

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

UNIVERSITE ABOU-BEKR BELKAID - TLEMCCEN

MEMOIRE

Présenté à :

FACULTE DES SCIENCES – DEPARTEMENT DE CHIMIE

Pour l'obtention du diplôme de :

MASTER EN CHIMIE

Spécialité : Chimie Physique

Par :

Mr

ABDELLAOUI Kheireddine Nadhir

Sur le thème

**Densité, vitesse du son, indice de réfraction et les propriétés
dérivées/d'excès pour les systèmes binaires : (composés oxygénés +
hydrocarbures) à différentes températures.
Mesures expérimentales et modélisation.**

Soutenu publiquement le 13 juin 2024 à Tlemccen devant le jury composé de :

Mme BABA AHMED Nouria	MCA	Université de Tlemccen	Présidente
Mme OUAAR Faiza	MAB	Université de Tlemccen	Examinatrice
Mme BELABBACI Aouicha	MCA	Université de Tlemccen	Encadrante
Mme AYAD Amal	MCA	Université de Tlemccen	Co-encadrante
Mme NEGADI Latifa	Professeur	Université de Tlemccen	Invitée

Remerciements

Tout d'abord, je souhaite exprimer ma profonde gratitude à Dieu tout puissant, qui m'a accordé le courage nécessaire pour mener à bien ce modeste travail.

Ce mémoire a été réalisé au sein du laboratoire de recherche "Thermodynamique Appliquée et Modélisation Moléculaire LATA2M" du Département de Chimie de la Faculté des Sciences de l'Université Abou-Bekr Belkaid à Tlemcen.

Je tiens à adresser mes plus sincères remerciements à Mme BELABBACI Aouicha, Maître de Conférence A à l'Université de Tlemcen, pour sa disponibilité, sa patience et son précieux soutien. Sans sa méthodologie, ses orientations et ses conseils, ce travail n'aurait pas pu être mené à bien. J'exprime également toute ma reconnaissance à Mme AYAD Amal, Maître de Conférence A à l'Université de Tlemcen, qui a apporté une contribution significative à ce travail. Mes plus sincères remerciements à vous deux.

Je souhaite également exprimer ma gratitude envers Mme BABA AHMED Nouria, Maître de Conférence A à l'Université de Tlemcen, pour avoir accepté de présider ce jury. Mes remerciements vont également à Mme OUAAR Faiza, Maître de Conférence B à l'Université de Tlemcen, pour avoir accepté d'examiner ce travail et de participer au jury.

Dédicaces

Je dédie humblement ce travail :

À mes précieux parents, dont le soutien indéfectible, les encouragements constants et l'aide inestimable ont éclairé tout mon parcours académique. Que le Tout-Puissant vous accorde une santé florissante et une longue vie.

À mes chers frères, compagnons de route et de vie.

À tous les enseignants qui m'ont partagé leur savoir et leur dévouement, m'aidant ainsi à progresser.

À ma collègue, pour son précieux soutien et son engagement à travailler en collaboration.

À mes amis, dont le soutien inconditionnel et les moments de partage ont été des sources de réconfort et d'inspiration.

À toutes les personnes qui me sont chères, pour leur encouragement et leur présence constante dans ma vie.

