

2

Les grandes familles de solvants organiques

Utilisations et aspects physico-chimiques

par D. Bégin, M. Gérin

■ Introduction – Définitions

Un solvant, par définition, est une substance qui a le pouvoir de former avec d'autres substances une solution homogène. Dans le contexte industriel, on se limite traditionnellement aux solvants organiques, c'est-à-dire ceux qui contiennent au moins un atome de carbone dans leur structure moléculaire. L'eau n'est donc pas traitée dans ce chapitre. D'après Cohr, un solvant organique est un composé chimique ou un mélange qui est liquide entre 0 °C et 200 °C approximativement, qui est volatil et relativement inerte chimiquement [1]. Dans la plupart des applications, le solvant joue un rôle transitoire en facilitant un processus ou en réalisant une tâche pour être ensuite évacué du procédé. Les solvants sont ainsi utilisés pour extraire (p. ex. industries chimique, pétrochimique, pharmaceutique et alimentaire), dissoudre (p. ex. dégraissage) et suspendre (p. ex. peintures) des substances généralement insolubles dans l'eau ou pour modifier les propriétés physiques d'un matériau (p. ex. diluant). Ce chapitre vise à présenter les grandes catégories des solvants « classiques », y compris les mélanges, en les mettant en relation avec leurs utilisations et leurs propriétés physico-chimiques. Les procédés de fabrication des solvants ne sont pas abordés ni les solvants utilisés uniquement comme réactifs ou comme milieu réactionnel. Les « nouveaux » solvants et les préparations à base d'eau seront décrits au chapitre 4.

■ Utilisation des solvants

La consommation canadienne de solvants a été estimée en 1991 à 1 331 kt si l'on inclut les solvants utilisés comme réactifs [2]. La consommation française serait d'environ le double [3]. De grandes quantités de solvants sont utilisées comme réactifs. À titre d'exemple, sur 700 kt de méthanol utilisées au Canada en 1996, 289 kt

ont servi à la synthèse du formaldéhyde, 160 kt pour produire du méthyl t-butyléther (MTBE) et 60 kt pour fabriquer diverses amines méthylées [4]. Les solvants les plus utilisés au début des années 90 au Canada par ordre décroissant d'utilisation étaient les suivants : hydrocarbures, alcools, glycols, halogénés, cétones, esters. Le tableau 2.1 présente la consommation annuelle d'une douzaine de solvants au Canada et aux États-Unis dans la deuxième moitié des années 90. L'utilisation de certains solvants halogénés (p. ex. 1,1,1-trichloréthane) a cessé au cours des dernières années en raison du protocole de Montréal visant la protection de la couche d'ozone stratosphérique. La réapparition d'autres solvants halogénés (p. ex. trichloréthylène) dans divers secteurs pour remplacer ces derniers est également un fait notable. L'ordre d'importance d'utilisation des solvants est différent en Amérique du Nord et en Europe. À titre d'exemple les esters seraient privilégiés dans les peintures industrielles en Europe alors que les cétones seraient davantage utilisées aux États-Unis et au Canada dans cette application [5]. Le tableau 2.2 présente l'utilisation des hydrocarbures et des solvants oxygénés par secteur en Europe occidentale. La consommation européenne de ces types de solvants aurait été de 4,3 Mt en 1995 [6]. La consommation européenne de solvants chlorés (dichlorométhane + trichloréthylène + perchloréthylène) était de 336 kt en 1995¹. L'Europe occidentale consommait donc cette année-là un total d'environ 4,6 Mt de solvants organiques.

Tableau 2.1 – Consommation annuelle en kilotonnes (kt) de douze solvants au Canada et aux États-Unis¹

<i>Solvant</i> ²	<i>Année</i>	<i>Canada (kt)</i>	<i>USA (kt)</i>
Xylènes	1997	40,0	–
Toluène	1995	36,0	270
Éthanol	1998	22,0	404
Isopropanol	1996	12,1	199,8
Acétone	1996	12,0	202
Dichlorométhane	1999	5,8	50,5
2-Butanone	1995	5,3	153,1
Perchloréthylène	1996	5,0	53,4
n-Hexane	1998	4,1	–
n-Butanol	1996	3,0	–
Trichloréthylène	1996	2,9	32,8
Méthylisobutylcétone	1995	2,2	–

1. Tiré de : *CPI Product Profiles*, Camford Information Services Inc., Scarborough, ON, <http://www.camfordinfo.com>

2. Les quantités rapportées renvoient aux utilisations suivantes : adhésif, décapant, dégraissant, diluant d'encre, nettoyage à sec, nettoyant, peinture, scellant, solvant.

■ Propriétés physico-chimiques

En plus du coût, les propriétés physico-chimiques, reliées intimement à la performance technique, sont les paramètres cruciaux qui déterminent les types d'utilisation industrielle des solvants et leur mise en œuvre. Elles permettent

1. André Orban, European Chlorinated Solvent Association (Bruxelles), communication personnelle, mars 2001, <http://www.eurochlor.org/>

Tableau 2.2 – Utilisation des hydrocarbures et des solvants oxygénés par secteurs en Europe occidentale en 1993¹ [6]

Secteur d'utilisation	Pourcentage
Peintures et revêtements	46
Produits pharmaceutiques	9
Autres utilisations industrielles	8
Produits d'entretien domestique et de véhicules	6
Articles de toilette/cosmétiques	6
Encres d'imprimerie	6
Adhésifs	6
Nettoyage des métaux/industriel	4
Fabrication de caoutchoucs et polymères	4
Extraction d'huiles végétales/aliments	2
Agrochimie	2
Nettoyage à sec	1

1. Les données présentées dans ce tableau sont valables également pour l'année 1995 selon le consortium European Solvents Industry Group (Bruxelles), <http://www.esig.org/solvfrm.htm>

également de prévoir une partie de leur comportement environnemental. Seules les propriétés les plus couramment rapportées en milieu industriel sont présentées ci-dessous. Les propriétés reliées spécifiquement aux dangers d'explosion et d'incendie sont décrites au chapitre 8. L'annexe, page 29, présente une dizaine de propriétés physico-chimiques pour 62 solvants d'utilisation courante classés par familles chimiques (tableaux 1 à 9). Ces propriétés sont tirées notamment des monographies de Riddick et coll. [7], Archer [8], Huntsman [9], Lide [10], Flick [11] et IARC [12]. Bien que relié spécifiquement au danger d'incendie, le point d'éclair est également inclus dans les tableaux en raison de sa grande utilité.

● Densité

La densité d'une substance est définie par sa masse par unité de volume et est exprimée dans le système international (SI) en kilogramme par mètre cube (kg/m^3). En pratique, on utilise plutôt le gramme par centimètre cube (g/cm^3 , système CGS). Le poids spécifique d'un liquide est le rapport du poids d'un volume quelconque du liquide à 25 °C au poids d'un volume égal d'eau à 4 °C. Les températures de référence peuvent différer. Le poids spécifique est une variable sans unité. Les substances possédant un poids spécifique inférieur à l'unité sont plus légères que l'eau et flottent sur l'eau si elles n'y sont pas miscibles. À l'exception des solvants halogénés la plupart des solvants sont plus légers que l'eau. Ceci explique pourquoi la majorité des feux de solvants ne peuvent être étouffés par l'eau, ceux-ci étant plus légers que l'eau et y étant insolubles. La densité des solvants affecte leur mode de stockage ainsi que le prix de vente des formulations.

● Point d'ébullition

Le point d'ébullition est la température à laquelle la pression de vapeur du liquide est égale à celle de la pression atmosphérique normale (101,3 kPa), soit la

température à laquelle la substance (le solvant) passe de l'état liquide à l'état gazeux. L'unité de mesure de cette variable dans le système international est le degré Kelvin mais, en pratique, on utilise le degré Celsius. En l'absence de données sur la tension de vapeur ou le taux d'évaporation, le point d'ébullition permet une première évaluation de la volatilité d'un solvant. Il permet également, par exemple, d'évaluer son utilisation possible dans les machines de dégraissage à la vapeur (un point d'ébullition trop élevé étant défavorable au point de vue énergétique) et son recyclage possible par distillation (un point d'ébullition élevé pouvant nécessiter une distillation sous vide pour éviter la dégradation thermique).

● Tension de vapeur

La tension ou pression de vapeur saturante d'un solvant est la pression exercée par sa vapeur lorsqu'elle est à l'équilibre avec le liquide. L'unité de mesure de cette variable est le kilopascal (kPa) quoique l'on utilise encore souvent le millimètre de mercure (mmHg ou Torr; 1 kPa = 7,5 mmHg). La tension de vapeur est rapportée le plus souvent à 25 °C. Plus la tension de vapeur est élevée et plus le solvant a une tendance naturelle à s'évaporer. À partir de la tension de vapeur saturante, on peut évaluer pour une température donnée quelle serait la concentration maximale de vapeurs de solvant qui pourrait être atteinte, c'est-à-dire celle immédiatement au-dessus de la phase liquide. Il suffit, pour un calcul rapide, de multiplier la tension de vapeur en mmHg par 1 300, ou celle en kPa par 10 000, pour obtenir la concentration de vapeur saturante en ppm.

● Chaleur de vaporisation

La chaleur de vaporisation ou chaleur latente de vaporisation d'un solvant est la quantité de chaleur requise pour vaporiser une quantité définie de solvant. Elle varie inversement en fonction de la température. Ses unités sont le kilojoule par mole dans le système international (kJ/mol) et la kilocalorie par mole dans le système CGS (kcal/mol). Ce paramètre est utile à connaître notamment pour la comparaison des solvants quant à leur exigence énergétique dans le domaine du dégraissage à la vapeur de surfaces métalliques.

