

THE.CH ~~2001~~ /28/3



UNIVERSITE DE OUARGLA

INSTITUT DES SCIENCES EXACTES

DEPARTEMENT DE CHIMIE

N° d'ordre :
N° de série :

Mémoire

Présenté pour l'obtention du diplôme de

MAGISTER

Spécialité : Chimie Organique

Option : Hétérocycles

Par : IHADDADENE BELAID

Thème

**Etude de l'effet de quelques alcools
sur l'extraction du toluène
par le Sulfolane**

Soutenu publiquement le 08 avril 2001

Devant le jury composé de :

Mr LANEZ Touhami
Melle TAZEROUTI Amel
Mr DADA MOUSA Belkhir
Mr HADJ MAHAMMED Mahfoud
Mr H. Al-Dujaili Amar

M. Conf. Univ. Ouargla
M. Conf. Univ. Ouargla
M. Conf. Univ. Ouargla
M. Conf. Univ. Ouargla
Professeur . Univ. Bagdad

Président
Examinatrice
Examineur
Rapporteur
Co-Rapporteur



Dédicaces

*A la mémoire
de mon très cher père
Décédé Et enterré en mon
absence*

Dédicaces

Ceux qui parlent ne sont pas toujours
ceux qui savent; ceux qui savent ne sont
pas toujours ceux qui parlent; les
meilleurs sont ceux qui parlent quand ils
savent.

A tous ceux qui me sont chers;

Et à tous ceux qui sont pour UNE
ALGERIE ALGERIENNE et une
ALGERIE de progrès, qui sont à la fois
hommes de science et de conscience
dotes d'esprit rationnel, favorisant la
réflexion avant l'action.

Remerciements

Ce travail a été réalisé sous la direction de Monsieur HADJ-MAHAMMED Mahfoud, Maître de Conférences à l'université de Ouargla et de Monsieur Amar Al-Dujaili, professeur à l'université de Bagdad.

Qu'ils trouvent ici l'expression de mes remerciements, mon profond respect et sincères considérations pour leurs orientations, encouragements et leur soutien pour faire aboutir ce travail de recherche à son terme.

Je remercie sincèrement Monsieur LANEZ Touhami, Maître de Conférences à l'université de Ouargla pour l'honneur qu'il me fait en acceptant de présider le juré de ce mémoire.

Je remercie également Mademoiselle TAZEROUTI Amel, Maître de Conférences à l'USTHB et Monsieur DADAMOUSA Belkhir, Maître de Conférences à l'université de Ouargla, pour avoir accepté de juger ce mémoire et d'y apporter leur contribution scientifique.

Je tiens à remercier à travers Monsieur Amar Al-Dujaili la Direction de l'université de Bagdad pour l'accueil chaleureux, et la facilités qui m'ont réservé afin de mener à bien ce travail.

Monsieur Baraka Djafer, m'a été d'un grand secours en assurant le relais entre Monsieur HADJ-Med et moi-même (via Internet), ses critiques constructives et remarques objectives m'ont beaucoup aidé à la réalisation de ce mémoire. Qu'il soit assuré de mon amitié et de mon profond respect.

J'exprime aussi ma reconnaissance à : Mademoiselle Doukani Koula, Messieurs Hatem, Khaled, Tarek et Nacer, pour l'aide précieuse qu'ils m'ont toujours apportée durant la réalisation de ce travail, leur extrême gentillesse, et le temps qu'ils m'ont consacré durant la mise au point de ce mémoire.

Les remarques et conseils de Messieurs M. BENALIA (CULaghouat), M.H.SELLAMI (Univ. Ouargla) et Benkada Mohamed Kaddour (Directeur du bureau de liaison du Holding publique mécanique et électronique en Irak) m'ont été d'un très grand réconfort, qu'ils trouvent ici l'expression de mon profond respect et grande considération.

J'adresse mes remerciements et ma reconnaissance à tous les Enseignants, Étudiants et travailleurs de l'université de Ouargla, à tous les responsables travailleurs (Holding, SNVI, Ambassade, Bureau de liaison SNVI Irak, Bureau de liaison Holding Irak, Anabib, Sonatrach, IMC...), qui ont contribué de près ou de loin à ma formation scientifique et professionnelle.

Je tiens également à remercier vivement Madame Nabila Al-Dujaili. Qu'elle soit assurée de mon amitié et de ma reconnaissance la plus sincère.

Je ne saurais oublier tous ceux et celles qui m'ont marqué par leur soutien et encouragements : Hilmi, Yassarine, Amna, Sajaa, Saliha Tayar, Sermed, Ahmed, Mohamed et Nacer Ihadaddene, Ould-Amer Boudjamaa, Abdellah Ihadaddene, Belmouloud, aussi K.Dehak, L.Bechki, N.Chaouch, F.Z.Baba-AMER et autres camarades de ma promotion, les familles : Ihadaddene, Ould Amer, Ben Zarrouk, Aoudia, Sekirifa, Guidoume, Bendeb, Genane, Tebib, Slimani et Hammar, je leur exprime mon respect et ma profonde sympathie.

En fin, je tiens à remercier tous ceux qui ont participé à la concrétisation de mon rêve. Que Monsieur M.Lakhal, Madame A.Ould Brahim, Monsieur A.Boularas, Monsieur Boushaki, Monsieur Belmesk, Monsieur Baba, Monsieur Khanour...trouvent ici toute ma reconnaissance et mon amitié la plus sincère.

Cités en derniers mais les premiers dans mon cœur, je tiens à exprimer mes meilleurs sentiments d'amour et de respect à mes très chers parents, pour leur patience, compréhension, aide et confiance tout au long de mon éducation et ma longue formation en espérant, leur rendre le peu du grand qu'ils m'ont donné, amour et affection (sauf que je n'aurai pas la chance de partager la joie de ma réussite avec mon père décédé et enterré en mon absence).

Abréviations

BTX	Benzène, Toluène, Xylène
DEG	Diethylene glycol
DMF	Dimethylformamide
DMSO	Dimethylsulfoxide
E_{∞}	Représente la capacité maximum de dissolvant a extraire le toluène à partir du mélange d'hydrocarbure
MEG	Monoethylene glycol
NFM	N-Formylmorpholine
NMP	N-Methylpyrrolidone
NRTL	Model non aléatoire de deux liquides
O	n-Octane
RMSD	Root mean square déviation
S	Sulfolane
SB	Sulfolane-Butanol
SE	Sulfolane-Ethanol
SM	Sulfolane-Methanol
SP	Sulfolane-Propanol
SW	Sulfolane-Eau
T	Toluène
UNIQUAC	Model Universel-Quasi-Chimique

Liste des Figures

Titre de Figure	No. Page
Figure .1. Deux types de cellules en accordant a la theorie des Deux-Liquides de Scott's des melanges binaires.	17
Figure .2. Le titrateur de point de turbidité	30
Figure .3. La courbe binodale pour le système (sulfolane + n-octane + toluène) à 298.15 K	32
Figure .4. La courbe Binodale pour le systeme sulfolane + n-octane + toluene a 293.15 K	32
Figure .5. Les données d'équilibre (liquide-liquide) pour le système sulfolane (S) + n-octane (O) + toluène (T) à 293.15 K.	39
Figure .6. Les données d'équilibre (liquide-liquide) pour le système (sulfolane + H ₂ O) (SEau) + n-octane (O) + toluène (T) à 293.15 K.	39
Figure .7. Les données d'équilibre (liquide-liquide) pour le système (sulfolane + n-methanol) (SM) + n-octane (O) + toluène (T) à 293.15 K.	40
Figure .8. Les données d'équilibre (liquide-liquide) pour le système (sulfolane + n-ethanol) (SE) + n-octane (O) + toluène (T) à 293.15 K.	40
Figure .9. Les données d'équilibre (liquide-liquide) pour le système (sulfolane + n-propanol) (SP) + n-octane (O) + toluène (T) à 293.15 K.	41
Figure .10. Les données d'équilibre (liquide-liquide) pour le système (sulfolane + n-butanol) (SB) + n-octane (O) + toluène (T) à 293.15 K.	41
Figure .11. Comparaison de la phase d'équilibre du diagramme pour toluene + 'n-octane + et solvants à 293.15 K.	43
Figure .12. La corrélation de Bachman pour tous les systèmes.	49
Figure .13. La corrélation de HAND et la détermination de point de plis pour n-octane + toluène + systèmes solvants à 293.15 K.	49
Figure .14. La corrélation d'Othmer – Tobias d'n-octane + toluène + solvant pour tous les systèmes 293.15 K.	52
Figure .15. La distribution du toluène entre la couche du solvant et la couche du n-octane à 293.15 K.	52
Figure .16. La courbe de sélectivité pour solvants + n-octane + toluène à 293.15 K.	56
Figure .17. Estimation des points de plis	56
Figure .18. Comparaison de la capacité de solvants avec les systèmes d'n-octane + toluène à 293.15 K.	60
Figure .19. La courbe de sélectivité et solubilité avec le changement de composition de (octane + toluène + solvants) à 293.15 K.	60

Figure .20. Comparaison des donnees des lignes d'attachement avec les valeurs calculees en utilisant les modeles UNIQUAC et NRTL pour sulfolane +n-octane + toluene a 293.15 K.	65
Figure .21. Comparaison des donnees experimentales des lignes d'attachement avec les valeurs calculees en utilisant les modeles UNIQUAC et NRTL pour (sulfolane + eau) +n-octane + toluene a 293.15 K	65
Figure .22. Comparaison des donnees experimentales des lignes d'attachement avec les valeurs calculees en utilisant les modeles UNIQUAC et NRTL pour (sulfolane + methanol) +n-octane + toluene a 293.15 K	66
Figure .23. Comparaison des donnees experimentales des lignes d'attachement avec les valeurs calculees en utilisant les modeles UNIQUAC et NRTL pour (sulfolane + ethanol) +n-octane + toluene a 293.15 K	66
Figure .24. Comparaison des donnees experimentales des lignes d'attachement avec les valeurs calculees en utilisant les modeles UNIQUAC et NRTL pour sulfolane + n-propanol +n-octane + toluene a 293.15 K	67
Figure .25. Comparaison des donnees experimentales des lignes d'attachement avec les valeurs calculees en utilisant les modeles UNIQUAC et NRTL pour (sulfolane + butanol) +n-octane + toluene a 293.15 K	67

Liste des Tableaux

Titre Des Tableau	No. Page
Tableau .1. Propriétés physiques du solvant (sulfolane), $C_4H_8O_2S$ à 303.15 K.	22
Tableau .2. Comparaison entre les propriétés physiques mesurées à 293,15 K et les valeurs tirées de la bibliographie.	28
Tableau .3. Résultats de solubilité mutuelle pour sulfolane (S) + n-octane (O) + toluène (T) à 293.15 K.	36
Tableau .4. Résultats de solubilité mutuelle pour (sulfolane + H_2O) (SEau) + n-octane (O) + toluène (T) à 293.15 K.	36
Tableau .5. Résultats de solubilité mutuelle pour (sulfolane + méthanol) (SM) + n-octane (O) + toluène (T) à 293.15 K.	37
Tableau .6. Résultats de solubilité mutuelle pour (sulfolane + éthanol) (SE) + n-octane (O) + toluène (T) à 293.15 K.	37
Tableau .7. Résultats de solubilité mutuelle pour (sulfolane + propanol) (SP) + n-octane (O) + toluène (T) à 293.15 K.	38
Tableau .8. Résultats de solubilité mutuelle pour (sulfolane + n-butanol) (SB) + n-octane (O) + toluène (T) à 293.15 K.	38
Tableau .9. La composition expérimentale du système d'équilibre (liquide - liquide) pour sulfolane (S) + n-octane (O) + toluène (T) à 293.15 K.	46
Tableau .10. La composition expérimentale du système d'équilibre (liquide - liquide) pour (sulfolane + H_2O) (Seau) + n-octane (O) + toluène (T) à 293.15 K.	46
Tableau .11. La composition expérimentale du système d'équilibre (liquide - liquide) pour (sulfolane + méthanol) (SM) + n-octane (O) + toluène (T) à 293.15 K.	47
Tableau .12. La composition expérimentale du système d'équilibre (liquide - liquide) pour (sulfolane + éthanol) (SE) + n-octane (O) + toluène (T) à 293.15 K.	47
Tableau .13. La composition expérimentale du système d'équilibre (liquide - liquide) pour (sulfolane + propanol) (SP) + n-octane (O) + toluène (T) à 293.15 K.	48
Tableau .14. La composition expérimentale du système d'équilibre (liquide - liquide) pour (sulfolane + n-butanol) (SE) + n-octane (O) + toluène (T) à 293.15 K.	48
Tableau .15. Résultats des analyses des moins carrés pour les systèmes n-octane + toluène + dissolvants à 293.15 K.	51
Tableau .16. Les coefficients de distribution k et valeurs de sélectivité pour n-octane + toluène + solvants.	54
Tableau .17. Composition du point de plis pour les systèmes ternaires dissolvants + n-octane + toluène à 293.15 K.	58
Tableau .18. Paramètre U_{ij} d'UNIQUAC et valeurs de RMSD pour les systèmes dissolvants + n-octane + toluène à 293.15 K.	64
Tableau .19. Paramètre g_{ij} de NRTL et valeurs de RMSD pour les systèmes solvants + n-octane + toluène à 293.15 K.	64
Tableau .20. Les lignes d'attachement calculées en employant le modèle NRTL pour les systèmes dissolvants + n-octane + toluène à 293.15 K.	68
Tableau .21. Les lignes d'attachement calculées en employant le modèle UNIQUAC pour les systèmes solvants + n-octane + toluène à 293.15 K.	69

INTRODUCTION

Parmi les méthodes physiques de séparation, la distillation est sans doute le processus le plus utilisé et le moins coûteux. Cependant, Les composants à séparer doivent avoir une volatilité absolue appropriée et une différence suffisante en terme de point d'ébullition. Dans le cas où ces conditions ne sont pas réunies, l'extraction s'avère être la plus appropriée pour la séparation des liquides.

Ainsi le processus d'extraction est l'une des méthodes physiques les plus utilisées pour la séparation d'un composé liquide d'un mélange de composés. La particularité d'une telle méthode n'entraîne pas un changement chimique dans la matière à traiter.

D'une façon générale l'extraction par solvants, consiste à traiter un mélange de substances avec un solvant non miscible ayant une grande capacité dissolvante pour l'un des constituants du mélange. Elle est la plus adéquate dans l'industrie pétrolière pour les composés aromatiques de C6 à C9 qui sont extraits en une seule étape. Mais ceux-ci doivent être séparés sélectivement vu leur importance comme matière première dans le secteur économique [1].

Le principe de base du processus d'extraction est l'équilibre entre deux phases liquides. Ainsi l'équilibre est un état statique dans lequel il ne se produit pas de changement dans les propriétés macroscopiques d'un système avec le temps [2-5].

Dans le cadre de ce travail l'objectif visé est l'étude du rendement de l'extraction d'un hydrocarbure aromatique par un composé hétérocyclique. Ce type de sujet, fait l'objet de recherche de pointe, car la nouvelle tendance est l'extraction de certains composés du pétrole brut

par un composé hétérocyclique au lieu de la méthode usuelle qui consiste à utiliser les solvants organiques.

A cet effet, notre choix s'est porté sur le sulfolane [6-8] pour extraire le toluène à partir d'une solution de n-octane.

Notre étude est répartie comme suit:

- Evaluation de l'utilisation du sulfolane comme solvant pur ou mélangé avec l'eau, le méthanol, l'éthanol, le n-propanol et le n-butanol pour l'extraction du toluène à partir de la solution de n-octane.
- Détermination des données d'équilibre liquide –liquide pour les systèmes ternaires à 298,15 K des compositions suivantes
 1. Sulfolane + n-Octane + Toluène
 2. Sulfolane + 5 %eau + n-Octane + Toluène
 3. Sulfolane + 5 %méthanol + n-Octane + Toluène
 4. Sulfolane + 5 %éthanol + n-Octane + Toluène
 5. Sulfolane + 5 %propanol + n-Octane + Toluène
 6. Sulfolane + 5 %butanol + n-Octane + Toluène
- Construction des Diagrammes des phases d'équilibre et détermination des paramètres suivants :
 1. Données des lignes d'attachements
 2. Coefficients de distribution du toluène
 3. La sélectivité [9-11] et la solvabilité du sulfolane pur ou du mélange de sulfolane avec l'eau ou les alcools pour chaque système.
- Corrélation de ces résultats en utilisant le modèle NRTL [12] et le modèle UNIQUAC [13-15] avec des paramètres d'interactions moléculaires.

CHAPITRE I

Généralités

Pour sélectionner un solvant d'extraction de manière efficace en vue de récupérer des hydrocarbures aromatiques du pétrole, on doit choisir un solvant hautement sélectif et soluble vis à vis du composé à extraire. La haute densité et la faible viscosité n'entraînent pas de réactions chimiques avec l'élément à extraire. Le solvant doit être thermiquement stable, son coût également bas, il doit être ni toxique ni corrosif.

I.1. Conditions de choix d'un solvant d'extraction

I.1.1. Sélectivité

La sélectivité [2] est la capacité d'un solvant à dissoudre une matière bien déterminée en présence d'autres substances. Il est primordial que ce paramètre soit pris en considération car plus la sélectivité est grande, mieux est la séparation.

VARTERESSIAN et FENSKE [3] ont défini le facteur de sélectivité comme le rapport de distribution de l'un des constituants aromatiques dans un système constitué de trois composés (solvants / aromatiques / non aromatiques). [4]

$$\text{Sélectivité, } S_{ij} = \frac{\gamma_i}{\gamma_j} = \frac{k_i}{k_j} \quad (1)$$

$$S_{ij} = \frac{\frac{\text{Poids\% du } x_i \text{ dans la phase d'extraction}}{\text{Poids\% du } x_i \text{ dans la phase du raffinat}}}{\frac{\text{Poids\% du } x_j \text{ dans la phase d'extraction}}{\text{Poids\% du } x_j \text{ dans la phase du raffinat}}} \quad (2)$$

Où :

$0k_i$ = Coefficient de distribution des aromatiques.

K_j = Coefficient de distribution des non aromatiques.

x_i = fraction molaire d'un aromatique.

x_j = fraction molaire d'un non aromatique.

γ = Le coefficient d'activité des composés i, j .

I.1.2. Capacité

La capacité [2] ou la solvabilité indique le pouvoir d'un solvant à dissoudre une quantité raisonnable de la matière à séparer tout en maintenant une bonne sélectivité. Elle peut s'exprimer par la mesure du coefficient de distribution des aromatiques entre la phase des hydrocarbures et celle des solvants. [4]

$$\text{Capacité} = \frac{x_i \text{ dans la phase d'extraction}}{x_i \text{ dans la phase du raffinat}} \quad (3)$$

La capacité du solvant a une grande influence sur le processus d'extraction. Si la capacité est très faible, une grande quantité de solvant est nécessaire pour une séparation donnée ; donc la capacité détermine le taux de circulation du solvant et la taille des équipements d'une usine. La plupart des solvants ayant une grande capacité possèdent une faible sélectivité et vice versa. Le solvant idéal est celui qui a une grande capacité et sélectivité.

I.1.3. Facilité de récupération

Puisque de grandes quantités de solvants sont utilisées dans un processus d'extraction[2] la température du solvant du raffinage et la

solution extraite doit être facile à faire. La distillation est la méthode de récupération la plus utilisée, toutefois le solvant doit posséder une grande pression de vapeur, une faible chaleur de vaporisation et son ébullition proche des matières à extraire.

La récupération du solvant est généralement une opération très coûteuse dans une usine. Le choix de la méthode de régénération est basé sur des considérations économiques.

