à la formation de l'acide trichloracétique

### Inflammation

- Point éclair
- Température d'autoinflammation
- Limite inférieure d'inflammabilité
- Limite supérieure d'inflammabilité
- Densité de la vapeur
- Indice d'évaporation

### Combustion

- Stoechiométrie 1,75 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion
- PCS
- PCI
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air
- Limite supérieure dans l'air

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide)
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C
- Chaleur latente de vaporisation
- Chaleur latente de fusion
- Enthalpie de formation -552,6 (s) kJ/mole
- Tension de vapeur 13,1 E2 Pa à 19,5 °C (sublimation)

### Sécurité

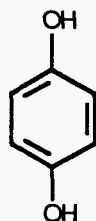
Substance hypnotique avec accoutumance  
Vapeurs irritantes pour les muqueuses oculaires et respiratoires

### Stockage

Conserver dans un endroit isolé, bien ventilé à l'abri de la chaleur

## Hydroquinone

C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>O<sub>2</sub>



M = 110,11 (9,08 mole/kg)

C : 65,45%

H : 5,49%

O : 29,06%

Solide

Agent de développement photographique, antioxydant

### Propriétés physiques

- Densité 1,332
- Point de fusion 170 °C
- Point d'ébullition 285 °C
- Solubilité dans l'eau 71 g/l
- Viscosité
- Tension superficielle

### Caractéristiques chimiques

Diphénol (groupe 31)

Réactions acides, forme des sels avec les bases fortes

Réaction facile avec tous les oxydants et formation de quinone.

Inhibiteur des réactions radicalaires

### Inflammation

- Point éclair 165 °C
- Température d'autoinflammation 515 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité
- Limite supérieure d'inflammabilité
- Densité de la vapeur 3,81
- Indice d'évaporation

### Combustion

- Stoechiométrie 6,5 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion 2858 kJ/mole
- PCS 25956 kJ/kg
- PCI 24848 kJ/kg
- T99 664°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 679°C - 17,78 Log t
- T99.99 692°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air
- Limite supérieure dans l'air

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide)
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C
- Chaleur latente de vaporisation
- Chaleur latente de fusion
- Enthalpie de formation -366,0 (s) kJ/mole
- Tension de vapeur 1,3 E2 Pa à 132,4 °C (sublimation)
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = - 0,05223 * 78366 /T + 10,3101$

### Sécurité

Peu inflammable

Le contact provoque des brûlures graves

Risque d'intoxication par inhalation ou absorption cutanée

### Stockage

Conserver en plein air ou dans un local bien ventilé

Eloigner des produits oxydants ou combustibles

Protéger des chocs

## Iodure de méthyle

CH<sub>3</sub>I

CH<sub>3</sub>I

M = 141,94 (7,05 mole/kg)

C : 8,46%

H : 2,13%

I : 89,41%

Liquide incolore, vire au brun par exposition à la lumière  
Agent d'alkylation, utilisé en microscopie (indice de réfraction élevé), test de la pyridine

### Propriétés physiques

- Densité 2,265
- Point de fusion -66,5 °C
- Point d'ébullition 42,4 °C
- Solubilité dans l'eau 20 g/l
- Viscosité 0,498 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 4,138 E-5 exp (6064/RT) Pa.s
- Tension superficielle 31,00 mN/m

### Caractéristiques chimiques

Fonction dérivé halogéné (groupe 17)

L'action prolongée de l'eau conduit à la formation de méthanol et d'acide iodhydrique.

Réagit avec les amines et les autres composés alkylables.

Se décompose en présence de lumière avec formation d'iode

### Inflammation

- Point éclair
- Température d'autoinflammation
- Limite inférieure d'inflammabilité
- Limite supérieure d'inflammabilité
- Densité de la vapeur
- Indice d'évaporation

### Combustion

- Stoechiométrie 1,75 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion 814 kJ/mole
- PCS 5735 kJ/kg
- PCI 5305 kJ/kg
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air
- Limite supérieure dans l'air

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide)
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)  $7,616E-2+9,786E-4T+-7,334E-7T^2+2,456E-10T^3$  J/g/K
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 0,309 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation 20,0 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion
- Enthalpie de formation 14,7 kJ/mole
- Tension de vapeur 526 E2 Pa à 25,3 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = - 0,05223 * 29402 /T + 7,7598$

### Sécurité

Toxique

L'exposition massive aux vapeurs peut causer des oedèmes pulmonaires

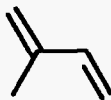
Le contact prolongé avec le liquide provoque des brûlures

### Stockage

Conserver dans un endroit bien ventilé à l'abri de la chaleur

Protéger de la lumière

C<sub>5</sub>H<sub>8</sub>



M = 68,12 (14,68 mole/kg)

C : 88,16%

H : 11,84%

Liquide incolore

Monomère dans la fabrication du caoutchouc synthétique, copolymère pour certains élastomères

## Propriétés physiques

- Densité 0,676
- Point de fusion -146,0 °C
- Point d'ébullition 34,1 °C
- Solubilité dans l'eau insoluble
- Azéotrope avec l'eau 0,14% d'eau Eb = 32,4°C
- Viscosité 0,384 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 8,290 E-15 exp (59857/RT) Pa.s
- Tension superficielle

## Caractéristiques chimiques

Diène conjugué (groupe 28)

Se dimérise très facilement pour donner le dipentène

Réagit facilement avec les composés insaturés (acrylates, acroleine, acrylonitrile, ...). Réaction faiblement exothermique qui conduit à des produits plus lourds

Se polymérise seul ou avec d'autres composés insaturés pour donner les élastomères, réactions exothermiques accélérées par la chaleur ou la lumière

## Inflammation

- Point éclair -54 °C
- Température d'autoinflammation 395 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité 1,5 % dans l'air
- Limite supérieure d'inflammabilité 8,9 % dans l'air
- Densité de la vapeur 2,4
- Indice d'évaporation

## Combustion

- Stoechiométrie 7 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion 3159 kJ/mole
- PCS 46374 kJ/kg
- PCI 43985 kJ/kg
- T99 621°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 631°C - 17,78 Log t
- T99.99 639°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air
- Limite supérieure dans l'air

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide)
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)  $-5,009E-2+6,731E-3T-4,899E-6T^2+1,468E-9T^3$  J/g/K
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 1,560 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation 28,9 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion 4,79 kJ/mole
- Enthalpie de formation 75,5 kJ/mole
- Tension de vapeur 526 E2 Pa à 15,4 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = -0,05223 * 28864 /T + 7,8459$

### Sécurité

Très inflammable

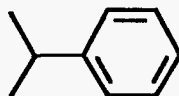
### Stockage

Conserver dans un endroit isolé, bien ventilé à l'abri de la chaleur  
Isoler des produits oxydants  
Local antidéflagrant



## Isopropylbenzène

C<sub>9</sub>H<sub>12</sub>



M = 120,20 (8,32 mole/kg)

C : 89,94%

H : 10,06%

Liquide incolore, odeur aromatique  
Fabrication du phénol

### Propriétés physiques

- Densité 0,858
- Point de fusion -96,0 °C
- Point d'ébullition 152,4 °C
- Solubilité dans l'eau insoluble
- Azéotrope avec l'eau 43,8% d'eau Eb = 95°C
- Viscosité 0,780 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 1,342 E-5 exp (9901/RT) Pa.s
- Tension superficielle 30,32 mN/m

### Caractéristiques chimiques

Carbure aromatique (groupe 16)

Composé stable. Les oxydants puissants peuvent conduire à l'acide benzoïque

### Inflammation

- Point éclair 36 °C
- Température d'autoinflammation 424 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité 0,9 % dans l'air
- Limite supérieure d'inflammabilité 6,5 % dans l'air
- Densité de la vapeur 4,1
- Indice d'évaporation

### Combustion

- Stoechiométrie 12 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion 5216 kJ/mole
- PCS 43394 kJ/kg
- PCI 41365 kJ/kg
- T99 634°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 643°C - 17,78 Log t
- T99.99 650°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air 0,9 %
- Limite supérieure dans l'air 6,5 %

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide)
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)  $-3,275E-1+6,524E-3T+-4,232E-6T^2+1,074E-9T^3$  J/g/K
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 1,269 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation 45,13 kJ/mole à 25 °C
- Chaleur latente de fusion 7,78 kJ/mole
- Enthalpie de formation 3,9 kJ/mole
- Tension de vapeur 6,58 E2 Pa à 26,8 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = - 0,05223 * 43229 /T + 8,2321$

### Sécurité

Inflammable

Le contact avec le liquide provoque des irritations (peau et yeux)

Les vapeurs sont irritantes pour les muqueuses respiratoires et les yeux

Effet narcotique à haute concentration

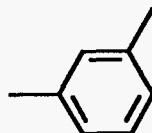
### Stockage

Conserver dans un endroit bien ventilé

Eloigner des produits oxydants

Local antidéflagrant

C<sub>8</sub>H<sub>10</sub>



M = 106,17 (9,42 mole/kg)

C : 90,51%

H : 9,49%

Liquide incolore

Solvant, produit de départ dans la fabrication de l'acide isophtalique

### Propriétés physiques

- Densité 0,860
- Point de fusion -47,9 °C
- Point d'ébullition 139,1 °C
- Solubilité dans l'eau insoluble
- Azéotrope avec l'eau 35,8% d'eau Eb = 92°C
- Viscosité 0,618 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 1,705 E-5 exp (8753/RT) Pa.s
- Tension superficielle 29,02 mN/m

### Caractéristiques chimiques

Carbure aromatique (groupe 16)

Composé stable. Les oxydants puissants peuvent conduire à l'acide isophtalique

### Inflammation

- Point éclair 27 °C
- Température d'autoinflammation 525 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité 1,1 % dans l'air
- Limite supérieure d'inflammabilité 7 % dans l'air
- Densité de la vapeur 3,7
- Indice d'évaporation 13,5

### Combustion

- Stoechiométrie 10,5 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion 4552 kJ/mole
- PCS 42875 kJ/kg
- PCI 40960 kJ/kg
- T99 692°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 702°C - 17,78 Log t
- T99.99 709°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air 1,1 %
- Limite supérieure dans l'air 7,0 %

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide) 1,618 J/g/°C
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)  $-2,747E-1+5,931E-3T+3,529E-6T^2+7,985E-10T^3$  J/g/K
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 1,200 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation 35,66 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion 11,6 kJ/mole
- Enthalpie de formation 17,2 kJ/mole
- Tension de vapeur 6,7 E2 Pa à 16,8 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = -0,05223 * 41426 /T + 8,1673$
- Température critique 346 °C
- Pression critique 35 E5 Pa

### Sécurité

Inflammable

Vapeurs irritantes pour la peau et les muqueuses respiratoires

Le contact avec le liquide provoque des irritations

Valeur limite de la concentration dans l'air : 100 ppm

### Stockage

Conserver dans un endroit isolé, bien ventilé à l'abri de la chaleur

Isoler des produits oxydants

Local antidéflagrant

## Méthylisobutylcétone

C<sub>6</sub>H<sub>12</sub>O



M = 100,16 (9,98 mole/kg)

C : 71,95%

H : 12,08%

O : 15,97%

Liquide incolore, odeur agréable  
Solvant industriel (laques, vernis, ...)

### Propriétés physiques

- Densité 0,796
- Point de fusion -84 °C
- Point d'ébullition 116,2 °C
- Solubilité dans l'eau 19 g/l
- Viscosité 0,613 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 1,484 E-5 exp (9068/RT) Pa.s
- Tension superficielle 24,5 mN/m

### Caractéristiques chimiques

Fonction cétone (groupe 19)

Réactions de condensation catalysées par les acides ou les bases avec production d'eau et de sous-produits de masse moléculaire élevée. Réactions faiblement exothermiques.

Les acides minéraux oxydants peuvent à haute température couper la molécule avec production d'acide carboxylique et de gaz carbonique.