Sommaire

	Introduction	11
Chapitre 1	Etude bibliographique.	15
	1.1. Définition des hydrocarbures	15
	1.2. Avantages et inconvénients des hydrocarbures.	15
	1.3. Propriétés d'hydrocarbure 1-hexène.	16
	1.4. Composés oxygénés.	16
	1.5. Utilisation des composés oxygénés.	17
	1.6. Additifs oxygénés – Alcools.	18
	1.6.1. Les propriétés des alcools (méthanol, 1-propanol, 1-pentanol) comme additifs dans les hydrocarbures.	19
Chapitre 2	Mesures expérimentales des Propriétés volumétriques, acoustiques et optiques des mélanges binaires étudiés.	22
	2.1. Appareillage et procédure.	22
	2.2. Produits utilisés.	23
	2.3. Résultats et discussion.	26
	2.3.1. Les propriétés thermodynamiques.	26
	2.3.1.1. La densité.	27
	2.3.1.2. Vitesse du son.	28
	2.3.1.3. Indice de réfraction	29
	2.3.2. Les paramètres acoustiques et thermodynamiques.	30
	2.3.2.1. La longueur libre intermoléculaire (L_f).	30
	2.3.2.2. L'association Relative (R_A).	32
	2.3.2.3. Force de relaxation (r).	33
	2.3.2.4. Fonction du son molaire de Rao (R).	34
	2.3.2.5. L'impédance acoustique (Z).	35
	2.3.2.6. Compressibilité isentropique.	36
	2.3.3. Propriétés d'excès/ dérivées et leur corrélation.	37
	2.3.3.1. Propriétés d'excès/ dérivées.	37
	2.3.3.2. Corrélation des propriétés d'excès/ dérivées.	37
	2.3.3.3. Résultats et discussion.	38
	• Volume molaire d'excès (V_m^E).	38
	• Déviation en compression isentropique (Δk_S).	41
	• Déviation en longueur libre intermoléculaire (ΔL_f).	43
	• Déviation de l'impédance acoustique spécifique (ΔZ).	45
• Déviation de la vitesse du son (Δu).	47	
• Déviation en indice de réfraction (Δn_D).	48	
Chapitre 3	Modélisation de la densité à l'aide des modèles PSRK et VTPR	63
	3.1. PSRK (Predictive Soave-Redlich-Kwong).	63
	3.2. VTPR (Volume-Translated Peng-Robinson).	65
	3.3. Résultats de la modélisation de la densité.	66
	3.4. Modélisation à l'aide de l'équation VTPR (fonction α (TWU) avec la règle de mélange (Stryjek-Vera).	67
	3.5. Modélisation à l'aide de l'équation VTPR avec fonction α (Soave Boston-Mathias).	69

3.6. Modélisation à l'aide de l'équation PSRK avec fonction α (Mathias Copeman).	70
Conclusion	72
Bibliographie.	74

Liste des tableaux

Tableau	Titre	N° de page
Tableau 2.1	Tableau récapitulatif des produits utilisés, leur pureté, CAS #, et source.	23
Tableau 2.2	Comparaison par rapport à la littérature des valeurs expérimentales (densité ρ , vitesse du son u et indice de réfraction n_D) des corps purs à différentes températures (293.15, 298.15 et 303.15) K et à la pression $P = 0.1$ MPa.	24
Tableau 2.3	Les valeurs expérimentales de densités ρ , de vitesse du son u , et de l'indice de réfraction pour les trois systèmes binaires 1-hexène (1) + méthanol (2), 1-propanol (2), ou 1-pentanol (2) aux différentes températures (293.15, 298.15, 303.15) K et à la pression $P = 0.1$ MPa.	50
Tableau 2.4	Les paramètres dérivés : la longueur libre intermoléculaire (L_f), l'association relative (R_A), la force de relaxation (r), la fonction du son molaire de Rao (R), et l'impédance acoustique (Z) pour les systèmes binaires (1-hexène (1) + méthanol (2) ou 1-propanol (2) ou 1-pentanol (2)) à (293.15, 298.15, 303.15) K.	53
Tableau 2.5	Le volume molaire d'excès V_m^E , la déviation en indice de réfraction Δn_D et la déviation en compression isentropique ΔK_s pour les systèmes binaires 1-hexène (1) + méthanol (2), 1-propanol (2), ou 1-pentanol (2) aux différentes températures (293.15, 298.15, 303.15) K et à la pression $P = 0.1$ MPa.	56
Tableau 2.6	La déviation de la longueur libre intermoléculaire (ΔL_f), déviation de l'impédance acoustique (ΔZ) et la déviation de vitesse du son (Δu) pour les systèmes binaires (1-hexène (1) + méthanol (2) ou 1-propanol (2) ou 1-pentanol (2)) à (293.15, 298.15, 303.15) K.	58
Tableau 2.7	Valeurs des coefficients A_i , et les déviations standard σ , obtenues par l'équation de Redlich-Kister, pour les systèmes binaires 1-hexène (1) + méthanol (2), 1-propanol (2), ou 1-pentanol (2) aux différentes températures (293.15, 298.15, 303.15) K et à la pression $P = 0.1$ MPa.	60

Tableau 3.1	Les paramètres d'interactions k_{ij0} et k_{ijT} , et les erreurs SSQ des trois systèmes étudiées avec l'équation de VTPR avec la fonction α (TWU) et règle de mélange (Stryjek-vera).	68
Tableau 3.2	Les erreurs SSQ selon l'équation VTPR avec fonction α (Soave Boston-Mathias) pour les trois systèmes binaires.	69
Tableau 3.3	Les erreurs SSQ selon l'équation PSRK avec fonction α (Mathias Copeman) pour les trois systèmes binaires.	71
Tableau 3.4	Comparaison entre les SSQ obtenues à l'aide des deux équations pour les trois systèmes étudiés.	71