● Taux d'évaporation

Le taux d'évaporation absolu d'un solvant est la quantité de matière qui s'évapore d'une surface par unité de temps. La littérature rapporte cependant les taux d'évaporation relatifs c'est-à-dire par rapport à un solvant de référence, soit l'éther éthylique ou l'acétate de butyle normal. Cette variable dépend des conditions environnementales (p. ex. température, débit d'air à la surface). Elle est sans unité. La méthode D3539 de l'*American Society for Testing and Materials* (West Conshohocken) est largement utilisée en Amérique du Nord pour la détermination des taux d'évaporation des solvants [13]. Les taux d'évaporation des solvants sont très utilisés dans la formulation des peintures, des adhésifs et des encres.

● Viscosité

Ce paramètre permet d'évaluer la difficulté d'un fluide à s'écouler. Le coefficient de viscosité ou viscosité dynamique se définit comme étant la force nécessaire au déplacement d'une surface plane de liquide de 1 cm² avec une vitesse de 1 cm/s par rapport à une autre surface plane de même liquide qui lui est parallèle à une

distance de 1 cm [14]. L'unité de viscosité dynamique dans le système international est le pascal seconde (Pa·s). En pratique on utilise également le poise (1 P = 0,1 Pa·s = 0,1 N·s/m² = 1 dyne·s/cm²) et le centipoise (1 cP = 1 mPa·s). La viscosité est importante lors de la formulation d'un mélange ainsi que lors du choix du mode d'application, par exemple par pulvérisation.

● Tension superficielle

La tension superficielle est définie comme la résultante des forces intermoléculaires s'exerçant sur les molécules à la surface libre d'un liquide qui ont tendance à réduire au minimum la surface du liquide et à conférer à la surface des propriétés semblables à celles d'une peau élastique tendue. Lorsque deux liquides dissemblables sont en contact, ces forces intermoléculaires modifieront la forme de l'interface jusqu'à ce que l'énergie potentielle de tout le système moléculaire atteigne un minimum [14]. Ses unités dans le système international sont le newton par mètre (N/m). Le système CGS utilise le dyne par centimètre (1 dyne/cm = 0,001 N/m). La tension superficielle est un paramètre utile à connaître pour évaluer la tendance que possède un liquide à s'étaler sur une surface.

● Paramètres de solubilité

La capacité de solubilisation d'un solvant pour un soluté donné, aussi appelé son pouvoir solvant, est une donnée essentielle d'un solvant. J. H. Hildebrand, et par la suite C. M. Hansen, ont développé la théorie des paramètres de solubilité [8]. Le paramètre de solubilité (δ) ou densité de l'énergie de cohésion, exprimé en (J cm⁻³)^{1/2}, est une fonction de l'énergie molaire de vaporisation (E) et du volume molaire (V) du liquide selon l'équation suivante :

$$\delta = (E/V)^{1/2}$$

Le paramètre de solubilité est une mesure des forces d'attraction entre les molécules d'une substance. Un solvant dissout bien un soluté lorsque leurs paramètres de solubilité sont identiques ou très proches. De façon plus précise le paramètre de solubilité peut être subdivisé en trois parties : la composante de dispersion ou forces non polaires d'attraction intermoléculaire (δ_d), la composante polaire (δ_p) et la composante des ponts hydrogène (δ_h). Hansen a ainsi défini le paramètre de solubilité total (δ_t) par l'équation suivante :

$$\delta_t = (\delta_d^2 + \delta_p^2 + \delta_h^2)^{1/2}$$

Deux solvants auront un pouvoir de solubilisation proche lorsque leurs trois composantes sont proches, ce qui permet d'optimiser la recherche de solvants de substitution.

Les paramètres de solubilité ont de nombreuses applications, notamment dans la conception des revêtements organiques.

● Indice Kauri-butanol (Kb)

L'indice Kb est une mesure indirecte de la « force » d'un solvant. Il est déterminé expérimentalement de façon simple. On prépare 20 g d'une solution standard de gomme kauri (une résine naturelle, dite copal, extraite d'un arbre tropical) dans le 1-butanol, qui est un très bon solvant pour cette résine. Tout ajout d'un autre solvant, dans lequel la gomme est nécessairement moins soluble, va abaisser le pouvoir solvant du mélange 1-butanol autre solvant, jusqu'à ce qu'on atteigne le point de précipitation qui sera vu expérimentalement par apparition de turbidité.

L'indice K_b est le volume en mL de solvant nécessaire pour atteindre un degré de turbidité donné [15]. Plus le solvant ajouté sera « fort », plus il faudra en rajouter avant d'atteindre ce point, plus le K_b sera élevé. Le test ne peut être utilisé pour les solvants oxygénés comme le 1-butanol car ils sont d'excellents solvants pour ce type de résine et peuvent donner des K_b « infinis ». Le K_b a été développé à l'origine pour indiquer le pouvoir solvant des hydrocarbures dans une perspective de formulation de peintures et vernis. On le retrouve cependant fréquemment cité dans la littérature commerciale pour d'autres applications, notamment de nettoyage, de dégraissage ou de décapage, et pour diverses familles de solvants. Cette valeur doit donc être interprétée avec précaution. En règle générale les bons solvants sont ceux avec des K_b proches ou supérieurs à 100 (p. ex. toluène, xylène, trichloréthylène), et les faibles sont inférieurs à 30 environ (par exemple alcanes linéaires, solvants fluorés), avec des produits comme les terpènes et les alicycliques occupant des valeurs intermédiaires.

● Constante diélectrique

La constante diélectrique ou permittivité relative d'un solvant est sa capacité à stocker une énergie potentielle électrique sous l'influence d'un champ électrique. Elle se définit comme le rapport de la capacité d'un condensateur comportant le solvant comme diélectrique, sur la capacité qu'aurait le même condensateur qui utiliserait le vide (ou l'air) comme diélectrique [14]. La constante diélectrique est sans unité. Plus ce paramètre augmente, plus le solvant a un pouvoir d'ionisation élevé ou de solubilisation pour les substances ioniques. Les solvants dont la constante diélectrique est élevée sont utilisés dans les revêtements appliqués par pulvérisation électrostatique.

■ Grandes familles de solvants

Les solvants organiques peuvent être classés dans quelques grandes familles chimiques déterminées par la nature de leur structure moléculaire. Les utilisations spécifiques des solvants sont tirées principalement de la monographie d'Archer [8]. Les propriétés présentées en annexe, page 29, prennent le même ordre que ci-dessous.

● Hydrocarbures

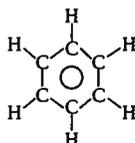
Les hydrocarbures constituent la classe de solvants organiques la plus répandue. Les solvants de cette catégorie ne contiennent que du carbone et de l'hydrogène dans leur structure moléculaire. On distingue les hydrocarbures aliphatiques, les hydrocarbures aromatiques ainsi que les mélanges pétroliers complexes.

Hydrocarbures aliphatiques

Les hydrocarbures aliphatiques saturés (alcanes, parfois appelés aussi paraffines) ont la formule C_nH_{2n+2} mais seules les molécules avec cinq carbones et plus sont des solvants liquides à la température normale. Les chaînes carbonées peuvent être linéaires (p. ex. n-hexane) ou ramifiées (p. ex. iso-pentane). Les hydrocarbures aliphatiques insaturés (p. ex. les alcènes, ou oléfines, comportant une double liaison) sont moins répandus comme solvants sauf pour certains produits naturels comme les terpènes. On peut également classer les composés cycliques, saturés ou non (sauf les aromatiques), dans la catégorie des hydrocarbures aliphatiques quoique la série alicyclique soit strictement leur classe d'adoption. On retrouve dans cette catégorie de nombreux solvants comme le cyclohexane. Les solvants aliphatiques sont utilisés notamment dans les adhésifs (p. ex. hexane).

Hydrocarbures aromatiques

La série aromatique comprend tous les liquides volatils dont la structure moléculaire comporte le noyau benzénique :



Les solvants aromatiques comportent généralement un seul cycle benzénique avec une ou plusieurs chaînes latérales comme le toluène et les xylènes. Les hydrocarbures aromatiques sont largement utilisés dans la formulation de peintures industrielles. Le benzène n'est plus utilisé comme solvant industriel mais peut se retrouver en très faibles quantités (généralement < 0,1 %) comme impureté dans d'autres solvants de la famille des hydrocarbures. On utilise communément le terme d'hydrocarbure aromatique lourd lorsqu'il y a trois carbones ou plus au total sur une ou plusieurs chaînes latérales.

Mélanges complexes

Les raffineries de pétrole, en plus de produire les hydrocarbures simples mentionnés plus haut (sauf les terpènes), fabriquent des mélanges complexes d'hydrocarbures aliphatiques, aromatiques ou comportant les deux séries à la fois. Ces coupes pétrolières se distinguent par leur gamme de point d'ébullition et leur composition chimique, selon les fractions dont ils sont dérivés et les divers traitements auxquelles elles sont soumises : hydrodésulfuration (pour enlever l'hydrogène sulfuré), hydrotraitement (hydrogénation catalytique qui convertit les aromatiques en alicycliques, aussi appelés naphténiques), extraction par solvant (pour extraire les aromatiques) ou reformage catalytique (pour augmenter notamment la teneur en aromatiques). Leur nomenclature est complexe et diffère souvent entre l'Europe et l'Amérique du Nord. On peut les regrouper en trois grandes catégories, comportant chacune plusieurs sous-catégories [12].