### Inflammation

- Point éclair 16 °C
- Température d'autoinflammation 448 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité 1,2 % dans l'air
- Limite supérieure d'inflammabilité 8 % dans l'air
- Densité de la vapeur 3,45
- Indice d'évaporation 5,6

### Combustion

- Stoechiométrie 8,5 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion
- PCS
- PCI
- T99 610°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 614°C - 17,78 Log t
- T99.99 621°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air 1,4 %
- Limite supérieure dans l'air 7,5 %

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide) 1,919 J/g/°C
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)  $3,888E-2+5,647E-3T-3,313E-6T^2+8,218E-10T^3$  J/g/K
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 1,449 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation 34,49 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion
- Enthalpie de formation
- Tension de vapeur 6,7 E2 Pa à 19,7 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = - 0,05223 * 48809 /T + 9,4079$

### Sécurité

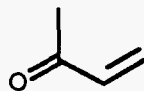
Très inflammable  
Vapeurs irritantes  
Effets narcotiques à haute concentration  
Valeur limite de la concentration dans l'air : 100 ppm

### Stockage

Récipients métalliques  
Eloigner des produits oxydants et des sources de chaleur  
Local antidéflagrant

## Méthylvinylcétone

C<sub>4</sub>H<sub>6</sub>O



M = 70,09 (14,27 mole/kg)

C : 68,55%

H : 8,63%

O : 22,83%

Liquide incolore, odeur âcre et irritante  
Intermédiaire de synthèse

### Propriétés physiques

- Densité 0,863
- Point de fusion
- Point d'ébullition 81,4 °C
- Solubilité dans l'eau soluble
- Azéotrope avec l'eau 12% d'eau Eb = 75°C
- Viscosité
- Tension superficielle

### Caractéristiques chimiques

Fonction cétone insaturée (groupe 28)

Cétone très réactive, donne de nombreuses réactions de condensations catalysées par les acides ou par les bases avec formation de composés lourds et colorés

Se condense sur elle-même très facilement (polymérisation), souvent stabilisée avec de l'eau ou de l'hydroquinone

### Inflammation

- Point éclair -7 °C
- Température d'autoinflammation 491 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité 2,1 % dans l'air
- Limite supérieure d'inflammabilité 15,6 % dans l'air
- Densité de la vapeur 2,4
- Indice d'évaporation

### Combustion

- Stoechiométrie 5 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion
- PCS
- PCI
- T99 663°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 674°C - 17,78 Log t
- T99.99 685°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air
- Limite supérieure dans l'air

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide)
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C
- Chaleur latente de vaporisation
- Chaleur latente de fusion
- Enthalpie de formation
- Tension de vapeur

### Sécurité

Très inflammable

Le liquide est facilement absorbée par la peau et provoque un empoisonnement général de l'organisme

Les vapeurs sont irritantes pour les muqueuses et les voies respiratoires

### Stockage

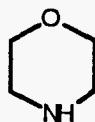
Conserver dans un endroit isolé, bien ventilé à l'abri de la chaleur

Isoler des produits oxydants

Local antidéflagrant



C<sub>4</sub>H<sub>9</sub>NO



M = 87,12 (11,48 mole/kg)

C : 55,15%

H : 10,41%

O : 18,36%

N : 16,08%

Liquide hygroscopique, odeur d'amine  
Intermédiaire de synthèse, tensio-actif (sous forme de sels)

## Propriétés physiques

- Densité 1,007
- Point de fusion -4,9 °C
- Point d'ébullition 128,9 °C
- Solubilité dans l'eau soluble
- Viscosité 2,350 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 1,789 E-6 exp (17501/RT) Pa.s
- Tension superficielle 37,63 mN/m

## Caractéristiques chimiques

Fonction amine (groupe 7)

Réagit rapidement avec tous les acides (formation de sels). Les oxydants conduisent à des composés fortement colorés avec dégagement possible d'oxydes d'azote, réactions exothermiques.  
Réactions de condensation avec les aldéhydes et les cétones (formation d'eau), réactions catalysées par les acides.  
Les amines subissent des réactions d'alkylation avec les dérivés halogénés. Elles réagissent avec les hydrures et les métaux alcalins avec formation d'hydrogène.

## Inflammation

- Point éclair 37 °C
- Température d'autoinflammation 290 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité 1,4 % dans l'air
- Limite supérieure d'inflammabilité 11,2 % dans l'air
- Densité de la vapeur 3
- Indice d'évaporation 26

## Combustion

- Stoechiométrie 5,75 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion
- PCS
- PCI
- T99 597°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 613°C - 17,78 Log t
- T99.99 626°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air
- Limite supérieure dans l'air

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide)
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)  $-4,913E-1+6,185E-3T+-3,06E-6T^2+4,82E-10T^3$  J/g/K
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 1,093 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation 36,7 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion
- Enthalpie de formation
- Tension de vapeur

### Sécurité

Très inflammable

A forte température, le contact avec les produits oxydants peut provoquer des réactions violentes

Les vapeurs sont irritantes pour les yeux, les muqueuses respiratoires et la peau

### Stockage

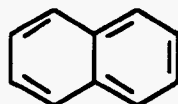
Conserver dans un endroit isolé, bien ventilé à l'abri de la chaleur

Isoler des produits oxydants

Local antidéflagrant

## Naphtalène

C<sub>10</sub>H<sub>8</sub>



M = 128,17 (7,80 mole/kg)

C : 93,71%

H : 6,29%

Solide (tablettes), odeur caractéristique (boules de naphthaline)

Produit de départ dans la fabrication de nombreux composés aromatiques

### Propriétés physiques

- Densité 1,18
- Point de fusion 80,3 °C
- Point d'ébullition 217,9 °C
- Solubilité dans l'eau insoluble
- Azéotrope avec l'eau 84% d'eau Eb = 98,8°C
- Viscosité 0,730 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 3,294 E-6 exp (16770/RT) Pa.s
- Tension superficielle 32,88 mN/m

### Caractéristiques chimiques

Carbure aromatique (groupe 16)

Le Naphtalène est très stable, il peut néanmoins réagir avec les oxydants puissants (réaction exothermique)

### Inflammation

- Point éclair 78 °C
- Température d'autoinflammation 525 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité 0,9 % dans l'air
- Limite supérieure d'inflammabilité 5,9 % dans l'air
- Densité de la vapeur 4,4
- Indice d'évaporation

### Combustion

- Stoechiométrie 12 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion 5156 kJ/mole
- PCS 40228 kJ/kg
- PCI 38959 kJ/kg
- T99 654°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 659°C - 17,78 Log t
- T99.99 664°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air 0,88 %
- Limite supérieure dans l'air 5,9 %

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide)
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)  $-5,368E-1+6,631E-3T+-5,076E-6T^2+1,546E-9T^3$  J/g/K
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 1,029 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation 71,4 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion 18,8 kJ/mole
- Enthalpie de formation 66,7 (s) kJ/mole
- Tension de vapeur 7,2 E2 Pa à 20 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = - 0,05223 * 51498 /T + 8,4136$

### Sécurité

Inflammable

Chauffé le naphthalène émet des vapeurs inflammables

Irritant pour la peau, les yeux et les muqueuses respiratoires

Valeur limite de la concentration dans l'air : 10 ppm

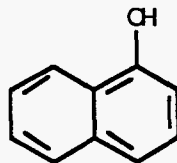
### Stockage

Conserver dans un endroit bien ventilé

Protéger des chocs

## ***$\alpha$ -Naphtol***

$C_{10}H_8O$



$M = 144,17$  (6,94 mole/kg)

C : 83,31%

H : 5,59%

O : 11,10%

Solide (prismes), odeur phénolique

Intermédiaire de synthèse (parfumerie et colorants), utilisation en microscopie

### Propriétés physiques

- Densité 1,09 (100°C)
- Point de fusion 96 °C
- Point d'ébullition 288 °C
- Solubilité dans l'eau légèrement soluble
- Viscosité
- Tension superficielle

### Caractéristiques chimiques

Phénol (groupe 31)

Réactions acides, forme des sels avec les bases fortes

Réaction facile avec tous les oxydants et formation de composés lourds fortement colorés (quinones et dérivés)

### Inflammation

- Point éclair
- Température d'autoinflammation
- Limite inférieure d'inflammabilité
- Limite supérieure d'inflammabilité
- Densité de la vapeur
- Indice d'évaporation

### Combustion

- Stoechiométrie 11,5 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion 4955 kJ/mole
- PCS 34369 kJ/kg
- PCI 33241 kJ/kg
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air
- Limite supérieure dans l'air

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide)
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C
- Chaleur latente de vaporisation
- Chaleur latente de fusion
- Enthalpie de formation -125,0 kJ/mole
- Tension de vapeur 1,31 E2 Pa à 94 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = - 0,05223 * 59423 /T + 8,4773$

### Sécurité

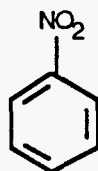
Peu inflammable  
Le contact provoque des brûlures graves

### Stockage

Conserver en plein air ou dans un local bien ventilé  
Eloigner des produits oxydants ou combustibles  
Protéger des chocs

## Nitrobenzène

C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>NO<sub>2</sub>



M = 123,11 (8,12 mole/kg)

C : 58,54%

H : 4,09%

O : 25,99%

N : 11,38%

Liquide huileux, jaune pâle, odeur d'amande  
Fabrication de l'aniline, solvant

### Propriétés physiques

- Densité 1,198
- Point de fusion 5,7 °C
- Point d'ébullition 210,8 °C
- Solubilité dans l'eau 2 g/l
- Viscosité 2,029 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 4,719 E-6 exp (14780/RT) Pa.s
- Tension superficielle 41,71 mN/m

### Caractéristiques chimiques

Dérivé nitré (groupe 27)

Les oxydants (et notamment l'acide nitrique) peuvent décomposer les composés nitrés, cette décomposition peut devenir explosive et dégager des oxydes d'azote.

### Inflammation

- Point éclair 87 °C
- Température d'autoinflammation 480 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité 1,8 % dans l'air
- Limite supérieure d'inflammabilité
- Densité de la vapeur 4,24
- Indice d'évaporation

### Combustion

- Stoechiométrie 6,25 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion 3090 kJ/mole
- PCS 25100 kJ/kg
- PCI 24274 kJ/kg
- T99 637°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 652°C - 17,78 Log t
- T99.99 665°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air 1,8 %
- Limite supérieure dans l'air 40 %

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide) 1,417 J/g/°C
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C
- Chaleur latente de vaporisation 55,01 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion
- Enthalpie de formation
- Tension de vapeur 1,3 E2 Pa à 44,4 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = - 0,05223 * 50898 /T + 8,4167$

### Sécurité

Inflammable

Vapeurs très toxiques

Risques d'empoisonnement par inhalation, ingestion et par absorption cutanée

Valeur limite de la concentration dans l'air : 1 ppm

### Stockage

Conserver dans un endroit bien ventilé

Eloigner des produits oxydants et des sources de chaleur

Protéger des chocs

Local antidéflagrant





M = 75,07 (13,32 mole/kg)

C : 32,00%

H : 6,71%

O : 42,63%

N : 18,66%

Liquide huileux, odeur agréable  
Solvant en synthèse organique, comburant liquide

## Propriétés physiques

- Densité 1,045
- Point de fusion  $-89,5\text{ }^{\circ}\text{C}$
- Point d'ébullition  $114,1\text{ }^{\circ}\text{C}$
- Solubilité dans l'eau 45 g/l
- Azéotrope avec l'eau 28,5% d'eau Eb =  $87,22\text{ }^{\circ}\text{C}$
- Viscosité  $0,661\text{ E-3 Pa.s}$
- Tension superficielle 32,66 mN/m

## Caractéristiques chimiques

Dérivé nitré (groupe 27)

Les oxydants (et notamment l'acide nitrique) peuvent décomposer les composés nitrés, cette décomposition peut devenir explosive et dégager des oxydes d'azote.