I.1.4. Densité

Pour mettre en place avec succès un processus d'extraction, cela dépend de la différence de densité entre les phases d'extraction et de raffinage [2]. La différence de densité montre un dépôt rapide et par conséquent un grand dépôt dans l'extracteur.

En utilisant un extracteur de type mélangeur-stabilisateur, la différence de densité augmente la capacité de la tête de propulsion qui fait circuler les liquides dans l'extracteur, les besoins pour le pompage sont faibles. D'autre part, si l'extraction est faite dans des tours enveloppes, une faible différence de densité est plus que souhaitable car l'écoulement est réduit et l'efficacité faible.

La relation entre la densité et la composition relative aux phases peut être également importante pour éviter l'inversion de densité. La phase du solvant devrait être la plus lourde à un moment donné et plus légère au bout de l'extracteur.

I.1.5. Adaptabilité

Un solvant devrait être utile pour l'extraction d'une grande variété de produits. Il serait souhaitable par exemple d'utiliser le même solvant et les mêmes équipements pour l'extraction de plusieurs produits pétrochimiques. L'adaptabilité à de petits changements dans la composition du

champ où à de grands changements dans les produits désirés, crée un avantage économique pour un solvant flexible.

I.1.6. Points d'ébullition et stabilité thermique

Le point d'ébullition du solvant détermine les conditions de chaleur requises pour la séparation par distillation des aromatiques du solvant [1]. Plus le point d'ébullition est élevé, plus grande est la chaleur requise pour élever le solvant à sa température d'ébullition.

Le point d'ébullition optimal pour un solvant est de 30- 40 degrés au-dessus du point d'ébullition des aromatiques à récupérer. Mis à part l'aspect d'économie de chaleur, la stabilité thermique est essentielle pour le choix du solvant. Le solvant ne doit pas réagir chimiquement avec les matières à extraire.

I.1.7. Viscosité

Les liquides ayant une faible viscosité sont plus faciles à manipuler que les liquides visqueux qui cependant ne sont pas difficiles à mélanger mais présentent souvent des problèmes de fluidité. Ainsi ils sont enclins à entraîner de fines gouttes qui réduisent le débit d'écoulement et augmentent la pression dans le réacteur [2].

I.1.8. Corrosivité

Un solvant ne doit pas impliquer de graves problèmes de corrosion aux matériaux ordinaires. Le système d'extraction et de récupération utilisant des alliages spéciaux est onéreux.

I.1.9. Coût

Une large gamme de solvants est utilisée dans les opérations d'extraction tout particulièrement dans l'industrie pétrolière. Evidemment, le coût du solvant doit être bas pour rentabiliser l'investissement utilisé [2]. Les pertes de solvants causées par les fuites dans les équipements entraînent une grande décomposition imprévue et une récupération déficiente du solvant des produits. Ces pertes peuvent être appréciables et l'utilisation d'un solvant cher rend le processus d'extraction non faisable.

I.1.10. Tension Interfaciale

Une faible tension inter faciale entre les phases améliore le mélange, mais une forte tension inter faciale améliore dans certains cas les caractéristiques qui peuvent être changées par ajout d'agents en vue d'améliorer le mélange des phases

I.1.11. Point de congélation

Le solvant doit avoir un point de congélation assez bas afin de réaliser l'extraction à une température modérée et être stocké convenablement à une température ambiante.

I.1.12. Toxicité et Inflammabilité

Les grandes quantités de solvants hautement toxiques et inflammables sont difficiles à manipuler mais ceux-ci ne présentent aucun danger si des équipements appropriés sont utilisés et le personnel est examiné médicalement de manière régulière.

I.1.13. Chaleur Latente

Si le solvant est récupéré par vaporisation ou distillation à partir des produits extraits ou raffinés, le coût de l'opération de récupération est directement en relation avec la chaleur latente.

Les 13 critères sus-mentionnés sont très importants dans la sélection efficace des solvants en vue de la récupération des hydrocarbures aromatiques à partir de produits pétroliers [5].

I.2. Etude bibliographique

Dans l'industrie pétrolière et pétrochimique la plupart des opérations de séparation sont concernées par mélanges liquides contenant des hydrocarbures aromatiques à chaîne aliphatique. Un grand nombre de solvants sélectifs sont disponibles pour la récupération de ces hydrocarbures aromatiques de masse basse. Le premier processus d'extraction était d'Edelmann [6]. Il a employé l'acide acétique anhydre comme solvant dans l'extraction des hydrocarbures aromatiques à chaîne droite, pour la purification du pétrole en raison de sa solubilité préférentielle avec le formateur et substantielle immiscibilité avec ce dernier.

Le premier procédé commercial pour la distillation extractive des composés aromatiques a eu lieu en 1945 pour la récupération du toluène en utilisant le phénol comme solvant sélectif [7]. La présence du phénol a causé une augmentation de la volatilité des paraffines et hétérocycle relative au toluène qui a facilité le procédé de séparation.

Grote (1958) [8] a décrit le processus d'Udex à la compagnie universelle du produit pétrolier (Illinois) qui avait été appliqué aux jets de raffinerie pour récupérer le benzène, le toluène et les mélanges de

composés aromatiques C8, avec un pourcentage élevé d'octane. Le solvant sélectif était le diéthylène glycol (DEG). La récupération des composés aromatiques était de l'ordre de 97%.

Somekh [9] a étudié la série de glycol, le soluté et particulièrement l'effet de l'eau, en tant que solvant polaire. Il a constaté que le glycol dipropylène a une capacité plus élevée que le diéthylène glycol mais dissout considérablement. L

es propriétés des hydrocarbures non aromatiques. Le mélange du diéthylène, propylène glycol avec le dipropylène glycol dans des proportions appropriées, donne des systèmes de solvants ayant une bonne sélectivité et une capacité élevée. L'introduction de l'eau dans chaque mélange de solvant donne une capacité inférieure, mais améliore la sélectivité et la pureté du produit puisque la proportion des composés aromatiques dissoute dans l'extrait est réduite.

En 1964, Cousserance [10] a étudié le carbonate méthylique comme solvant sélectif d'extraction du benzène-toluène-xylène (BTX). Le solvant a montré un bon coefficient de sélectivité et de distribution. Le taux d'extraction global est de l'ordre de 92 % mais le solvant ne peut être régénéré.

Le diéthylène glycol (DMSO) contenant une quantité d'eau a été employée pour la première fois en 1969 dans le processus d'IFP (Institut français du Pétrole) [11] comme solvant polaire sélectif pour la récupération des composés aromatiques. Dans une deuxième étape d'extraction, ces composés aromatiques ont été séparés du solvant. N'importe quel hydrocarbure non aromatique, facilement séparé des composés aromatiques par distillation, sert comme deuxième solvant. Ainsi le processus d'extraction a lieu entièrement à une température ambiante où les propriétés du solvant sont particulièrement avec le respect attrayant à la stabilité et à la sélectivité. Le taux de corrosion d'acier au carbone avec DMSO était très bas à la température ambiante, et aucune

dégradation du solvant n'a été observée quand le traitement est alimenté avec une quantité substantielle d'oléfine.

Des dérivés de morpholine, le N-formylmorpholine (NFM), ont été employés dans le processus extractif de Stein [12]. Le NFM, présente une bonne sélectivité, sa solvabilité est souvent suffisante pour des composés non-aromatiques. Ils sont chimiquement et thermiquement stables et non-corrosifs [13].

La sélectivité et la solvabilité de plusieurs solvants étudié dans les années 1970, 1980 et 1990 du siècle dernier et décrite par, Simkovicove et Al. en (1979) [14] ont évalués les solvants utilisés pour l'extraction de BTX, à savoir le glycol de diéthylène, le pyrrolidone n-méthylque (NMP) et le DMSO. Ces solvants étaient évalués sur la base de la sélectivité et la capacité vers les systèmes modèles des alcanes et composés aromatiques aux même conditions de séparation. Pour les systèmes modèles à capacité optimale, les solvants d'extraction ont montré la sélectivité la plus élevée dans l'ordre du DMSO, du NMP en allant du plus commode au moins approprié. Le DMSO et le NMP étaient presque au même niveau de la sélectivité mais le premier avait une stabilité inférieure, plus corrosive et la régénération supplémentaire est faite par extraction. Vu les propriétés physiques et chimiques le NMP est favorisé.

En 1971, le NMP a été employé dans le processus de Distapex en Allemagne pour la récupération du benzène et de xylène par distillation extractive [15]. Quand le taux de benzène atteint un taux de 10 à 25% dans le raffinat. Il produit une pureté beaucoup plus grande que les composés aromatiques, sans devoir changer le débit et le taux de circulation du solvant. La perte de benzène dans le raffinat était très élevée, comparée à celle du xylène en augmentant sa concentration dans le raffinat. Par conséquent, le taux de circulation du solvant et le débit de chaleur sont les paramètres principaux pour le récupération économique du

xylène, alors que le rendement est le paramètre principal pour la réparation du benzène. Une pureté plus élevée de benzène peut être atteinte, seulement en permettant une perte plus élevée de benzène dans le raffinat.

Ferreira et Al. [16] ont étudié l'effet de composition du solvant et les changements de température sur les propriétés de diagramme d'équilibre, du système glycol benzène-NMP/monoéthylène (MGE). Quand des compositions en NMP ont été augmentées dans le solvant une augmentation de la région biphasée a eu lieu et le coefficient de distribution du benzène entre les deux phases a été diminué. La sélectivité du solvant mélangé augmente avec l'augmentation de la quantité de NMP particulièrement pour une élévation de quantité des hydrocarbures dans la phase du solvant. Pour des différentes compositions du solvant, la température affecte la position de la courbe binodale. La composition en raffinat était plus affectée que la composition d'extrait.

Beaucoup de chercheurs ont rapporté plus tôt les données d'équilibre liquide-liquide pour le système constitué par le NMP et divers les hydrocarbures. Les données d'équilibre liquide-liquide ont été déterminées pour le NMP avec l'heptane [17-19] le méthane, et le propane dans le mélange de solvant de NMP et de l'eau [20-22].

Récemment, la sélectivité et la solvabilité de plusieurs solvants ont été étudiées dans certains mélanges binaires et ternaires. Al-Quttan et autres [23,24] ont étudiés les équilibres liquide-liquide dans un mélange binaire et ternaires NMP en utilisant le NFM et le glycol de tétraéthylène comme solvant pour la récupération des composés aromatiques des n-alcane. Leurs résultats ont été employés pour estimer les paramètres d'interaction entre le solvant et les groupes principaux des composés paraffiniques, aromatiques et naphthéniques en fonction de la température.

N,N-diméthylformamide (DMF), le N-méthylformamide ou formamide ont été étudiés à une température entre -45 et 25 °C par des diagrammes de phase pour récupérer le benzonitrile à partir des mélanges aqueux [25].

1.3. Prévion et corrélation des données de l'équilibre liquide-liquide

L'interpolation et l'extrapolation des données thermodynamiques du mélange sont nécessaires en chimie industrielle. Le modèle de la solution idéale est utilisée pour donner une première approximation et une base acceptable pour le calcul des propriétés réelles. Toutefois, les déviations vis-a-vis de la solution idéale sont souvent grandes. Ces déviations sont énoncées par des fonctions d'excès qui dépendent de la concentration des composants et de la température. Le plus important est l'énergie libre de Gibbs en excès car les variables canoniques pour cette énergie sont la température et la pression. Puisque ces variables peuvent être mesurées et contrôlées, l'énergie de Gibbs est une propriété thermodynamique ayant un grand potentiel [26]. Quand $G/RT=G(T,P)$ sont donnés, toutes les autres propriétés thermodynamiques peuvent être évaluées par des opérations mathématiques. L'énergie de Gibbs sert par conséquent, comme une fonction générée par les autres propriétés thermodynamiques et représente implicitement des propriétés complètes. L'excès d'énergie de Gibbs G^E est définie comme la différence entre la valeur de la solution de l'actuelle propriété et la valeur de la solution idéale, la température, la pression et la composition étant égales. Donc

$$G^E = G - G^{id} \quad (4)$$

Ou la formule sus-citée montre une valeur d'une solution idéale.

Le coefficient d'activité γ_i a été calculé à partir des équations corrélatives pour G^E/RT en prenant comme base l'équation suivante

$$\ln \gamma_i = \left[\frac{\partial n G^E / RT}{\partial n_i} \right] \quad (5)$$

Concernant la solution liquide, G^E est une fonction de pression faible, à une pression basse ou modérée, par conséquent la dépendance de pression du coefficient d'activité est généralement négligée. Nous avons donc des données à une température constante.

$$G^E/RT = g(x_1, x_2, x_3, \dots) \quad (6)$$

Par conséquent, de nombreuses équations existantes peuvent être utilisées pour faire la corrélation entre les données expérimentales pour un binaire, un tertiaire et un système de multi-composants. Parmi ces équations, on peut citer les équations Redlich-Kister(1948), Wilson (1964), NRTL(1968), UNIQUAC(1975), CLC. (1998) [27].

Ci-après, une brève présentation du traitement mathématique de l'équation sus-citée est donnée.

1.3.1. L'équation de NRTL

L'équation fut développée et présentée par Renon et Prausnitz (1968) [28] comme un modèle empirique pouvant améliorer l'équation de Wilson par la représentation simultanée de l'équilibre Liquide/Liquide, le coefficient d'activité de la chaleur du mélange dans des mélanges binaires et de multi-composants.

Cette équation est basée sur le modèle théorique de Scott de 2 liquides ne prenant pas en compte l'échantillonnage de mélange liquide. Le paramètre de sélection α constitue l'équation NRTL applicable à une grande variété du mélange de binaires et donne une bonne prévision de

l'équilibre Liquide/Liquide ternaire basé sur des données de binaire seulement.

Dans l'équation NRTL, une modification est faite dans l'équation 7

$$\frac{x_{21}}{x_{11}} = \frac{x_2 \exp(-g_{21}/RT)}{x_1 \exp(-g_{11}/RT)} \quad (7)$$

par l'introduction des facteurs α_{12} :

$$\frac{x_{21}}{x_{11}} = \frac{x_2 \exp(-\alpha_{12}g_{21}/RT)}{x_1 \exp(-\alpha_{12}g_{11}/RT)} \quad (8)$$

ou

α_{12} ($\alpha_{12} = \alpha_{21}$) est une caractéristique constante de l'échantillonnage du mélange.

Les fractions molaires locales sont reliées par :

$$x_{21} + x_{11} = 1 \quad (9)$$

$$x_{12} + x_{22} = 1 \quad (10)$$

A partir des équations (8) et (9) la fraction molaire locale peut être obtenue comme suit :

$$x_{21} = \frac{x_2 \exp(-\alpha_{12}(g_{21} - g_{11})/RT)}{x_2 + x_1 \exp(-\alpha_{12}(g_{12} - g_{22})/RT)} \quad (11)$$

En inter-changeant 1 et 2, x_{12} devient :

$$x_{12} = \frac{x_1 \exp(-\alpha_{12}(g_{21} - g_{11})/RT)}{x_2 + x_1 \exp(-\alpha_{12}(g_{12} - g_{22})/RT)} \quad (12)$$

La théorie des 2 liquides de Scoot indique qu'il y a 2 types de cellules dans un mélange binaire, un pour les molécules 1 et un autre pour les molécules comme présentées dans la Figure 1.

Pour des cellules contenant des molécules 1 au centre, l'énergie résiduelle de Gibbs est la somme de toutes les énergies résiduelles de Gibbs pour une interaction de 2 corps testée par la molécule centrale 1 ($g^{(1)}$)

$$g^{(1)} = x_{11}g_{11} + x_{21}g_{21} \quad (13)$$

Identiquement, pour une cellule contenant une molécule 2 a son centre

$$g^{(2)} = x_{22}g_{22} + x_{12}g_{12} \quad (14)$$

$$g_{\text{pure}}^{(2)} = g_{22} \quad (15)$$

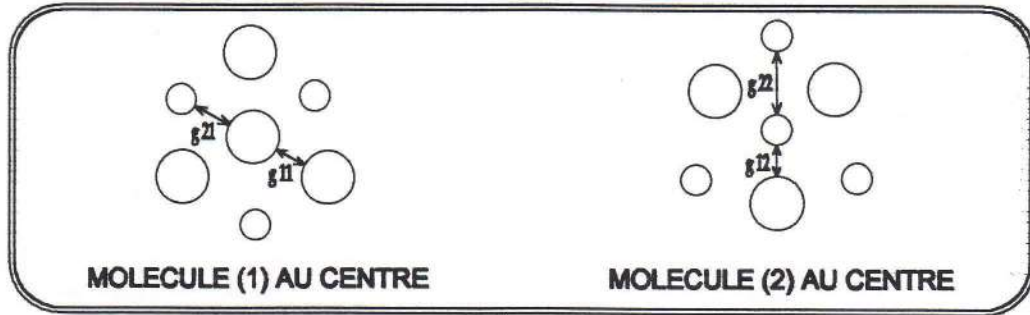


Figure 1. Deux types de cellules en par rapport a la theorie des Deux-Liquides de Scott's des melanges binaires.

L'énergie relative à un excès molaire Gibbs se rapportant à une solution binaire est la somme de 2 changements dans l'énergie résiduelle de Gibbs : d'abord en transférant x_1 molécules à partir d'une cellule de liquide pur 1 vers une cellule 1 de la solution, $(g^{(1)} - g_{\text{pure}}^{(1)})$, et ensuite en transférant x_2 molécules à partir d'une cellule de liquide pur 2 dans une cellule 2 de la solution, $(g^{(2)} - g_{\text{pure}}^{(2)}) x_2$ et par conséquent,

$$g^E = x_1 (g^{(1)} - g_{\text{pure}}^{(1)}) + x_2 (g^{(2)} - g_{\text{pure}}^{(2)}) \quad (16)$$

En substituant équations (10-12) à l'équation. (14), on obtient l'équation suivante :

$$g^E = x_1 x_{21} (g_{21} - g_{11}) + x_2 x_{12} (g_{12} - g_{22}) \quad (17)$$

Le coefficient d'activité de l'équation NRTL peut être obtenu par la différence de l'équation (17)

$$\ln \gamma_1 = x_2^2 \left[\tau_{21} \frac{G_{21}}{(x_1 + x_2 G_{21})^2} + \tau_{12} \frac{G_{12}}{(x_2 + x_1 G_{12})^2} \right] \quad (18)$$

$$\ln \gamma_2 = x_1^2 \left[\tau_{12} \frac{G_{12}}{(x_2 + x_1 G_{12})^2} + \tau_{21} \frac{G_{21}}{(x_1 + x_2 G_{21})^2} \right] \quad (19)$$

ou,

$$\tau_{12} = (g_{12} - g_{22})/RT$$

$$\tau_{21} = (g_{21} - g_{11})/RT$$

et

$$G_{12} = \exp(-\alpha_{12}\tau_{12})$$

$$G_{21} = \exp(-\alpha_{21}\tau_{21})$$

Pour les systèmes de multiplication, l'excès d'énergie de Gibbs est calculé comme suit

$$\frac{G^E}{RT} = \sum_{i=1}^N x_i \frac{\sum_{j=1}^N \tau_{ji} G_{ji} x_j}{\sum_{k=1}^N G_{ki} x_k} \quad (20)$$

où,

N est le nombre de composants dans le système

$$\tau_{ji} = \frac{g_{ji} - g_{ii}}{RT} \quad (21)$$

$$G_{ji} = \exp(-\alpha_{ji}\tau_{ji}) \quad (22)$$

Le coefficient d'activité est obtenu par une différence appropriée d'équations (20):

$$\ln \gamma_i = \frac{\sum_{j=1}^N \tau_{ji} G_{ji} x_j}{\sum_{k=1}^N G_{ki} x_k} + \sum_{k=1}^N \frac{x_k G_{ik}}{\sum_{k=1}^N G_{ki} x_k} \left(\tau_{ij} \frac{\sum_{j=1}^N \tau_{lj} G_{lj} x_l}{\sum_{k=1}^N G_{ki} x_k} \right) \quad (23)$$

1.3.2. L'équation UNIQUAC

L'UNIQUAC (Universal Quasi Chemical) [29] est une extension de l'équation originale de Wilson où la phase de séparation peut être obtenue par ajout d'un terme de combinaison, taille et aspect à 3 paramètres résiduels modifiés : le terme de Wilson [30]. Cette équation est également une extension du modèle quasi-chimique de Lattice de Guggenheim (qui indique que quand des liquides non électrolytes sont mélangés à une température et pression constante, loin des conditions critiques, il y a un petit changement de volume. L'effet de ce changement sur l'excès d'énergie de Gibbs peut être annulé) qui fut à l'origine limitée à de petites molécules essentiellement de taille identique, à un mélange contenant des molécules de différente taille et aspect par l'utilisation du concept de composition locale introduite par Wilson [31]

$$g = G^E / RT = g^C + g^R \quad (24)$$

$$g^C = \sum_i x_i \ln \frac{\phi_i}{x_i} + \frac{Z}{2} \sum_i q_i x_i \ln \frac{\theta_i}{\phi_i} \quad (25)$$

$$g^R = - \sum_i q_i x_i \ln \left(\sum_j \theta_j \tau_{ji} \right) \quad (26)$$

où,

Z est le nombre de coordination lattice, a une valeur constante égale à $6 \leq Z \leq 12$

ϕ_i La fraction de volume moyen

$$\phi_i = \frac{x_i r_i}{\sum_j x_j r_j} \quad (27)$$

θ_i La fraction de zone moyenne du composant

$$\theta_i = \frac{q_i x_i}{\sum_j q_j x_j} \quad (28)$$

Ci-dessus, i représente les espèces et j un indice Dummy Les paramètres structuraux r et q sont des paramètres de pure espèce.

$$r_i = \frac{V_{wi}}{15.17} \quad (29)$$

$$q_i = \frac{A_{wi}}{2.5 \times 10^9} \quad (30)$$

Ou V_{wi} et A_{wi} sont les volume et surface de la molécule de Van Der Waals.