Les mélanges à plus faible point d'ébullition ou *special boiling range solvents*, dont les *VM & P naphtha*, sont utilisés principalement dans les adhésifs, les peintures et l'industrie du caoutchouc. La plupart sont désormais hydrotraités (p. ex. le *VM & P Naphtha HT* de Shell) et comportent peu de n-hexane. Dans certaines spécialités des proportions importantes d'aromatiques peuvent être ajoutées. De point d'ébullition plus élevé, les essences minérales (c'est-à-dire les *Mineral Spirits* en Amérique du Nord ou *White Spirits* en Europe), dont le solvant *Stoddard*, sont utilisées dans les peintures et pour le dégraissage. Ce sont des mélanges composés principalement d'hydrocarbures aliphatiques (et alicycliques) avec, selon les catégories, une fraction d'hydrocarbures aromatiques lourds, ne dépassant généralement pas 25 % (p. ex. le *Varsol* de ExxonMobil). La troisième grande catégorie est constituée des mélanges comprenant principalement des hydrocarbures aromatiques lourds, c'est-à-dire à haut point d'ébullition (p. ex. le *Solvesso 100* de ExxonMobil Europe), qui ont un pouvoir de dissolution sensiblement plus élevé que les catégories précédentes. Notons que la plupart des fabricants ou des fournisseurs proposent des produits dans les diverses gammes présentées ici. Le chapitre 4 présente la gamme des solvants pétroliers d'introduction plus récente.

• Alcools

Les alcools sont des solvants oxygénés de synthèse caractérisés par la fonction hydroxyle (p. ex. méthanol, éthanol, isopropanol). Les alcools résultent de la

substitution de l'hydrogène sur un hydrocarbure R-H par la fonction -OH pour donner R-OH (sauf dans le cas d'un hydrogène sur le cycle aromatique qui donne un *phénol* dont les propriétés chimiques sont passablement différentes des alcools). On parle d'alcool monohydrique s'il n'y a qu'une seule fonction hydroxyle par molécule.

La fonction hydroxyle produit une élévation importante du point d'ébullition et de la viscosité de l'hydrocarbure correspondant en raison de la présence de *liaisons hydrogène*. Les alcools sont solubles dans l'eau. La solubilité diminue cependant en fonction de la masse moléculaire de l'alcool. Les alcools ont des densités et des tensions superficielles semblables à plusieurs cétones aliphatiques. Ils possèdent une large gamme de taux d'évaporation et un excellent pouvoir solvant pour divers polymères et résines. Les alcools sont utilisés dans la formulation de détergents, de produits de soins personnels (p. ex. éthanol dans les parfums, isopropanol comme alcool à friction), de revêtements (p. ex. nitrate de cellulose), adhésifs et encres.

● Glycols

Les glycols sont des solvants de synthèse caractérisés par la double (diols ou dialcools) ou triple (triols) fonction hydroxyle. Par rapport aux alcools simples, l'augmentation du nombre de groupes hydroxyle entraîne une augmentation très importante de leur point d'ébullition et de leur viscosité ainsi qu'une solubilité accrue dans l'eau. Les glycols sont peu volatils. L'éthylène glycol est le plus connu des glycols. Il est utilisé notamment comme antigel dans les radiateurs d'automobile et dans les peintures en phase aqueuse. Le propylène glycol, moins toxique, est employé dans l'industrie alimentaire et pharmaceutique.

● Hydrocarbures halogénés

Les solvants halogénés sont des hydrocarbures dont un ou plusieurs atomes d'hydrogène ont été substitués par des halogènes (fluor, chlore, brome, iode). Les solvants chlorés sont les plus répandus suivis des fluorés. La plus grande partie des solvants halogénés est issue des hydrocarbures aliphatiques. Certains solvants halogénés, jadis très utilisés, ont été bannis en raison du protocole de Montréal pour la protection de la couche d'ozone stratosphérique. C'est le cas notamment du 1,1,1-trichloréthane et du 1,1,2-trichlorotrifluoréthane (CFC-113) dont nous présentons cependant les propriétés physico-chimiques en annexe à des fins de référence et de comparaison. Plusieurs solvants halogénés sont ininflammables. Ils ont tous des points d'ébullition et des densités plus élevés que ceux des hydrocarbures correspondants. Ils sont insolubles dans l'eau mais sont d'excellents solvants pour de nombreux polymères synthétiques, huiles et graisses minérales. Les solvants halogénés sont largement utilisés dans le dégraissage à la vapeur de surfaces métalliques (p. ex. trichloréthylène). Le chauffage des solvants halogénés et leur contact constant avec divers alliages dans de telles applications exigent la présence de stabilisants (p. ex. époxydes). D'autres applications incluent le décapage de peinture (dichlorométhane) et le nettoyage à sec (perchloréthylène). Les solvants fluorés et d'autres spécialités plus récentes sont traités au chapitre 4.

● Cétones

Les cétones sont caractérisées par la fonction carbonyle à laquelle se rattachent deux chaînes carbonées. Les aldéhydes possèdent le même groupement fonctionnel mais seulement une chaîne carbonée s'y rattache, l'autre chaîne étant

remplacée par un atome d'hydrogène. Les aldéhydes ne sont pas traités ici parce qu'ils sont employés surtout comme réactifs ou comme solvants dans des procédés en circuit fermé.

Les cétones de faibles poids moléculaires sont solubles dans l'eau. À partir de C_5 , cette solubilité est presque nulle. Les cétones sont des solvants à haut pouvoir de dissolution. Elles ont généralement des densités plus faibles que celles des autres solvants oxygénés. Ces propriétés permettent la formulation de revêtements à hauts pourcentages de solides, réduisant ainsi les quantités de composés organiques volatils (COV) émises dans l'atmosphère. Les cétones ont également de faibles tensions superficielles, une autre caractéristique intéressante pour la formulation des revêtements très garnissants. Elles offrent une large gamme de taux d'évaporation, de faibles viscosités et sont miscibles avec les hydrocarbures peu coûteux, des propriétés appréciées dans la formulation des peintures. En plus de leur utilisation dans la formulation de peintures et de laques, les cétones sont employées dans les nettoyants et les dégraissants industriels, les adhésifs et en extraction.

Les cétones les plus connues sont les suivantes : acétone, méthyléthylcétone (MEK) ou butanone, méthylisobutylcétone (MIBK). Ces solvants sont très volatils et inflammables.

● Esters

Les esters organiques, comme les acides organiques, sont caractérisés par le groupe carboxyle. Ils sont obtenus par réaction d'un acide organique avec un alcool. Les acétates sont les esters les plus utilisés comme solvants. Il existe également des acétates complexes ou mélanges produits à partir de fractions pétrolières (p. ex. la série *Exxate* de ExxonMobil Chemical Company, Houston). Les esters de faibles poids moléculaires sont partiellement solubles dans l'eau. Les esters ont de faibles tensions superficielles et se présentent dans une large gamme de taux d'évaporation. Ils sont utilisés notamment dans la formulation de peintures, de laques, d'adhésifs et d'encre. Certains esters d'introduction plus récente sont traités au chapitre 4.

● Éthers

Les éthers résultent de la déshydratation des alcools pour former la liaison R-O-R' où R et R' sont des chaînes carbonées aliphatiques ou aromatiques (R peut être égal à R' comme dans le cas de l'éther diéthylique). Les éthers aliphatiques sont peu solubles dans l'eau alors que les éthers alicycliques le sont plus. Les éthers ont tendance à former des peroxydes et des hydroperoxydes qui posent des problèmes de sécurité en raison de leur potentiel explosif. Les éthers aliphatiques de faibles poids moléculaires sont très volatils et inflammables.

Les éthers aliphatiques sont utilisés comme solvants réactionnels. Le MTBE (méthyl t-butyléther) est utilisé pour augmenter l'indice d'octane dans les carburants. Le tétrahydrofurane, un éther cyclique, est utilisé comme solvant de polymère pour l'application de revêtements industriels spécialisés et pour le collage de tuyaux en chlorure de polyvinyle et autres substrats. Plusieurs diéthers aliphatiques sont solubles dans l'eau et dans les hydrocarbures. Ils sont utilisés dans diverses applications spécialisées telles que la fabrication de circuits imprimés.

● Éthers de glycol

Les éthers de glycol [16-18] forment une large famille de solvants dérivés de l'éthylène glycol ou du propylène glycol qui sont, aux conditions normales d'utilisation, des liquides incolores à l'odeur d'éther, modérément volatils et de viscosité

moyenne. Ils possèdent un caractère amphiphile qui leur confère une affinité à la fois pour les composés polaires (eau, alcools, cétones par exemple) et les composés apolaires (hydrocarbures). Les éthers de glycols sont donc de bons solvants pour de nombreuses substances et peuvent être utilisés pour rendre miscibles des solvants autrement non-miscibles. Ainsi, plusieurs produits en phase aqueuse contiennent un éther de glycol comme solvant de couplage, cosolvant ou agent de coalescence (p. ex. nettoyants aqueux, peintures à l'eau). Leurs caractéristiques physico-chimiques intéressantes ont contribué à l'essor industriel des éthers de glycol notamment dans les peintures, les adhésifs, les encres, les vernis, les diluants, les décapants, les fluides de coupes, les produits d'entretien et les cosmétiques.