Les dérivés nitrés aliphatiques peuvent réagir avec les bases pour donner des sels (explosifs quand ils sont secs)

Condensation possible avec les dérivés carbonyles (aldéhydes et cétones), réactions exothermiques catalysées par les bases

## Inflammation

- Point éclair  $27\text{ }^{\circ}\text{C}$
- Température d'autoinflammation  $414\text{ }^{\circ}\text{C}$
- Limite inférieure d'inflammabilité 3,4 % dans l'air
- Limite supérieure d'inflammabilité % dans l'air
- Densité de la vapeur 2,6
- Indice d'évaporation

## Combustion

- Stoechiométrie 2,25 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion 1347 kJ/mole
- PCS 17943 kJ/kg
- PCI 16590 kJ/kg
- T99  $678\text{ }^{\circ}\text{C} - 18,17\text{ Log } t$  (t en sec.)
- T99.9  $698\text{ }^{\circ}\text{C} - 17,78\text{ Log } t$
- T99.99  $715\text{ }^{\circ}\text{C} - 17,39\text{ Log } t$
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air 3,4 %
- Limite supérieure dans l'air

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide)
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 1,039 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation
- Chaleur latente de fusion
- Enthalpie de formation -125,4 (l) kJ/mole
- Tension de vapeur 26,3 E2 Pa à 24,8 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = - 0,05223 \cdot 39864 /T + 8,2821$

### Sécurité

Très inflammable

Peut se décomposer avec explosion et libération de produits toxiques au contact de la chaleur

Moyennement toxique

### Stockage

Eloigner des produits oxydants et des sources de chaleur

Protéger des chocs

Local antidéflagrant



M = 61,04 (16,38 mole/kg)

C : 19,67%

H : 4,95%

O : 52,42%

N : 22,95%

Liquide huileux, odeur désagréable

Industrie des revêtements, réactif en synthèse organique, comburant liquide

## Propriétés physiques

- Densité 1,131
- Point de fusion -28,6 °C
- Point d'ébullition 101,2 °C
- Solubilité dans l'eau 95 g/l
- Azéotrope avec l'eau 23,6% d'eau Eb = 83,6°C
- Viscosité 0,651 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 1,881 E-5 exp (8638/RT) Pa.s
- Tension superficielle 37,48 mN/m

## Caractéristiques chimiques

Dérivé nitré (groupe 27)

Les oxydants (et notamment l'acide nitrique) peuvent décomposer les composés nitrés, cette décomposition peut devenir explosive et dégager des oxydes d'azote.

Les dérivés nitrés aliphatiques peuvent réagir avec les bases pour donner des sels (explosifs quand ils sont secs)

Condensation possible avec les dérivés carbonylés (aldéhydes et cétones), réactions exothermiques catalysées par les bases

## Inflammation

- Point éclair 35 °C
- Température d'autoinflammation 415 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité 7,3 % dans l'air
- Limite supérieure d'inflammabilité
- Densité de la vapeur 2,1
- Indice d'évaporation 63

## Combustion

- Stoechiométrie 0,75 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion 708 kJ/mole
- PCS 11599 kJ/kg
- PCI 10600 kJ/kg
- T99 711°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 733°C - 17,78 Log t
- T99.99 753°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air 7,3 %
- Limite supérieure dans l'air

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide)
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 0,934 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation 33,99 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion 9,70 kJ/mole
- Enthalpie de formation -111,6 kJ/mole
- Tension de vapeur 52,6 E2 Pa à 27,5 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = - 0,05223 * 38524 /T + 8,2821$

### Sécurité

Facilement inflammable

Peut se décomposer avec explosion et libération de produits toxiques au contact de la chaleur

Moyennement toxique

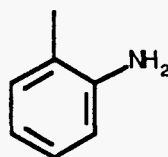
### Stockage

Eloigner des produits oxydants et des sources de chaleur

Protéger des chocs

Local antidéflagrant

C<sub>7</sub>H<sub>9</sub>N



M = 107,16 (9,33 mole/kg)

C : 78,46%

H : 8,47%

N : 13,07%

Liquide jaune clair, vire au rouge brun par exposition à l'air et à la lumière  
Industrie des colorants

### Propriétés physiques

- Densité 0,998
- Point de fusion -23,7 °C
- Point d'ébullition 200,2 °C
- Solubilité dans l'eau légèrement soluble
- Viscosité 4,512 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 9,019 E-7 exp (20761/RT) Pa.s
- Tension superficielle 40,68 mN/m

### Caractéristiques chimiques

Fonction amine (groupe 7)

Réagit rapidement avec tous les acides (formation de sels). Les oxydants conduisent à des composés fortement colorés avec dégagement possible d'oxydes d'azote, réactions exothermiques.

Réactions de condensation avec les aldéhydes et les cétones (formation d'eau), réactions catalysées par les acides.

Les amines subissent des réactions d'alkylation avec les dérivés halogénés. Elles réagissent avec les hydrures et les métaux alcalins avec formation d'hydrogène.

### Inflammation

- Point éclair 85 °C
- Température d'autoinflammation 480 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité
- Limite supérieure d'inflammabilité
- Densité de la vapeur 3,69
- Indice d'évaporation

### Combustion

- Stoechiométrie 9,25 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion 4031 kJ/mole
- PCS 37617 kJ/kg
- PCI 35908 kJ/kg
- T99 722°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 739°C - 17,78 Log t
- T99.99 751°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air 1,5 %
- Limite supérieure dans l'air

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide)
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)  $-1,492E-1+5,301E-3T-2,83E-6T^2+4,333E-10T^3$  J/g/K
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 1,191 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation 50,2 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion
- Enthalpie de formation 67,5 kJ/mole
- Tension de vapeur 133 E2 Pa à 44 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = - 0,05223 * 52969 /T + 8,7864$

### Sécurité

Inflammable

Risques d'intoxication grave par ingestion, inhalation des vapeurs ou par absorption par la peau

Valeur limite de la concentration dans l'air : 2 ppm

### Stockage

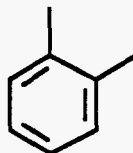
Récipients métalliques

Eloigner des produits oxydants et des sources de chaleur

Protéger des chocs

Local antidéflagrant

C<sub>8</sub>H<sub>10</sub>



M = 106,17 (9,42 mole/kg)

C : 90,51%

H : 9,49%

Liquide incolore

Solvant, produit de départ pour les dérivés de l'acide phtalique

### Propriétés physiques

- Densité 0,876
- Point de fusion -25,2 °C
- Point d'ébullition 144,4 °C
- Solubilité dans l'eau insoluble
- Viscosité 0,812 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 1,471 E-5 exp (9776/RT) Pa.s
- Tension superficielle 30,31 mN/m

### Caractéristiques chimiques

Carbure aromatique (groupe 16)

Composé stable. Les oxydants puissants peuvent conduire à l'acide phtalique

### Inflammation

- Point éclair 32 °C
- Température d'autoinflammation 460 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité 1 % dans l'air
- Limite supérieure d'inflammabilité 7 % dans l'air
- Densité de la vapeur 3,7
- Indice d'évaporation 13,5

### Combustion

- Stoechiométrie 10,5 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion 4553 kJ/mole
- PCS 42884 kJ/kg
- PCI 40969 kJ/kg
- T99 657°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 668°C - 17,78 Log t
- T99.99 675°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air 1 %
- Limite supérieure dans l'air 6 %

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide) 1,718 J/g/°C
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)  $-1,493E-1+5,616E-3T+3,243E-6T^2+7,091E-10T^3$  J/g/K
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 1,255 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation 36,24 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion 13,6 kJ/mole
- Enthalpie de formation 19,0 kJ/mole
- Tension de vapeur 6,7 E2 Pa à 20,2 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = -0,05223 * 41820 /T + 8,1478$

### Sécurité

Inflammable

Les vapeurs sont irritantes pour la peau et les muqueuses respiratoires

Le contact avec le liquide provoque des irritations

Valeur limite de la concentration dans l'air : 100 ppm

### Stockage

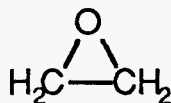
Conserver dans un endroit isolé, bien ventilé à l'abri de la chaleur

Isoler des produits oxydants

Local antidéflagrant



C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>O



M = 44,05 (22,70 mole/kg)

C : 54,53%  
H : 9,15%  
O : 36,32%

Gaz incolore  
Intermédiaire de synthèse, tensio-actifs non ioniques, fongicide

### Propriétés physiques

- Densité 0,882 (liquide à 1,5 E5 Pa)
- Point de fusion -111 °C
- Point d'ébullition 10,7 °C
- Solubilité dans l'eau soluble
- Viscosité 0,310 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 1,775 E-5 exp (6505/RT) Pa.s
- Tension superficielle 35,98 mN/m

### Caractéristiques chimiques

Epoxyde (groupe 34)  
Réagit avec tous les nucléophiles (eau, alcools, amines, halogénures, ...). Réactions exothermiques avec ouverture du cycle à 3. Cette réaction peut conduire à des oligomères polyéthoxylés.  
Très sensible aux acides et aux bases.

### Inflammation

- Point éclair -17,8 °C
- Température d'autoinflammation 425 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité 3,0 % dans l'air
- Limite supérieure d'inflammabilité 100 % dans l'air
- Densité de la vapeur 1,49
- Indice d'évaporation

### Combustion

- Stoechiométrie 2,5 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion 1306 kJ/mole
- PCS 29648 kJ/kg
- PCI 27802 kJ/kg
- T99 628°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 642°C - 17,78 Log t
- T99.99 652°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air 2,6 %
- Limite supérieure dans l'air 100 %

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide)
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)  $-1,707E-1+5,044E-3T+-2,851E-6T^2+5,884E-10T^3$  J/g/K
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 1,095 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation 25,54 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion 5,2 kJ/mole
- Enthalpie de formation -50,9 kJ/mole
- Tension de vapeur 658 E2 Pa à 0 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = - 0,05223 * 28697 /T + 8,2012$
- Température critique 195,8 °C
- Pression critique 70 E5 Pa

### Sécurité

Gaz ou liquide extrêmement inflammable

Vapeurs toxiques pour le système nerveux

Action narcotique à haute concentration

Le contact du liquide ou d'une solution d'oxyde d'éthylène peut occasionner des brûlures

Valeur limite de la concentration dans l'air : 10 ppm

### Stockage

Entreposer à l'abri de la chaleur dans un local bien ventilé

Eloigner des produits oxydants

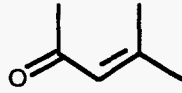
Eviter d'exposer les récipients à la lumière solaire

Local antidéflagrant

Recouvrir le sol de claies de bois

## Oxyde de mésityle

C<sub>8</sub>H<sub>10</sub>O



M = 98,15 (10,19 mole/kg)

C : 73,43%  
H : 10,27%  
O : 16,30%

Liquide huileux, odeur de miel  
Solvant (nitrocellulose, laques et gommes), fabrication de la méthylisobutylcétone

### Propriétés physiques

- Densité 0,859
- Point de fusion -41,5 °C
- Point d'ébullition 130 °C
- Solubilité dans l'eau 33 g/l
- Viscosité
- Tension superficielle

### Caractéristiques chimiques

Fonction cétone insaturée (groupe 28)  
Cétone très réactive, donne de nombreuses réactions de condensations catalysées par les acides ou par les bases avec formation de composés lourds et colorés

### Inflammation

- Point éclair 30 °C
- Température d'autoinflammation 344 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité 1,4 % dans l'air
- Limite supérieure d'inflammabilité 7,2 % dans l'air
- Densité de la vapeur 3,4
- Indice d'évaporation 16

### Combustion

- Stoechiométrie 8 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion 3539 kJ/mole
- PCS 36057 kJ/kg
- PCI 33985 kJ/kg
- T99 576°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 585°C - 17,78 Log t
- T99.99 595°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air
- Limite supérieure dans l'air

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide) 2,178 J/g/°C
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C
- Chaleur latente de vaporisation
- Chaleur latente de fusion
- Enthalpie de formation
- Tension de vapeur 13,1 E2 Pa à 26 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = - 0,05223 * 42283 /T + 8,3839$

### Sécurité

Très inflammable

Le liquide est facilement absorbée par la peau et provoque un empoisonnement général de l'organisme

Les vapeurs sont irritantes pour les muqueuses et les voies respiratoires

### Stockage

Conserver dans un endroit isolé, bien ventilé à l'abri de la chaleur

Isoler des produits oxydants

Local antidéflagrant

## Oxyde de propylène

C<sub>3</sub>H<sub>6</sub>O



M = 58,08 (17,22 mole/kg)

C : 62,04%

H : 10,41%

O : 27,55%

Liquide incolore étheré  
Intermédiaire de synthèse (polyéthers, polyurethanes), solvant

### Propriétés physiques

- Densité 0,859
- Point de fusion -112,1 °C
- Point d'ébullition 34,2 °C
- Solubilité dans l'eau 400 g/l
- Viscosité 0,330 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 1,702 E-5 exp (7225/RT) Pa.s
- Tension superficielle

### Caractéristiques chimiques

Epoxyde (groupe 34)

Réagit avec tous les nucléophiles (eau, alcools, amines, halogénures, ...). Réactions exothermiques avec ouverture du cycle à 3. Cette réaction peut conduire à des oligomères polyéthoxylés.  
Très sensible aux acides et aux bases.