La dépendance de température de g dans l'équation (2,44) par τ_{ij} est donnée :

$$\tau_{ij} = \exp \left\{ - \left(\frac{g_{ij} - g_{jj}}{RT} \right) \right\} \quad (31)$$

Le coefficient d'activite pour le composant (i):

$$\ln \gamma_i = \ln \gamma_i^C + \ln \gamma_i^R \quad (32)$$

$$\ln \gamma_i^C = 1 - \frac{r_i}{\sum_j r_j x_j} + \ln \frac{r_i}{\sum_j r_j x_j} - 5q_i \left[1 - \frac{\frac{r_i}{\sum_j r_j x_j}}{\frac{q_i}{\sum_j q_j x_j}} + \ln \frac{\frac{r_i}{\sum_j r_j x_j}}{\frac{q_i}{\sum_j q_j x_j}} \right] \quad (33)$$

$$\ln \gamma_i^R = q_i \left(1 - \ln \frac{q_i}{\sum_j q_j x_j} \right) - \sum_j \left[\left(\sum_j q_i x_i \right) \frac{\sum_m q_i \tau_{mj}}{\sum_m q_i \tau_{mj} x_i} - q_i \ln \frac{\sum_m q_i \tau_{mj}}{\sum_m q_i \tau_{mj} x_i} \right] \quad (34)$$

1.4. Sulfolane Solvant Industriel

Le sulfolane ou 1,1-dioxide tetrahydrothiophene ou tétraméthylène de sulfone a la formule structurale suivante:



Commercialement, il était disponible depuis 1959. C'est un solvant incolore, polaire, aprotique qui a beaucoup d'applications en chimie théorique et industrielle comme il a été cité par Martinmaa [32]. Le Tableau 1 a énuméré les propriétés physiques générales du sulfolane.

En 1959, Alder [33] a examiné le sulfolane comme nouveau solvant pour extraire les composés aromatiques au lieu du glycol de diéthylène (DEG) à la société (Shell). Le sulfolane a été employé dans l'extraction catalytique de raffinat pour produire un extrait aromatique avec un plus grand pourcentage d'octane. Ils ont constaté que le sulfolane est plus sélectif que le DEG, plus stable à l'oxydation par la chaleur et ayant la capacité de chaleur la plus inférieure. A 200°C. le sulfolane se décompose thermiquement à un taux de 0,002% environ par heure pour produire le dioxyde sulfureux et les matériaux polymères insaturés. Cette décomposition est accrue par la présence de l'air, mais pas d'une façon nette. En l'absence d'air, le DEG se dégrade thermiquement pour produire des produits gazeux (principalement l'hydrogène) au taux environ de 1,5 fois supérieur à ceux du sulfolane.

Benoite et Charbonneau [34] et Tripathi et Al, [35] ont obtenu les données d'équilibre liquide-liquide pour le système ternaire n-heptane-sulfolane à 25, 40 et 50 °C. Ces auteurs ont conclu que le sulfolane est un solvant très puissant pour l'extraction du toluène du mélange qui dépend,

Tableau 1. Propriétés physiques du solvant (sulfolane), $C_4H_8O_2S$ a 303.15 K.

Poids Moléculaire	120.171 g . mol ⁻¹
Point d'Ebullition	278.3 °C at 760 mm.Hg
Point de Congélation	28.45 °C
Densité (ρ)	1.2623 g.cm ⁻³
Indice de Réfraction (n_D)	1.4820
Viscosité (η)	10.286
Tension de Surface (γ)	35.5 N.m ⁻²
$\Delta H_{vap.}$	15 kJ.mol ⁻¹ at 100 °C
Capacité Thermique (C_p)	43 J.K ⁻¹ .mol ⁻¹
Constante d'Isolation Electrique (ϵ)	43.3
Moment Dipolaire (μ)	4.81 D
Point d'Inflammabilité	213.8 °C

des diagrammes d'équilibre, des coefficients de distribution, des données de sélectivité et des courbes de correction de ligne d'attachement.

De Fre et Verhoeve [36] ont étudié l'extraction du benzène par le sulfolane en utilisant différents hydrocarbures saturés notamment le cyclohexane, l'hexane, 1-hexène aux différentes températures. Ils ont conclu que la sélectivité du sulfolane a diminué avec l'augmentation de la température et a augmenté en présence des différents hydrocarbures dans l'ordre suivant: 1-hexène < cyclohexane < hexane.

La comparaison des capacités du sulfolane pour l'extraction du benzène, du toluène et de l'heptane a été faite avec onze solvants par Rawat et Gulati [37]. La sélectivité a été diminuée dans l'ordre 1,3-propane-sulfon > DMSO > thiodiglycol > sulfolane > tétraméthylène > sulphotide > 3-méthyl vinyl sulfolane.

Karvo et Nissem [38] ont étudié les données d'équilibre liquide-liquide pour le système benzène-cyclohexane-sulfolane et toluène-cyclohexane-sulfolane. Ils ont précisé que la séparation du benzène du cyclohexane par l'extraction avec du sulfolane peut être réalisée en quelques étapes par rapport à la séparation du toluène du cyclohexane.

Des données quantitatives des phases-d'équilibre pour les systèmes contenant n-octane + benzène + sulfolane, le toluène ou le xylène ont été déterminées aux différentes températures (298.15, 308.15, 343.35, 372.35 et 402.35) K par S.Lee et H.Kim [39,40]. Le calcul basé sur les modèles d'UNIQUAC et de NRTL a donné une bonne représentation des données d'attachement pour ces systèmes. Les valeurs calculées basées sur le modèle de NRTL s'avèrent meilleures que celles basées sur le modèle d'UNIQUAC.

Letcher et Al. [41] ont déterminé des données d'équilibre liquide-liquide pour les cinq systèmes ternaires, sulfolane + 1-heptyne (+ benzène ou + p-xylène) + heptane et sulfolane + benzène + decane (ou + dodecane) à 303.15 K. Ils ont trouvé que la séparation de 1-heptyne, du benzène, ou du p-xylène d'heptane, de decane ou de dodecane par l'extraction avec du sulfolane est faisable, comme peut être conclu à partir des données de distribution et de sélectivité. Le benzène et le p-xylène sont de meilleurs solvants pour le sulfolane + un mélange d'hydrocarbure tel que le 1-heptyne à 303.15 K. le Calcul de données des lignes d'attachement basé sur les modèles de NRTL et d'UNIQUAC a montré en général que les meilleurs résultats sont obtenus par le modèle d'UNIQUAC.

Récemment Chen et Al. [42] ont étudié les équilibres liquide-liquide à 298,15 K pour six systèmes ternaires heptane + toluène ou m-xylène + sulfolane, cyclohexane + benzène ou toluène + sulfolane, ou toluène + sulfolane et pour deux systèmes quaternaires cyclohexane + heptane + benzène ou toluène + sulfolane. Les données d'équilibre du système ternaire et quaternaire ont été employées pour faire la régression des paramètres d'introduction dans le modèle de NRTL pour ces systèmes. Les données prévues sont en bonne coordination avec les données expérimentales.

Une approche alternative pour l'extraction liquide-liquide est d'employer une combinaison des solvants pour équilibrer la sélectivité et donner comme avantage une basse consommation d'énergie et le rapport solvant-feed, avec un effet sur la dimension des colonnes d'extraction. Les données d'équilibre de phase ternaire sont essentielles pour la compréhension appropriée du processus d'extraction par solvants, du choix du solvant et de la conception des extracteurs.

Le solvant mixte du dipropylene glycol et du diéthylène glycol, a été remplacé par un système de solvants en utilisant le tétra éthylène-glycol dans l'unité d'extraction d'Udex [43]. La récupération des composés aromatiques a été augmenté de 10%, les frais d'exploitation et de besoins en solvant ont été réduits. Le rapport solvant-feed avec le glycol de tétraéthylène était 70% de celui employé par le système solvant mixte. La plupart des autres conditions de fonctionnement étaient inchangées.

Jones et Paynem [44] ont recommandé le solvant mixte de l'amine de diglycol (DGA) et l'eau pour l'extraction de composés aromatiques au lieu du glycol de DEG/propylene. Basé sur leurs résultats d'essai, quelques compagnies américaines ont décidé le changement du solvant dans l'unité de récupération de toluène-xylène, la pureté de produit a été sensiblement améliorée. On n'a pas trouvé de publication éditée sur l'équilibre liquide-liquide du solvant mixte contenant le sulfolane. Dans le présent travail, le système étudié est: toluène + n-octane en utilisant le sulfolane, sulfolane + eau et le sulfolane + alcool, à savoir, le méthanol, l'éthanol, le n-propanol et n-butanol à 293.15 K.

CHAPITRE II

Partie Expérimentale

II.1. Matériels

Les produits utilisés dans notre étude à savoir : le sulfolane, le toluène et le n-Octane sont fournis par Fluka AG avec une pureté respective de 99%, 99.7% et 99%. Par contre le méthanol, l'éthanol, le n-propanol et n-butanol sont fournis par la société chimique d'Aldrich avec une pureté respective de 99,9 %, 99,5 %, 99,5 % et 99,4 %. Tous ces produits chimiques sont maintenus sur tamis moléculaires fraîchement activés du type (carbure de silicate) avant leur emploi. La pureté a été vérifiée expérimentalement en mesurant leurs densités et leurs indices de réfraction. Les propriétés physiques des produits utilisés dans cette étude sont représentées dans le Tableau 1 avec comparaison aux valeurs tirées de la bibliographie.

II.2. Mesures De Densité

Les densités des produits chimiques purs, ont été mesurées au moyen d'un densimètre numérique d'Anton Paar (modèle DMA 602) à 293,15K. Les détails d'utilisation de cet instrument sont décrits dans la partie bibliographique [54].

II.3. Mesures des Indices de réfraction

Les indices de réfraction n_0 des composants liquides purs et mélanges sont mesurés à 293.15 K par le réfractomètre d'Abbe (Tafesa, Allemagne), en utilisant la méthode de réflexion de la ligne de sodium de longueur d'onde ($\lambda = 589.3$ nm) avec une précision de lecture de ± 0.0002 . Cet appareil est calibré avant la mesure des indices de réfraction des échantillons en utilisant des liquides purs standards.

Tableau 2. Comparaison entre les propriétés physiques mesurées a 293.15 K et les valeurs tirées de la bibliographie.

Produits chimiques	Densité ρ (g.cm ⁻³)		Indice de réfraction, n_D		Point d'ébullition °C	Viscosité η C.P.
	Obs.	Lit.[1 -3]	Obs.	Lit.[1 -3]		
Sulfolane	1.2631a	1.2623 ^a	1.4813a	1.4820 ^a	287.3	11.05
Toluène	0.8624	0.8623	1.4941	1.4941	110.625	0.5516
n-Octane	0.6981	0.6984	1.3949	1.3950	125.665	0.5151
Méthanol	0.7866	0.7866	1.3264	1.3265	64.70	0.5445
Ethanol	0.7846	0.7850	1.3594	1.3593	78.29	1.078
n-Propanol	0.7991	0.7998	1.3830	1.3837	97.2	1.722
n-Butanol	0.8063	0.8060	1.3980	1.3973	117.66	2.271

^a Température a 303.15 K

Dans toutes les mesures d'indice de réfraction, la température a été maintenue constante à ± 0.01 K en utilisant un bain-marie à thermostat du type Schott-de Gerate CT 1150, et un thermomètre de quartz du model 201 A de Hewlett-Packard.

II.4. Appareils et procédure

II.4.1. Détermination des courbes binodales

La méthode de titrage de point de turbidité de Haddad et d'Edmister [49] a été employée pour déterminer les données de la courbe binodale (courbe de solubilité), le point de turbidité est la température à laquelle la nébulosité est observée en premier lieu au fond de la fiole d'essai [50]. L'appareil représenté dans la Figure 2 est maintenu à une température constante à $\pm 0.1^\circ\text{C}$ par la circulation d'eau dans la jaquette de la fiole. Une micro-burette calibrée à 0.01 ml est utilisée pour assurer un titrage exact des liquides. Durant le titrage, la solution est agitée en continu par un baro magnétique en Téflon.

Les courbes binodales des systèmes ternaires ont été déterminées par la méthode d'Othmer et d'Al, [51]. Le solvant (sulfolane, sulfolane + eau ou sulfolane + alcool) sont mis dans une fiole à double paroi à travers laquelle l'eau circule à une température constante, le titrage du n-octane se fait à l'aide d'une micro-burette pendant que le mélange est agité par un baro-magnétique. Dès que le point de turbidité est atteint, le liquide est progressivement recalifié par une titration du toluène. L'opération est répétée plusieurs fois et les points de turbidité successifs enregistrés sont reliés pour obtenir une courbe binodale.

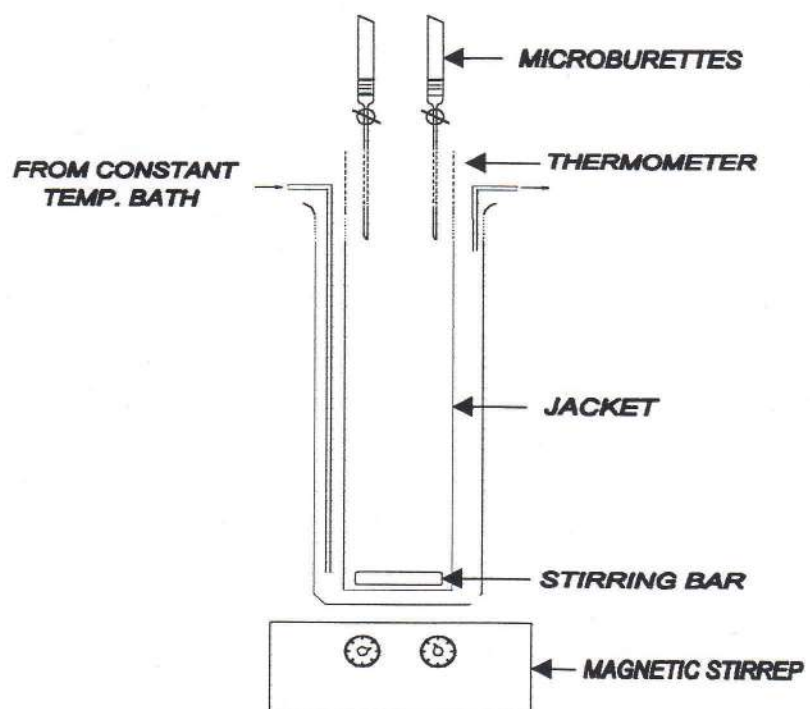


Figure 2.. Le titrateur de point de turbidité

II.4.2. Détermination des lignes d'attachement

Les équilibres liquide-liquide pour les systèmes ternaires sont mesurés en utilisant des flacons en verre(pyrex) a bouchons comme il a été décrit par Alonso et Recasens [52]. Chaque flacon contenait 50 cm^3 du liquide. Les flacons contenant les différents mélanges des trois composants ont été placés dans une table secouante du type D336 Burg wedel 1 de F.G. (la société Bode, Allemagne) dotée d'un thermostat, a une vitesse de 130 tr/mn. La température a été contrôlée avec une exactitude du $\pm 0.1^\circ\text{C}$ en employant un régulateur de température de type Schott - Gerate.

La forme de la ligne d'attachement entre les deux phases conjuguées a été déterminée par la méthode de la section de la croix [53]. La Figure 2 et 4 montrent les résultats des rapports de poids entre le sulfolane et le n-octane (70:30 (a), 50:50 (b) et 30:70 (c)). A chaque fois que la concentration du toluène ait été augmentée pour chaque rapport de concentration, la solution a été agité pendant trois (3) heures et laissée décanter pendant une nuit afin d'enrichir l'équilibre. La Figure 3 montre le dispositif vibreur.

Le prélèvement des échantillons a été fait par des seringues a longues aiguilles introduites dans chacune des deux phases pour contrôler l'évolution de la concentration du toluène et déterminer l'indice de réfraction. La Figure 3 montre les indices de réfraction de la phase inférieure du système (sulfolane + n-octane + toluène).

L'indice de réfraction est constant, tant que le rapport de composition est constant sur la même ligne d'attachement, ainsi l'équilibre réalisé entre les deux phases dans chaque système liquide-liquide est dédoublé.

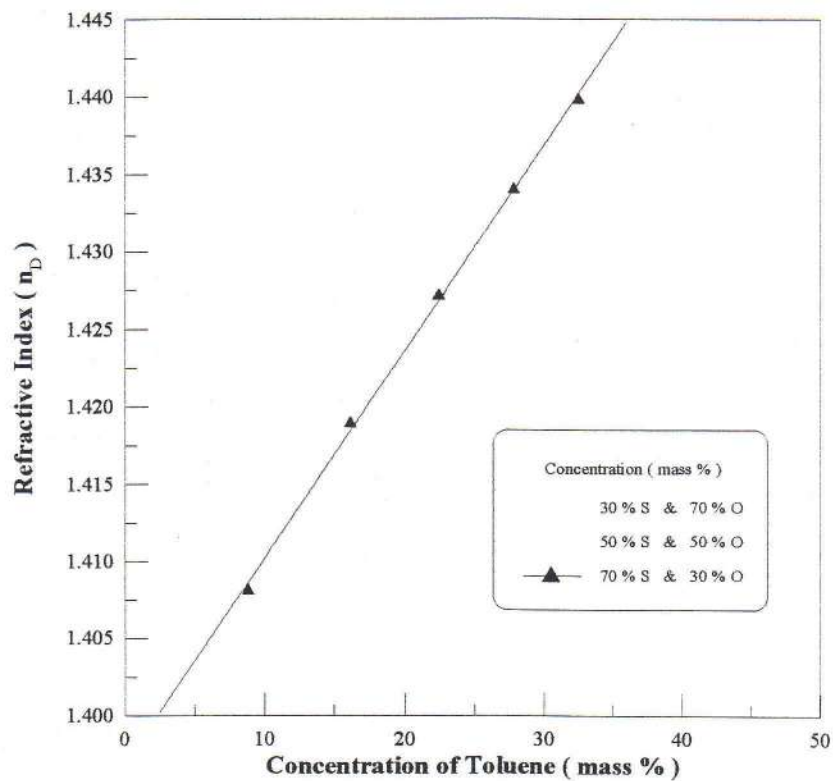


Figure 3. la courbe Binodale pour le système (sulfolane + n-octane + toluène) à 293.15 K.