Liste des figures

Numéro de figure	Titre	N° de page
Figure 2.1	Appareil de dégazage (BRANSON 3510).	22
Figure 2.2	Un densimètre à tube vibrant en U (DSA 5000 M, Anton Paar).	22
Figure 2.3	Un réfractomètre (modèle Abbemat 300, Anton Paar).	23
Figures 2.4 (a-c)	Variation de la densité (ρ) du système binaire : (a) {1-hexène (1) + méthanol (2)}, (b) {1-hexène (1) + 1-propanol (2)} et (c) {1-hexène (1) + 1-pentanol (2)} en fonction de la fraction molaire en 1-hexène à 293.15K(♦), 298.15 K (▲), 303.15 K (■).	27
Figures 2.5 (a-c)	Variation de la vitesse de son (u) du système binaire : (a) {1-hexène (1) + méthanol (2)}, (b) {1-hexène (1) + 1-propanol (2)} et (c) {1-hexène (1) + 1-pentanol (2)} en fonction de la fraction molaire en 1-hexène à 293.15K(♦), 298.15 K (▲), 303.15 K (■).	28
Figures 2.6 (a-c)	Variation de l'indice de réfraction (n_D) du système binaire : (a) {1-hexène (1) + méthanol (2)}, (b) {1-hexène (1) + 1-propanol (2)} et (c) {1-hexène (1) + 1-pentanol (2)} en fonction de la fraction molaire en 1-hexène à 293.15K(♦), 298.15 K (▲), 303.15 K (■).	29
Figures 2.7 (a-c)	Variation de la longueur libre intermoléculaire (L_f) du système binaire : (a) {1-hexène (1) + méthanol (2)}, (b) {1-hexène (1) + 1-propanol (2)} et (c) {1-hexène (1) + 1-pentanol (2)} en fonction de la fraction molaire en 1-hexène à 293.15K(♦), 298.15 K (▲), 303.15 K (■).	31
Figures 2.8 (a-c)	Variation de l'association Relative (RA) du système binaire : (a) {1-hexène (1) + méthanol (2)}, (b) {1-hexène (1) + 1-propanol (2)} et (c) {1-hexène (1) + 1-pentanol (2)} en fonction de la fraction molaire en 1-hexène à 293.15K(♦), 298.15 K (▲), 303.15 K (■).	32
Figures 2.9 (a-c)	Variation de la force de relaxation (r) du système binaire : (a) {1-hexène (1) + méthanol (2)}, (b) {1-hexène (1) + 1-propanol (2)} et (c) {1-hexène (1) + 1-pentanol (2)} en fonction de la fraction molaire en 1-hexène à 293.15K(♦), 298.15 K (▲), 303.15 K (■).	33
Figures 2.10 (a-c)	Variation de la fonction du son molaire de Rao (R) du système binaire : (a) {1-hexène (1) + méthanol (2)}, (b) {1-hexène (1) + 1-propanol (2)} et (c) {1-hexène (1) + 1-pentanol (2)} en fonction de la fraction molaire en 1-hexène à 293.15K(♦), 298.15 K (▲), 303.15 K (■).	34
Figures 2.11 (a-c)	Variation de l'impédance acoustique spécifique (Z) du système binaire : (a) {1-hexène (1) + méthanol (2)}, (b) {1-hexène (1) + 1-propanol (2)} et (c) {1-hexène (1) + 1-pentanol (2)} en fonction de la fraction molaire en 1-hexène à 293.15K(♦), 298.15 K (▲), 303.15 K (■).	35
Figures 2.12 (a-c)	Variation de la compressibilité isentropique (k_s) du système binaire : (a) {1-hexène (1) + méthanol (2)}, (b) {1-hexène (1) + 1-propanol (2)} et (c) {1-hexène (1) + 1-pentanol (2)} en fonction de la fraction molaire en 1-hexène à 293.15K(♦), 298.15 K (▲), 303.15 K (■).	36
Figures 2.13 (a-c)	Le volume molaire d'excès V_m^E du système binaire : (a) {1-hexène (1) + méthanol (2)}, (b) {1-hexène (1) + 1-propanol (2)} et (c) {1-hexène	39