### Inflammation

- Point éclair -37 °C
- Température d'autoinflammation 449 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité 2,3 % dans l'air
- Limite supérieure d'inflammabilité 37 % dans l'air
- Densité de la vapeur 2
- Indice d'évaporation

### Combustion

- Stoechiométrie 4 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion
- PCS
- PCI
- T99 633°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 645°C - 17,78 Log t
- T99.99 654°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air
- Limite supérieure dans l'air

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide)
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)  $-1,456E-1+5,608E-3T+3,425E-6T^2+8,304E-10T^3$  J/g/K
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 1,243 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation 27,35 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion
- Enthalpie de formation -94,7 kJ/mole
- Tension de vapeur 526 E2 Pa à 17,8 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = - 0,05223 * 30512 /T + 8,0933$

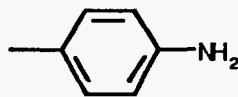
### Sécurité

Liquide extrêmement inflammable  
Vapeurs toxiques pour le système nerveux  
Action narcotique à haute concentration  
Le contact du liquide peut occasionner des brûlures

### Stockage

Entreposer à l'abri de la chaleur dans un local bien ventilé  
Eloigner des produits oxydants  
Eviter d'exposer les récipients à la lumière solaire  
Local antidéflagrant

C<sub>7</sub>H<sub>9</sub>N



M = 107,16 (9,33 mole/kg)

C : 78,46%

H : 8,47%

N : 13,07%

Solide (tablettes ou feuillets)

Industrie des colorants

### Propriétés physiques

- Densité 0,962
- Point de fusion 43,7 °C
- Point d'ébullition 200,6 °C
- Solubilité dans l'eau 7,4 g/l
- Viscosité 1,642 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 8,455 E-6 exp (14155/RT) Pa.s
- Tension superficielle 34,79 mN/m

### Caractéristiques chimiques

Fonction amine (groupe 7)

Réagit rapidement avec tous les acides (formation de sels). Les oxydants conduisent à des composés fortement colorés avec dégagement possible d'oxydes d'azote, réactions exothermiques.

Réactions de condensation avec les aldéhydes et les cétones (formation d'eau), réactions catalysées par les acides. Les amines subissent des réactions d'alkylation avec les dérivés halogénés. Elles réagissent avec les hydrures et les métaux alcalins avec formation d'hydrogène.

### Inflammation

- Point éclair
- Température d'autoinflammation 482 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité
- Limite supérieure d'inflammabilité
- Densité de la vapeur
- Indice d'évaporation

### Combustion

- Stoechiométrie 9,25 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion 4006 kJ/mole
- PCS 37383 kJ/kg
- PCI 35675 kJ/kg
- T99 723°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 740°C - 17,78 Log t
- T99.99 752°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air
- Limite supérieure dans l'air

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide)
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)  $-1,492E-1+5,301E-3T+2,83E-6T^2+4,333E-10T^3$  J/g/K
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 1,191 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation 50,6 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion 17,9 kJ/mole
- Enthalpie de formation
- Tension de vapeur 1,31 E2 Pa à 42 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = -0,05223 * 51987 / T + 8,6490$

### Sécurité

Inflammable

Risques d'intoxication grave par ingestion, inhalation des vapeurs ou par absorption par la peau

Valeur limite de la concentration dans l'air : 2 ppm

### Stockage

Récipients métalliques

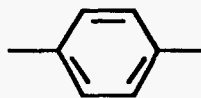
Eloigner des produits oxydants et des sources de chaleur

Protéger des chocs

Local antidéflagrant



C<sub>8</sub>H<sub>10</sub>



M = 106,17 (9,42 mole/kg)

C : 90,51%

H : 9,49%

Liquide incolore légèrement huileux  
Fabrication de l'acide téréphtalique

### Propriétés physiques

- Densité 0,857
- Point de fusion 13,3 °C
- Point d'ébullition 138,4 °C
- Solubilité dans l'eau insoluble
- Viscosité 0,645 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 1,612 E-5 exp (8992/RT) Pa.s
- Tension superficielle 28,55 mN/m

### Caractéristiques chimiques

Carbure aromatique (groupe 16)  
Composé stable. Les oxydants puissants peuvent conduire à l'acide téréphtalique

### Inflammation

- Point éclair 27 °C
- Température d'autoinflammation 525 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité 1,1 % dans l'air
- Limite supérieure d'inflammabilité 7 % dans l'air
- Densité de la vapeur 3,7
- Indice d'évaporation 13,5

### Combustion

- Stoechiométrie 10,5 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion 4553 kJ/mole
- PCS 42884 kJ/kg
- PCI 40969 kJ/kg
- T99 692°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 702°C - 17,78 Log t
- T99.99 709°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air 1,1 %
- Limite supérieure dans l'air 7 %

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide) 1,659 J/g/°C
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)  $-2,363E-1+5,691E-3T+-3,178E-6T^2+6,424E-10T^3$  J/g/K
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 1,194 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation 35,67 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion 17,1 kJ/mole
- Enthalpie de formation 17,9 kJ/mole
- Tension de vapeur 6,7 E2 Pa à 15,5 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = -0,05223 * 41031 / T + 8,1250$
- Température critique 345 °C
- Pression critique 34 E5 Pa

### Sécurité

Inflammable

Vapeurs irritantes pour la peau et les muqueuses respiratoires

Le contact avec le liquide provoque des irritations

Valeur limite de la concentration dans l'air : 100 ppm

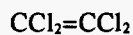
### Stockage

Conserver dans un endroit isolé, bien ventilé à l'abri de la chaleur

Isoler des produits oxydants

Local antidéflagrant

## Perchloréthylène



M = 165,82 (6,03 mole/kg)

C : 14,49%

Cl : 85,51%

Liquide incolore, odeur étherée  
Solvant (dégraissage)

### Propriétés physiques

- Densité 1,631
- Point de fusion -22 °C
- Point d'ébullition 121 °C
- Solubilité dans l'eau 0,1 g/l
- Azéotrope avec l'eau 17,2% d'eau Eb = 88,5°C
- Viscosité 0,902 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 4,675 E-5 exp (7214/RT) Pa.s
- Tension superficielle 32,86 mN/m

### Caractéristiques chimiques

Fonction dérivé halogéné (groupe 17)

En présence d'oxydant fort ou d'une température élevée, on peut constater la formation de chlore, d'acide chlorhydrique et de phosgène

### Inflammation

- Point éclair
- Température d'autoinflammation
- Limite inférieure d'inflammabilité
- Limite supérieure d'inflammabilité
- Densité de la vapeur 5,32
- Indice d'évaporation 8,1

### Combustion

- Stoechiométrie 2 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion
- PCS
- PCI
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air
- Limite supérieure dans l'air

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide)
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)  $2,772E-1+1,36E-3T+-1,383E-6T^2+5,043E-10T^3$  J/g/K
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 0,573 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation 34,68 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion
- Enthalpie de formation -12,5 (l) KJ/mole
- Tension de vapeur 18,7 E2 Pa à 20 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = - 0,05223 * 38649 /T + 8,0264$

### Sécurité

Liquide non inflammable

Se décompose avec production de dérivés toxiques au contact d'une flamme, de matières incandescentes ou d'une forte chaleur

Vapeurs irritantes pour la peau, les yeux et les muqueuses respiratoires

Effets narcotiques à forte concentration

Le contact du liquide provoque des irritations

L'absorption peut causer des intoxications graves

Valeur limite de la concentration dans l'air : 100 ppm

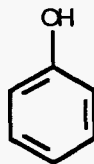
### Stockage

Conserver dans un endroit bien ventilé

Protéger de la chaleur et de la lumière solaire

Protéger des chocs

Eloigner des bases



M = 94,11 (10,62 mole/kg)

C : 76,57%

H : 6,43%

O : 17,00%

Solide incolore ou blanc, rougit par exposition à l'air et à la lumière, odeur caractéristique  
Grand intermédiaire de synthèse, désinfectant

### Propriétés physiques

- Densité 1,132
- Point de fusion 40,9 °C
- Point d'ébullition 181,8 °C
- Solubilité dans l'eau 67 g/l
- Azéotrope avec l'eau 90,8% d'eau Eb = 99,52°C
- Viscosité 3,620 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 1,299 E-7 exp (27499/RT) Pa.s
- Tension superficielle 39,27 mN/m

### Caractéristiques chimiques

Phénol (groupe 31)

Réactions acides, forme des sels avec les bases fortes

Réaction facile avec tous les oxydants et formation de quinone.

Inhibiteur des réactions radicalaires

### Inflammation

- Point éclair 79 °C
- Température d'autoinflammation 715 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité 1,8 % dans l'air
- Limite supérieure d'inflammabilité
- Densité de la vapeur 3,24
- Indice d'évaporation

### Combustion

- Stoechiométrie 7 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion 3060 kJ/mole
- PCS 32515 kJ/kg
- PCI 31218 kJ/kg
- T99 784°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 796°C - 17,78 Log t
- T99.99 807°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air 1,5 %
- Limite supérieure dans l'air

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide)
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)  $-3,808E-1+6,357E-3T+5,129E-6T^2+1,623E-9T^3$  J/g/K
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 1,101 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation 45,7 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion 11,5 kJ/mole
- Enthalpie de formation -90,7 kJ/mole
- Tension de vapeur 1,3 E2 Pa à 40,1 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = -0,05223 \cdot 55111 / T + 9,2757$

### Sécurité

Inflammable

Le contact provoque des brûlures graves

Risque d'intoxication par inhalation ou absorption cutanée

Valeur limite de la concentration dans l'air : 5 ppm

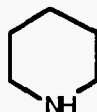
### Stockage

Conserver en plein air ou dans un local bien ventilé

Eloigner des produits oxydants ou combustibles

Protéger des chocs

C<sub>5</sub>H<sub>11</sub>N



M = 85,15 (11,74 mole/kg)

C : 70,53%

H : 13,02%

N : 16,45%

Liquide, odeur caractéristique

Intermédiaire de synthèse

### Propriétés physiques

- Densité 0,862
- Point de fusion -13 °C
- Point d'ébullition 106 °C
- Solubilité dans l'eau infiniment soluble
- Azéotrope avec l'eau 35% d'eau Eb = 92,8°C
- Viscosité 1,491 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 3,420 E-6 exp (14814/RT) Pa.s
- Tension superficielle 29,48 mN/m

### Caractéristiques chimiques

Fonction amine (groupe 7)

Réagit rapidement avec tous les acides (formation de sels). Les oxydants conduisent à des composés fortement colorés avec dégagement possible d'oxydes d'azote, réactions exothermiques.

Réactions de condensation avec les aldéhydes et les cétones (formation d'eau), réactions catalysées par les acides.

Les amines subissent des réactions d'alkylation avec les dérivés halogénés. Elles réagissent avec les hydrures et les métaux alcalins avec formation d'hydrogène.