Les éthers de glycol sont principalement synthétisés par réaction d'alcool avec l'oxyde d'éthylène ou l'oxyde de propylène. De façon générale, un éther de glycol est formé par la fixation d'un radical alkyl par liaison éther sur l'une des fonctions alcool du glycol correspondant. La figure 2.1 présente les structures des différents types d'éther de glycol. Les éthers de glycol peuvent également posséder plusieurs groupements oxyéthyléniques ou oxypropyléniques; on parle alors d'éthers de glycol dérivés du di- ou triéthylène (ou propylène) glycol selon les cas. La réaction d'un éther de glycol avec un acide organique (en général l'acide acétique) fournit l'ester correspondant (p. ex. acétate de méthoxyéthanol). Il existe également des éthers de glycol dont les deux fonctions alcool sont alkylées, appelés dialkyléthers de l'éthylène ou du propylène glycol, ou glymes (p. ex. 2-méthoxy-méthoxyéthanol). Les glymes peuvent être obtenus par alkylation directe de l'éthylène ou du propylène glycol. Les éthers esters et les glymes, qui ne contiennent pas de fonction alcool, sont cependant généralement classés dans la grande famille des éthers de glycols de par leurs propriétés physico-chimiques, leurs utilisations et leurs propriétés toxiques qui en sont proches. Les séries dites éthyléniques et propyléniques regroupent l'ensemble des composés dans chacune des colonnes de la figure 2.1.

Le nombre d'éthers de glycol que l'on pourrait théoriquement synthétiser est considérable. Cependant, notamment en raison de considérations techniques,

Glycols	HO-CH ₂ -CH ₂ -OH Éthylène glycol	HO-CH ₂ -CH-CH ₃ OH Propylène glycol
Éthers de glycol	R-(O-CH ₂ -CH ₂) _n -OH n=1: éther dérivé de l'éthylène glycol* n=2: éther dérivé du diéthylène glycol n=3: éther dérivé du triéthylène glycol * même chose pour le propylène glycol	R-(O-CH ₂ -CH(CH ₃)) _n -OH R-(O-CH(CH ₃)-CH ₂) _n -OH isomère alpha (fonction alcool secondaire) isomère bêta (fonction alcool primaire)
Glymes (diéthers)	R-(O-CH ₂ -CH ₂) _n -OR n=1: glyme n=2: diglyme n=3: triglyme	R-(O-CH ₂ -CH(CH ₃)) _n -OR R-(O-CH(CH ₃)-CH ₂) _n -OR
Éthers Esters (acétates)	R-(O-CH ₂ -CH ₂) _n -O-C(=O)-CH ₃	R-(O-CH ₂ -CH(CH ₃)) _n -O-C(=O)-CH ₃ R-(O-CH(CH ₃)-CH ₂) _n -O-C(=O)-CH ₃
Radicaux (R)	CH ₃ - méthyl C ₂ H ₅ - éthyl	C ₃ H ₇ - n-propyl isopropyl C ₄ H ₉ - n-butyl isobutyl C ₆ H ₅ - phényl

Figure 2.1 - Structure chimique des éthers de glycols et dérivés.

financières et de disponibilité des matières premières, il est possible de réduire à une vingtaine le nombre de composés produits et utilisés de façon industrielle. Les éthers de glycols les plus courants sont présentés au tableau 2.3. On observe aujourd'hui une tendance à substituer les produits dérivés de l'éthylène glycol par ceux dérivés du propylène glycol, qui s'explique par la toxicité réduite de ces derniers (cf. chapitre 4). Les propriétés physico-chimiques de quelques éthers de glycol sont présentées au tableau 9 en annexe (cf. page 38).

Tableau 2.3 – Principaux éthers de glycol utilisés dans l'industrie

<i>Abréviation courante</i>	<i>Nom chimique</i>	<i>Type d'éther et radical employé (cf. figure 2.1)</i>
EGME*	éther monométhyle de l'éthylène glycol	éther, n = 1, méthyle
EGEE*	éther monoéthyle de l'éthylène glycol	éther, n = 1, éthyle
EGEE (A)	acétate de l'éther monoéthyle de l'éthylène glycol	éther ester, n = 1, éthyle
EGBE*	éther monobutyle de l'éthylène glycol	éther, n = 1, n-butyle
EGBE (A)*	acétate de l'éther monobutyle de l'éthylène glycol	éther ester, n = 1, n-butyle
DEGME	éther monométhyle du diéthylène glycol	éther, n = 2, méthyle
DEGBE	éther monobutyle du diéthylène glycol	éther, n = 2, n-butyle
DEGBE (A)	acétate de l'éther monobutyle du diéthylène glycol	éther ester, n = 2, n-butyle
DEGEE	éther monoéthyle du diéthylène glycol	éther, n = 2, éthyle
EGPhE*	éther monophényle de l'éthylène glycol	éther, n = 1, phényle
DEGDME	éther diméthyle du diéthylène glycol	glyme, n = 2, méthyle
DPGME	éther monométhyle du dipropylène glycol	éther, n = 2, méthyle
TPGME	éther monométhyle du tripropylène glycol	éther, n = 3, méthyle
2PG1ME*	éther monométhyle du propylène glycol	éther, n = 1, méthyle isomère alpha (fonction alcool secondaire)
2PG1ME (A)*	acétate de l'éther monométhyle du propylène glycol	éther ester, n = 1, méthyle isomère alpha (fonction ester sur la fonction alcool secondaire)
2PG1EE (A)	acétate de l'éther monoéthyle du propylène glycol	éther ester, n = 1, éthyle, isomère alpha (fonction ester sur la fonction alcool secondaire)
2PG1BE	éther monobutyle du propylène glycol	éther, n = 1, n-butyle isomère alpha (fonction alcool secondaire)

* composés produits en quantité supérieure à 5 000 tonnes par an aux États-Unis

● Autres solvants

Plusieurs autres solvants ont un usage industriel plus ou moins important. C'est le cas notamment des hydrocarbures azotés tels que les amines, les amides et les nitroparaffines. Les amines, dérivées de l'ammoniac par substitution d'un ou plusieurs atomes d'hydrogène par un radical alkyle ou aryle, sont surtout utilisées comme réactifs et milieu réactionnel. Les amides résultent du remplacement du groupe hydroxyle des acides carboxyliques par un groupe aminé. Le diméthylformamide (DMF) est un exemple d'amide utilisé comme solvant de polymères et de résines. Son emploi dans les procédés ouverts est toutefois limité en raison de sa toxicité. Les nitroparaffines ou nitroalcanes comportent la fonction $-NO_2$. Ils sont utilisés comme milieu réactionnel, intermédiaires de réaction, dans les procédés de séparation et dans certaines peintures industrielles.

Le disulfure de carbone est un excellent solvant mais sa toxicité et son inflammabilité limitent son utilisation industrielle. On l'utilise encore dans la fabrication de la viscosse et dans les laboratoires.

Une variété d'autres solvants d'introduction plus récente est traitée au chapitre 4.

● Mélanges

Les solvants organiques utilisés industriellement sont généralement des mélanges. C'est souvent le cas même pour les solvants dits « purs » qui peuvent contenir divers additifs ou impuretés. Ainsi, on incorpore des stabilisants aux solvants chlorés pour prévenir leur dégradation dans les appareils de dégraissage à la vapeur (p. ex. 0,5 % de 1,2-époxybutane dans le trichloréthylène). De plus des impuretés plus toxiques que le produit de base peuvent provenir du processus de fabrication. Ainsi le trichloréthylène peut contenir d'autres hydrocarbures aliphatiques chlorés, par exemple du tétrachlorure de carbone [19], le 1-bromopropane du 2-bromopropane et le 1-méthoxy-2-propanol être contaminé par l'isomère 2-méthoxy-1-propanol. Des normes de qualité peuvent imposer une concentration maximale à ces impuretés. Certains solvants, comme ceux dérivés de fractions pétrolières et décrits ci-dessus, peuvent comporter « naturellement » plusieurs centaines de substances. Par ailleurs les chimistes mélangent fréquemment les solvants afin d'obtenir des propriétés physico-chimiques intermédiaires ou complémentaires. Par exemple, dans certaines peintures, on utilisera un solvant oxygéné pour dissoudre la résine alors qu'une coupe pétrolière aliphatique sera ajoutée comme diluant. Le domaine des peintures industrielles est d'ailleurs celui où les mélanges de solvants sont le plus diversifié et complexe. Par ailleurs de nombreux nouveaux solvants de dégraissage, plus acceptables pour l'environnement, ont un pouvoir solvant faible qui doit être compensé par l'addition en proportion non négligeable de solvants classiques, notamment des composés chlorés (*cf. chapitre 4*).

Certains mélanges commerciaux destinés au dégraissage à la vapeur sont formulés directement comme azéotropes, ce qui signifie que la composition des vapeurs au point d'ébullition est la même que celle du liquide. Ces mélanges ne s'appauvriront donc pas en un des composants à l'usage. Il faut cependant se méfier des mélanges non azéotropiques, dont la formulation, et donc le danger, peut changer en cours d'utilisation. Par exemple un solvant halogéné pourra être ajouté à un solvant inflammable pour masquer le point d'éclair; son évaporation rendra cependant ce mélange dangereux.