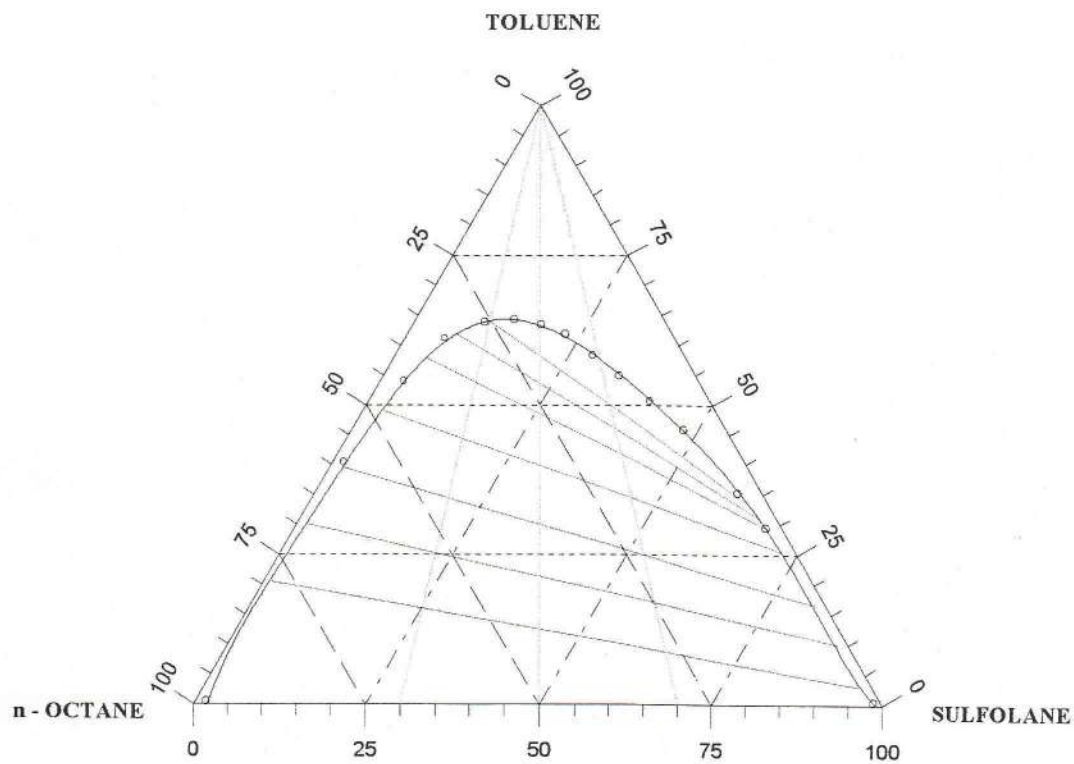


Figure 4. La courbe Binodale pour les systemes (sulfolane + n-octane + toluene) à 293.15 K

Les données de ligne d'attachement ont été déterminées, en lisant la concentration du toluène correspondante à l'indice de réfraction arbitraire, et en représentant les résultats au moyen des trois sécantes A, B et C sur la Figure 4. Ainsi les données des lignes d'attachement ont été déterminées en joignant ces points avec la courbe binodale. Les résultats des cinq autres systèmes étaient semblables à ceux de la Figure 4.

La ligne d'attachement du système (sulfolane + n-octane + toluène) a été également analysée par chromatographie en phase gazeuse, les résultats obtenus par cette méthode sont identiques à ceux mesurés par réfractomètre. La chromatographie en phase (gaz-liquide) utilisée est du model 204 Pye-Unicame, équipée d'un détecteur d'ionisation de flamme, et reliée à une unité d'intégration des spectres physiques. La colonne d'acier inoxydable (180 cm $\times$ 0.423 cm) est remplie avec du Carbowax 20 M sur le chromosorb W. La température d'analyse était de 160°C. Le débit du gaz porteur (azote) est maintenu constant à 30 cm³ min.⁻¹. L'étalonnage de l'appareil a été réalisé avant son utilisation en injectant des échantillons de concentration connue. Les mesures de la masse de fraction étaient reproductibles entre ± 0.004 .

CHAPITRE III

Résultats et Discussions

III.1. Solubilité Mutuelle

Les résultats expérimentaux pour la masse (%) et la fraction molaire de la solubilité mutuelle à 293.15 K des six systèmes ternaires suivants représentés dans les tableaux 3.1-3.6.: sulfolane (S) + n-octane (O) + toluène (T), (sulfolane + eau 5%) (SW) + n-octane (O) + toluène (T), (sulfolane + méthanol 5%) (SM) + n-octane (O) + toluène (T), (sulfolane + éthanol 5%) (SE) + n-octane (O) + toluène (T), (sulfolane + n-propanol 5%) (SP) + n-octane (O) + toluène (T), (sulfolane + 5% n. butanol) (SB) + n-octane (O) + toluène (T). Les courbes de solubilité mutuelle et les compositions des mélanges pour ces systèmes ternaires ont été tracées sur un diagramme triangulaire et sont représentées sur les figures 5-10.

Ces figure montrent que le toluène était complètement miscible avec du sulfolane, (sulfolane + eau), (sulfolane + alcools) et n-octane. Cependant, le sulfolane pur, le (sulfolane + eau) ou (sulfolane + alcools) était complètement immiscible avec le n-octane dans des rapports de poids au-dessous de 1% et au-dessus de 97%. Par contre, le n-octane était moins miscible dans le dissolvant ou dissolvant-soluté, donc ce dissolvant est considéré comme étant très sélectif pour le toluène. Il est prévu alors que dans un mélange contenant de grandes proportions de toluène + n-octane, le toluène sera sélectivement extrait par ces solvants suivants: sulfolane, (sulfolane + eau) ou (sulfolane + alcools), en raison de leur grande surface d'immiscibilité.

Tableau 3: Résultats de solubilité mutuelle pour sulfolane (S) + n-octane (O) + toluène (T) à 293.15 K.

Masse %			Fraction molaire %		
S _O	O	T	x _S	x _O	x _T
68.717	2.210	29.073	0.631	0.021	0.348
61.747	3.442	34.811	0.557	0.033	0.410
48.283	5.982	45.736	0.423	0.055	0.522
40.873	8.545	50.582	0.353	0.078	0.570
34.368	10.949	54.683	0.293	0.098	0.608
28.537	13.258	58.205	0.241	0.118	0.641
22.914	15.330	61.756	0.192	0.135	0.674
18.591	18.138	63.271	0.155	0.159	0.687
14.425	21.444	64.131	0.120	0.187	0.693
10.313	25.873	63.814	0.085	0.225	0.689
5.921	33.012	61.067	0.049	0.289	0.662
3.629	42.483	53.888	0.031	0.377	0.593
1.933	58.196	39.871	0.017	0.532	0.452

Tableau 4: Résultats de solubilité mutuelle pour (sulfolane + H₂O) (SEau) + n-octane (O) + toluène (T) à 293.15 K.

Masse %			Fraction molaire %		
SW	O	T	x _S	x _O	x _T
62.178	2.025	35.797	0.563	0.019	0.418
56.163	3.171	40.666	0.502	0.029	0.468
46.924	5.887	47.189	0.412	0.054	0.534
38.400	8.130	53.470	0.332	0.073	0.595
31.719	10.233	58.048	0.271	0.091	0.638
27.037	12.721	60.240	0.229	0.112	0.658
21.998	14.903	63.099	0.185	0.130	0.684
17.612	17.400	64.988	0.148	0.151	0.701
13.813	20.794	65.393	0.116	0.181	0.704
9.848	25.018	65.134	0.082	0.217	0.701
5.852	33.036	61.112	0.049	0.289	0.662
3.447	40.870	55.683	0.029	0.361	0.610
1.790	54.582	43.628	0.016	0.494	0.490

Tableau 5: Résultats de solubilité mutuelle pour (sulfolane + méthanol) (SM) + n-octane (O) + toluène (T) à 293.15 K.

Masse %			Fraction molaire %		
SM	O	T	x_s	x_o	x_T
69.369	2.298	28.333	0.645	0.022	0.334
63.810	3.663	32.526	0.587	0.034	0.379
49.786	6.351	43.863	0.445	0.058	0.497
41.647	8.966	49.387	0.367	0.081	0.552
35.148	11.530	53.322	0.307	0.103	0.590
29.499	14.112	56.388	0.256	0.125	0.619
23.757	16.366	59.877	0.204	0.144	0.652
19.266	19.355	61.379	0.165	0.169	0.666
13.882	21.252	64.866	0.118	0.184	0.698
9.634	24.888	65.478	0.082	0.216	0.703
5.905	33.898	60.197	0.051	0.297	0.653
3.637	43.842	52.522	0.032	0.390	0.579
1.878	58.228	39.894	0.017	0.532	0.452

Tableau 6 : Résultats de solubilité mutuelle pour (sulfolane + éthanol) (SE) + n-octane (O) + toluène (T) à 293.15 K.

Masse %			Fraction molaire %		
SE	O	T	x_s	x_o	x_T
79.930	2.649	17.421	0.764	0.026	0.215
65.576	3.767	30.657	0.606	0.036	0.359
50.971	6.506	42.524	0.457	0.060	0.483
43.228	9.311	47.461	0.383	0.084	0.533
35.902	11.784	52.315	0.315	0.105	0.580
30.333	14.519	55.148	0.264	0.129	0.607
23.908	16.479	59.613	0.206	0.145	0.649
19.127	19.226	61.647	0.164	0.168	0.668
14.444	22.123	63.433	0.123	0.193	0.684
9.969	25.768	64.262	0.085	0.224	0.692
6.002	34.475	59.523	0.052	0.302	0.646
3.711	44.764	51.524	0.032	0.399	0.569
2.101	65.161	32.739	0.019	0.604	0.377

**Tableau 7: Résultats de solubilité mutuelle pour (sulfolane + propanol) (SP) + n-octane (O)
+ toluène (T) à 293.15 K.**

Masse %			Fraction molaire %		
SP	O	T	x_s	x_o	x_T
84.556	2.797	12.647	0.817	0.028	0.155
66.858	3.833	29.308	0.619	0.036	0.344
51.429	6.552	42.019	0.462	0.060	0.478
42.945	9.233	47.823	0.380	0.084	0.537
36.207	11.862	51.931	0.317	0.106	0.577
30.591	14.616	54.794	0.266	0.130	0.604
24.608	16.930	58.461	0.212	0.149	0.639
19.553	19.618	60.829	0.167	0.172	0.661
14.369	21.968	63.664	0.122	0.191	0.687
10.428	26.903	62.669	0.089	0.234	0.677
5.815	33.338	60.847	0.050	0.291	0.659
3.604	43.393	53.003	0.031	0.385	0.583
2.169	67.157	30.674	0.020	0.626	0.354

**Tableau 8 : Résultats de solubilité mutuelle pour (sulfolane + n-butanol) (SB) + n-octane
(O) + toluène (T) à 293.15 K.**

Masse %			Fraction molaire %		
SB	O	T	x_s	x_o	x_T
75.073	2.482	22.445	0.708	0.024	0.268
65.629	3.761	30.610	0.606	0.036	0.359
52.287	6.658	41.055	0.470	0.061	0.468
43.619	9.373	47.008	0.387	0.085	0.529
37.031	12.126	50.843	0.325	0.109	0.566
30.383	14.509	55.109	0.264	0.129	0.607
24.448	16.811	58.741	0.210	0.148	0.641
19.697	19.753	60.550	0.169	0.173	0.658
14.775	22.578	62.647	0.126	0.197	0.677
10.356	26.705	62.939	0.088	0.233	0.679
5.770	33.065	61.165	0.049	0.289	0.662
3.759	45.236	51.005	0.033	0.403	0.564
1.987	61.497	36.516	0.018	0.566	0.416

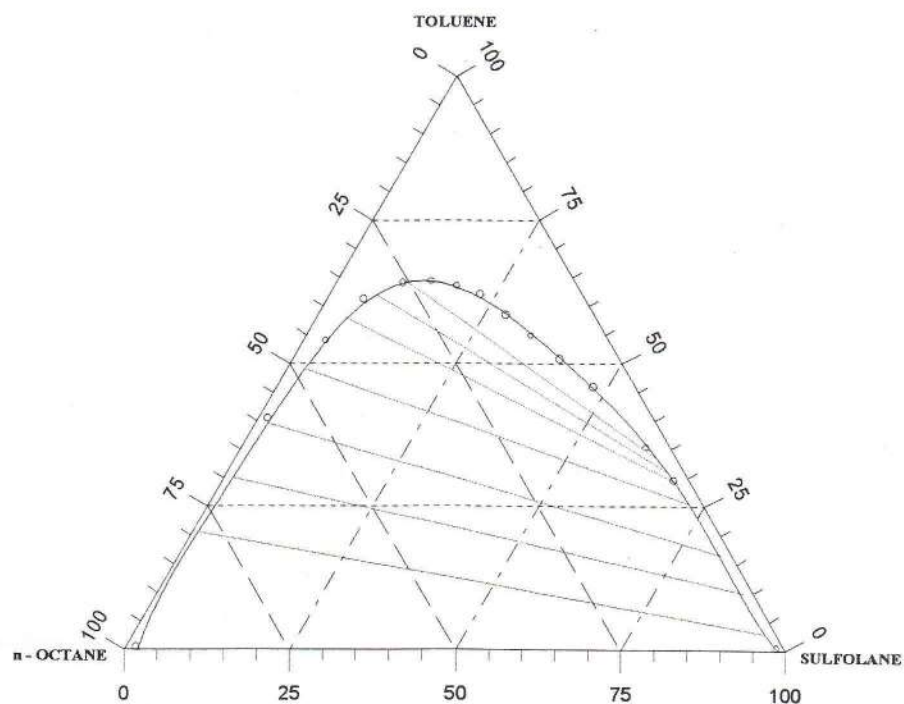


Figure 5 : Les données d'équilibre (liquide-liquide) pour le système sulfolane (S) + n-octane (O) + toluène (T) à 293.15 K.

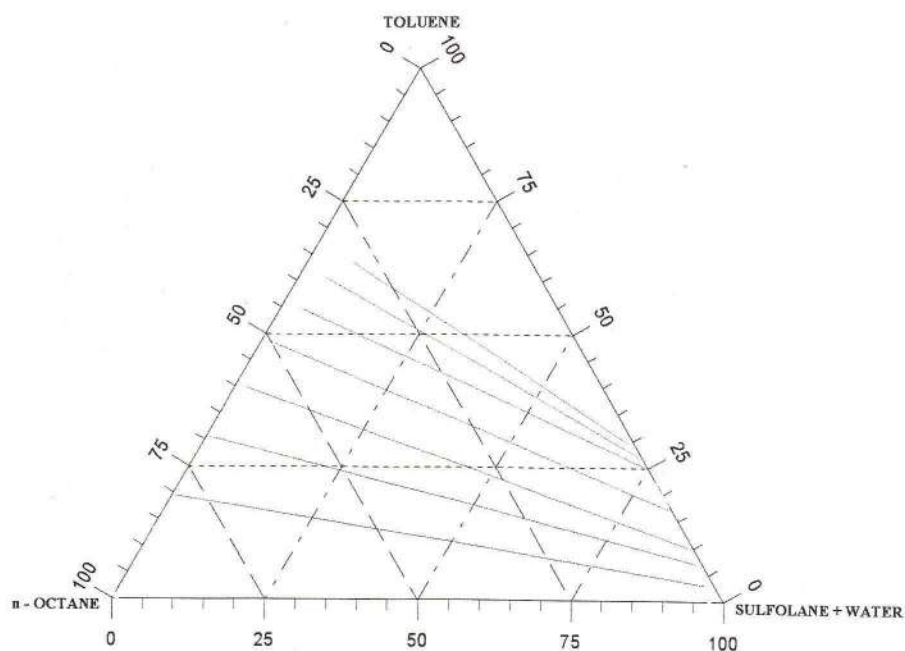


Figure 6: Les données d'équilibre (liquide-liquide) pour le système (sulfolane + H₂O) (SEau) + n-octane (O) + toluène (T) à 293.15 K.

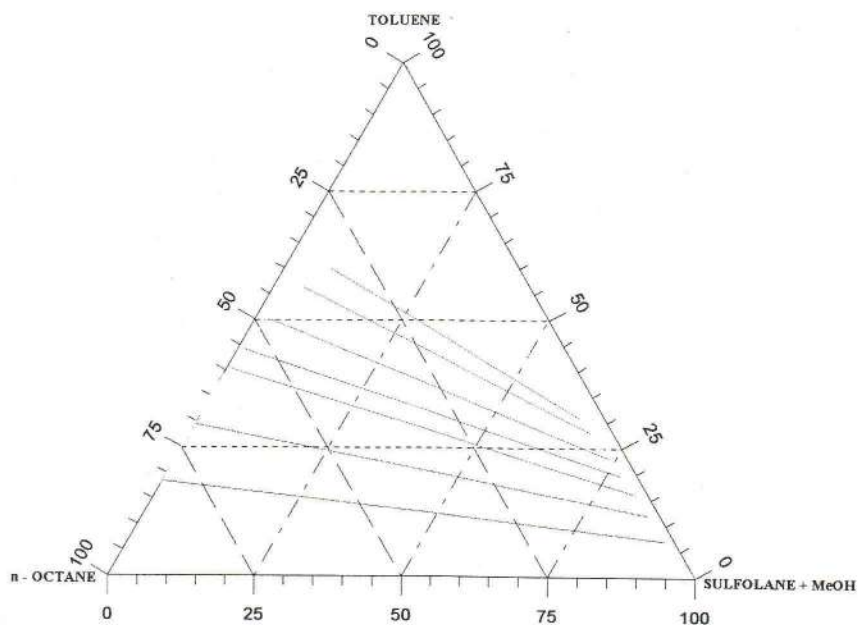


Figure 7 : Les données d'équilibre (liquide-liquide) pour le système (sulfolane + n-méthanol) (SM) + n-octane (O) + toluène (T) à 293.15 K.

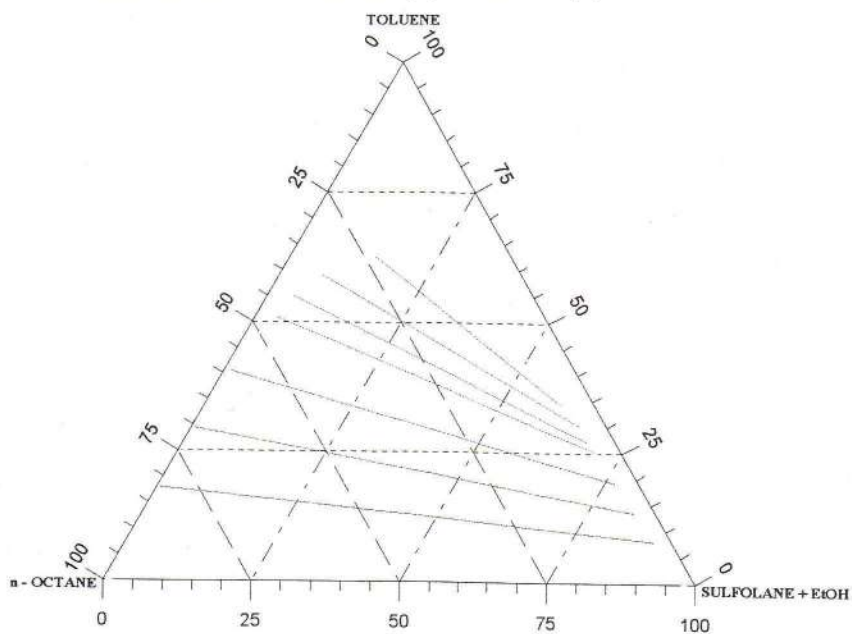


Figure 8 : Les données d'équilibre (liquide-liquide) pour le système (sulfolane + n-éthanol) (SE) + n-octane (O) + toluène (T) à 293.15 K.

