

## Base de données CarAtex. Recueil des données bibliographiques sur l'inflammabilité des gaz, liquides et solides vaporisables

### ■ La base de données CarAtex

L'évaluation du risque d'inflammabilité lié aux produits ou aux process est un élément essentiel dans la démarche de la maîtrise globale des risques.

Pour effectuer celle-ci, les industriels ont besoin de connaître les caractéristiques physico-chimiques permettant d'évaluer l'inflammabilité des produits qu'ils manipulent, utilisent, transforment, stockent, etc...

La base de données CarAtex a été compilée pour les aider dans cette démarche. Elle se présente sous la forme d'un fichier de 1082 substances chimiques usuelles pour lesquelles ont été relevés les paramètres tels que : le point d'éclair, la température d'auto-ignition et les limites -inférieure et supérieure- d'inflammabilité. Il a paru utile d'y adjoindre la température d'ébullition, la pression de vapeur à 20°C, l'indice d'évaporation et la densité des vapeurs par rapport à l'air.

On a également indiqué les caractéristiques présentant un risque élevé d'inflammation ou d'explosion telles que l'incompatibilité avec l'eau ou les agents halogénés, la formation de peroxydes, la sensibilité aux chocs, etc. Ces données ne sont en aucune manière exhaustives ; les données, spécifiques à chaque substance, ont uniquement été relevées après recherche bibliographique.

En effet, les valeurs mentionnées ont été collectées à partir de [différentes sources d'information](#). Celles-ci sont détaillées donnant au lecteur la possibilité de vérifier ou de compléter (notamment par des données toxicologiques) les informations présentes. **Lorsque des divergences ont été constatées, la valeur correspondant au risque maximum, c'est à dire à l'estimation la plus prudente, a été retenue.**

Par ailleurs, ces données ne s'appliquent qu'à des substances pures. Les caractéristiques physiques des qualités commerciales peuvent être sensiblement différentes, selon la nature et les quantités des impuretés



## Base de données CARATEX

présentes.

Il ne sera pas traité ici des notions liées au risque d'inflammation des poussières des solides combustibles. Ce risque devra obligatoirement être pris en compte (cf. réglementation sur les atmosphères explosibles) pour une démarche globale de prévention du risque incendie/explosion.

Pour ce faire, l'INRS a mis en place une coopération avec le [Deutsche Gesetzliche Unfallversicherung \(DGUV\)](#) qui produit et diffuse (en allemand et en anglais) une base de données sur les poussières explosibles. L'INRS a traduit cette base de données en français. Elle sera disponible à l'automne 2009.

**L'INRS dégage toute responsabilité quant aux conséquences que pourrait avoir l'utilisation de ces valeurs. En effet, aucune analyse expérimentale vérifiant les données recueillies n'a été menée. Seule la crédibilité des sources ainsi que leur multiplicité permettent d'en faire un recueil fiable.**

*Pour toute demande d'information complémentaire, ou pour faire modifier le descriptif d'une substance contactez les auteurs : [caratex@inrs.fr](mailto:caratex@inrs.fr)*

### ■ Détail et définitions des données recueillies

**Sauf mention contraire, les valeurs sont données dans les conditions normales de température et de pression.**

#### □ Nom de la substance

De manière générale, chaque substance comporte différents noms. Les règles de la nomenclature IUPAC ont été prises comme référence pour déterminer le nom de la substance sur laquelle sont rattachées les valeurs. Les éventuels synonymes renvoient à cette référence. Dans un souci de clarté, certains noms de substance, pris comme référence, ne répondent pas scrupuleusement à toutes les règles IUPAC. Il est joint pour chaque substance son numéro CAS (Chemical Abstracts Service)

#### □ Formule chimique

Les formules développées permettent de mettre en évidence les fonctions principales.

#### □ Point d'éclair

Le point d'éclair d'un liquide est la température minimale à laquelle il faut le porter pour que les vapeurs émises s'enflamment en présence d'une flamme.

## Base de données CARATEX

Cette définition est également applicable à certains solides qui émettent des vapeurs ou se volatilisent à la température ambiante. Cette notion ne s'applique pas aux gaz.

Le point d'éclair peut être déterminé, soit en coupelle fermée, soit en coupelle ouverte. Pour chacune de ces méthodes, il existe des écarts significatifs relatifs à l'appareillage.