L'une des conséquences de l'ubiquité des mélanges de solvants pour l'hygiéniste ou le médecin du travail est la nécessité d'obtenir la composition des préparations commerciales, principalement en consultant la fiche de données de sécurité (FDS) ou fiche signalétique (*cf. chapitre 9*). Cependant les FDS sont souvent

incomplètes et les propriétés toxicologiques mal documentées [20]. Au Canada, par exemple, comme dans la plupart des pays industrialisés, les fabricants de substances chimiques doivent fournir une fiche signalétique qui indique notamment le point d'éclair du produit. L'exercice est facile s'il s'agit d'un produit pur car le rédacteur de la fiche peut trouver le point d'éclair dans un livre de référence mais l'exercice s'avère plus compliqué et surtout onéreux si le produit est un mélange. Il est ainsi de pratique courante pour certains fournisseurs de mélanges, tels que les peintures et les solvants, de ne pas mesurer le point d'éclair du mélange mais d'indiquer un point d'éclair approximatif. Cette pratique illégale est dangereuse car il est extrêmement difficile de prédire le point d'éclair d'un mélange de solvants. En complément il est important de réaliser que l'utilisateur est le dernier dans la cascade : fabricants, fournisseurs-distributeurs, formulateurs, utilisateurs, avec un niveau souvent décroissant dans la qualité de l'information et du support fournis pour les aspects santé et sécurité du travail. Il ne faut pas hésiter à contacter la personne qui a préparé la FDS et dont le nom y apparaît obligatoirement, pour remonter à la source des renseignements ainsi que pour obtenir les fiches techniques qui sont souvent plus instructives sur la composition des mélanges, notamment en ce qui concerne les ingrédients dont la divulgation n'est pas requise (cf. aussi chapitre 9).

Des logiciels sont à la disposition des chimistes industriels pour la formulation de mélanges de solvants. Ces outils prennent en compte les propriétés physico-chimiques incluant les paramètres de solubilité afin de proposer à l'utilisateur des mélanges correspondant à ses besoins. Ces logiciels sont fournis gratuitement par les grandes sociétés chimiques à leurs clients (p. ex. *BP Solve* [21] et *Shell BlendPro* [22]). Ils ne tiennent cependant pas compte de la toxicité des ingrédients. D'autres logiciels plus récents le font. C'est le cas de *SUBTEC* [23] et de *PARIS II*¹. Le chapitre 3 présente ces divers outils de façon plus complète.

Bibliographie

1. Cohn K.H. — Definition and Practical Limitation of the Concept of Organic Solvents. In : *Chronic Effects of Organic Solvents on the Central Nervous System and Diagnostic Criteria*, World Health Organization. Regional Office for Europe, Copenhagen, 1985, 43-55.
2. Camford. — *Study on the Identification of Solvent Users and their VOC Emissions on Canada*. Camford Information Services Inc., Don Mills, 1991.
3. Mousel M.L., Picot A. — Les solvants : des toxiques banalisés. In : *Les Risques du travail. Pour ne pas perdre sa vie à la gagner*. Éditions La Découverte, Paris, 1985, 336-348.
4. Camford. — *CPI Product Profiles : Methanol (methyl alcohol)*. Camford Information Services Inc., Scarborough, 1997.
5. PRA. — *Advice Centre : Solvents*. Paint Research Association, Teddington, Middlesex, UK, 2000 (<http://www.pra.org.uk/advice/solvents.htm>, page Web visitée en novembre 2000).
6. Baker J. — Special Report Solvents : Holding the chemical industry together. *European Chemical News*, 1998, 69, 1830, 20.
7. Riddick J.A., Bunger W.B., Sakano T.K. — *Organic Solvents. Physical Properties and Methods of Purification*. A. Weissberger, editor. John Wiley & Sons, New York, 1986.
8. Archer W.L. — *Industrial Solvents Handbook*. Marcel Dekker, New York, 1996.
9. Huntsman. — *JEFFSOL™ Carbonates Comparative Solvents Data*. Huntsman Corporation, Houston, 1995.
10. Lide D.R., editor. — *Properties of Organic Solvents Version 2.0*. CRC Press, Inc. (banque de données sur disque optique compact), Boca Raton, 1996.
11. Flick E.W. — *Industrial Solvents Handbook*. Noyes Data Corporation, Westwood, 1998.

1. *Program for Assisting the Replacement of Industrial Solvents*, logiciel développé par le *United States Environmental Protection Agency* et commercialisé par la société *Technical Database Services* (New York, NY) <http://www.tds-tds.com/parfact.htm>

12. IARC. — Some Petroleum Solvents. In : *IARC Monographs on the Evaluation of Carcinogenic Risks to Humans*, volume 47, International Agency for Research on Cancer, Lyon, France, 1989, 43-77.
13. ASTM. — *Standard Test Methods for Evaporation Rates of Volatile Liquids by Shell Thin-Film Evaporometer (D3539-87)*. American Society For Testing and Materials, West Conshohocken, 1996.
14. Office de la langue française. — *Le Grand Dictionnaire terminologique*. Version 3.70 pour Windows. CEDROM-SNi, Outremont, 1997.
15. ASTM. — *Standard Test Method for Kauri-Butanol Value of Hydrocarbon Solvents (D1133-97)*. American Society For Testing and Materials, West Conshohocken, 1997.
16. Cragg S.T., Boatman R.J. — Glycol Ethers : Ethers of Propylene, Butylene Glycols, and Other Derivatives. In : E. Bingham, B. Cohrssen, C.H. Powell, editors, *Patty's Toxicology*, volume 7. John Wiley & Sons, New York, fifth edition, 2001, 271-396.
17. Boatman R.J., Knaak J.B. — Ethers of Ethylene Glycol and Derivatives. In : E. Bingham, B. Cohrssen, C.H. Powell, editors, *Patty's Toxicology*, volume 7. John Wiley & Sons, New York, 2001, fifth edition, 73-270.
18. Institut national de la santé et de la recherche médicale. — *Éthers de glycol : quels risques pour la santé?* Inserm, Paris, 1999.
19. Maître A., Pironneau S., Taddéi P. — Hydrocarbures aliphatiques chlorés. *Encyclopédie Médico-Chirurgicale, Toxicologie-Pathologie professionnelle (16-046-E-10)*. Elsevier, Paris, 1998, 1-8.
20. Welsh M.S., Lamesse M., Karpinski E. — The Verification of Hazardous Ingredients Disclosures in Selected Material Safety Data Sheets. *Applied Occupational and Environmental Hygiene*, 2000, 15, 5, 409-420.
21. BP Chemicals. — *BP Solve Version 3 for Windows*. BP Chemicals Limited, London, 1996.
22. Shell. — *Shell BlendPro™ Computer Blend Program*. Shell Chemical Company, Houston, 1996.
23. Olsen E., Olsen I., Wallstrøm E., Rasmussen D. — The SUBTEC Software Package : A Tool for Risk Assessment and Risk Reduction by Substitution. *Occupational Hygiene*, 1998, 4, 3-6, 333-353.

Annexe

Annexe

Propriétés physico-chimiques
de soixante-deux solvants communs

Tableau 1 – Hydrocarbures aliphatiques et alicycliques simples

Nom	n-Hexane	n-Heptane	n-Octane	n-Nonane	Cyclohexane	Méthylcyclohexane	Décaline
Formule chimique	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_4\text{CH}_3$	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_5\text{CH}_3$	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_6\text{CH}_3$	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_7\text{CH}_3$	C_6H_{12}	C_7H_{14}	$\text{C}_{10}\text{H}_{18}$ (cis + trans)
N° CAS ¹	110-54-3	142-82-5	111-65-9	111-84-2	110-82-7	108-87-2	91-17-8
Masse molaire ²	86,177	100,203	114,230	128,257	84,161	98,188	138,252
Densité ³	0,65484 ₂₅	0,68372 ₂₀	0,69862 ₂₅	0,71372 ₂₅	0,77389 ₂₅	0,76506 ₂₅	0,8789 ₂₅
Point d'ébullition ⁴	68,736	98,424	125,673	150,818	80,730	100,934	191,7
Tension de vapeur ⁵	20,17 ₂₅	6,09 ₂₅	1,87 ₂₅	0,57 ₂₅	13,04 ₂₅	6,1 ₂₅	1,0 _{25,33}
Chaleur de vaporisation ⁶	31,552 ₂₅	36,55 ₂₅	41,49 ₂₅	46,442 ₂₅	32,89 ₂₅	35,359 ₂₅	41,09 _{25,17}
Taux d'évaporation ⁷	6,82	3,18	1,23	0,415	5,6	2,99	0,10
Viscosité ⁸	0,2942 ₂₅	0,3967 ₂₅	0,5151 ₂₅	0,6696 ₂₅	0,898 ₂₅	0,685 ₂₅	2,415 ₂₅
Tension superficielle ⁹	17,94 ₂₅	19,70 ₂₅	21,18 ₂₅	22,38 ₂₅	24,65 ₂₅	23,29 ₂₅	29,36 _{25,6}
δ_{D}^{10}	15,0	15,3	15,6	15,8	16,8	16,0	18,0
δ_{P}^{10}	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
δ_{H}^{10}	0,0	0,0	0,0	0,0	0,2	1,0	0,0
Indice Kb ¹¹	30,5	30	24,5	—	56	—	—
Constante diélectrique ¹²	1,8799 ₂₅	1,9246 ₂₀	1,948 ₂₀	1,970 ₂₀	2,02431 ₂₀	2,020 ₂₀	2,1542 ₂₅
Point d'éclair ¹³	-22	-4	13	31	-20	-4	58

1. Numéro d'enregistrement du *Chemical Abstracts Service*, une division de l'*American Chemical Society* (Columbus, OH).