	(1) + 1-pentanol (2)} en fonction de la fraction molaire en 1-hexène à 293.15K(◆), 298.15 K (▲), 303.15 K (■). (—) Les valeurs calculées en utilisant l'équation de Redlich-Kister.	
Figure 2.14	Comparaison du volume molaire d'excès V_m^E du système binaire : (—) {1-hexène (1) + méthanol (2)}, (—) {1-hexène (1) + 1-propanol (2)} et (—) {1-hexène (1) + 1-pentanol (2)} en fonction de la fraction molaire en 1-hexène à 298.15 K.	41
Figures 2.15 (a-c)	La déviation en compression isentropique ΔK_s du système binaire : (a) {1-hexène (1) + méthanol (2)}, (b) {1-hexène (1) + 1-propanol (2)} et (c) {1-hexène (1) + 1-pentanol (2)} en fonction de la fraction molaire en 1-hexène à 293.15K(◆), 298.15 K (▲), 303.15 K (■). (—) Les valeurs calculées en utilisant l'équation de Redlich-Kister.	42
Figures 2.16 (a-c)	La déviation de la longueur libre intermoléculaire (ΔL_f) du système binaire : (a) {1-hexène (1) + méthanol (2)}, (b) {1-hexène (1) + 1-propanol (2)} et (c) {1-hexène (1) + 1-pentanol (2)} en fonction de la fraction molaire en 1-hexène à 293.15K(◆), 298.15 K (▲), 303.15 K (■). (—) Les valeurs calculées en utilisant l'équation de Redlich-Kister.	44
Figures 2.17 (a-c)	La déviation de l'impédance acoustique (ΔZ) du système binaire : (a) {1-hexène (1) + méthanol (2)}, (b) {1-hexène (1) + 1-propanol (2)} et (c) {1-hexène (1) + 1-pentanol (2)} en fonction de la fraction molaire en 1-hexène à 293.15K(◆), 298.15 K (▲), 303.15 K (■). (—) Les valeurs calculées en utilisant l'équation de Redlich-Kister.	46
Figures 2.18 (a-c)	La déviation de la vitesse du son (Δu) du système binaire : (a) {1-hexène (1) + méthanol (2)}, (b) {1-hexène (1) + 1-propanol (2)} et (c) {1-hexène (1) + 1-pentanol (2)} en fonction de la fraction molaire en 1-hexène à 293.15K(◆), 298.15 K (▲), 303.15 K (■). (—) Les valeurs calculées en utilisant l'équation de Redlich-Kister.	47
Figures 2.19 (a-c)	La déviation en l'indice de réfraction Δn_D du système binaire : (a) {1-hexène (1) + méthanol (2)}, (b) {1-hexène (1) + 1-propanol (2)} et (c) {1-hexène (1) + 1-pentanol (2)} en fonction de la fraction molaire en 1-hexène à 293.15K(◆), 298.15 K (▲), 303.15 K (■). (—) Les valeurs calculées en utilisant l'équation de Redlich-Kister.	49
Figures 3.1 (a-c)	La densité (ρ) des systèmes binaires : (a) {1-hexène (1) + méthanol (2)}, (b) {1-hexène (1) + 1-propanol (2)} et (c) {1-hexène (1) + 1-pentanol (2)} en fonction de la fraction molaire en 1-hexène à 293.15K(◆), 298.15 K (▲), 303.15 K (■). (—) Les valeurs calculées en utilisant l'équation de VTPR avec la fonction α (TWU) et règle de mélange (Stryjek-vera).	68
Figures 3.2 (a-c)	La densité (ρ) du système binaire : (a) {1-hexène (1) + méthanol (2)}, (b) {1-hexène (1) + 1-propanol (2)} et (c) {1-hexène (1) + 1-pentanol (2)} en fonction de la fraction molaire en 1-hexène à 293.15K(◆), 298.15 K (▲), 303.15 K (■). (—) Les valeurs calculées en utilisant l'équation de VTPR réglée à fonction α (Soave Boston-Mathias) et règle de mélange (non définie).	69

Figures 3.3 (a-c)

La densité (ρ) du système binaire : (a) {1-hexène (1) + méthanol (2)}, (b) {1-hexène (1) + 1-propanol (2)} et (c) {1-hexène (1) + 1-pentanol (2)} en fonction de la fraction molaire en 1-hexène à 293.15K (◆), 298.15 K (▲), 303.15 K (■). (—) Les valeurs calculées en utilisant l'équation de PSRK réglée à fonction α (Mathias Copeman) et règle de mélange (PSRK).