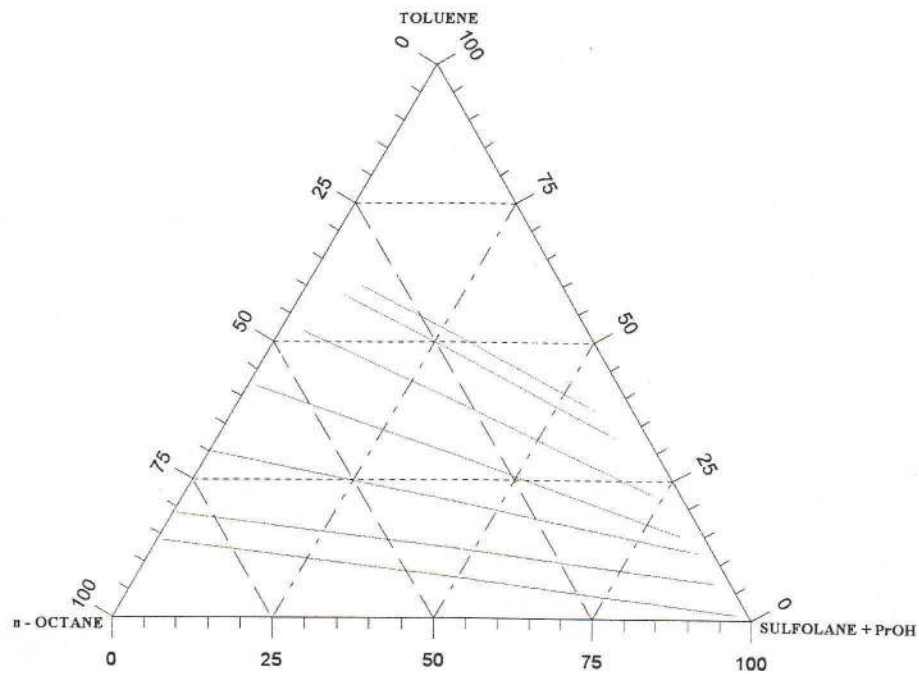


Figure 9 : Les données d'équilibre (liquide-liquide) pour le système (sulfolane + n-propanol) (SP) + n-octane (O) + toluène (T) à 293.15 K.

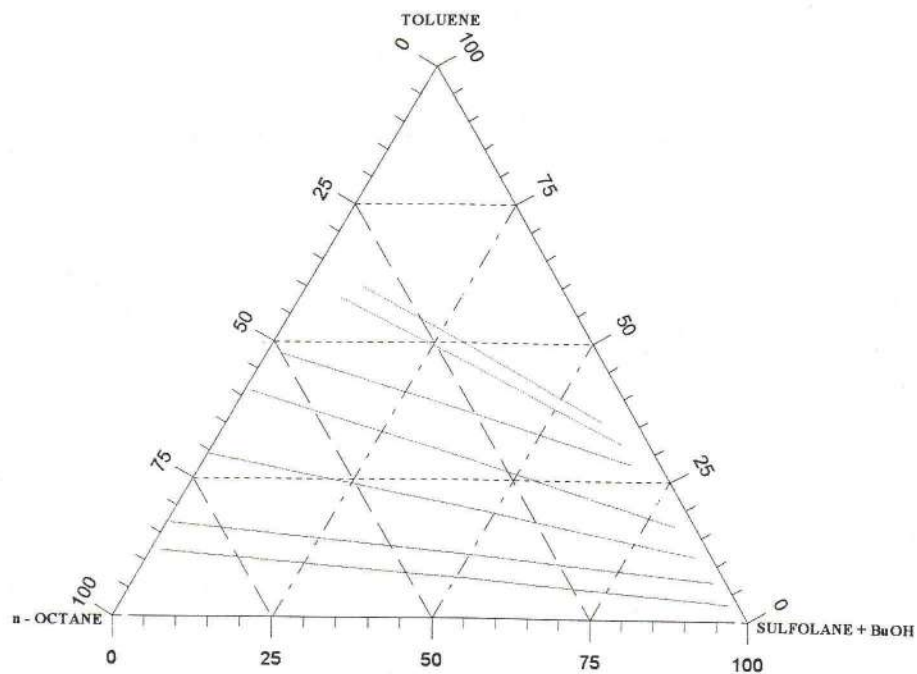


Figure 10: Les données d'équilibre (liquide-liquide) pour le système (sulfolane + n-butanol) (SB) + n-octane (O) + toluène (T) à 293.15 K.

Il est important de mentionner qu'il y a quelques paramètres qui peuvent être déterminés à partir des courbes binodales ci-dessus des mélanges ternaires. Ces paramètres donnent la capacité au sulfolane, au sulfolane + l'eau et au sulfolane + alcool pour extraire le toluène à partir du mélange d'hydrocarbure. La figure 12 montre que la méthode d'évaluation de ces paramètres se fait comme suit. E_{∞} représente la capacité maximum du dissolvant à extraire le toluène à partir du mélange d'hydrocarbure. E_{∞} a été obtenu en traçant une tangente à la courbe binodale à partir du point A du triangle. La composition de E de l'extrait est obtenue en traçant une ligne droite de dissolvant au point Q. La composition du R du raffinat est obtenue en traçant une ligne droite de A au point P.

Le rapport de phase découle à partir de la figure 12 tel que l'extrait de la phase E / le raffinat de la phase R = MP / MQ .

Concernat le rapport de l'extrait au raffinat: Extrait E / Raffinat R = FR / FE

De la relation ci-dessus, la quantité et la composition de l'extraction de E et R peut être calculé facilement.

Quand au calcul de E_{∞} pour les systèmes étudiés sont respectivement comme suit : 93, 98, 89, 86,8, 85,5 et 83,2 % pour le sulfolane, sulfolane + eau, sulfolane + méthanol, sulfolane + éthanol, sulfolane + propanol et sulfolane + butanol.

III.2. Données Des Lignes D'attachement

Les données d'équilibre (liquide-liquide) obtenues expérimentalement pour les six systèmes ternaires à 293,15 K sont tracées sur des triangles équilatérales suivant la méthode de Francies [53], et représentées sur les Figures 5-10.

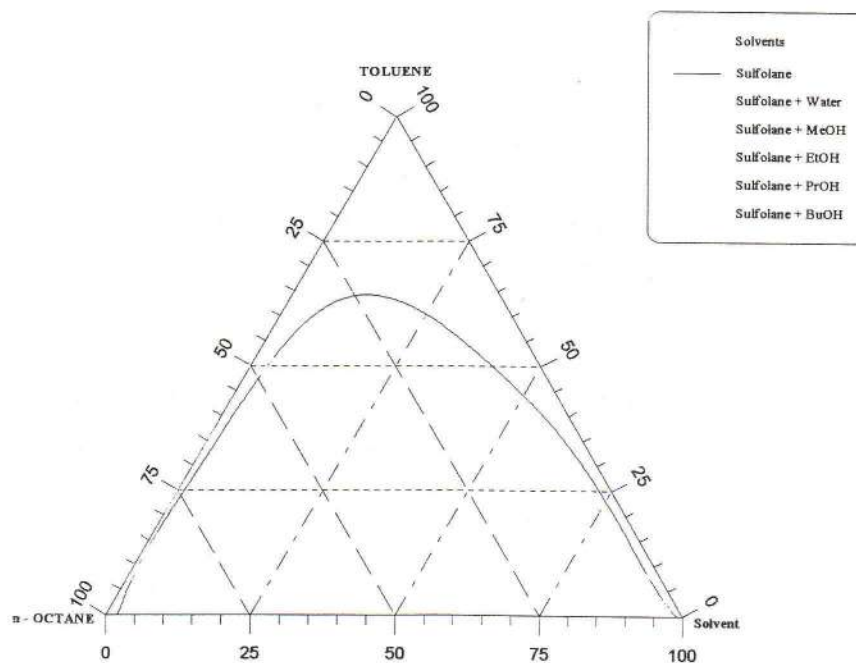


Figure 11: Comparaison des diagrammes des phases d'équilibre pour toluène + n-octane + solvants à 293.15 K.

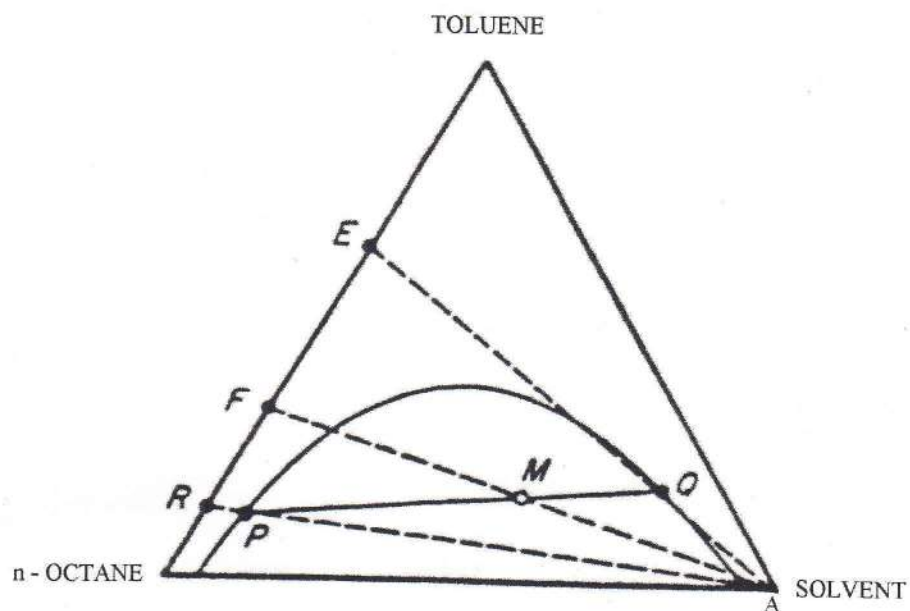


Figure 12 : La corrélation de Bachman pour tous le systèmes.

Les données des lignes d'attachement indiquant la composition des deux phases (phase riche du dissolvant et phase riche de n-octane) sont figurées dans les tableaux 9-14.

Les données des systèmes adaptées aux courbes binodales, indiquent l'exactitude des données expérimentales des lignes d'attachement. Les pentes des lignes d'attachement inclinées par rapport aux solvants indiquent que la séparation du toluène de l'n-octane peut être réalisée dans quelques étapes [53].

Corrélations Des Lignes D'attachement

Les données des Lignes d'attachement des six mélanges ternaires ont été corrélées par Bachman [54], Hand [55] et Othmer-Tobias [56] comme suit.

La première équation empirique décrivant la distribution des composants dans les trois composants des systèmes liquides biphasés était faite par Bachman.

$$x_{S,S} = a_1 + b_1 \cdot \left(\frac{x_{S,S}}{x_{O,O}} \right) \quad (3.1)$$

Où $x_{S,S}$ et $x_{O,O}$ sont la concentration (fraction molaire en pourcentage) des composants, (S) sulfolane et (O) n-octane dans la phase (S) phase riche du sulfolane et la phase (O) phase riche d'n-octane, respectivement, et a_1 et b_1 sont des constantes. Figure 13 La corrélation de Bachman pour le système n-octane + toluène + solvants à 293.15 K.

Hand a corrélé la concentration du soluté dans les deux solutions conjuguées par l'équation suivante:

$$\log \left(\frac{x_{T,S}}{x_{S,S}} \right) = a_2 + b_2 \cdot \log \left(\frac{x_{T,O}}{x_{O,O}} \right) \quad (3.2)$$

Où $x_{T,S}$ et $x_{T,O}$ sont les fractions molaires des composants (T) toluène dans la phase (S) phase riche de sulfolane et (O) phase riche d'n-octane, respectivement. a_2 et b_2 sont des constantes, Figure 14 montrant la trace logarithmique de $x_{T,S}/x_{S,S}$ contre $x_{T,O} / x_{O,O}$ est rectiligne.

Othmer et Tobias ont proposé comme suit :

$$\log\left(\frac{1-x_{S,S}}{x_{S,S}}\right) = a_3 + b_3 \cdot \log\left(\frac{1-x_{O,O}}{x_{O,O}}\right) \quad (3.3)$$

Tableau 9: La composition expérimentale du système d'équilibre (liquide - liquide) pour sulfolane (S) + n-octane (O) + toluène (T) à 293.15 K.

Phase riche en sulfolane			Phase riche en n-octane		
x_s	x_o	x_T	x_s	x_o	x_T
0.529	0.075	0.396	0.083	0.257	0.660
0.580	0.039	0.381	0.058	0.299	0.643
0.619	0.029	0.352	0.042	0.334	0.624
0.715	0.019	0.266	0.026	0.430	0.544
0.814	0.015	0.171	0.017	0.534	0.449
0.890	0.012	0.098	0.013	0.640	0.347
0.940	0.009	0.051	0.011	0.731	0.258

Tableau 10: La composition expérimentale du système d'équilibre (liquide - liquide) pour (sulfolane +H₂O) (Seau) + n-octane (O) + toluène (T) à 293.15 K.

Phase riche en sulfolane			Phase riche en n-octane		
x_{sw}	x_o	x_T	x_{sw}	x_o	x_T
0.655	0.019	0.326	0.062	0.253	0.685
0.691	0.016	0.293	0.046	0.298	0.656
0.711	0.014	0.275	0.031	0.326	0.643
0.782	0.012	0.206	0.013	0.448	0.539
0.855	0.010	0.135	0.008	0.613	0.379
0.865	0.009	0.126	0.004	0.634	0.362
0.909	0.003	0.088	0.002	0.734	0.264

Tableau 11 : La composition expérimentale du système d'équilibre (liquide - liquide) pour (sulfolane + méthanol) (SM) + n-octane (O) + toluène (T) à 293.15 K.

Phase riche en sulfolane			Phase riche en n-octane		
X _{SM}	X _O	X _T	X _{SM}	X _O	X _T
0.569	0.036	0.395	0.088	0.259	0.653
0.635	0.029	0.336	0.055	0.327	0.618
0.706	0.025	0.269	0.023	0.426	0.551
0.742	0.023	0.235	0.020	0.471	0.509
0.776	0.020	0.204	0.017	0.525	0.458
0.830	0.017	0.153	0.013	0.633	0.354
0.895	0.015	0.090	0.009	0.771	0.220

Tableau 12: La composition expérimentale du système d'équilibre (liquide - liquide) pour (sulfolane + éthanol) (SE) + n-octane (O) + toluène (T) à 293.15 K.

Phase riche en sulfolane			Phase riche en n-octane		
X _{SE}	X _O	X _T	X _{SE}	X _O	X _T
0.517	0.045	0.438	0.087	0.216	0.697
0.557	0.039	0.404	0.074	0.249	0.677
0.608	0.034	0.358	0.050	0.308	0.642
0.668	0.030	0.302	0.030	0.407	0.563
0.736	0.027	0.237	0.017	0.525	0.458
0.806	0.025	0.169	0.013	0.645	0.342
0.868	0.018	0.113	0.009	0.747	0.244

Tableau 13: La composition expérimentale du système d'équilibre (liquide - liquide) pour (sulfolane + propanol) (SP) + n-octane (O) + toluène (T) à 293.15 K.

Phase riche en sulfolane			Phase riche en n-octane		
X_{SP}	X_O	X_T	X_{SP}	X_O	X_T
0.506	0.057	0.437	0.066	0.280	0.654
0.567	0.048	0.385	0.042	0.321	0.637
0.671	0.040	0.289	0.030	0.397	0.573
0.772	0.030	0.198	0.022	0.505	0.473
0.858	0.025	0.117	0.018	0.635	0.347
0.937	0.015	0.048	0.014	0.722	0.264
0.956	0.015	0.029	0.010	0.818	0.172

Tableau 14: La composition expérimentale du système d'équilibre (liquide - liquide) pour (sulfolane + n-butanol) (SE) + n-octane (O) + toluène (T) à 293.15 K.

Phase riche en sulfolane			Phase riche en n-octane		
X_{SB}	X_O	X_T	X_{SB}	X_O	X_T
0.512	0.052	0.436	0.066	0.280	0.654
0.563	0.043	0.394	0.042	0.321	0.637
0.676	0.039	0.285	0.026	0.440	0.534
0.764	0.020	0.216	0.019	0.520	0.461
0.843	0.015	0.142	0.015	0.645	0.340
0.926	0.010	0.064	0.012	0.778	0.210
0.950	0.007	0.043	0.009	0.846	0.145

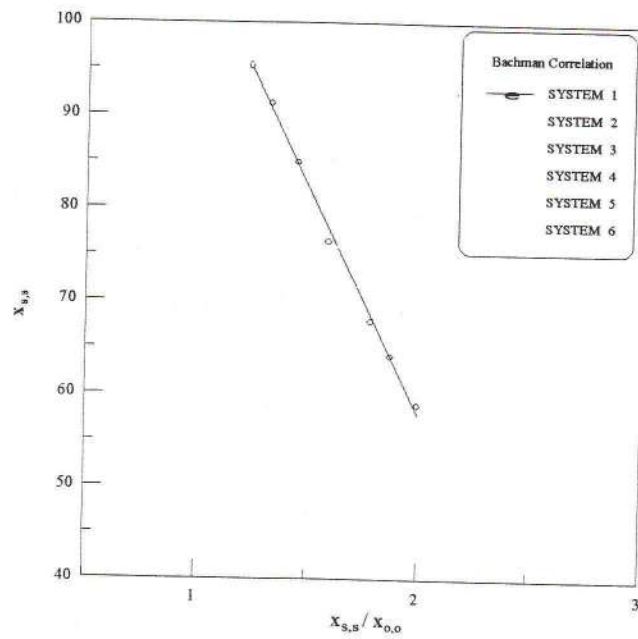


Figure 12: La corrélation de Bachman pour tous les systèmes.

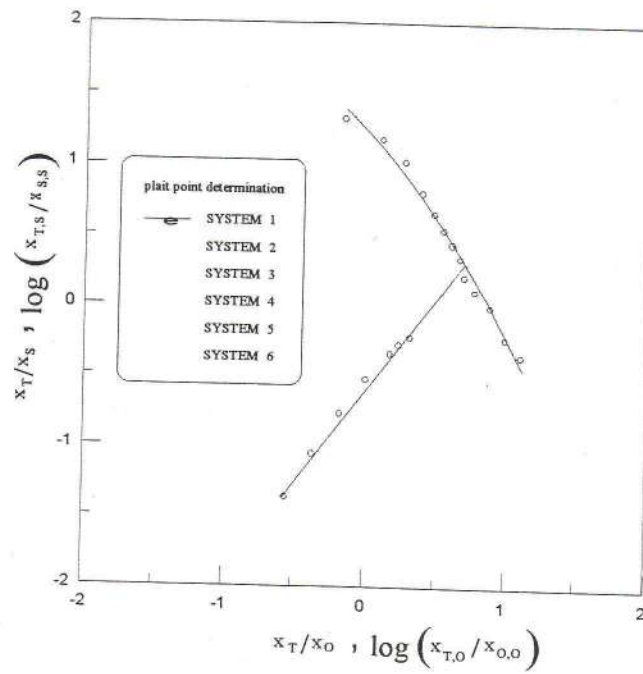


Figure 13: la corrélation de HAND et la détermination de point de plis pour n-octane + toluène + systèmes solvants à 293.15 K.