2. Masse molaire relative, sans unité.

3. g · cm⁻³. La température de référence est indiquée en °C en indice.

4. °C à 1 atm.

5. kPa. La température de référence est indiquée en °C en indice.

6. kJ/mol. La température de référence est indiquée en °C en indice.

7. Acétate de butyle normal = 1 à 25 °C, sans unité.

8. centipoise (cP). La température de référence est indiquée en °C en indice.

9. dyn · cm⁻¹. La température de référence est indiquée en °C en indice.

10. Paramètres de solubilité de Hansen en (J · cm⁻³)^{1/2} · δ_{D} = composante de dispersion, δ_{P} = composante polaire, δ_{H} = composante de liaison hydrogène.

11. Données issues de la littérature commerciale de divers fournisseurs de solvants.

12. Sans unité. La température de référence est indiquée en °C en indice.

13. En °C, d'après [10]. Diverses méthodes de détermination sont utilisées, ce qui peut introduire des différences de quelques °C.

Tableau 2 – Hydrocarbures aromatiques simples

Nom	Toluène	ortho-Xylène	méta-Xylène	para-Xylène	Ethylbenzène	Cumène	Mésitylène
Formule chimique	$C_6H_5CH_3$	$o-C_6H_4(CH_3)_2$	$m-C_6H_4(CH_3)_2$	$p-C_6H_4(CH_3)_2$	$C_6H_5CH_2CH_3$	$C_6H_5CH(CH_3)_2$	$Sym-C_6H_3(CH_3)_3$
N° CAS ¹	108-88-3	95-47-6	108-38-3	106-42-3	100-41-4	98-82-8	108-67-8
Masse moléculaire ²	92,140	106,167	106,167	106,167	106,167	120,194	120,194
Densité ³	0,86219 ₂₅	0,87594 ₂₅	0,86009 ₂₅	0,85661 ₂₅	0,86253 ₂₅	0,85743 ₂₅	0,86111 ₂₅
Point d'ébullition ⁴	110,630	144,429	139,120	138,359	136,193	152,411	164,743
Tension de vapeur ⁵	3,8036 ₂₅	0,88 ₂₅	1,1 ₂₅	1,2 ₂₅	1,3 ₂₅	0,61 ₂₅	0,33 ₂₅
Chaleur de vaporisation ⁶	37,990 ₂₅	10,381 ₂₅	42,656 ₂₅	42,376 ₂₅	42,25 ₂₅	45,141 ₂₅	47,480 ₂₅
Taux d'évaporation ⁷	2	0,54	0,51	0,72	0,84	0,43	0,22
Viscosité ⁸	0,5525 ₂₅	0,756 ₂₅	0,581 ₂₅	0,605 ₂₅	0,6373 ₂₅	0,739 ₂₅	1,154 ₂₀
Tension superficielle ⁹	27,92 ₂₅	29,49 ₂₅	28,10 ₂₅	27,76 ₂₅	28,48 ₂₅	27,68 ₂₅	28,32 ₂₅
δ_D^{10}	18,0	17,8	18,0 (total)	17,6	17,8	16,2	18,0
δ_P^{10}	1,4	1,0		1,0	0,6	7,0	0,0
δ_H^{10}	2,0	3,1		3,1	1,4	0,0	0,6
Indice Kb ¹¹	105	98 (mélange des 3 isomères)	98 (mélange des 3 isomères)	93	96	-	-
Constante diélectrique ¹²	2,3807 ₂₅	2,568 ₂₀	2,3742 ₂₀	2,2699 ₂₀	2,4042 ₂₀	2,3833 ₂₀	2,273 ₂₅
Point d'éclair ¹³	4	32	27	27	21	36	50

1. Numéro d'enregistrement du *Chemical Abstracts Service*, une division de l'*American Chemical Society* (Columbus, OH).

2. Masse moléculaire relative, sans unité.

3. $g \cdot cm^{-3}$. La température de référence est indiquée en °C en indice.

4. °C à 1 atm.

5. kPa. La température de référence est indiquée en °C en indice.

6. kJ/mol. La température de référence est indiquée en °C en indice.

7. Acétate de butyle normal = 1 à 25 °C, sans unité.

8. centipoise (cP). La température de référence est indiquée en °C en indice.

9. dyne cm^{-1} . La température de référence est indiquée en °C en indice.

10. Paramètres de solubilité de Hansen en $(J \cdot cm^{-3})^{1/2}$. δ_D = composante de dispersion, δ_P = composante de liaison hydrogène.

11. Données issues de la littérature commerciale de divers fournisseurs de solvants.

12. Sans unité. La température de référence est indiquée en °C en indice.

13. En °C, d'après [10]. Diverses méthodes de détermination sont utilisées, ce qui peut introduire des différences de quelques °C.

Tableau 3 – Mélanges complexes d'hydrocarbures pétroliers

Nom	Special boiling range solvents (bas point d'ébullition) ¹	VM & P Naphtiba HT ²	White spirits ou essences minérales ¹	Varsol 60 ³	Mélanges d'hydrocarbures aromatiques lourds (à haut point d'ébullition) ¹	Solvesso 100 ³
Nombre de carbonés	4-11		7-12		8-16	
Point d'ébullition ⁴	30-160	118 (initial)-140 (final)	130-220	185 (initial)-216 (final)	160-300	163 (initial)-180 (final)
Densité ⁵	0,670-0,760	0,753	0,750-0,797	0,801	0,879-0,999	0,877
Taux d'évaporation ⁶	19-0,6	1,5	0,5- < 0,01	0,025	0,21- < 0,01	0,15
Viscosité ⁷	0,3-0,75	0,68	0,74-1,65	1,22	0,8-2,6	0,83
Indice Kauri-butanol	30-36	32-38	29-33	35	85-89	90
% d'aromatiques	< 0,02-50 ⁸	< 0,5	< 1-45 ⁹	24	> 80	> 99
Point d'éclair ¹⁰	0-32	10	25-80	64	45-110	49

1. D'après [12].

2. Tiré de la littérature commerciale de Shell et de [8]. D'autres fabricants proposent des produits semblables.

3. Tiré de la littérature commerciale de ExxonMobil Europe. D'autres fabricants proposent des produits semblables.

4. °C à 1 atm.

5. g · cm⁻³. La température de référence est de 15 °C.

6. Acétate de butyle normal = 1 à 25 °C, sans unité.

7. centipoise (cP).

8. Depuis < 0,02 % pour les hydrotraités jusqu'à 50 % dans certaines formulations avec addition d'aromatiques comme le toluène.

9. Depuis < 1 % pour les hydrotraités jusqu'à 45 % pour certains hydrodésulfurés; habituellement < 25 %.

10. En °C.

Tableau 4 – Alcools et glycols

Nom	Méthanol	Éthanol	Isopropanol	n-Butanol	Cyclohexanol	Éthylène glycol	Propylène glycol
Formule chimique	CH ₃ OH	CH ₃ CH ₂ OH	CH ₃ CHOHCH ₃	CH ₃ (CH ₂) ₃ OH	C ₆ H ₁₂ O	(CH ₂ OH) ₂	CH ₂ CHOHCH ₂ OH
N° CAS ¹	67-56-1	64-17-5	67-63-0	71-36-3	108-93-0	107-21-1	57-55-6
Masse molaire ²	32,042	46,069	60,096	74,122	100,160	62,068	76,095
Densité ³	0,78637 ₂₅	0,78493 ₂₅	0,78126 ₂₅	0,80575 ₂₅	0,9684 ₂₅	1,1100	1,0328 ₂₅
Point d'ébullition ⁴	64,546	78,293	82,242	117,725	161,10	197,54	187,6
Tension de vapeur ⁵	16,937 ₂₅	7,870 ₂₅	5,775 ₂₅	0,910 ₂₅	0,11 ₃₀	0,0117 ₂₅	0,0177 ₂₅
Chaleur de vaporisation ⁶	37,43 ₂₅	42,309 ₂₅	45,52 ₂₅	52,34 ₂₅	62,01 ₂₅	67,8 ₂₅	64,4 ₂₅
Taux d'évaporation ⁷	2,10	1,70	1,70	0,44	0,05	0,01	0,01
Viscosité ⁸	0,5513 ₂₅	1,0826 ₂₅	2,0436 ₂₅	2,5710 ₂₅	54,54 ₂₅	17,13 ₂₅	43,22 ₂₅
Tension superficielle ⁹	22,30 ₂₅	22,18 ₂₅	21,00 ₂₅	23,35 ₂₅	33,91 ₂₅	47,99 ₂₅	36,51 ₂₅
δ _D ¹⁰	15,1	15,8	15,8	16,0	17,4	17,0	16,8
δ _P ¹⁰	12,3	8,8	6,1	5,7	4,1	11,0	9,4
δ _H ¹⁰	22,3	19,4	16,4	15,8	13,5	26,0	23,3
Constante diélectrique ¹¹	32,66 ₂₅	24,25 ₂₅	19,92 ₂₅	17,51 ₂₅	15,0 ₂₅	37,7 ₂₅	32,0 ₂₅
Point d'éclair ¹²	11	13	12	37	68	111	99

1. Numéro d'enregistrement du *Chemical Abstracts Service*, une division de l'*American Chemical Society* (Columbus, OH).