### Inflammation

- Point éclair 16 °C
- Température d'autoinflammation
- Limite inférieure d'inflammabilité
- Limite supérieure d'inflammabilité
- Densité de la vapeur 3
- Indice d'évaporation

### Combustion

- Stoechiométrie 7,75 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion 3455 kJ/mole
- PCS 40575 kJ/kg
- PCI 37949 kJ/kg
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air
- Limite supérieure dans l'air

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide)
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)  $-6,233E-1+7,386E-3T+-3,944E-6T^2+7,548E-10T^3$  J/g/K
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 1,247 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation 37,3 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion
- Enthalpie de formation -47,2 kJ/mole
- Tension de vapeur 26,3 E2 Pa à 15,8 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = - 0,05223 * 37275 /T + 8,0328$

### Sécurité

Extrêmement inflammable

Vapeurs extrêmement irritantes pour la peau, les yeux et les voies respiratoires

Le contact avec le liquide peut provoquer des brûlures

### Stockage

Conserver dans un endroit isolé, bien ventilé à l'abri de la chaleur

Isoler des produits oxydants

Local antidéflagrant



## Propanediol



M = 76,10 (13,14 mole/kg)

C : 47,35%

H : 10,60%

O : 42,05%

Liquide visqueux

Antige, fabrication de résines synthétiques, inhibiteur de fermentation, émulsifiant

### Propriétés physiques

- Densité 1,036
- Point de fusion -59 °C
- Point d'ébullition 188,2 °C
- Solubilité dans l'eau infiniment soluble
- Viscosité 31,6 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 5,122 E-7 exp (26883/RT) Pa.s
- Tension superficielle 72,00 mN/m

### Caractéristiques chimiques

Fonction alcool (groupe 4)

Estérification par les acides minéraux ou organiques avec formation d'eau. Les oxydants transforment les alcools en aldéhydes et cétones, réaction exothermique

Réagit avec les métaux réducteurs et les hydrures métalliques avec formation d'hydrogène, risque d'inflammation et d'explosion.

### Inflammation

- Point éclair 98 °C
- Température d'autoinflammation 370 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité 2,6 % dans l'air
- Limite supérieure d'inflammabilité 12,5 % dans l'air
- Densité de la vapeur 2,6
- Indice d'évaporation

### Combustion

- Stoechiométrie 4 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion 1802 kJ/mole
- PCS 23679 kJ/kg
- PCI 21541 kJ/kg
- T99 611°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 624°C - 17,78 Log t
- T99.99 637°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air
- Limite supérieure dans l'air

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide)
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C
- Chaleur latente de vaporisation
- Chaleur latente de fusion
- Enthalpie de formation -421,3 kJ/mole
- Tension de vapeur 1,31 E2 Pa à 45,5 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = - 0,05223 * 56783 /T + 9,3198$

### Sécurité

Liquide peu inflammable  
Peut provoquer des intoxications par ingestion

### Stockage

Entreposer dans un endroit ventilé à l'abri de la chaleur

## Propionate d'éthyle



M = 102,13 (9,79 mole/kg)

C : 58,80%

H : 9,87%

O : 31,33%

Liquide incolore, odeur fruitée

Arôme, synthèse organique

### Propriétés physiques

- Densité 0,894
- Point de fusion -72,6 °C
- Point d'ébullition 99,1 °C
- Solubilité dans l'eau 16,7 g/l
- Viscosité 0,533 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 1,509 E-5 exp (8691/RT) Pa.s
- Tension superficielle 24,38 mN/m

### Caractéristiques chimiques

Fonction ester (groupe 13)

S'hydrolyse lentement dans l'eau en acide propionique et éthanol. En présence de base, réaction beaucoup plus rapide (saponification). Ces réactions ne provoquent qu'un échauffement modéré.

Les esters réagissent avec les amines, les mercaptans et les alcools par échange fonctionnel, réactions en général athermiques, production d'éthanol

### Inflammation

- Point éclair 12 °C
- Température d'autoinflammation 440 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité 1,9 % dans l'air
- Limite supérieure d'inflammabilité 11 % dans l'air
- Densité de la vapeur 3,5
- Indice d'évaporation

### Combustion

- Stoechiométrie 6,5 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion 2933 kJ/mole
- PCS 28718 kJ/kg
- PCI 26727 kJ/kg
- T99 600°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 630°C - 17,78 Log t
- T99.99 642°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air
- Limite supérieure dans l'air

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide) 1,919 J/g/°C
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)  $1,944E-1+3,95E-3T-1,407E-6T^2+7,24E-11T^3$  J/g/K
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 1,245 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation 32,8 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion
- Enthalpie de formation -469,7 kJ/mole
- Tension de vapeur 52,6 E2 Pa à 27,2 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = - 0,05223 * 39579 /T + 8,4715$

### Sécurité

Très inflammable

Vapeurs toxiques

Le contact du liquide avec la peau et les yeux provoque des irritations

### Stockage

Récipients métalliques.

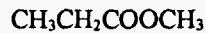
Eloigner des produits oxydants et des sources de chaleur

Local antidéflagrant.

Protéger des chocs

## Propionate de méthyle

C<sub>4</sub>H<sub>8</sub>O<sub>2</sub>



M = 88,11 (11,35 mole/kg)

C : 54,53%

H : 9,15%

O : 36,32%

Liquide incolore  
Synthèse organique

### Propriétés physiques

- Densité 0,915
- Point de fusion -87,5 °C
- Point d'ébullition 79,9 °C
- Solubilité dans l'eau 62 g/l
- Viscosité 0,456 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 1,532 E-5 exp (8272/RT) Pa.s
- Tension superficielle 25,06 mN/m

### Caractéristiques chimiques

Fonction ester (groupe 13)

S'hydrolyse lentement dans l'eau en acide propionique et méthanol. En présence de base, réaction beaucoup plus rapide (saponification). Ces réactions ne provoquent qu'un échauffement modéré.

Les esters réagissent avec les amines, les mercaptans et les alcools par échange fonctionnel, réactions en général athermiques, production de méthanol

### Inflammation

- Point éclair -2 °C
- Température d'autoinflammation 465 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité 2,5 % dans l'air
- Limite supérieure d'inflammabilité 13 % dans l'air
- Densité de la vapeur 3
- Indice d'évaporation

### Combustion

- Stoechiométrie 5 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion 2309 kJ/mole
- PCS 26206 kJ/kg
- PCI 24360 kJ/kg
- T99 621°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 630°C - 17,78 Log t
- T99.99 642°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air
- Limite supérieure dans l'air

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide)
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)  $2,066E-1+3,564E-3T+-1,062E-6T^2+-2,075E-10T^3$  J/g/K
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 1,169 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation 35,0 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion
- Enthalpie de formation
- Tension de vapeur 78,9 E2 Pa à 18,7 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = - 0,05223 * 36948 /T + 8,3768$

### Sécurité

Très inflammable

Vapeurs toxiques

Le contact du liquide avec la peau et les yeux provoque des irritations

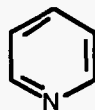
### Stockage

Récipients métalliques.

Eloigner des produits oxydants et des sources de chaleur

Local antidéflagrant.

Protéger des chocs

C<sub>5</sub>H<sub>5</sub>N

M = 79,10 (12,64 mole/kg)

C : 75,92%

H : 6,37%

N : 17,71%

Liquide incolore, odeur caractéristique désagréable

Solvant, intermédiaire de synthèse

Propriétés physiques

- Densité 0,982
- Point de fusion -41,6 °C
- Point d'ébullition 115,2 °C
- Solubilité dans l'eau infiniment soluble
- Azéotrope avec l'eau 41,3% d'eau Eb = 93,6°C
- Viscosité 0,984 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 9,040 E-6 exp (11430/RT) Pa.s
- Tension superficielle 37,24 mN/m

Caractéristiques chimiques

Fonction amine (groupe 7)

Réagit rapidement avec tous les acides (formation de sels). Les oxydants conduisent à des composés fortement colorés avec dégagement possible d'oxydes d'azote, réactions exothermiques.

Réactions de condensation avec les aldéhydes et les cétones (formation d'eau), réactions catalysées par les acides.

Les amines subissent des réactions d'alkylation avec les dérivés halogénés.

Inflammation

- Point éclair 20 °C
- Température d'autoinflammation 480 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité 1,8 % dans l'air
- Limite supérieure d'inflammabilité 12,4 % dans l'air
- Densité de la vapeur 2,73
- Indice d'évaporation 12,7

Combustion

- Stoechiométrie 6,25 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion 2752 kJ/mole
- PCS 34791 kJ/kg
- PCI 33506 kJ/kg
- T99 723°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 745°C - 17,78 Log t
- T99.99 758°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air 1,8 %
- Limite supérieure dans l'air 12,4 %

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide) 1,802 J/g/°C
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)  $5,03E-1+6,23E-3T+4,498E-6T^2+1,269E-9T^3$  J/g/K
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 1,994 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation 35,09 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion
- Enthalpie de formation 140,4 KJ/mole
- Tension de vapeur 26,7 E2 Pa à 24,8 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = - 0,05223 * 40359 /T + 8,3479$

### Sécurité

Très inflammable

A forte température, le contact avec les produits oxydants peut provoquer des réactions violentes

Les vapeurs sont irritantes pour les yeux, les muqueuses respiratoires et la peau

A haute concentration, action sur le système nerveux central avec narcose

Valeur limite de la concentration dans l'air : **5 ppm**

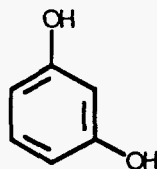
### Stockage

Conserver dans un endroit isolé, bien ventilé à l'abri de la chaleur

Isoler des produits oxydants

Local antidéflagrant





M = 110,11 (9,08 mole/kg)

C : 65,45%

H : 5,49%

O : 29,06%

Solide blanc (aiguilles)rosit par exposition à l'air et à la lumière  
Tannage, industrie des colorants, fabrication de résines, adhésifs

## Propriétés physiques

- Densité 1,272
- Point de fusion 109,8 °C
- Point d'ébullition 276,5 °C
- Solubilité dans l'eau 1110 g/l
- Viscosité 0,647 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 1,118 E-6 exp (27668/RT) Pa.s
- Tension superficielle 47,6 mN/m

## Caractéristiques chimiques

Phénol (groupe 31)

Réactions acides, forme des sels avec les bases fortes

Réaction facile avec tous les oxydants et formation de quinone.

Inhibiteur des réactions radicalaires

## Inflammation

- Point éclair 127 °C
- Température d'autoinflammation 608 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité 1,4 % dans l'air
- Limite supérieure d'inflammabilité % dans l'air
- Densité de la vapeur 3,79
- Indice d'évaporation

## Combustion

- Stoechiométrie 6,5 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion 2848 kJ/mole
- PCS 25865 kJ/kg
- PCI 24757 kJ/kg
- T99 714°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 727°C - 17,78 Log t
- T99.99 741°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air 1,4 %
- Limite supérieure dans l'air

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide)
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C
- Chaleur latente de vaporisation
- Chaleur latente de fusion
- Enthalpie de formation -366,0 (s) kJ/mole
- Tension de vapeur 1,3 E2 Pa à 108,4 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = - 0,05223 * 68605 / T + 9,4139$

### Sécurité

Peu inflammable

Le contact provoque des brûlures graves

Risque d'intoxication par inhalation ou absorption cutanée

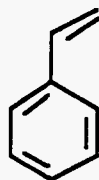
Valeur limite de la concentration dans l'air : 10 ppm

### Stockage

Conserver en plein air ou dans un local bien ventilé

Eloigner des produits oxydants ou combustibles

Protéger des chocs

C<sub>8</sub>H<sub>8</sub>

M = 104,15 (9,60 mole/kg)

C : 92,26%

H : 7,74%

Liquide jaune huileux, odeur pénétrante  
Fabrication du polystyrène et de copolymères (élastomères)

### Propriétés physiques

- |                         |                               |
|-------------------------|-------------------------------|
| • Densité               | 0,906                         |
| • Point de fusion       | -30,6 °C                      |
| • Point d'ébullition    | 145 °C                        |
| • Solubilité dans l'eau | insoluble                     |
| • Viscosité             | 0,781 E-3 Pa.s                |
| • Viscosité en f(T)     | 1,229 E-5 exp (10121/RT) Pa.s |
| • Tension superficielle | 32,00 mN/m                    |

### Caractéristiques chimiques

Carbure aromatique (groupes 16, 28 et 103)