Où a_3 et b_3 sont des constantes. La corrélation d'Othmer et de Tobias représenté sur Figure 14 donne une ligne droite.

Les paramètres a_j et b_j ($j=1-3$) de l'équation 3.1 – 3.3 ont été obtenus en employant la méthode des moindres carrés à partir des données expérimentales de lignes d'attachement dans les tableaux 9-14. Les paramètres et les coefficients de corrélation, R_j , sont donnés dans le tableau 15. Ces données ont montré une petite dispersion d'une ligne droite, donc elles étaient jugées acceptables empiriquement, en indiquant l'uniformité interne des données expérimentales.

III.3. Coefficient de Distribution et Sélectivité

L'efficacité du dissolvant pour l'extraction du toluène peut être exprimée en termes de coefficient de distribution (k_T) et (k_O) du toluène et n-octane, et la sélectivité (S_{ij}) du solvant. Les coefficients de distribution du toluène et n-octane sont donnés par les formules suivantes:

$$k_T = \frac{\text{Mole \% Toluene dans la couche de Sulfolane}}{\text{Mole \% Toluene dans la couche de n - Octane}} = \frac{x_{T,s}}{x_{T,o}} \quad (3.4)$$

$$k_O = \frac{\text{Mole \% Octane dans la couche de Sulfolane}}{\text{Mole \% Octane dans la couche de n - Octane}} = \frac{x_{O,s}}{x_{O,o}} \quad (3.5)$$

La sélectivité ($S_{T,O}$) qui est la mesure des capacités du dissolvant pour l'extraction du toluène de la solution (toluène + n-octane) est donnée par cette formule [33]:

$$S_{T,O} = \frac{k_T}{k_O} \quad (3.6)$$

La sélectivité (β) est exprimée par l'équation suivante [51]:

Tableau 15: Résultats des analyses des moindres carrés pour les systèmes n-octane + toluène + solvants à 293.15 K.

Solvent	Correlation								
	Bachman			Hand			Othmer et Tobais		
	a ₁	b ₁	R ₁	a ₂	b ₂	R ₂	a ₃	b ₃	R ₃
S	156.107	-49.288	0.998	0.453	0.746	0.996	0.468	0.779	0.996
SW	111.671	-17.101	0.992	0.857	1.248	0.999	0.818	1.291	0.998
SM	122.227	-28.466	0.993	0.626	1.133	0.999	0.603	1.214	0.999
SE	113.558	-24.476	0.981	0.645	1.256	0.997	0.593	1.343	0.997
SP	171.212	-63.131	0.987	0.392	0.702	0.995	0.411	0.769	0.994
SB	160.398	-57.787	0.996	0.434	0.879	0.999	0.416	0.898	0.999

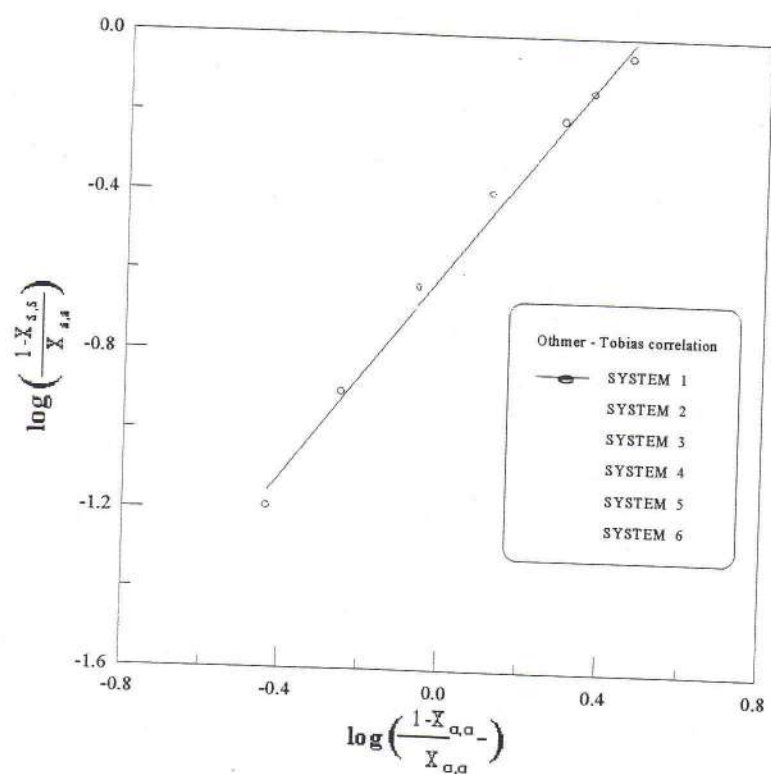


Figure 14: La corrélation d'Othmer – Tobias d'n-octane + toluène + solvant pour tous les systèmes 293.15 K.

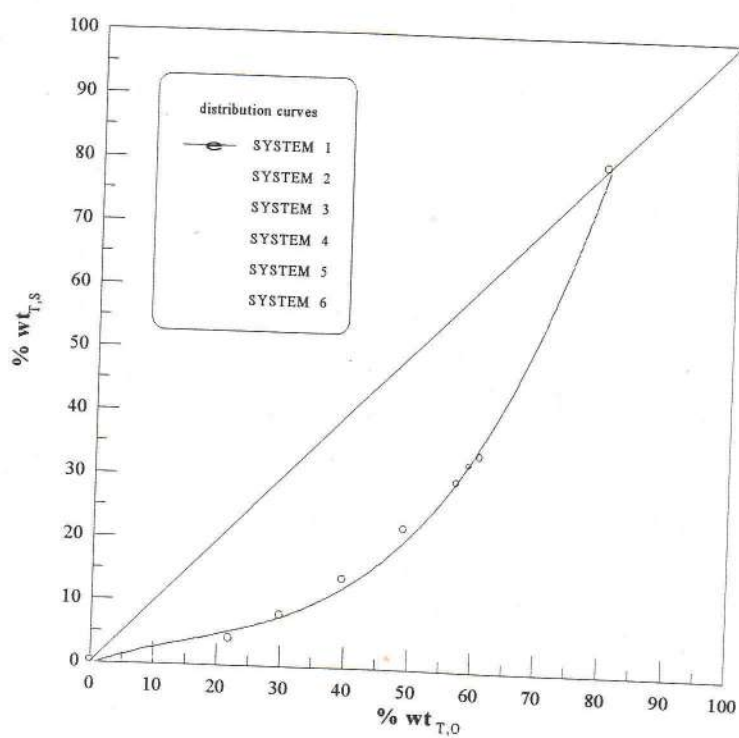


Figure 15: La distribution du toluène entre la couche du solvant et la couche du n-octane à 293.15 K.

$$\beta = \frac{\text{Mole de Toluene \% dans sulfolane - couche libre du solvant}}{\text{Mole de Toluene \% dans sulfolane - couche libre du n - octane}} = \frac{\frac{x_{T,S}}{x_{T,S} + x_{O,S}}}{\frac{x_{T,O}}{x_{T,O} + x_{O,O}}} \quad (3.7)$$

Les résultats obtenus des coefficients de distribution et de la sélectivité sont portés dans le tableau 16.

Figure 16 montre le coefficient de distribution du toluène et la Figure 17 montre la sélectivité du dissolvant, calculés à partir des lignes d'attachement en utilisant les données expérimentales précédentes confirmées par les équations 3.4 et 3.5.

Le coefficient de distribution du toluène entre n-octane et dissolvant indique que la préférence de l'extraction du toluène est dans l'ordre suivant: sulfolane + eau > sulfolane > sulfolane + MeOH > sulfolane + EtOH > sulfolane + PrOH > sulfolane + BuOH.

Des affinités semblables tirées du diagramme de sélectivité et représentées dans Figure 17 indiquent que le (sulfolane + eau) est le plus sélectif pour l'extraction du toluène en présence de n-octane.

III.4. Point de Plis

Le point de plis est le point de la courbe binodale [57] auquel les lignes d'attachement reliant les deux compositions des phases l'équilibre deviennent extrêmement courtes. A ce point, les deux phases d'équilibre deviennent identiques en composition.

Tableau 16: Les coefficients de distribution k et valeurs de sélectivité pour n-octane + toluène + solvants.

K_T	K_O	$S_{T,O}$	β
Sulfolane (S) + n-octane (O) + toluène (T)			
0,600	0,292	2,056	1,168
0,593	0,130	4,543	1,329
0,564	0,087	6,498	1,418
0,489	0,044	11,068	1,671
0,381	0,028	13,562	2,013
0,282	0,019	15,068	2,534
0,197	0,012	16,567	3,271
(Sulfolane + eau) (SE) + n-octane (O) + toluène (T)			
0,476	0,075	6,336	1,294
0,447	0,054	8,318	1,379
0,428	0,043	9,961	1,434
0,382	0,027	14,273	1,730
0,356	0,016	21,845	2,437
0,349	0,014	25,521	2,574
0,332	0,005	71,077	3,640
(Sulfolane + méthanol) (SM) + n-octane (O) + toluène (T)			
0,605	0,139	4,352	1,280
0,544	0,089	6,131	1,408
0,488	0,059	8,320	1,622
0,462	0,049	9,453	1,754
0,445	0,038	11,693	1,955
0,432	0,027	15,924	2,505
0,409	0,019	21,022	3,861
(Sulfolane + éthanol) (SE) + n-octane (O) + toluène (T)			
0,628	0,208	3,016	1,188
0,597	0,157	3,810	1,247
0,558	0,110	5,051	1,351
0,536	0,074	7,277	1,567
0,517	0,051	10,062	1,927
0,494	0,039	12,747	2,514
0,464	0,024	19,022	3,495
(Sulfolane + propanol) (SP) + n-octane (O) + toluène (T)			
0,668	0,204	3,282	1,263
0,604	0,150	4,042	1,337
0,504	0,101	5,005	1,487
0,419	0,059	7,046	1,796
0,337	0,039	8,563	2,332
0,183	0,021	8,807	2,847
0,169	0,018	9,192	3,793

Suite du Tableau 16:

(Sulfolane + n-butanol) (SB) + n-octane (O) + toluène (T)			
0,667	0,186	3,590	1,276
0,619	0,134	4,618	1,356
0,534	0,089	6,022	1,604
0,469	0,038	12,182	1,948
0,418	0,023	17,958	2,620
0,305	0,013	23,706	4,069
0,297	0,008	35,836	5,877

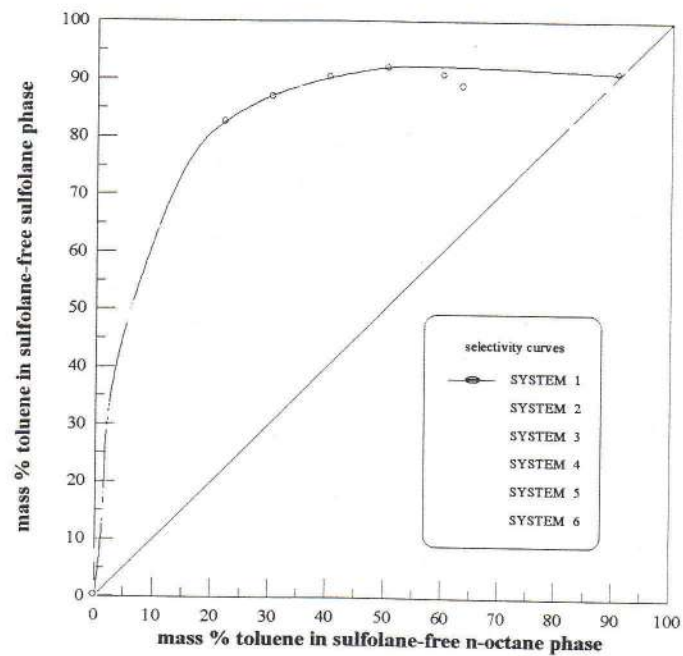


Figure 16: La courbe de sélectivité pour solvants + n-octane + toluène à 293.15 K.

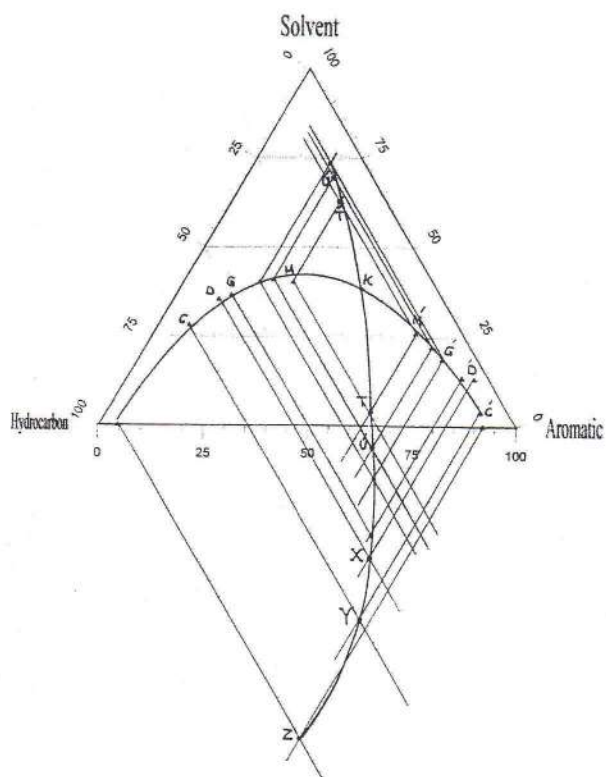


Figure 17: Estimation des points de plis

L'interpolation des lignes d'attachement nous a mené à estimer la position du point de plis. La composition du point de plis sur la courbe binodale a été déterminé à partir de cette formule:

$$\frac{x_{T,O}}{x_{O,O}} = \frac{x_{T,S}}{x_{O,S}} = \frac{x_T}{x_O} \quad (3.8)$$

Les méthodes les plus simples pour l'interpolation et la corrélation des lignes d'attachement sont celles basées sur la construction de la ligne conjuguée, qui peut être dessinée par plusieurs manières [33]. Ces méthodes ont été choisies car elles sont rapides et fiables, et la position du point de plis est immédiatement trouvée. La figure 18 représente la manière d'obtention du point de plis du système ternaire.

Les lignes parallèles par rapport aux côtes du triangle ont été tracées en utilisant les points C, D, G..... et C', D', G' (points finals des lignes d'attachement). Les lignes d'attachement dessinées à partir des phases coexistences M et M' coupent dans T et T', et aussi L et L' coupent dans U et U' et ainsi de suite. On obtient ainsi une ligne auxiliaire (la ligne conjuguée) ZXY.... T'U'V' qui coupe la courbe binodale en K. Il est évident que K indique la composition du point de plis. les valeurs des points de plis des systèmes ternaires sont énumérées dans le tableau XVII.

Figure 18 donne l'évaluation du point plis du système: sulfolane + n-octane + toluène à 293.15 K.

Treybal et Al, [58] ont proposé la méthode d'évaluation du point plis en utilisant le système de coordination de HAND.

Tableau 17: Composition du point de plis pour les systèmes ternaires solvants + n-octane + toluène à 293.15 K.

Solvant	Experimental method			Treybal method		
	X _S	X _O	X _T	X _S	X _O	X _T
S	0.504	0.106	0.390	0.590	0.120	0.290
SW	0.486	0.088	0.427	0.481	0.082	0.437
SM	0.526	0.116	0.358	0.507	0.058	0.435
SE	0.533	0.163	0.304	0.495	0.094	0.410
SP	0.577	0.121	0.302	0.539	0.120	0.332
SB	0.551	0.177	0.272	0.565	0.142	0.293

III.5. Discussion

Le choix du dissolvant utilise dans l'extraction dépend de la Capacité dissolvante mesurée par le coefficient de distribution du soluté et également de sa sélectivité. la capacité et la sélectivité du dissolvant par rapport au toluène sont représentées respectivement sur les Figure 19 et 20. On remarque que La sélectivité diminue par rapport à l'augmentation du toluène, par contre la solubilité augmente avec l'augmentation de la teneur du toluène d'alimentation.

Dans le cas du recyclage des composés aromatiques, il est préférable d'avoir un dissolvant ayant une grande capacité et sélectivité vers les composés aromatiques, on a trouve que la combinaison du sulfolane avec de l'eau a une grande capacité, sélectivité et composition en point de plis par rapport aux systèmes solvants: sulfolane pur, ou sulfolane + alcool. Donc, on peut considérer que le (sulfolane + eau) est un des solvants les plus puissants pour l'extraction de toluène. D'ailleurs, la viscosité du système (sulfolane + eau) est très basse relativement à la viscosité du sulfolane pur qui ($\eta_{\text{sulfolane}} = 10.286 \text{ cP}$, $\eta_{\text{H}_2\text{O}} = 0.797 \text{ cP}$) améliore encore l'efficacité d'extraction. Donc, ce système dissolvant semble être attrayant pour l'extraction du toluène.

En général, les pentes des lignes d'attachement sont plus raides dans le système (sulfolane + eau) que dans les solvants correspondants (voir les Figure 5-10). Dans le cas du système (sulfolane + eau). Le point de plis est situé dans la région des mélanges où plus de sulfolane. Donc la séparation du toluène à partir du (toluène + n octane) par extraction avec (sulfolane + eau) peut être réalisée dans moins d'étapes que la séparation du toluène par d'autres solvants. D'autre part, la comparaison de la solubilité (les Figure 5-10), capacité (les Figure 17 et 19) et sélectivité (les Figure 16 et 20) montre que le dissolvant (sulfolane + eau) est le dissolvant le plus efficace pour l'extraction du toluène du mélange (toluène + n-octane).

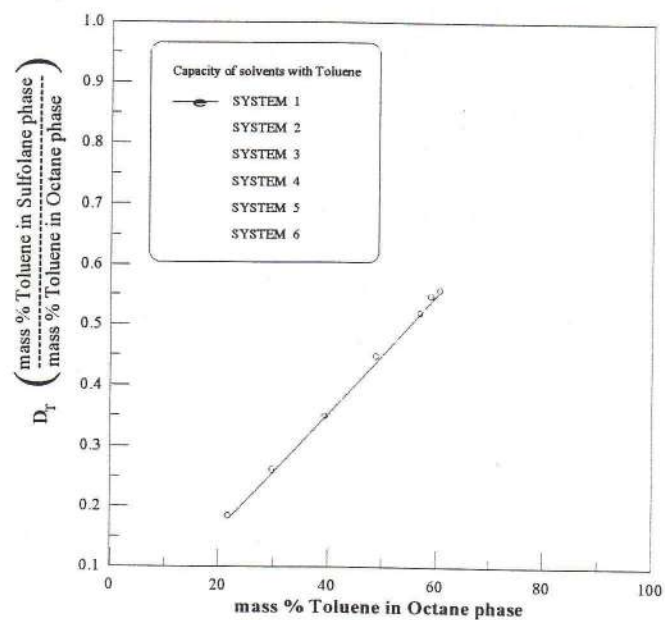


Figure 18: Comparaison de la capacité de solvants avec les systèmes d'n-octane + toluène à 293.15 K.