2. Masse molaire relative, sans unité.

3. g · cm⁻³. La température de référence est indiquée en °C en indice.

4. °C à 1 atm.

5. kPa. La température de référence est indiquée en °C en indice.

6. kJ/mol. La température de référence est indiquée en °C en indice.

7. Acétate de butyle normal = 1 à 25 °C, sans unité.

8. centipoise (cP). La température de référence est indiquée en °C en indice.

9. dyne · cm⁻¹. La température de référence est indiquée en °C en indice.

10. Paramètres de solubilité de Hansen en (l · cm⁻³)^{1/2}. δ_D = composante de dispersion, δ_P = composante polaire, δ_H = composante de liaison hydrogène.

11. Sans unité. La température de référence est indiquée en °C en indice.

12. En °C, d'après [10]. Diverses méthodes de détermination sont utilisées, ce qui peut introduire des différences de quelques °C.

Tableau 5 – Hydrocarbures halogénés

Nom	Dichlorométhane	Chloroforme	Trichloréthylène	1,1,1-Trichloréthane	Tétrachlorure de carbone	Perchloréthylène	1,1,2-Trichlorotrifluoroéthane
Formule chimique	CH ₂ Cl ₂	CHCl ₃	Cl ₂ C = CHCl	CH ₃ CCl ₃	CCl ₄	Cl ₂ C = CCl ₂	CFC ₂ CF ₂ Cl
N° CAS ¹	75-09-2	67-66-3	79-01-6	71-55-6	56-23-5	127-18-4	76-13-1
Masse moléculaire ²	84,933	119,378	131,389	133,405	153,823	165,834	187,376
Densité ³	1,31678 ₂₅	1,47970 ₂₅	1,4642 ₂₀	1,3299 ₂₅	1,58436 ₂₅	1,61432 ₂₅	1,56354 ₂₅
Point d'ébullition ⁴	39,64	61,178	87,19	74,083	76,638	121,07	47,633
Tension de vapeur ⁵	58,10 ₂₅	25,97 ₂₅	6,307 ₂₅	16,49 ₂₅	15,36 ₂₅	2,462 ₂₅	48,48 ₂₅
Chaleur de vaporisation ⁶	28,56 ₂₅	33,35 ₂₀	34,27 ₂₅	32,390 ₂₅	32,41 ₂₅	39,61 ₂₅	28,70 ₂₅
Taux d'évaporation ⁷	14,50	10,20	6,39	6,00	7,52	2,59	21,00
Viscosité ⁸	0,42 ₂₅	0,5357 ₂₅	0,532 ₂₅	0,795 ₂₅	0,9004 ₂₅	0,84 ₂₅	0,74 ₂₅
Tension superficielle ⁹	27,32 ₂₅	26,53 ₂₅	28,8 ₂₅	25,14 ₂₅	26,12 ₂₅	31,59 ₂₅	17,82 ₂₅
δ _d ¹⁰	18,2	17,8	18,0	16,8	17,8	19,0	14,8
δ _p ¹⁰	6,4	3,1	3,1	4,3	0,0	6,5	1,6
δ _t ¹⁰	6,2	5,7	5,3	2,0	0,6	2,9	0,0
Indice Kb ¹¹	136	—	129	124	104	92	37
Constante diélectrique ¹²	8,93 ₂₅	4,806 ₂₀	3,39 ₂₀	7,24 ₂₀	2,23790 ₂₀	2,280 ₂₅	2,41 ₂₅
Point d'éclair ¹³	—	—	—	—	—	—	—

1. Numéro d'enregistrement du *Chemical Abstracts Service*, une division de l'*American Chemical Society* (Columbus, OH).

2. Masse moléculaire relative, sans unité.

3. g · cm⁻³. La température de référence est indiquée en °C en indice.

4. °C à 1 atm.

5. kPa. La température de référence est indiquée en °C en indice.

6. kJ/mol. La température de référence est indiquée en °C en indice.

7. Acétate de butyle normal = 1 à 25 °C, sans unité.

8. centipoise (cP). La température de référence est indiquée en °C en indice.

9. dyne · cm⁻¹. La température de référence est indiquée en °C en indice.

10. Paramètres de solubilité de Hansen en (J · cm⁻³)^{1/2}. δ_d = composante de dispersion, δ_p = composante polaire, δ_t = composante de liaison hydrogène.

11. Données issues de la littérature commerciale de divers fournisseurs de solvants.

12. Sans unité. La température de référence est indiquée en °C en indice.

13. Substances n'ayant pas de point d'éclair.

Tableau 6 – Cétones

Nom	Acétone	Butanone	2-Pentanone	Cyclohexanone	4-Méthyl-2-pentanone	2-Heptanone	2,6-Diméthyl-4-heptanone
Formule chimique	C ₃ H ₆ O	C ₄ H ₈ O	C ₅ H ₁₀ O	C ₆ H ₁₀ O	(CH ₃) ₂ CHCH ₂ COCH ₃	C ₇ H ₁₄ O	C ₉ H ₁₈ O
N° CAS ¹	67-64-1	78-93-3	107-87-9	108-94-1	108-10-1	110-43-0	108-83-8
Masse moléculaire ²	58,08	72,107	86,133	98,144	100,160	114,187	142,241
Densité ³	0,78440 ₂₅	0,7997 ₂₅	0,8015 ₂₅	0,943 ₂₅	0,7963 ₂₅	0,81123 ₂₅	0,8022 ₂₅
Point d'ébullition ⁴	56,067	79,583	102,262	155,65	117,4	151,058	168,24
Tension de vapeur ⁵	30,806 ₂₅	12,079 ₂₅	4,720 ₂₅	0,64 ₂₅	2,51 ₂₅	0,514 ₂₅	0,22 ₂₅
Chaleur de vaporisation ⁶	31,3 ₂₅	34,51 ₂₅	38,4 ₂₅	44,89 ₂₅	41,0 ₂₅	47,24 ₂₅	50,92 ₂₅
Taux d'évaporation ⁷	6,06	4,03	2,40	0,30	1,70	0,34	0,18
Viscosité ⁸	0,3029 ₂₅	0,378 ₂₅	0,50 ₂₅	2,00 ₂₅	0,5463 ₂₅	0,74 ₂₅	0,96 ₂₅
Tension superficielle ⁹	22,68 ₂₅	23,97 ₂₅	24,90 ₂₅	34,05 ₂₅	23,26 ₂₅	26,12 ₂₅	24,10 ₂₅
δ _d ¹⁰	15,5	16,0	15,8	17,8	15,3	16,2	16,0
δ _p ¹⁰	10,4	9,0	9,0	6,3	6,1	5,7	3,7
δ _v ¹⁰	7,0	5,1	7,6	5,1	4,1	4,1	4,1
Constante diélectrique ¹¹	20,56 ₂₅	18,51 ₂₀	15,38 ₂₀	16,10 ₂₀	13,11 ₂₅	11,98 ₂₀	9,91 ₂₀
Point d'éclair ¹²	-20	-9	7	44	18	39	49

1. Numéro d'enregistrement du *Chemical Abstracts Service*, une division de l'*American Chemical Society* (Columbus, OH).

2. Masse moléculaire relative, sans unité.

3. g · cm⁻³. La température de référence est indiquée en °C en indice.

4. °C à 1 atm.

5. kPa. La température de référence est indiquée en °C en indice.

6. kJ/mol. La température de référence est indiquée en °C en indice.

7. Acétate de butyle normal = 1 à 25 °C, sans unité.

8. centipoise (cP). La température de référence est indiquée en °C en indice.

9. dyne · cm⁻¹. La température de référence est indiquée en °C en indice.

10. Paramètres de solubilité de Hansen en (J · cm⁻³)^{1/2}. δ_d = composante de dispersion, δ_p = composante polaire, δ_v = composante de liaison hydrogène.

11. Sans unité. La température de référence est indiquée en °C en indice.

12. En °C, d'après [10]. Diverses méthodes de détermination sont utilisées, ce qui peut introduire des différences de quelques °C.

Tableau 7 – Esters

Nom	Acétate d'éthyle	Acétate de propyle	Acétate d'isopropyle	Acétate de butyle	Acétate d'isobutyle	Acétate d'amyle	Acétate de 2-éthylhexyle
Formule chimique	C ₄ H ₈ O ₂	C ₅ H ₁₀ O ₂	C ₅ H ₁₀ O ₂	C ₆ H ₁₂ O ₂	C ₆ H ₁₂ O ₂	C ₇ H ₁₄ O ₂	C ₁₀ H ₂₀ O ₂
N° CAS ¹	141-78-6	109-60-4	108-21-4	123-86-4	110-19-0	628-63-7	103-09-3
Masse molaire ²	88,106	102,133	102,133	116,160	116,160	130,186	172,267
Densité ³	0,8945 ₂₅	0,8830 ₂₅	0,8702 ₂₅	0,8763 ₂₅	0,8677 ₂₅	0,8719 ₂₅	0,8718 ₂₀
Point d'ébullition ⁴	77,111	101,536	88,601	126,061	116,6	149,2	198,6
Tension de vapeur ⁵	12,600 ₂₅	4,497 ₂₅	7,892 ₂₅	1,664 ₂₅	2,389 ₂₅	1,29 ₂₅	0,053 ₂₀
Chaleur de vaporisation ⁶	35,62 ₂₅	39,82 ₂₅	37,20 ₂₅	43,64 ₂₅	39,2 ₂₅	41,0 ₁₀₀	48,1 ₂₅
Taux d'évaporation ⁷	4,94	2,30	3,50	1,00	1,50	0,40	0,03
Viscosité ⁸	0,426 ₂₅	0,551 ₂₅	0,52 ₂₅	0,68 ₂₅	0,651 ₂₅	0,862 ₂₅	1,41 ₂₅
Tension superficielle ⁹	23,70 ₂₅	23,82 ₂₅	21,79 ₂₅	24,81 ₂₅	23,12 ₂₅	25,07 ₂₅	26,30 ₂₅
δ _v ¹⁰	15,8	15,4	15,0	15,8	15,1	15,7	16,2
δ _p ¹⁰	5,3	4,3	4,5	3,7	3,7	3,3	5,9
δ _n ¹⁰	7,2	7,6	8,2	6,3	6,3	6,8	12,1
Constante diélectrique ¹¹	6,053 ₂₀	6,002 ₂₀	—	5,01 ₂₀	5,29 ₂₀	4,75 ₂₀	—
Point d'éclair ¹²	-4	13	2	22	18	16	71

1. Numéro d'enregistrement du *Chemical Abstracts Service*, une division de l'*American Chemical Society* (Columbus, OH).