Les valeurs indiquées dans la base de données correspondent aux résultats obtenus en coupelle fermée, sauf mention contraire.

### □ Température d'auto-inflammation (ou d'auto-ignition)

La température d'auto-ignition (ou d'auto-inflammation) d'une substance est la température minimum nécessaire pour l'enflammer et entretenir la combustion en l'absence de toute flamme.

### □ Limite d'inflammabilité ou d'explosivité

De nombreuses substances à l'état gazeux ou sous forme de vapeurs forment des mélanges inflammables avec l'air ou l'oxygène. La combustion ne peut s'entretenir que si le combustible et le comburant (principalement l'oxygène de l'air) se trouvent dans des quantités suffisantes. La composition du mélange susceptible de s'enflammer doit donc se situer à l'intérieur d'un intervalle limité par une concentration minimale (LII ou LIE) et une concentration maximale (LSI OU LSE) en combustible.

Les limites d'inflammabilité sont ici en fractions volumiques, à la température de 25°C et sous la pression atmosphérique normale. La modification de ces variables d'états influe sur les limites de l'intervalle.

#### ■ la température :

une élévation de la température élargit le domaine d'inflammabilité : la limite inférieure diminue et la limite supérieure augmente.

#### ■ la pression :

de manière générale, pour des pressions inférieures à la pression atmosphérique l'intervalle d'inflammabilité diminue par élévation de la LII et abaissement de la LSI. En dessous d'une certaine pression le mélange n'est plus inflammable

### □ Température d'ébullition

Température à laquelle une substance liquide passe à l'état de vapeur sous la pression atmosphérique normale.

### □ Pression de vapeur à 20°C

## Base de données CARATEX

Exprimée en kPa (kilo-pascal), elle permet de déterminer la quantité de substance sous forme de vapeur à 20°C présente au-dessus du liquide ou du solide.

□ Densité des vapeurs par rapport à l'air

Cette notion indique combien de fois le mélange vapeur-air est plus lourd que l'air.

□ Indice d'évaporation

La norme **NF T 30-301** donne la définition de l'indice de volatilité (ou d'évaporation) d'un solvant de la manière suivante :

L'indice de volatilité ( $V_e$ ) est le quotient de la durée d'évaporation de l'**acétate de n-butyle** pris comme solvant de référence, par la durée d'évaporation du solvant étudié, ces durées étant mesurées dans les conditions décrites dans cette même norme.

Une autre définition souvent utilisée pour cet indice de volatilité, génère une ambiguïté.

En effet, selon la norme **DIN 53170**, l'indice de volatilité d'un constituant par rapport à l'**oxyde de diéthyle** est égal au quotient de la durée d'évaporation du solvant étudié par la durée d'évaporation de l'éther pris comme référence (les conditions opératoires étant identiques pour les deux normes).

$$\text{NF T 30-301} \quad V_e \text{ par rapport à l'acétate de butyle} = \frac{\text{Durée d'évaporation de l'acétate de n - butyle}}{\text{Durée d'évaporation du solvant étudié}}$$

$$\text{DIN 53170} \quad V_e \text{ par rapport à l'oxyde de diéthyle} = \frac{\text{Durée d'évaporation du solvant étudié}}{\text{Durée d'évaporation de l'oxyde de diéthyle}}$$

Il peut être intéressant de comparer la volatilité de deux produits n'ayant pas le même solvant de référence.

En multipliant les deux expressions ci-dessus, on obtient :

$$\frac{\text{Durée d'évaporation du solvant S1}}{\text{Durée d'évaporation du solvant S2}} = \frac{\text{Durée d'évaporation de l'acétate de n - butyle}}{\text{Durée d'évaporation de l'oxyde de diéthyle}} \cdot \frac{1}{V_{\text{acbu}}(S1) * V_{\text{ether}}(S2)}$$

avec,

$$\frac{\text{Durée d'évaporation de l'acétate de n - butyle}}{\text{Durée d'évaporation de l'oxyde de diéthyle}} = 12$$

$V_{\text{acbu}}(S1)$  = indice de volatilité du solvant S1 par rapport à l'acétate de *n*-

## Base de données CARATEX

butyle

Véther(S2) = indice de volatilité du solvant S2 par rapport à l'oxyde de diéthyle

Le résultat obtenu (supérieur ou inférieur à 1) permet de conclure quant à la volatilité du solvant 1 par rapport au solvant 2.