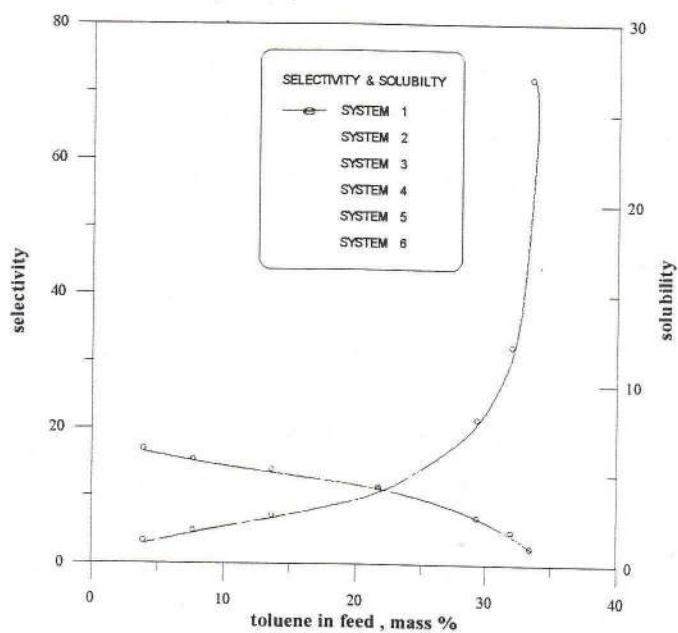


Figure 19 : La courbe de sélectivité et solubilité avec le changement de composition de (octane + toluène + solvants) à 293.15 K.

La comparaison des sélectivités du (sulfolane + eau), de N-méthylpyrrolidone (NMP), de N-formylmorpholine (NFM) et de diméthylsulfoxyde (DMSO) a été basée sur les données d'équilibre liquide-liquide pour le système dissolvant + n-octane + toluène tirées de la bibliographie [35, 38, 59, 60]. La sélectivité du dissolvant (sulfolane + eau) est plus haute que les autres.

Il est clair qu'il y a plusieurs types d'interactions moléculaires qui agissent sur les systèmes binaires et ternaires pour créer une déviation par rapport à l'idéalité. Ces interactions moléculaires sont celles de Van der Waals, les liaisons d'hydrogène, le complexe de transfert de charge et les forces de Colomb. Il est clair aussi que le point auquel le mélange dévie de l'idéalité justifie la distribution d'un corps dissous (toluène) entre deux dissolvants (sulfolane + n-octane). Cependant, il est alors possible de déterminer la nature de l'extraction du toluène du mélange sur la base des potentiels de liaisons d'hydrogènes. Puisque dans notre système ternaire on utilise le sulfolane, le sulfolane + H_2O ou le sulfolane + l'alcool, l'interaction moléculaire principale est la liaison d'hydrogène, en plus des forces de Vander Waals concernant le toluène et le n-octane. Ainsi, la capacité d'extraction dépend principalement du dissolvant utilisé. Par conséquent, les liaisons d'hydrogènes sont les liaisons uniques et prédominantes dans le processus d'extraction.

Il faut mentionner que l'équilibre liquide-liquide en présence d'eau est caractérisé par des forces intermoléculaires (liaisons d'hydrogène). La présence d'eau comme solvant conjugué avec le sulfolane favorise la formation des liaisons d'hydrogène, ceci résulte plus de cavités dans

cette structure qui est capable d'augmenter la sélectivité du sulfolane envers le toluène dans un mélange d'hydrocarbures.

Les alcools présentent moins d'interactions comparativement à l'eau, la capacité sélective diminue avec l'augmentation de la taille du groupe alkyle de l'alcool :

sulfolane + méthanol > sulfolane + éthanol > sulfolane + propanol > sulfolane + butanol.

Le fait de négligence des liaisons d'hydrogènes entre les molécules d'eau et d'alcool, étant donné que la quantité en eau ou en alcool sont suffisamment petit (5%) semble être raisonnable.

III.6. Corrélation des Données

Des modèles thermodynamiques, et modèles de coefficient d'activité, ont été utilisés pour faire la corrélation des données expérimentales des systèmes à savoir l'équation de (UNIQUAC) proposée par Anderson et Prausnitz [61], et l'équation de (NRTL) proposée par Renon et Prausnitz [28].

La fonction objective F , a été employée pour minimiser la différence entre les fractions expérimentales et les fractions molaires.

$$F = \sum_{i=1}^n \min \sum_{j=1}^3 \sum_{L=1}^2 (x_{jL}^{\text{exp}}(i) - x_{jL}^{\text{cal}}(i))^2 \quad (3.9)$$

$x_{jL}^{\text{exp}}(i)$ est la fraction molaire expérimentale, $x_{jL}^{\text{cal}}(i)$ est la fraction molaire calculée et n est le nombre de lignes d'attachement expérimentales.

Les valeurs des paramètres réduisant les fonctions objectives ont été calculées, en utilisant le modèle de UNIQUAC et le modèle de NRTL. En appliquant la méthode de Varhegyi et d'Eon [62], la valeur d' U_{11} a été

trouvée, et les valeurs des cinq paramètres du modèle UNIQUAC: U22, U33, U12, U13, U23 (J.mol.-1) ont été calculés.

Les valeurs des cinq paramètres (g) du modèle NRTL pour le système ternaire liquide - liquide ont été calculées en employant des programmes informatiques professionnels Mathcad 7 (1997) et STATISTICA (1995) selon le procédé proposé par Sorenson [63].

Les paramètres calculés figures dans les tableaux 18 et 19.

Ainsi la déviation de la racine de la moyenne carrée (RMSD) qui est définie comme suit:

$$\text{RMSD} = 100 \left(\sum_{i=1}^n \min \sum_{j=1}^3 \sum_{L=1}^2 \left(\frac{(x_{jL}^{\text{exp}}(i) - x_{jL}^{\text{cal}}(i))^2}{6n} \right)^{1/2} \right) \quad (3.10)$$

(RMSD) est la mesure de coordination entre les valeurs expérimentales et les valeurs calculées.

Les données de lignes d'attachement obtenues par UNIQUAC et NRTL figurent dans les tableaux 18 et 19 et présentées sur les Figure 20-25.

Les calculs basés sur le modèle UNIQUAC et le modèle NRTL ont donné une bonne représentation des données des lignes d'attachement pour les systèmes étudiés dans notre cas. Cependant, le modèle NRTL adapté aux données expérimentales, est plus précis que le modèle UNIQUAC, comme le montre les valeurs de RMSD.

Les Figure 21-26 et les tableaux 18 et 19 représentent la comparaison des données expérimentales des lignes d'attachement avec les valeurs calculées en utilisant les modèles UNIQUAC et NRTL pour (sulfolane + n-octane + toluène) à 293.15 K.

Tableau 18: Paramètres U_{ij} d'UNIQUAC et valeurs de RMSD pour les systèmes solvants + n-octane + toluène à 293.15 K.

Solvent	U11	U22	U33	U12	U13	U23	RMSD
S	1110	1294	1912	6584	6652	2648	0.445
SW	1212	3509	1280	2547	1819	5020	1.876
SM	1035	3491	1620	2508	2162	4694	0.214
SE	1020	3819	2139	3003	2702	5061	0.062
SP	2490	3608	2226	2681	3077	4714	0.178
SB	2743	4392	2239	2916	2618	5362	1.771

Tableau 19: Paramètres g_{ij} de NRTL et valeurs de RMSD pour les systèmes solvants + n-octane + toluène a 293.15 K

Solvent	g11	g22	g33	g12	g13	g23	α_{12}	α_{13}	α_{23}	RMSD
S	3579	1051	5683	7574	7624	13872	0.460	0.447	0.429	0.049
SW	1724	2567	2566	7878	7339	18661	0.460	0.441	0.403	0.321
SM	1014	1521	1231	6863	8561	13394	0.460	0.445	0.406	0.063
SE	8203	3542	1267	5947	7405	12647	0.389	0.429	0.395	0.042
SP	2560	3407	2513	5808	8689	11953	0.344	0.461	0.312	0.048
SB	1036	1085	4291	9567	5934	15926	0.460	0.459	0.442	0.192

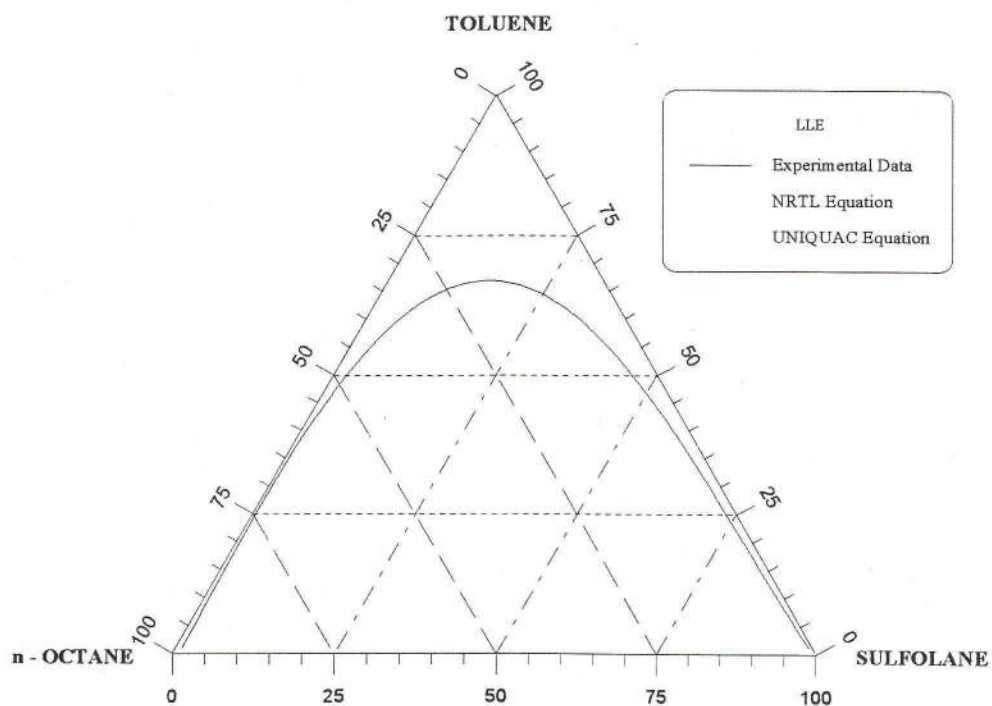


Figure 20 : Comparaison des données des lignes d'attachement avec les valeurs calculées en utilisant les modèles UNIQUAC et NRTL pour sulfolane + n-octane + toluène a 293.15 K.

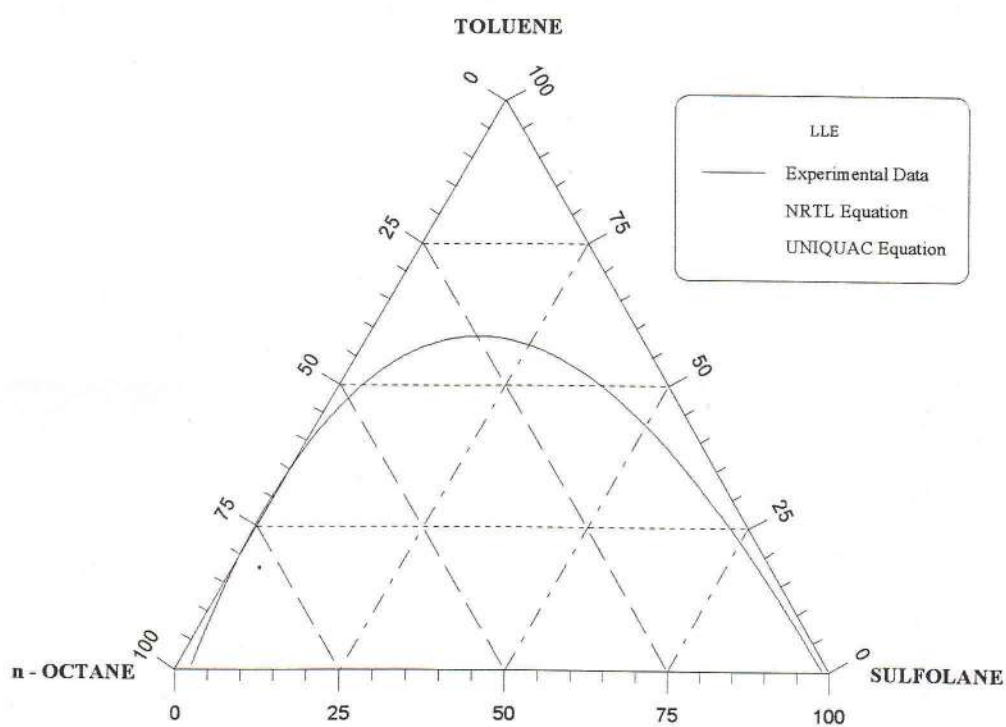


Figure 21 : Comparaison des données expérimentales des lignes d'attachement avec les valeurs calculées en utilisant les modèles UNIQUAC et NRTL pour (sulfolane + eau) + n-octane + toluène a 293.15 K

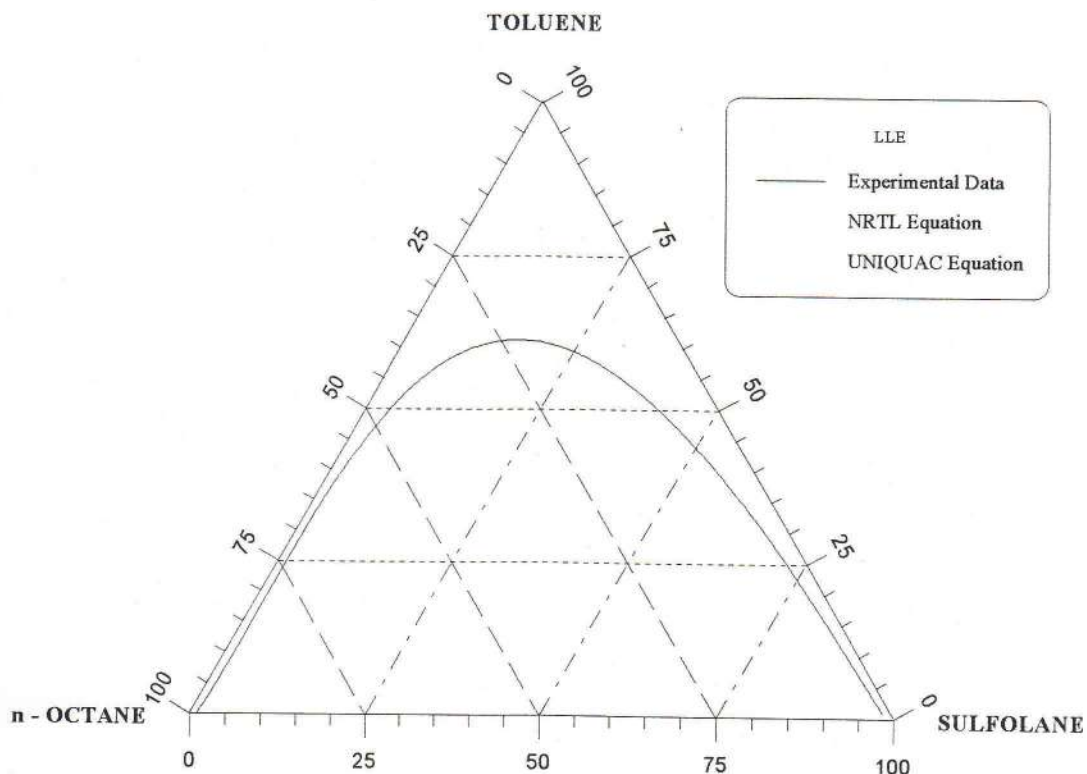


Figure 22: Comparaison des données expérimentales des lignes d'attachement avec les valeurs calculées en utilisant les modèles UNIQUAC et NRTL pour (sulfolane + méthanol) + n-octane + toluène a 293.15 K

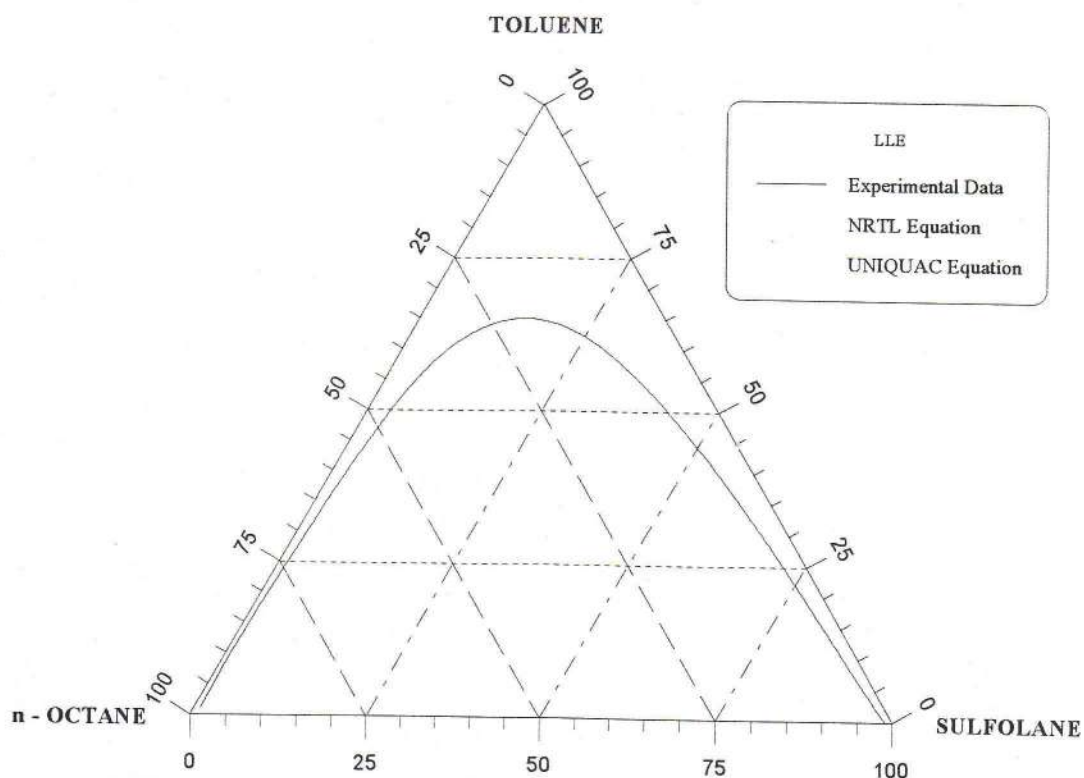


Figure 23: Comparaison des données expérimentales des lignes d'attachement avec les valeurs calculées en utilisant les modèles UNIQUAC et NRTL pour (sulfolane + éthanol) + n-octane + toluène a 293.15 K