2. Masse molaire relative, sans unité.

3. g . cm⁻³. La température de référence est indiquée en °C en indice.

4. °C à 1 atm.

5. kPa. La température de référence est indiquée en °C en indice.

6. kJ/mol. La température de référence est indiquée en °C en indice.

7. Acétate de butyle normal = 1 à 25 °C, sans unité.

8. centipoise (cP). La température de référence est indiquée en °C en indice

9. dyne . cm⁻¹. La température de référence est indiquée en °C en indice

10. Paramètres de solubilité de Hansen en (J . cm⁻³)^{1/2}. δ_v = composante de dispersion, δ_p = composante polaire, δ_n = composante de liaison hydrogène.

11. Sans unité. La température de référence est indiquée en °C en indice.

12. En °C, d'après [10]. Diverses méthodes de détermination sont utilisées, ce qui peut introduire des différences de quelques °C.

Tableau 8 – Éthers

Nom	Tétrahydrofurane	Éther éthylique	Méthyl t-butyléther	1,4-Dioxane	1,2-Diméthoxyéthane	Anisole	2,5,8-Trioxanonane
Formule chimique	C ₄ H ₈ O	(C ₂ H ₅) ₂ O	C ₅ H ₁₂ O	C ₆ H ₁₀ O ₂	CH ₃ OCH ₂ CH ₂ OCH ₃	C ₆ H ₅ OCH ₃	(CH ₃ OCH ₂ CH ₂) ₃ O
N° CAS ¹	109-99-9	60-29-7	1634-04-4	123-91-1	110-71-4	100-66-3	111-96-6
Masse moléculaire ²	72,107	74,122	88,149	88,106	90,122	108,140	134,175
Densité ³	0,8892 ₂₀	0,7078 ₂₅	0,7405 ₂₀	1,0279 ₂₅	0,86370 ₂₅	0,9893 ₂₅	0,9384 ₂₅
Point d'ébullition ⁴	65,965	34,431	55,2	101,320	84,50	153,60	159,76 (décomposition)
Tension de vapeur ⁵	21,60 ₂₅	71,622 ₂₅	33,2 ₂₀	4,9 ₂₅	6,40 ₂₀	0,472 ₂₅	0,45 ₂₅
Chaleur de vaporisation ⁶	32,0 ₂₅	27,2 ₂₅	27,94 ₂₅	35,585 ₁₀₁	36,39 ₂₅	46,84 ₂₅	43,145 _{159,76}
Taux d'évaporation ⁷	6,30 ₂₅	11,80 ₂₅	8,14 ₂₅	2,17 ₂₅	4,02 ₂₅	0,322 ₂₅	0,15 ₂₅
Viscosité ⁸	0,460 ₂₅	0,22 ₂₅	0,34 ₂₅	1,19 ₂₅	1,1 ₂₀	1,01 ₂₅	0,989 ₂₅
Tension superficielle ⁹	26,4 ₂₅	16,50 ₂₅	19,07 ₂₅	32,80 ₂₅	22,9 ₂₀	34,47 ₂₅	29,5 ₂₅
δ^d ¹⁰	16,8	14,5	13,7	19,0	15,2	17,8	15,8
δ^p	5,7	2,9	3,5	1,8	2,7	4,1	6,2
δ^h	8,0	5,1	5,1	7,4	7,6	6,7	9,2
Constante diélectrique ¹¹	7,58 ₂₅	4,197 ₂₅	—	2,209 ₂₅	7,20 ₂₅	4,33 ₂₅	—
Point d'éclair ¹²	-14	-45	-30	12	-2	52	67

1. Numéro d'enregistrement du *Chemical Abstracts Service*, une division de l'*American Chemical Society* (Columbus, OH).

2. Masse moléculaire relative, sans unité.

3. g . cm⁻³. La température de référence est indiquée en °C en indice.

4. °C à 1 atm.

5. kPa. La température de référence est indiquée en °C en indice.

6. kJ/mol. La température de référence est indiquée en °C en indice.

7. Acétate de butyle normal = 1 à 25 °C, sans unité.

8. centipoise (cP). La température de référence est indiquée en °C en indice.

9. dyne . cm⁻¹. La température de référence est indiquée en °C en indice.

10. Paramètres de solubilité de Hansen en (J . cm⁻³)^{1/2}. δ^d = composante de dispersion, δ^p = composante polaire, δ^h = composante de liaison hydrogène.

11. Sans unité. La température de référence est indiquée en °C en indice.

12. En °C d'après [10] et deux fabricants pour le MTBE. Diverses méthodes de détermination sont utilisées, ce qui peut introduire des différences de quelques °C.

Tableau 9 – Éthers de glycol

Nom	2-Méthoxyéthanol	1-Méthoxy-2-propanol	2-Butoxyéthanol	2-(2-méthoxyéthoxy)-éthanol	Acétate de 1-méthoxy-2-propyle	(2-Méthoxy-méthyléthoxy)-propanol	Éther monométhylglycol du tripropylène glycol
Formule chimique	C ₃ H ₈ O ₂	C ₄ H ₁₀ O ₂	C ₆ H ₁₄ O ₂	C ₅ H ₁₂ O ₃	C ₆ H ₁₂ O ₃	C ₇ H ₁₆ O ₃	C ₁₀ H ₂₂ O ₃
N° CAS ¹	109-86-4	107-98-2	111-76-2	111-77-3	108-65-6	34590-94-8	25498-49-1
Masse molaire ²	76,095	90,1218	118,175	120,148	132,16	148,2016	206,2814
Densité ³	0,96024 ₂₅	0,971 ₂₅	0,89625 ₂₅	1,0167 ₂₅	0,962 ₂₅	0,949 ₂₅	0,965 ₂₅
Point d'ébullition ⁴	124,6	118,5	170,2	194,1	145,8	184	242,4
Tension de vapeur ⁵	1,3 ₂₅	1,6 ₂₅	0,114 ₂₅	0,024 ₂₅	0,5 ₂₀	0,073 ₂₅	0,003 ₂₅
Chaleur de vaporisation ⁶	45,17 ₂₅	—	56,59 ₂₅	46,57 ₂₅	—	—	—
Taux d'évaporation ⁷	0,53 ₂₅	0,814 ₂₅	0,072 ₂₅	0,018 ₂₅	0,368 ₂₅	0,02 ₂₅	< 0,01 ₂₅
Viscosité ⁸	1,60 ₂₅	1,68 ₂₅	3,15 ₂₅	3,48 ₂₅	1,09 ₂₅	3,44 ₂₅	5,8 ₂₅
Tension superficielle ⁹	30,84 ₂₅	27,50 ₂₅	27,4 ₂₅	28,49 ₂₅	27,70 ₂₅	28,25 ₂₅	30 ₂₅
δ_d^{10}	16,2	15,6	16,0	16,2	16,1	15,1	14,9
δ_p^{10}	9,2	7,2	6,2	7,8	6,1	6,8	6,8
δ_h^{10}	16,4	16,6	11,4	12,7	6,6	12,6	10,4
Constante diélectrique ¹¹	16,93 ₂₅	—	9,30 ₂₅	—	—	—	—
Point d'éclair ¹²	39	32	69	96	42	86	121

1. Numéro d'enregistrement du *Chemical Abstracts Service*, une division de l'*American Chemical Society* (Columbus, OH).

2. Masse molaire relative, sans unité.

3. g . cm⁻³. La température de référence est indiquée en °C en indice.

4. °C à 1 atm.

5. kPa. La température de référence est indiquée en °C en indice.

6. kJ/mol. La température de référence est indiquée en °C en indice.

7. Acétate de butyle normal = 1 à 25 °C, sans unité.

8. centipoise (cP). La température de référence est indiquée en °C en indice.

9. dyne . cm⁻¹. La température de référence est indiquée en °C en indice.

10. Paramètres de solubilité de Hansen en (J . cm⁻³)^{1/2}. δ_d = composante de dispersion, δ_p = composante de liaison hydrogène.

11. Sans unité. La température de référence est indiquée en °C en indice.

12. En °C, d'après [10] et NFPA : *Fire Protection Guide to Hazardous Materials*. National Fire Protection Association, Quincy, 1997. Diverses méthodes de détermination sont utilisées, ce qui peut introduire des différences de quelques °C.