### ■ Limites d'inflammabilité de mélanges de gaz ou vapeurs inflammables

Les mélanges gazeux auxquels on a souvent affaire comportent plusieurs éléments chimiques combustibles. La relation de Le Châtelier exprime par la formule suivante que la limite inférieure (ou supérieure) d'inflammabilité est atteinte si l'on a, par exemple, dans le cas d'un mélange de trois gaz ou vapeurs inflammables :

$$\frac{n_1}{N_1} + \frac{n_2}{N_2} + \frac{n_3}{N_3} = 1$$

N1, N2, N3 sont les limites inférieures (ou supérieures) d'inflammabilité dans l'air de **chacun des gaz pris isolément**; n1, n2, n3 sont les pourcentages de chacun des gaz dans **le mélange gaz + air** à étudier.

Cette formule exprime :

- que si l'on ajoute à un mélange gazeux, à limite inférieure (ou supérieure), un autre mélange lui aussi à limite inférieure (ou supérieure), le résultat final sera également un mélange à limite inférieure (ou supérieure) d'inflammabilité ;
- que, par exemple, un mélange d'air, d'oxyde de carbone et d'hydrogène qui contient 1/4 de la quantité nécessaire d'oxyde de carbone et 3/4 de la quantité d'hydrogène, pour former un mélange à la limite inférieure, sera lui-même un mélange à la limite inférieure.

On utilise souvent la loi de Le Châtelier sous la forme suivante :

$$L = \frac{100}{\frac{P_1}{N_1} + \frac{P_2}{N_2} + \frac{P_3}{N_3}}$$

## Base de données CARATEX

L est la limite inférieure (ou supérieure) du mélange final en %; P1, P2, P3 sont les proportions en % de chacun des gaz combustibles présents dans le mélange de ceux-ci de telle sorte que **P1 + P2 + P3 = 100**.

N1, N2, N3 sont toujours les limites inférieures (ou supérieures) de chacun des constituants pris séparément.

Par exemple, la limite inférieure d'inflammabilité d'un gaz naturel dont la composition est la suivante :

■ Méthane	80 %	LIE	5,3 %
■ Éthane	15 %	LIE	3,22 %
■ Propane	4 %	LIE	2,37 %
■ Butane	1 %	LIE	1,86 %

sera :

$$L = \frac{100}{\frac{80}{5,3} + \frac{15}{3,22} + \frac{4}{2,37} + \frac{1}{1,86}} = 4,55 \%$$

La loi de Le Châtelier s'applique avec une bonne approximation aux mélanges suivants :

- Hydrogène, oxyde de carbone, méthane qu'ils soient pris par deux ou tous ensemble ;
- Gaz à l'eau (mélange gazeux obtenu par réaction de la vapeur d'eau sur du coke chauffé), gaz d'éclairage (mélange gazeux produit par distillation de la houille) ;
- Mélanges d'hydrocarbures paraffiniques simples (de la forme  $C_nH_{2n+2}$ ), y compris les gaz naturels; toutefois les différences entre les valeurs calculées et les valeurs observées sont parfois importantes.

Les plus grandes différences sont observées lorsque l'un des constituants est une vapeur telle que l'oxyde de diéthyle, l'acétone, le disulfure de carbone.

### ■ Les sources d'informations

Ces différentes sources ont été à l'origine de la compilation des données présentes dans CarAtex.

- Norme CEI/IEC 79-20 : 1996

Matériel électrique pour atmosphères explosives gazeuses – Partie 20 :



## Base de données CARATEX

Données pour gaz et vapeurs inflammables, en relation avec l'utilisation des matériels électriques.

### ■ N.F.P.A : (National Fire Protection Association)

▲ Code n° 325 "Fire Hazards Properties of Flammable Liquids; Gases And Volatils Solids", édition de 1996, qui donne les propriétés d'environ 2000 produits classés par ordre alphabétique d'après leur nom chimique anglais.

▲ Code n° 49 "Hazardous Chemicals Data", édition de 1994, qui fournit des compléments d'information sur les risques des composés usuels.