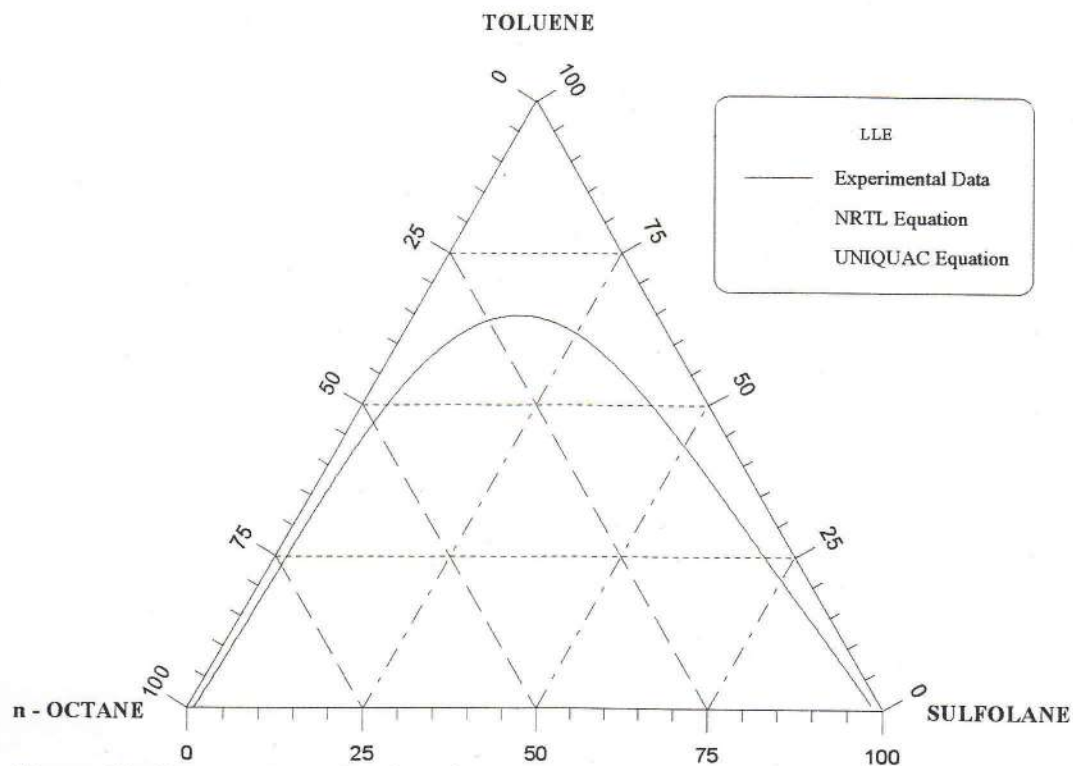


Figure 24: Comparaison des données expérimentales des lignes d'attachement avec les valeurs calculées en utilisant les modèles UNIQUAC et NRTL pour sulfolane + n-propanol + n-octane + toluène a 293.15 K

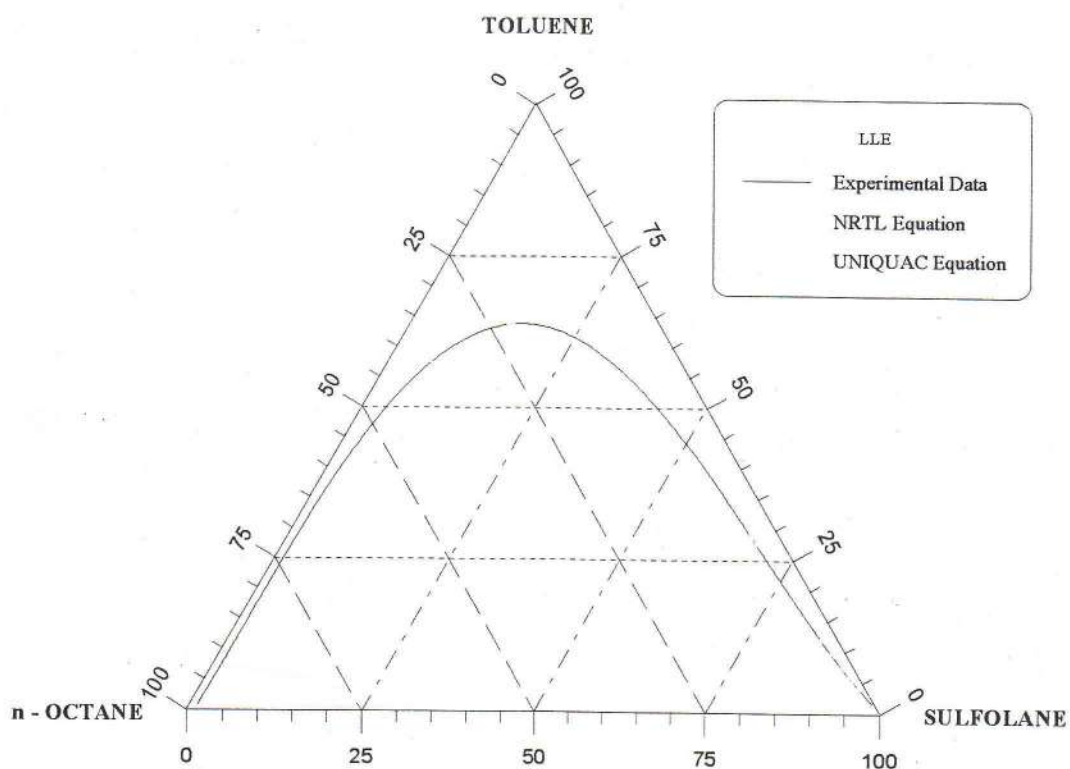


Figure 25: Comparaison des données expérimentales des lignes d'attachement avec les valeurs calculées en utilisant les modèles UNIQUAC et NRTL pour (sulfolane + butanol) + n-octane + toluène a 293.15 K

Tableau 20: Les lignes d'attachement calculées en employant le modèle NRTL pour les systèmes solvants + n-octane + toluène à 293.15 K.

Solvant	Sulfolane - rich layer			n-octane - rich layer		
	x_s	x_o	x_T	x_s	x_o	x_T
S	0.510	0.074	0.416	0.112	0.259	0.629
	0.557	0.038	0.405	0.085	0.311	0.605
	0.594	0.029	0.377	0.081	0.336	0.583
	0.695	0.020	0.285	0.088	0.405	0.507
	0.809	0.016	0.176	0.053	0.509	0.437
	0.894	0.012	0.094	0.003	0.639	0.357
	0.940	0.009	0.051	0.012	0.741	0.246
SW	0.593	0.020	0.387	0.185	0.238	0.577
	0.634	0.017	0.349	0.170	0.279	0.551
	0.659	0.015	0.326	0.155	0.302	0.543
	0.751	0.013	0.237	0.099	0.432	0.469
	0.851	0.009	0.140	0.016	0.639	0.345
	0.863	0.008	0.129	0.032	0.652	0.316
	0.914	0.003	0.083	0.009	0.719	0.271
SM	0.556	0.036	0.408	0.114	0.253	0.633
	0.618	0.030	0.352	0.095	0.315	0.590
	0.688	0.026	0.286	0.066	0.416	0.518
	0.728	0.023	0.249	0.056	0.464	0.481
	0.767	0.021	0.213	0.051	0.511	0.442
	0.830	0.017	0.153	0.015	0.630	0.355
	0.901	0.014	0.085	0.053	0.751	0.197
SE	0.515	0.041	0.444	0.076	0.236	0.688
	0.553	0.038	0.409	0.075	0.257	0.669
	0.601	0.034	0.366	0.067	0.305	0.628
	0.664	0.032	0.304	0.062	0.380	0.559
	0.735	0.029	0.237	0.044	0.496	0.459
	0.807	0.024	0.169	0.010	0.661	0.329
	0.867	0.018	0.115	0.014	0.745	0.241
SP	0.509	0.058	0.433	0.065	0.274	0.661
	0.560	0.050	0.391	0.062	0.310	0.628
	0.657	0.041	0.303	0.059	0.395	0.546
	0.762	0.031	0.207	0.055	0.492	0.453
	0.859	0.024	0.117	0.009	0.654	0.336
	0.940	0.016	0.045	0.031	0.685	0.284
	0.955	0.014	0.031	0.016	0.828	0.156
SB	0.450	0.052	0.498	0.148	0.280	0.573
	0.501	0.043	0.455	0.130	0.319	0.551
	0.625	0.046	0.329	0.163	0.375	0.463
	0.737	0.021	0.242	0.096	0.493	0.411
	0.844	0.016	0.140	0.052	0.604	0.344
	0.931	0.010	0.059	0.024	0.766	0.210
	0.949	0.007	0.044	0.030	0.841	0.130

Tableau 21: Les lignes d'attachement calculées en employant le modèle UNIQUAQ pour les systèmes solvants + n-octane + toluène à 293.15 K.

Solvent	Sulfolane - rich layer			n-octane - rich layer		
	X _S	X _O	X _T	X _S	X _O	X _T
S	0.559	0.049	0.392	0.028	0.373	0.599
	0.604	0.040	0.356	0.018	0.294	0.687
	0.643	0.034	0.322	0.036	0.283	0.682
	0.744	0.024	0.232	0.039	0.336	0.625
	0.836	0.016	0.149	0.014	0.498	0.488
	0.893	0.011	0.096	0.031	0.653	0.316
	0.926	0.009	0.066	0.034	0.766	0.199
SW	0.726	0.014	0.260	0.089	0.291	0.619
	0.756	0.013	0.231	0.091	0.320	0.589
	0.770	0.012	0.219	0.088	0.335	0.578
	0.822	0.009	0.169	0.095	0.459	0.447
	0.871	0.007	0.122	0.118	0.610	0.272
	0.876	0.006	0.117	0.105	0.628	0.267
	0.905	0.005	0.089	0.323	0.417	0.260
SM	0.579	0.035	0.386	0.066	0.265	0.669
	0.641	0.029	0.330	0.045	0.325	0.630
	0.704	0.025	0.271	0.023	0.431	0.546
	0.742	0.022	0.236	0.005	0.488	0.507
	0.777	0.020	0.203	0.023	0.516	0.461
	0.832	0.018	0.150	0.045	0.593	0.362
	0.897	0.015	0.088	0.003	0.773	0.224
SE	0.533	0.041	0.426	0.047	0.237	0.716
	0.575	0.038	0.388	0.036	0.259	0.705
	0.621	0.034	0.345	0.026	0.308	0.667
	0.673	0.032	0.295	0.043	0.380	0.577
	0.738	0.028	0.234	0.037	0.499	0.464
	0.809	0.023	0.168	0.020	0.660	0.320
	0.896	0.018	0.113	0.002	0.755	0.243
SP	0.496	0.061	0.443	0.093	0.262	0.645
	0.563	0.050	0.387	0.058	0.309	0.633
	0.685	0.036	0.279	0.018	0.429	0.554
	0.799	0.028	0.174	0.040	0.501	0.460
	0.883	0.023	0.095	0.060	0.598	0.342
	0.933	0.015	0.052	0.003	0.754	0.243
	0.954	0.016	0.030	0.076	0.758	0.166
SB	0.497	0.052	0.451	0.088	0.280	0.632
	0.551	0.044	0.405	0.063	0.318	0.619
	0.686	0.032	0.282	0.039	0.499	0.462
	0.787	0.020	0.193	0.016	0.501	0.485
	0.863	0.014	0.122	0.033	0.618	0.348
	0.926	0.009	0.065	0.051	0.770	0.178
	0.948	0.008	0.044	0.118	0.740	0.143

CONCLUSION

Les données bibliographiques indiquent qu'aucune donnée d'équilibre liquide-liquide est disponible pour l'usage du sulfolane + soluté (eau, méthanol, éthanol, n-propanol, n-butanol) pour l'extraction du toluène à partir des solutions d'n-octane + toluène.

L'uniformité des données expérimentales des lignes d'attachement pour les systèmes ternaires solvants + n-octane + toluène a été confirmé pour six solvants en utilisant les corrélations de Bachman, de Hand et d'Othmer-Tobias. Le bon ajustement confirme la fiabilité des données.

Le calcul basé sur le modèle d'UNIQUAC et sur celui du modèle de NRTL a donné une bonne représentation des données des lignes d'attachement pour les systèmes :solvants + n-octane +toluène. Cependant, les valeurs calculées basées sur le modèle NRTL s'avèrent meilleures que celles basées sur le modèle UNIQUAC.

La méthode à prévoir pour l'équilibre liquide - liquide des systèmes ternaires en calculant les valeurs du paramètre tirées à partir d'une seule donnée des lignes d'attachement est plus simple et plus précise que calculant le paramètre à partir des données d'équilibre binaire liquide – liquide et données mutuelles de solubilité.

Parmi les six solvants employés pour extraire le toluène à partir de la solution (n-octane + toluène), Il est apparu que (sulfolane + eau) a la plus grande sélectivité et capacité. Donc c'est un excellent dissolvant pour l'extraction du toluène à partir des solutions (n-octane + toluène).

Pour avoir une meilleure approche sur l'efficacité de l'extraction des composés aromatiques, nous pensons qu'il est opportun de réaliser ce qui suit :

- Etudier l'effet de la température sur la capacité et la sélectivité du sulfolane + solvants.
- Etudier l'effet de la concentration du dissolvant sur la solvabilité et la sélectivité du sulfolane + dissolvant.
- Utiliser des modèles mathématiques, tel le modèle d'UNIFAC pour estimer les paramètres d'interaction entre le groupe dissolvant (sulfolane) et les groupes principaux de CH_2 (CH_2 parafanque), ACH (CH aromatique), ACCH_2 (CCH_2 aromatique) en fonction de la température.
- Etudier l'effet d'extraction du toluène avec d'autres hydrocarbures saturés ou l'emploi du benzène ou xylène en tant qu'extractants aromatiques

BIBLIOGRAPHIE

1. E. Mueller and G. Hoehfed, 7th World petroleum Congress, 1971, 4, 213-219.
2. R.F. Chapman, Separation process in Practice, Richard Publisher, New York, 1961
3. K.A. Vartenessian and M.R. Fenske, Industrial and engineering chemistry, 1936, 28, 1353.
4. D.R. Broughton, 7th World petroleum Congress, Proceeding, 1967, 4, 15-20.
5. Y. Marcus, The properties of solvante, Wiley, New York, 1998.
6. A. Ededeaneue, British Patent, 1980, 11, 140.
7. H.G. Drickamer, G.G. Brown and B.R. White, Trans, A.I. Ch. E., 1945, 41, 555-605.
8. H.W. Gort, The Undex Process, J. Chem. Eng. Process, 1958, 54181, 43-48.
9. G.S. Somekh, J. Heterocyclic Proc. Pet. Ref., 1963, 42, 8-17.
10. G.J. Cousserans, J. Heterocyclic Proc. Pet. Ref., 1964, 43, 149-152.
11. B. Choffe, C. Raimbault and F.B. Naxarre, J. Heterocyclic Proc. Pet. Ref., 1969, 45, 188-192.
12. M. H. Stein, Proc. Pet. Ref., 1973, 52(4), 139-141.
13. K.A. Jabara, M. Sc. Thesis, University of Bagdad, College of Engineering, 1987.
14. A. Simcovicove, J. Chem. Eng. Data, 1970, 72, 488.
15. E. Mueller and G. Hochfeld, 8th World petroleum Congress, 1971, 4, 213-219.
16. P.Q. Ferreira, D. Barbosa and A.G. Medina, Fluid Phase Equilibria, 1984, 18, 185-195.
17. J.L. Gustin and H.J. Renon, J. Chem. Eng. Data, 1973, 18, 164-166.
18. J.F. Fabries, J.L. Gustin and H.J. Renon, J. Chem. Eng. Data, 1977, 22, 303-308.
19. P.Q. Ferriera, D. Barbosa and A.G. Medina, Fluid Phase Equilibria, 1971, 16, 369-379.
20. W.M. Melzar, F. Schrodter and H. Knapp, Fluid Phase Equilibria, 1989, 49, 167-186.
21. V.H. Bittrich and R. Eckert, Separation procces in Practice, Reinhold Publisher, New York, 1961.
22. V.H. Bittrich and R. Eckert, Physikalische Chimie, Neue Folge, Bd., 1992, 175, 217-234.
23. M.A. Al-Quttan, T.A. Al-Sahhaf and M.A. Fahim, J. Chem. Eng. Data, 1994, 39, 111-113.
24. M.A. Al-Quttan, T.A. Al-Sahhaf and M.A. Fahim, J. Chem. Eng. Data, 1994, 40, 80-90.
25. M.C. Grand and C.M. Marschoff, J. Chem. Eng. Data, 1998, 43, 1030-1033.
26. J. M. Smith and H.C. Ness, Introduction to Chemical Enginneering Thermodynamics, 4th Ed., Mac Graw Hill, london, 1988.
27. M.J. Assael, J.P.M. Trusler and T.F. Tsoalkis, Thermophysical Properties of Fluid, An Introduction to their Predication, Imperial College Press, London, 1998.
28. H. Renon, J.M. Prausnitz, A. I. Ch. E. J., 1968, 14, 135-144.
29. D.S. Abrams and J.M. Prausnitz, A. I. Ch. E. J., 1975, 14, 135-144.
30. H. Renon, Fluid Phase Equilibria, 1985, 24, 87-114.
31. G.M. Wilson, J.Am. Ch. Soc., 1964, 86, T27.
32. J. Martinmaa, Sulfolane, The Chemistry of Non-Aqueus Solvante, Vol. 4, Page 247, Editor, J.J. Lajowsky, Academic Press, New york.

33. L. Alders, Liquid-liquid Extraction, 2nd Ed., Elsevier, Amsterdam, 1959.
34. R.L. Benoit and J. Charbonneau, Can. J. Chem. Eng. Data, 1969, 47, 4195.
35. R.P. Tripathi, R.A. Raja and P.B. Rao, J. Chem. Eng. Data, 1975, 20, 261.
36. R.M. DeFreand L.A. Verhoeve, J. Appl. Che. Biotechnol., 1976, 26, 487.
37. B.S. Rawat and I.B. Gulati, J. Appl. Che. Biotechnol., 1976, 26, 425.
38. M. Karvo and A. Nissem, Finn. Chem. Lett, 1979, 17, 65.
39. S. Lee and H. Kim, J. Chem. Eng. Data, 1995, 40, 499.
40. S. Lee and H. Kim, J. Chem. Eng. Data, 1998, 43, 358.
41. T.M. Letchen, G.G. Redhi and S.E. Radloff, J. Chem. Eng. Data, 1996, 41, 634.
42. J. Chen, Z. Li and L. Duan, J. Chem. Eng. Data, 2000, 45, 689.
43. T.S. Hover, J. HC. Proc., 1969, 12, 131-133.
44. W.T. Jones and V. Payne, J. HC. Proc., 1973, 16, 91-94.
45. J. Timmermans, Physicochemical constants of pure organic compounds, Elsevier, Amsterdam, 1965, Vol.II.
46. J.A. Riddick and W.B. Bunger and T.K. Sakano, Organic solvents, Wiley, New York, 1986, 4th Edition.
47. A.H. AL-Dujaili, A.M. Awwad and I.Y. Al-Bdri J.Chem.Eng. Data, 2000, 45, 656.
48. P.O. Haddad and W.C. Edmister, J. Chem. Eng. Data, 1972, 17, 275.
49. ASTM Designation 05-02, D2500, 1981.
50. D.F. Othmer, R.E. White and E. Trueger, Ind. . Eng. Chem., 1941, 33, 1240.
51. M. Alonso and F. Rrcasens, J. Chem. Eng. Data, 1986, 31, 146.
52. A. Radecki, B. Kaczmark and J. Grzybowski, J. Chem. Eng. Data, 1973, 20, 163.
53. A.W. Francis [liquid-liquid equilibrium], Interscience publisher, New York, 1987.
54. I. Bachman, Ind Eng. Chem. Anal. Ed., 1940, 12, 38.
55. D.B. Hand, J. Phys. Chem., 1930, 34, 1961.
56. D.E. Othmer and P.E. Tobias, Ind. Chem., 1942, 34, 693-700.
57. International Critical Tables, 3, McGraw Hill, New York, 1928, 398.
58. R.E. Treybal, Liquid Extraction, 2nd edition, Mc Graw Hill, New York, 1963.
59. B. Choffe, C. Raimbault and F.P. Navarre, Hydrocarbon Processing, 1966, 45, 188.
60. A.M. Awwad, M.A. Salman and F.A. Hassan, J.Chem .Eng. Data, 1988, 33, 263.
61. T.F. Anderson and J.M. Prausnitz, Ind. Eng. Chem. Process. Des.Dev ., 1978, 17, 552-556.
62. G. Varhegyi and C.H. Eon, Ind. Eng. Chem. Funmdam., 1977, 16, 182.
63. R. Hook. and T. Jeeves, J. Assoc. Comput. Mach., 1961, 18, 218-229.