70

Introduction

Introduction

Dans un monde où les combustibles fossiles, tels que le charbon, le pétrole et le gaz naturel, dominant comme principales sources d'énergie, la transition vers des alternatives plus durables et respectueuses de l'environnement est devenue impérative. Ces ressources non renouvelables, qui représentent plus de 80% de l'approvisionnement mondial en énergie primaire [1], sont à l'origine de dégradations environnementales et contribuent au changement climatique. La croissance continue de la demande mondiale d'énergie, alimentée par l'expansion démographique et le progrès économique, menace d'épuiser les stocks mondiaux de pétrole et de gaz.

Face à cette réalité, de nombreux pays, comme le Brésil, l'Australie, l'Inde, les États-Unis et l'Union européenne, ont commencé à enrichir leur essence en biocarburants tels que l'éthanol et les bio-éthers, ainsi qu'à ajouter des éthers et des alcools comme additifs oxygénés pour réduire les émissions polluantes. Ces avancées témoignent d'une transition progressive vers des sources d'énergie plus propres et renouvelables [2].

En matière de la préservation de l'environnement, les récentes normes internationales encouragent l'adoption de biocarburants et d'autres sources d'énergie renouvelables pour le transport. Elles recommandent que les gouvernements veillent à ce qu'une part minimale de biocarburants soit disponible sur leurs marchés, en prenant en compte le pourcentage de mélange de ces biocarburants dans les carburants essence et diesel.[3]

Cela a entraîné un important investissement de l'industrie pétrochimique dans la recherche et le développement de nouveaux carburants, en particulier pour les essences. En plus des hydrocarbures, les essences reformulées contiennent divers composés oxygénés tels que les éthers et les alcools. L'ajout de biocarburants et d'autres sources d'énergie renouvelables est également encouragé.[3]

Pour ce faire, une essence de base est définie, à laquelle sont ajoutés les additifs oxygénés, et qui sera composée des hydrocarbures suivants : **Paraffines** : n-pentane et n-heptane. **Isoparaffines** : Isopentane et isooctane. **Cycloparaffines** : cyclohexane. **Oléfines** : 1-hexène. **Aromatiques** : toluène et xylène. Les additifs oxygénés d'origine renouvelable seront : **Alcools** : éthanol, propanol, butanol. **Éthers** : éthyl tert butyl éther (ETBE) et tertamyl ethyl éther (TAEE). [3]

Introduction

La connaissance des propriétés thermo-physiques tels que la densité, la vitesse du son et l'indice de réfraction pour les mélanges binaires (hydrocarbures + composés oxygénés), est importante pour optimiser leur utilisation dans divers domaines tels que la production de carburants et la fabrication de produits chimiques. Ces caractéristiques offrent des informations cruciales sur la composition, la structure et les interactions moléculaires dans ces systèmes binaires, ainsi que sur leurs comportements thermodynamiques et leurs transitions de phase.

Ce travail s'intéresse à deux aspects: l'un expérimental et l'autre théorique. L'objectif expérimental est l'étude des propriétés volumétriques, acoustiques et optiques des mélanges binaires contenant le 1-hexène, considéré comme un hydrocarbure et différents alcools comme des additifs oxygénés. L'objectif théorique est la modélisation thermodynamique des valeurs expérimentales de la densité en utilisant différentes équations d'état. Les trois systèmes examinés dans ce travail sont :

- 1-hexène (1) + méthanol (2).
- 1-hexène (1) + 1-propanol (2).
- 1-hexène (1) + 1-pentanol (2).

La structure de ce manuscrit est divisée en trois chapitres :

Dans une première partie (chapitre 1), nous passons, en revue bibliographique, mettant en lumière les propriétés des hydrocarbures ainsi que leurs diverses applications. Une attention particulière est portée aux systèmes binaires formés par les hydrocarbures et les alcools.