Se polymérise facilement sous l'action de la chaleur, de la lumière ou d'un catalyseur acide, généralement stabilisé avec de l'eau ou de l'hydroquinone

La double liaison est sensible aux agents oxydants avec formation d'acide benzoïque

### Inflammation

- |                                      |                  |
|--------------------------------------|------------------|
| • Point éclair                       | 31 °C            |
| • Température d'autoinflammation     | 490 °C           |
| • Limite inférieure d'inflammabilité | 1,1 % dans l'air |
| • Limite supérieure d'inflammabilité | 7,0 % dans l'air |
| • Densité de la vapeur               | 3,6              |
| • Indice d'évaporation               |                  |

### Combustion

- |                           |                                 |
|---------------------------|---------------------------------|
| • Stoechiométrie          | 10 moles d'oxygène/mole         |
| • Enthalpie de combustion | 4377 kJ/mole                    |
| • PCS                     | 42026 kJ/kg                     |
| • PCI                     | 40464 kJ/kg                     |
| • T99                     | 700°C - 18,17 Log t (t en sec.) |
| • T99.9                   | 713°C - 17,78 Log t             |
| • T99.99                  | 723°C - 17,39 Log t             |
| • Paramètres cinétiques   |                                 |

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air 1,1 %
- Limite supérieure dans l'air 6,1 %

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide)
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)  $-2,712E-1+5,914E-3T+3,863E-6T^2+9,539E-10T^3$  J/g/K
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 1,173 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation 37 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion
- Enthalpie de formation 146,7 kJ/mole
- Tension de vapeur 13,3 E2 Pa à 30,8 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = -0,05223 * 40299 / T + 7,9223$
- Température critique 375 °C
- Pression critique 40,5 E5 Pa

### Sécurité

Très inflammable

Peut subir une polymérisation explosive au contact de la chaleur

Peut former des peroxydes explosifs

Les vapeurs peuvent former des mélanges explosifs dans l'air

Le contact du liquide ou des vapeurs provoque des irritations (peau, yeux et muqueuses respiratoires)

Valeur limite de la concentration dans l'air : 50 ppm

### Stockage

Stocker avec un retardateur de polymérisation

Conserver dans un endroit isolé, bien ventilé à l'abri de la chaleur

Isoler des produits oxydants (risque de réactions explosives)

Local antidéflagrant

## Tétrachlorure de carbone

CCl<sub>4</sub>

CCl<sub>4</sub>

M = 153,81 (6,50 mole/kg)

C : 7,81%  
Cl : 92,19%

Liquide lourd incolore, odeur caractéristique  
Solvant, nettoyage à sec, agent d'extinction

### Propriétés physiques

- Densité 1,584
- Point de fusion -23,0 °C
- Point d'ébullition 76,5 °C
- Solubilité dans l'eau 0,8 g/l
- Azéotrope avec l'eau 4,1% d'eau Eb = 66°C
- Viscosité 0,977 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 1,394 E-5 exp (10359/RT) Pa.s
- Tension superficielle 26,43 mN/m

### Caractéristiques chimiques

Fonction dérivé halogéné (groupe 17)

En présence d'oxydant fort ou d'une température élevée, on peut constater la formation de chlore, d'acide chlorhydrique et de phosgène

### Inflammation

- Point éclair
- Température d'autoinflammation
- Limite inférieure d'inflammabilité
- Limite supérieure d'inflammabilité
- Densité de la vapeur 5,32
- Indice d'évaporation

### Combustion

- Stoechiométrie 1 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion 156 kJ/mole
- PCS 1014 kJ/kg
- PCI 1014 kJ/kg
- Paramètres cinétiques  $k = 3 \text{ E}11 \text{ exp } (-2200/T)$

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air
- Limite supérieure dans l'air

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide) 0,840 J/g/°C
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)  $2,647E-1+1,332E-3T-1,476E-6T^2+5,749E-10T^3$  J/g/K
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 0,546 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation 29,82 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion 3,28 kJ/mole
- Enthalpie de formation -106,6 kJ/mole
- Tension de vapeur 119,4 E2 Pa à 20 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = -0,05223 * 33859 /T + 7,9641$
- Température critique 283,1 °C
- Pression critique 45 E5 Pa

### Sécurité

Ininflammable

Se décompose en produits toxiques au contact d'une source de chaleur ou d'une flamme

Le contact avec la peau, les muqueuses et les yeux provoque des irritations

L'inhalation des vapeurs entraîne des intoxications aiguës avec narcose

Risque d'intoxication par contact prolongé du liquide avec la peau

Valeur limite de la concentration dans l'air : 10 ppm

### Stockage

Conserver à l'abri de la chaleur dans un endroit bien ventilé

Protéger des chocs

Le sol du dépôt sera imperméable



M = 72,11 (13,87 mole/kg)

C : 66,63%

H : 11,18%

O : 22,19%

Liquide incolore, odeur étherée  
Solvant, intermédiaire de synthèse

### Propriétés physiques

- Densité 0,889
- Point de fusion -65 °C
- Point d'ébullition 67 °C
- Solubilité dans l'eau infiniment soluble
- Viscosité 0,519 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 1,918 E-5 exp (8037/RT) Pa.s
- Tension superficielle 27,31 mN/m

### Caractéristiques chimiques

Fonction éther (groupe 14)

Assez inerte chimiquement, réagit avec les acides forts pour donner des alcools et des esters minéraux.  
Sensible également aux oxydants forts, forme des acides

### Inflammation

- Point éclair -14 °C
- Température d'autoinflammation 320 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité 2 % dans l'air
- Limite supérieure d'inflammabilité 11,8 % dans l'air
- Densité de la vapeur 2,5
- Indice d'évaporation 2,3

### Combustion

- Stoechiométrie 5,5 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion 2501 kJ/mole
- PCS 34683 kJ/kg
- PCI 32428 kJ/kg
- T99 556°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 567°C - 17,78 Log t
- T99.99 576°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques  $k = 8 E13 \exp (-1900/T)$

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air 2,3 %
- Limite supérieure dans l'air 11,8 %

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide)
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)  $2,649E-1+7,159E-3T+-5,73E-6T^2+2,016E-9T^3$  J/g/K
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 1,943 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation 29,81 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion
- Enthalpie de formation -184,2 kJ/mole
- Tension de vapeur 235 E2 Pa à 25 °C

### Sécurité

Très inflammable

Vapeurs irritantes pour les muqueuses avec effet narcotique à haute concentration

Le liquide provoque des irritations à la peau et aux yeux

Valeur limite de la concentration dans l'air : 200 ppm

### Stockage

Conserver dans un endroit isolé, bien ventilé à l'abri de la chaleur

Isoler des produits oxydants

Local antidéflagrant



## Tétranitrométhane



M = 196,03 (5,10 mole/kg)

C : 6,13%  
O : 65,29%  
N : 28,58%

Liquide jaune pâle  
Comburant liquide, explosif

### Propriétés physiques

- Densité 1,623
- Point de fusion 13,8 °C
- Point d'ébullition 126 °C
- Solubilité dans l'eau insoluble
- Viscosité 1,76 E-3 Pa.s
- Tension superficielle

### Caractéristiques chimiques

Dérivé nitré (groupe 27)

Les oxydants (et notamment l'acide nitrique) peuvent décomposer les composés nitrés, cette décomposition peut devenir explosive et dégager des oxydes d'azote.

### Inflammation

- Point éclair
- Température d'autoinflammation
- Limite inférieure d'inflammabilité
- Limite supérieure d'inflammabilité
- Densité de la vapeur
- Indice d'évaporation

### Combustion

- Stoechiométrie -3 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion
- PCS
- PCI
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air
- Limite supérieure dans l'air

### Données thermodynamiques

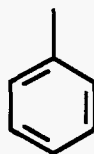
- Chaleur spécifique (liquide)
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C
- Chaleur latente de vaporisation 40,74 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion
- Enthalpie de formation
- Tension de vapeur

### Sécurité

Hautement explosif en présence d'impuretés  
Irritant pour la peau et les voies respiratoires  
Le contact du liquide avec la peau provoque des brûlures

### Stockage

Conserver dans un endroit isolé à l'abri de la chaleur  
Protéger des chocs

C<sub>7</sub>H<sub>8</sub>

M = 92,14 (10,85 mole/kg)

C : 91,25%

H : 8,75%

Liquide réfringent, odeur de benzène

Grand intermédiaire de synthèse (acide benzoïque, TNT, ...), solvant

Propriétés physiques

- Densité 0,862
- Point de fusion -95,0 °C
- Point d'ébullition 110,6 °C
- Solubilité dans l'eau insoluble
- Azéotrope avec l'eau 13, % d'eau Eb = 84,1°C
- Viscosité 0,580 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 1,476 E-5 exp (8947/RT) Pa.s
- Tension superficielle 28,52 mN/m

Caractéristiques chimiques

Carbure aromatique (groupe 16)

Composé stable. Les oxydants puissants peuvent conduire à l'acide benzoïque

Inflammation

- Point éclair 4,4 °C
- Température d'autoinflammation 536 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité 1,2 % dans l'air
- Limite supérieure d'inflammabilité 7,1 % dans l'air
- Densité de la vapeur 3,14
- Indice d'évaporation

Combustion

- Stoechiométrie 9 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion 3910 kJ/mole
- PCS 42435 kJ/kg
- PCI 40670 kJ/kg
- T99 700°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 712°C - 17,78 Log t
- T99.99 720°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air 1,27 %
- Limite supérieure dans l'air 7 %

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide) 1,613 J/g°C
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)  $-2,643E-1+5,562E-3T-3,001E-6T^2+5,33E-10T^3$  J/g/K
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 1,141 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation 33,18 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion 6,63 kJ/mole
- Enthalpie de formation 49,9 kJ/mole
- Tension de vapeur 53,3 E2 Pa à 31,8 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = -0,05223 * 37976 / T + 8,0863$
- Température critique 320,8 °C
- Pression critique 40 E5 Pa

### Sécurité

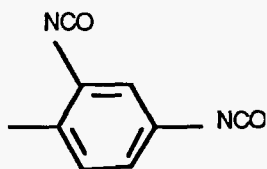
Très inflammable  
Vapeurs irritantes pour les muqueuses oculaires et respiratoires  
Risque de paralysie du centre respiratoire à haute concentration  
Valeur limite de la concentration dans l'air : 100 ppm

### Stockage

Récipients métalliques  
Éloigner des produits oxydants et des sources de chaleur  
Protéger des chocs  
Local antidéflagrant

## Toluène diisocyanate

$C_9H_6N_2O_2$



M = 174,16 (5,74 mole/kg)

C : 62,07%

H : 3,47%

O : 18,37%

N : 16,09%

Liquide, odeur piquante

Fabrication des polyuréthanes

### Propriétés physiques

- Densité 1,224
- Point de fusion 19,5 °C
- Point d'ébullition 251 °C
- Solubilité dans l'eau décomposé par l'eau
- Viscosité
- Tension superficielle

### Caractéristiques chimiques

Fonction Isocyanate (groupes 18 et 107)

Composé très réactif avec l'eau, les alcools, les amines et tous les nucléophiles protonés. Réactions exothermiques avec formation de gaz carbonique

Polymérisable avec les diols (polyurethanes)

### Inflammation

- Point éclair 135 °C
- Température d'autoinflammation
- Limite inférieure d'inflammabilité
- Limite supérieure d'inflammabilité
- Densité de la vapeur 6,0
- Indice d'évaporation

### Combustion

- Stoechiométrie 9,5 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion
- PCS
- PCI
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air 0,9 %
- Limite supérieure dans l'air 9,5 %

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide)
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C
- Chaleur latente de vaporisation
- Chaleur latente de fusion
- Enthalpie de formation
- Tension de vapeur 0,013 E2 Pa à 25 °C

### Sécurité

Peu inflammable

Se décompose à 285 °C avec formation de vapeurs nitreuses toxiques

Vapeurs irritantes et relativement toxiques dès la température ordinaire (irritation des yeux et des muqueuses)