### ■ Fiches IPCS

Fiches internationales de sécurité de "International Programme on Chemical Safety" (OMS) [www.cdc.gov/niosh/ipcs/french.html](http://www.cdc.gov/niosh/ipcs/french.html)

### ■ Répertoire toxicologique du CSST

Banque de données du Service du répertoire toxicologique, dépendant de la Commission de la Santé et de la Sécurité au travail (CSST / Québec), sur les produits chimiques ou biologiques.

[www.reptox.csst.qc.ca/](http://www.reptox.csst.qc.ca/)

### ■ Toxnet

Ce site permet notamment d'accéder librement à différentes bases dont : HSDB (Hazardous Substances Data Bank)

[toxnet.nlm.nih.gov](http://toxnet.nlm.nih.gov)

### ■ NIOSH Pocket Guide

Version html de l'édition papier, regroupant des données physiques et toxicologiques du NIOSH (National Institute for Occupational Safety and Health) et de l'OSHA (Occupational Safety and Health Administration), relatives à 700 produits chimiques et groupes de substances.

[www.cdc.gov/niosh/npg/npg.html](http://www.cdc.gov/niosh/npg/npg.html)

### ■ Bureau européen des produits chimiques / European Chemicals Bureau (ECB)

Accès à la base de données ESIS (European Substances Information System) permettant d'obtenir des données brutes (physico-chimiques, toxicologiques, et écotoxicologiques) collectées par l'industrie et réunies dans la base IUCLID (International Uniform Chemical Information Database).

<http://ecb.jrc.it/esis/>

### ■ Seton Compliance Resource Center



## Base de données CARATEX

Méta-moteur permettant d'accéder aux fiches de données de sécurité des fournisseurs de produits chimiques.

[www.setonresourcecenter.com/MSDS/index.htm](http://www.setonresourcecenter.com/MSDS/index.htm)

■ ChemExper

Site belge regroupant plus de 100 000 fiches de données de sécurité.

[www.chemexper.com/](http://www.chemexper.com/)

■ Sigma, Aldrich, Fluka, Supelco, RdH-Lab

Fiches de données de sécurité de fournisseur

[www.sigmaaldrich.com/](http://www.sigmaaldrich.com/)

■ Acros Chemicals, Fisher Scientific, Curtin Matheson Scientific

Fiches de données de sécurité de fournisseur

[www.fishersci.com/](http://www.fishersci.com/)

■ Alfa Aesar

Fiches de données de sécurité de fournisseur

[www.alfa.com/](http://www.alfa.com/)

■ Merck KgaA

Fiches de données de sécurité de fournisseur

[http://chemdat.merck.de/cdrl/catalog/standard/en/index\\_body.html](http://chemdat.merck.de/cdrl/catalog/standard/en/index_body.html)

■ CambridgeSoft web site

Site universitaire de Cambridge regroupant les données élémentaires des substances (Nom, synonymes, N° CAS, formule chimique, Tébullition).

<http://chemfinder.cambridgesoft.com/>

■ Université de Akron

Site universitaire de Akron

<http://www.uakron.edu/>

■ Comment rechercher dans la base de données

On peut rechercher de trois manières différentes :

□ Nom chimique

■ la recherche porte sur les noms préférentiels mais aussi sur les synonymes, éventuellement attachés au nom préférentiel : en tout environ 2000 expressions

■ On peut rechercher avec ou sans accents.

**nom complet**



## Base de données CARATEX

On peut saisir un nom complet, que celui-ci soit composé d'un seul terme :  
"benzene" ou d'une expression "butanoate de pentyle"

### **fragment de nom**

Si ce fragment constitue un mot complet on peut le retrouver, par exemple :  
"acide" - "crésol" - "butadiène"

### **mot tronqué**

Si la modalité précédente ne donne aucun résultat, il faut utiliser la  
troncature, représentée par une étoile

"dichloro\*" permet de retrouver tous les noms comportant la racine  
"dichloro" : dichloroéthane, dichlorobenzène, dichlorophénol,...

### □ Numéro CAS

On peut saisir :

- un n°CAS complet : "45-68-3"
- ou un fragment de numéro sous réserve qu'il soit bien séparé des autres fragments  
"68" permet de retrouver "75-68-3" mais pas "689-97-4"

### □ Liste des substances

Un abécédaire permet de sélectionner toutes les substances dont le nom  
commence par la lettre choisie :

- ce peut être le nom préférentiel ou le synonyme,
- les chiffres formant le préfixe du nom chimique ne sont pas pris en compte.