Le second chapitre est réservé à la détermination expérimentale de la densité, vitesses du son et de l'indice de réfraction des corps purs et des trois mélanges binaires contenant 1-hexène avec méthanol, 1-propanol et 1-pentanol à différentes températures sous $P=0,1$ MPa. À partir de ces données expérimentales, des paramètres thermodynamiques et acoustiques sont déterminés, notamment la longueur libre intermoléculaire (L_f), l'association relative (R_A), la force de relaxation (r), la fonction du son molaire de Rao (R), l'impédance acoustique (Z) ainsi que les propriétés d'excès/dérivées volume d'excès (V^E), déviation en longueur libre intermoléculaire (ΔL_f), déviation en impédance acoustique (ΔZ), déviation en vitesse du son (Δu), déviation en

Introduction

compressibilité isentropique ($\Delta\kappa_s$) et déviation en indice de réfraction (Δn_D). La corrélation de ces propriétés d'excès/dérivées a été effectuée à l'aide de l'équation de Redlich-Kister.

Dans le troisième chapitre nous nous rapportons en premier lieu brièvement quelques notions de base sur les équations d'état PSRK (Predictive Soave-Redlich-Kwong) et VTPR (Volume-Translated Peng-Robinson) ; en suite nous passons à la modélisation thermodynamique des valeurs expérimentales de la densité en utilisant les différentes équations d'état thermodynamiques existant dans le programme PROSIM pour les trois systèmes binaires.

Ce mémoire termine par une conclusion.

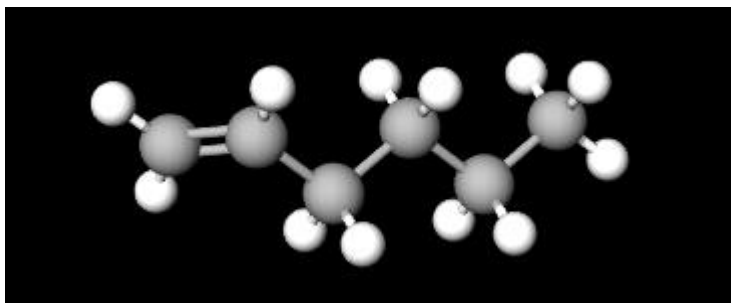
Chapitre 1

Étude bibliographique

1.1. Définition des hydrocarbures

Les hydrocarbures sont des composés chimiques constitués uniquement d'atomes de carbone (C) et d'hydrogène (H), formant des liaisons covalentes. Ils sont classés en différentes catégories selon la présence de liaisons simples (alcane), doubles (alcène) ou triples (alcyne) entre les atomes de carbone. Les hydrocarbures peuvent être trouvés naturellement dans le pétrole brut, le gaz naturel et le charbon.

Le 1-hexène est un alcène de formule moléculaire C_6H_{12} considéré comme hydrocarbures à chaîne court [4]. Il s'agit d'un composé organique insaturé qui contient une double liaison carbone-carbone à l'une de ses extrémités, cet alcène durable attrayant pour le développement des biocarburants.



1-hexène

La formulation d'une nouvelle essence, tenant compte des contraintes environnementales, signifie l'utilisation des éthers et plus récemment des alcools comme des additifs à l'essence en raison de leurs propriétés réductrices des émissions polluantes et de leur capacité à augmenter l'indice d'octane [5].

1.2. Avantages et inconvénients des hydrocarbures

Les hydrocarbures, tels que le pétrole, le gaz naturel et le 1-hexène, possèdent une densité énergétique élevée, ce qui les rend efficaces pour la production d'énergie et les rend polyvalents dans divers secteurs industriels.

Le 1-hexène, en tant qu'hydrocarbure, offre plusieurs avantages et inconvénients environnementaux spécifiques. D'un côté, sa polyvalence en tant que matière première pour la fabrication de divers produits chimiques et polymères contribue à l'économie industrielle. Sa

densité énergétique élevée facilite également son stockage et son transport, en faisant ainsi un composé précieux pour l'industrie.

Néanmoins, l'utilisation du 1-hexène comporte des inconvénients notables. Il présente un risque de pollution environnementale en cas de déversement, ce qui peut affecter la qualité de l'eau, du sol et de l'air. Les hydrocarbures, dont le 1-hexène, peuvent entraîner des répercussions néfastes sur la biodiversité en perturbant les écosystèmes aquatiques et terrestres. De plus, la combustion du 1-hexène produit des gaz à effet de serre, contribuant ainsi au réchauffement climatique.

Par conséquent, même si les hydrocarbures sont une source d'énergie polyvalente et efficace, son utilisation nécessite une gestion responsable et la mise en place de mesures préventives pour réduire au minimum son impact environnemental négatif.