Le contact avec le liquide provoque des brûlures

Valeur limite de la concentration dans l'air : 0,005 ppm

### Stockage

Conserver dans un endroit isolé, bien ventilé à l'abri de la chaleur

Isoler des produits oxydants et des sources de feu

## Trichloréthane



M = 133,40 (7,50 mole/kg)

C : 18,01%

H : 2,27%

Cl : 79,73%

Liquide

Solvant des graisses, cires, résines naturelles

### Propriétés physiques

- Densité 1,432
- Point de fusion -36,6 °C
- Point d'ébullition 113,8 °C
- Solubilité dans l'eau insoluble
- Viscosité 0,837 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 1,067 E-5 exp (10633/RT) Pa.s
- Tension superficielle 25,14 mN/m

### Caractéristiques chimiques

Fonction dérivé halogéné (groupe 17)

En présence d'oxydant fort ou d'une température élevée, on peut constater la formation de chlore, d'acide chlorhydrique et de phosgène

### Inflammation

- Point éclair
- Température d'autoinflammation 537 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité 7,5 % dans l'air
- Limite supérieure d'inflammabilité 12,5 % dans l'air
- Densité de la vapeur 4,6
- Indice d'évaporation 2,5

### Combustion

- Stoechiométrie 2,75 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion
- PCS
- PCI
- T99 677°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 688°C - 17,78 Log t
- T99.99 695°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques

## Explosivité

(composé stabilisé)

- Limite inférieure dans l'air 10 %
- Limite supérieure dans l'air 15,5 %

## Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide) 1,112 J/g/°C
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C
- Chaleur latente de vaporisation 29,86 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion 2,74 kJ/mole
- Enthalpie de formation -144,6 kJ/mole
- Tension de vapeur 133 E2 Pa à 20 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = -0,05223 * 33512 / T + 7,9559$
- Température critique 260 °C
- Pression critique 50 E5 Pa

## Sécurité

Peu inflammable

Vapeurs irritantes pour les muqueuses avec effet narcotique à haute concentration

Valeur limite de la concentration dans l'air : 350 ppm

## Stockage

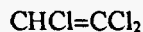
Entreposer à l'abri de la lumière et de la chaleur dans un endroit bien ventilé

Protéger des chocs

Sol imperméable



## Trichloréthylène



M = 131,38 (7,61 mole/kg)

C : 18,28%

H : 0,77%

Cl : 80,95%

Liquide, odeur de chloroforme

Solvant de tous les corps gras, intermédiaire de synthèse

### Propriétés physiques

- Densité 1,465
- Point de fusion -84,8 °C
- Point d'ébullition 86,7 °C
- Solubilité dans l'eau insoluble
- Azéotrope avec l'eau 17% d'eau Eb = 73,4°C
- Viscosité 0,570 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 1,816 E-4 exp (2789/RT) Pa.s
- Tension superficielle 29,5 mN/m

### Caractéristiques chimiques

Fonction dérivé halogéné (groupe 17)

En présence d'oxydant fort ou d'une température élevée, on peut constater la formation de chlore, d'acide chlorhydrique et de phosgène

### Inflammation

- Point éclair
- Température d'autoinflammation 410 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité 8 % dans l'air
- Limite supérieure d'inflammabilité 10,5 % dans l'air
- Densité de la vapeur 4,54
- Indice d'évaporation 3,8

### Combustion

- Stoechiométrie 2,25 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion
- PCS
- PCI
- T99 638°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 653°C - 17,78 Log t
- T99.99 661°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air
- Limite supérieure dans l'air

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide) 0,932 J/g/°C
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)  $2,296E-1+1,741E-3T+-1,697E-6T^2+6,275E-10T^3$  J/g/K
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 0,614 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation 31,40 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion
- Enthalpie de formation -8,1 kJ/mole
- Tension de vapeur 80 E2 Pa à 20 °C
- Tension de vapeur en f(T)  $\log_{10}(p) = -0,05223 * 34775 /T + 7,9564$
- Température critique 271 °C
- Pression critique 49,5 E5 Pa

### Sécurité

Liquide non inflammable dans les conditions normales d'utilisation

Le trichloréthylène réagit avec la soude et la potasse pour former des mélanges explosifs (dichloroacétylène)

Vapeurs toxiques avec effet narcotique

A forte concentration, les vapeurs provoquent le coma et la mort

Le liquide cause des irritations

L'ingestion du liquide provoque des intoxications graves

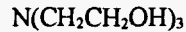
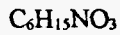
Valeur limite de la concentration dans l'air : 50 ppm

### Stockage

Entreposer à l'abri de la chaleur et de la lumière dans un local bien ventilé

Eloigner des bases et des métaux alcalins

## Triéthanolamine



M = 149,19 (6,70 mole/kg)

C : 48,30%

H : 10,13%

O : 32,17%

N : 9,39%

Liquide visqueux très hygroscopique, brunit par exposition à l'air et à la lumière, odeur ammoniacale faible  
Fabrication de tensio-actifs, solvant chélatant, intermédiaire de synthèse

### Propriétés physiques

- Densité 1,124
- Point de fusion 21,5 °C
- Point d'ébullition 335 °C
- Solubilité dans l'eau infiniment soluble
- Viscosité 590,5 E-3 Pa.s
- Tension superficielle

### Caractéristiques chimiques

fonction amino-alcool (groupe 4 et 7)

La fonction alcool peut être estérifiée ou déshydratée dans les conditions habituelles

La fonction amine réagit avec tous les acides, avec formation de sels

Le composé est sensible aux oxydants avec dégradation exothermique de la molécule et formation d'acides et de produits lourds

### Inflammation

- Point éclair 196 °C
- Température d'autoinflammation
- Limite inférieure d'inflammabilité
- Limite supérieure d'inflammabilité
- Densité de la vapeur 5,14
- Indice d'évaporation

### Combustion

- Stoechiométrie 8,25 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion
- PCS
- PCI
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air
- Limite supérieure dans l'air

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide)
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C
- Chaleur latente de vaporisation
- Chaleur latente de fusion
- Enthalpie de formation
- Tension de vapeur < 0,01 E2 Pa à 20 °C

### Sécurité

Peu inflammable  
Irritant pour la peau et les muqueuses oculaires et respiratoires  
Peut provoquer des irritations allergiques

### Stockage

Récipients métalliques avec préchauffage  
Local bien ventilé à l'abri de l'humidité  
Eloigner des produits oxydants et des acides

## Triéthylamine

$C_6H_{15}N$

$N(CH_2CH_3)_3$

M = 101,19 (9,88 mole/kg)

C : 71,22%

H : 14,94%

N : 13,84%

Liquide, odeur forte d'ammoniac

Préparation des sels d'ammonium quaternaires

### Propriétés physiques

- Densité 0,723
- Point de fusion -114,7 °C
- Point d'ébullition 89,5 °C
- Solubilité dans l'eau légèrement soluble
- Viscosité 0,746 E-3 Pa.s
- Viscosité en f(T) 2,295 E-5 exp (6748/RT) Pa.s
- Tension superficielle 20,72 mN/m

### Caractéristiques chimiques

Fonction amine (groupe 7)

Réagit rapidement avec tous les acides (formation de sels). Les oxydants conduisent à des composés fortement colorés avec dégagement possible d'oxydes d'azote, réactions exothermiques.

Réactions de condensation avec les aldéhydes et les cétones (formation d'eau), réactions catalysées par les acides.

Les amines subissent des réactions d'alkylation avec les dérivés halogénés.

### Inflammation

- Point éclair -7 °C
- Température d'autoinflammation 249 °C
- Limite inférieure d'inflammabilité 1,2 % dans l'air
- Limite supérieure d'inflammabilité 8 % dans l'air
- Densité de la vapeur 3,48
- Indice d'évaporation

### Combustion

- Stoechiométrie 9,75 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion 4334 kJ/mole
- PCS 42830 kJ/kg
- PCI 39816 kJ/kg
- T99 584°C - 18,17 Log t (t en sec.)
- T99.9 597°C - 17,78 Log t
- T99.99 606°C - 17,39 Log t
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air 1,25 %
- Limite supérieure dans l'air 7,90 %

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide)
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C 1,591 J/g/K
- Chaleur latente de vaporisation 31,01 kJ/mole
- Chaleur latente de fusion
- Enthalpie de formation -92,8 kJ/mole
- Tension de vapeur 69,3 E2 Pa à 20 °C

### Sécurité

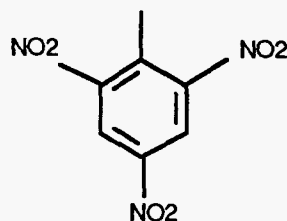
Très inflammable  
Vapeurs irritantes pour la peau, les yeux et les muqueuses  
Le liquide provoque des irritations et des brûlures  
Valeur limite de la concentration dans l'air : 25 ppm

### Stockage

Conserver dans un endroit isolé, bien ventilé à l'abri de la chaleur  
Isoler des produits oxydants  
Local antidéflagrant

## Trinitrotoluène

$C_7H_5N_3O_6$



M = 227,13 (4,40 mole/kg)

C : 37,02%

H : 2,22%

O : 42,26%

N : 18,50%

Solide jaune (aiguilles)

Explosif

### Propriétés physiques

- Densité 1,654
- Point de fusion 80,1 °C
- Point d'ébullition
- Solubilité dans l'eau insoluble
- Viscosité
- Tension superficielle

### Caractéristiques chimiques

Dérivé nitré (groupe 27)

Les oxydants (et notamment l'acide nitrique) peuvent décomposer les composés nitrés, cette décomposition peut devenir explosive et dégager des oxydes d'azote.

### Inflammation

- Point éclair
- Température d'autoinflammation
- Limite inférieure d'inflammabilité
- Limite supérieure d'inflammabilité
- Densité de la vapeur
- Indice d'évaporation

### Combustion

- Stoechiométrie 5,25 moles d'oxygène/mole
- Enthalpie de combustion 3430 kJ/mole
- PCS 15101 kJ/kg
- PCI 14654 kJ/kg
- Paramètres cinétiques

### Explosivité

- Limite inférieure dans l'air
- Limite supérieure dans l'air

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique (liquide)
- Chaleur spécifique (gaz parfait) en f(T)
- Chaleur spécifique du gaz à 25 °C
- Chaleur latente de vaporisation
- Chaleur latente de fusion
- Enthalpie de formation 43,4 kJ/mole
- Tension de vapeur

### Sécurité

Extrêmement explosif

Les vapeurs provoquent des migraines, anémies et atteintes du foie

Le liquide est absorbé par la peau et provoque des brûlures

### Stockage

Local isolé à l'abri de la lumière et de la chaleur

Protéger des chocs



*SOLIDES*

---

## Polyéthylène

(C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>)<sub>n</sub>



C : 85,7 %

H : 14,3 %

Solide plastique transparent d'aspect laiteux  
Films d'emballage, tuyaux, isolants, objets domestiques, etc...

### Propriétés physiques

- Masse volumique 0,85 g/cm<sup>3</sup>
- Transition vitreuse -125 °C
- Point de fusion 85 - 110 °C
- Point de ramollissement
- Solubilité Benzène, solvants halogénés, alcanes

### Caractéristiques chimiques

Polymère thermoplastique (groupe 101)

Stable vis-à-vis de l'eau, des acides non-oxydants, des bases, des cétones, esters, alcools à température ordinaire.  
Attaqué par les acides oxydants comme l'acide nitrique ou perchlorique et par les halogènes.

### Inflammation

- Température d'autoinflammation 350 °C
- Indice d'oxygène 17,4
- Température de décomposition 340 - 440 °C

### Combustion

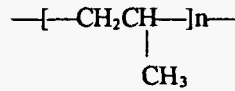
- Stoechiométrie 107 moles d'oxygène/kg
- PCI 46500 kJ/kg

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique 1,55 - 1,76 J/g/K
- Conductivité thermique 1,6 - 4,8 E-1 Watt/m/K
- Dilatation thermique 2,4 - 3,6 E-4 cm<sup>3</sup>/g/K
- Enthalpie de fusion 292 kJ/kg

# Polypropylène

(C<sub>3</sub>H<sub>6</sub>)<sub>n</sub>



C : 85,63 %

H : 14,37 %

Solide plastique

Pièces mécaniques, applications du polyéthylène, fils, fibres, tubes, etc...