1.3. Propriétés de 1-hexène

- **Point d'ébullition :** Le 1-hexène a un point d'ébullition d'environ 63°C, ce qui indique qu'il est généralement sous forme liquide à température ambiante.
- **Solubilité :** Le 1-hexène est faiblement soluble dans l'eau, mais il est soluble dans les solvants organiques comme l'alcool, l'éther, le chloroforme et l'hexane.
- **L'indice d'octane :** l'indice d'octane de 1-hexène est approximativement entre 56 et 60. Cet indice est relativement bas comparé à d'autres hydrocarbures, ce qui signifie qu'il a tendance à provoquer un cliquetis plus facilement dans les moteurs à combustion.
- **Réactivité :** En raison de la présence de la double liaison carbone-carbone, le 1-hexène est réactif et peut subir des réactions d'addition, de polymérisation et d'oxydation.
- **Stabilité :** Le 1-hexène est relativement stable, mais il peut être sensible à l'oxydation et à la décomposition thermique en présence d'oxygène et de lumière.

1.4. Composés oxygénés

Les composés oxygénés, en chimie organique, incluent principalement les alcools, les aldéhydes, les cétones et les acides carboxyliques. Ces composés sont caractérisés par la présence d'atomes d'oxygène qui influencent leurs propriétés chimiques et physiques.

- **Alcools :** Ils contiennent un groupe hydroxyle (-OH) attaché à un atome de carbone. Ils peuvent être primaires, secondaires ou tertiaires selon la position du groupe hydroxyle.

- **Aldéhydes et cétones** : Ces composés possèdent un groupe carbonyle (C=O). Les aldéhydes ont ce groupe à l'extrémité de la chaîne carbonée, tandis que les cétones l'ont à l'intérieur.
- **Acides carboxyliques** : Ils se distinguent par le groupe carboxyle (-COOH) et ont des propriétés acides.

1.5. Utilisation des composés oxygénés

Les composés oxygénés sont souvent utilisés comme additifs dans les hydrocarbures pour améliorer leurs propriétés. Par exemple, les éthers comme le MTBE (méthyl tert-butyl éther) et les alcools sont ajoutés aux carburants pour augmenter l'indice d'octane, ce qui améliore la combustion et réduit les émissions de gaz polluants. Les esters peuvent également être utilisés pour améliorer la lubrification et la performance des moteurs à combustion interne.

Les composés oxygénés sont de plus en plus utilisés comme additifs dans les carburants pour diverses raisons techniques et environnementales :

- **Amélioration de l'indice d'octane**

Les composés oxygénés augmentent l'indice d'octane des carburants, ce qui améliore les performances des moteurs à essence en réduisant les risques de cliquetis (détonations intempestives). Un indice d'octane élevé permet une combustion plus régulière et plus efficace dans les moteurs à combustion interne.

- **Réduction des émissions polluantes**

Ces additifs contribuent à une combustion plus complète des hydrocarbures, réduisant ainsi les émissions de monoxyde de carbone (CO), d'oxydes d'azote (NOx) et d'hydrocarbures non brûlés. Par exemple, l'éthanol et le méthanol sont souvent ajoutés pour réduire les émissions de gaz toxiques et améliorer la qualité de l'air.

- **Augmentation de la teneur en oxygène**

Les composés oxygénés augmentent la teneur en oxygène des carburants, ce qui facilite une combustion plus propre et plus complète. Cela est particulièrement important dans les zones urbaines où la qualité de l'air est une préoccupation majeure.

- **Impact économique et technique sur les raffineries**

Les composés oxygénés peuvent offrir des avantages économiques en améliorant l'efficacité de la production de carburants. Chaque type de composé oxygéné présente des avantages et des défis spécifiques en fonction du type de raffinerie et des conditions d'utilisation.

- **Diversification des sources d'énergie**

L'utilisation d'additifs oxygénés permet de diversifier les sources d'énergie en incluant des carburants issus de biomasse, tels que l'éthanol et le biodiesel, réduisant ainsi la dépendance aux combustibles fossiles traditionnels.