## Propriétés physiques

- Masse volumique 0,90 - 0,92 g/cm<sup>3</sup>
- Transition vitreuse - 8 °C
- Point de fusion ~ 165 °C
- Point de ramollissement ~ 155 °C
- Solubilité Décaline et téraline à chaud, tétrachloréthane à l'ébullition

## Caractéristiques chimiques

Polymère thermoplastique (groupe 101)

Résistant aux acides et aux bases fortes, attaqué par les oxydants forts comme l'eau oxygénée. Se contracte dans le trichloréthylène à ébullition

## Inflammation

- Température d'autoinflammation 350 °C
- Indice d'oxygène 17,5
- Température de décomposition 320 - 400 °C

## Combustion

- Stoechiométrie 107 moles d'oxygène/kg
- PCI 46000 kJ/kg

## Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique 1,63 - 1,76 J/g/K
- Conductivité thermique 2,39 E-1 Watt/m/K
- Dilatation thermique 2,2 E-4 cm<sup>3</sup>/g/K
- Enthalpie de fusion 206 kJ/kg

## Nylon 6.6



C : 63,68 %  
H : 9,80 %  
O : 14,14 %  
N : 12,28 %

Solide plastique blanchâtre  
Fibres synthétiques

### Propriétés physiques

- Masse volumique 1,07 g/cm<sup>3</sup>
- Transition vitreuse 50 °C
- Point de fusion 250 - 255 °C
- Point de ramollissement
- Solubilité Soluble dans les phénols (surtout le m-crésol) et l'acide formique

### Caractéristiques chimiques

Polymère thermoplastique (groupe 101)

Résiste à tous les solvants usuels, chlorés ou non, aux hydrocarbures aliphatiques, aux produits aromatiques, aux agents alcalins et aux acides faibles. Attaqué par les phénols et les acides forts (minéraux ou organiques) concentrés.

### Inflammation

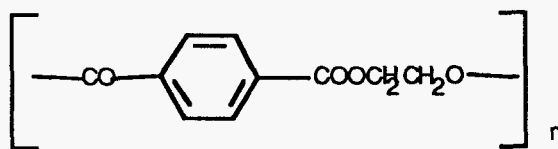
- Température d'autoinflammation 530 °C
- Indice d'oxygène 24,3
- Température de décomposition 320 - 400 °C

### Combustion

- Stoechiométrie 73 moles d'oxygène/kg
- PCI 29000 kJ/kg

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique 1,47 J/g/K
- Conductivité thermique 3,49 E-1 Watt/m/K
- Dilatation thermique 5,6 E-4 cm<sup>3</sup>/g/K
- Enthalpie de fusion 300 kJ/kg



C : 62,50 %

H : 4,20 %

O : 33,30 %

Solide plastique

Films, fibres

### Propriétés physiques

- Masse volumique 1,33 g/cm<sup>3</sup>
- Transition vitreuse 69 °C
- Point de fusion
- Point de ramollissement
- Solubilité soluble dans le m-crésol chaud, l'acide trifluoroacétique

### Caractéristiques chimiques

Polymère thermoplastique (groupe 101)

Bonne résistance aux acides faibles même chauds, aux acides forts à froid, aux bases faibles et à la plupart des solvants organiques

### Inflammation

- Température d'autoinflammation
- Indice d'oxygène 20,0
- Température de décomposition

### Combustion

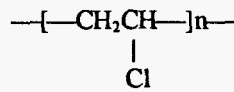
- Stoechiométrie 52 moles d'oxygène/kg
- PCI

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique 1,13 J/g/K
- Conductivité thermique 2,19 E-1 Watt/m/K
- Dilatation thermique 6,0 - 7,4 E-4 cm<sup>3</sup>/g/K
- Enthalpie de fusion 48 - 145 kJ/kg

## Polychlorure de vinyle

(C<sub>2</sub>H<sub>3</sub>Cl)<sub>n</sub>



C : 38,44 %  
H : 4,84 %  
Cl : 56,72 %

Solide plastique translucide de couleur ambrée  
Chaudronnerie plastique, films pour emballages, tubes, raccords injectés pour la plomberie plastique, etc...

### Propriétés physiques

- Masse volumique 1,385 g/cm<sup>3</sup>
- Transition vitreuse 81 °C
- Point de fusion
- Point de ramollissement 75 °C
- Solubilité soluble dans les cétones, le THF, le nitrobenzène

### Caractéristiques chimiques

Polymère thermoplastique (groupe 101)  
Résiste bien aux acides même concentrés, aux bases fortes à froid, aux alcools et aux hydrocarbures. Sensible à la lumière et à la chaleur

### Inflammation

- Température d'autoinflammation 450 °C
- Indice d'oxygène 40,3
- Température de décomposition 200 - 300 °C

### Combustion

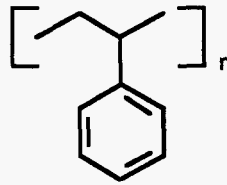
- Stoechiométrie 44 moles d'oxygène/kg
- PCI 20900 kJ/kg

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique 0,96 - 1,09 J/g/K
- Conductivité thermique 1,59 E-1 Watt/m/K
- Dilatation thermique 4,2 - 5,2 E-4 cm<sup>3</sup>/g/K
- Enthalpie de fusion 176 kJ/kg

## Polystyrène

(C<sub>8</sub>H<sub>8</sub>)<sub>n</sub>



C : 92,26 %

H : 7,74 %

Résine transparente, légère  
Fabrication de plastiques et d'élastomères

### Propriétés physiques

- Masse volumique 1,05 g/cm<sup>3</sup>
- Transition vitreuse 100 °C
- Point de fusion
- Point de ramollissement
- Solubilité soluble dans le toluène, le chlorure de méthylène, l'acétate de butyle

### Caractéristiques chimiques

Polymère thermoplastique (groupe 101)

Bonne résistance à l'eau et aux solutions salines, aux bases, aux acides non oxydants. Résistance faible aux solvants et aux oxydants forts

### Inflammation

- Température d'autoinflammation 490 °C
- Indice d'oxygène 17,8
- Température de décomposition 300 - 400 °C

### Combustion

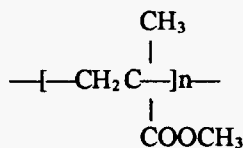
- Stoechiométrie 96 moles d'oxygène/kg
- PCI 39700 kJ/kg

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique 1,22 J/g/K
- Conductivité thermique 1,19 E-1 Watt/m/K
- Dilatation thermique 4,3 - 6,5 E-4 cm<sup>3</sup>/g/K
- Enthalpie de fusion 96 kJ/kg

## Polyméthacrylate de méthyle

$(C_5H_8O_2)_n$



C : 59,99 %

H : 8,05 %

O : 31,96 %

Solide plastique transparent (verre organique)  
Luminaires, enrobage, prothèses, vitrages divers

### Propriétés physiques

- Masse volumique 1,17 g/cm<sup>3</sup>
- Transition vitreuse 105 °C
- Point de fusion
- Point de ramollissement
- Solubilité soluble dans le monomère, l'acétone, les solvants chlorés

### Caractéristiques chimiques

Polymère thermoplastique (groupe 101)  
Grande inertie chimique vis à vis de la plupart des réactifs chimiques minéraux, sauf l'acide chlorhydrique et l'anhydride sulfurique qui l'attaquent brutalement. L'acide nitrique et l'ammoniaque modifient sa transparence. Soluble dans un grand nombre de composés organiques.

### Inflammation

- Température d'autoinflammation 430 °C
- Indice d'oxygène 17,3
- Température de décomposition 180 - 280 °C

### Combustion

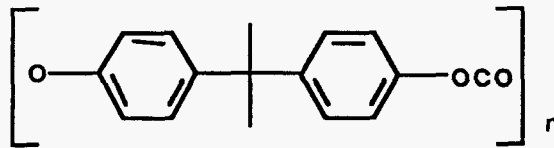
- Stoechiométrie 60 moles d'oxygène/kg
- PCI 23000 kJ/kg

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique 1,38 J/g/K
- Conductivité thermique 2,08 E-1 Watt/m/K
- Dilatation thermique 5,2 - 5,4 E-4 cm<sup>3</sup>/g/K
- Enthalpie de fusion 96 kJ/kg



## Polycarbonate



C : 75,57 %  
H : 5,55 %  
O : 18,88 %

Solide plastique parfaitement transparent  
Electronique (bâti, relais,...), boîtiers, éléments de pompe, pièces mécaniques

### Propriétés physiques

- Masse volumique 1,20 g/cm<sup>3</sup>
- Transition vitreuse 145 °C
- Point de fusion 230 °C
- Point de ramollissement 135 °C
- Solubilité soluble dans les solvants chlorés

### Caractéristiques chimiques

Polymère spécial (groupe 101)

Bonne résistance chimique aux acides minéraux et organiques concentrés, aux oxydants et réducteurs, aux solutions salines, aux graisses et huiles (minérales, animales et végétales), aux hydrocarbures aliphatiques. Ne tient pas à l'alcool méthylique et est détruit par les bases, l'ammoniaque et les amines. Gonfle en présence des carbures aromatiques, de l'acétone, de l'acétate d'éthyle.

### Inflammation

- Température d'autoinflammation
- Indice d'oxygène 26,0
- Température de décomposition 320 °C

### Combustion

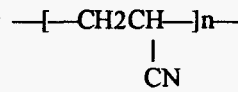
- Stoechiométrie 71 moles d'oxygène/kg
- PCI 29200 kJ/kg

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique 1,17 J/g/K
- Conductivité thermique 2,34 E-1 Watt/m/K
- Dilatation thermique
- Enthalpie de fusion 131 kJ/kg

## Polyacrylonitrile

$(C_3H_3N)_n$



C : 67,90 %

H : 5,70 %

N : 26,40 %

Fibres plastiques blanches

Fibres textiles, revêtement soumis aux intempéries

### Propriétés physiques

- Masse volumique 1,17 g/cm<sup>3</sup>
- Transition vitreuse 97 °C
- Point de fusion
- Point de ramollissement
- Solubilité Soluble dans le diméthylformamide

### Caractéristiques chimiques

Polymère thermoplastique (groupe 101)

Excellente résistance à l'humidité et à la lumière solaire. Résiste bien aux acides, aux bases diluées et aux solvants courants.

### Inflammation

- Température d'autoinflammation 560 °C
- Indice d'oxygène 18,0
- Température de décomposition 250 - 300 °C

### Combustion

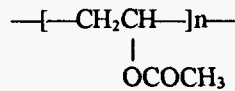
- Stoechiométrie 71 moles d'oxygène/kg
- PCI

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique 1,26 J/g/K
- Conductivité thermique
- Dilatation thermique 2,9 E-4 cm<sup>3</sup>/g/K
- Enthalpie de fusion 92 - 98 kJ/kg

## Polyacétate de vinyle

$(C_4H_6O_2)_n$



C : 55,81 %  
H : 7,02 %  
O : 37,17 %

Poudre blanche transparente  
Vernis, colles, apprêts divers, liants, etc...

### Propriétés physiques

- Masse volumique 1,19 g/cm<sup>3</sup>
- Transition vitreuse 31 °C
- Point de fusion 65 - 150 °C
- Point de ramollissement
- Solubilité Soluble dans l'alcool, l'acétone, le benzène, l'acétate d'éthyle

### Caractéristiques chimiques

Polymère thermoplastique (groupe 101)  
Très bonne stabilité à la lumière solaire ou artificielle, Bonne stabilité à la chaleur, jusqu'à 120 °C

### Inflammation

- Température d'autoinflammation
- Indice d'oxygène
- Température de décomposition 213 - 235 °C

### Combustion

- Stoechiométrie 52 moles d'oxygène/kg
- PCI 23000 kJ/kg

### Données thermodynamiques

- Chaleur spécifique 1,47 J/g/K
- Conductivité thermique 1,59 E-1 Watt/m/K
- Dilatation thermique 5,0 - 6,0 E-4 cm<sup>3</sup>/g/K
- Enthalpie de fusion