1.6. Additifs oxygénés – Alcools

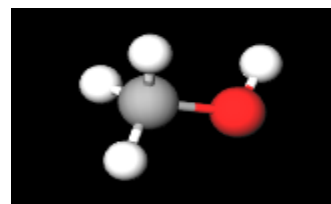
Dans la recherche pour réduire les émissions et améliorer les performances des carburants, l'industrie s'est tournée vers l'intégration d'additifs oxygénés, notamment les alcools. Cette approche innovante vise à optimiser plusieurs aspects essentiels des carburants. En introduisant ces alcools, les ingénieurs cherchent à augmenter le pouvoir oxydant du carburant, favorisant ainsi une combustion plus complète et réduisant les émissions de gaz nocifs. De plus, cette stratégie pour améliorer les propriétés du carburant, notamment sa volatilité et sa stabilité, ce qui peut conduire à une combustion plus efficace, à une réduction des résidus carbonés et à une augmentation la puissance du moteur en optimisant la composition chimique du carburant. Ainsi, l'intégration des alcools dans les hydrocarbures, représente une avancée significative dans le domaine des carburants, offrant des solutions innovantes pour répondre aux exigences environnementales et améliorer les performances des moteurs [6].

1.6.1. Les propriétés des alcools (méthanol, 1-propanol, 1-pentanol) comme additifs dans les hydrocarbures

Les alcools comme le méthanol, le 1-propanol et le 1-pentanol présentent des propriétés intéressantes lorsqu'ils sont utilisés comme additifs dans les hydrocarbures.

a. Méthanol

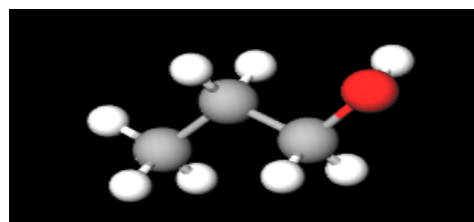
Le méthanol est un alcool simple utilisé couramment comme additif dans les carburants. Il offre plusieurs avantages :



- **Amélioration de la combustion** : Le méthanol a une haute teneur en oxygène (environ 50% en poids), ce qui améliore l'efficacité de la combustion et réduit les émissions de gaz nocifs comme les oxydes d'azote (NOx) et les particules fines.
- **Indice d'octane élevé** : Le méthanol a un indice d'octane plus élevé que l'essence, typiquement autour de 109-113, ce qui permet de réduire le phénomène de cliquetis dans les moteurs et d'améliorer les performances.
- **Réduction des émissions** : Il contribue à une diminution des émissions de dioxyde de carbone (CO₂) et d'autres polluants, en raison de sa combustion plus complète et propre.

b. 1-Propanol

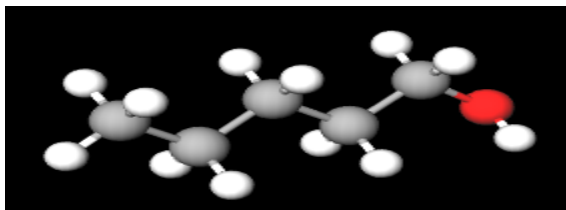
Le 1-propanol est un autre alcool qui peut être utilisé comme additif. Ses avantages comprennent :



- **Amélioration de la combustion** : Comme le méthanol, le 1-propanol améliore la qualité de la combustion des hydrocarbures en augmentant la teneur en oxygène du carburant.
- **Compatibilité avec les moteurs** : Le 1-propanol est compatible avec les moteurs actuels sans nécessiter de modifications importantes. Il offre également une bonne solubilité avec l'essence, ce qui facilite son intégration dans les mélanges de carburants.
- **Indice d'octane** : Le 1-propanol a un indice d'octane relativement élevé, c'est d'environ 108, ce qui aide à améliorer les performances du moteur.

c. 1-Pentanol

Le 1-pentanol, en tant qu'additif, présente également des caractéristiques bénéfiques :



- **Amélioration de la densité énergétique :** Le 1-pentanol possède une densité énergétique plus élevée que le méthanol et le 1-propanol, ce qui peut augmenter l'efficacité énergétique des carburants mélangés.
- **Réduction des émissions de CO₂ :** Comme les autres alcools, le 1-pentanol aide à réduire les émissions de CO₂ en raison de sa combustion plus complète et moins polluante.
- **Indice d'octane :** Il offre également un bon indice d'octane, environ 96-100, contribuant ainsi à une meilleure performance du moteur.

Chapitre 2

Mesures expérimentales des Propriétés volumétriques, acoustiques et optiques des mélanges binaires étudiés

Chapitre 2. Mesures expérimentales des Propriétés volumétriques, acoustiques et optiques des mélanges binaires étudiés

Dans ce chapitre nous nous sommes intéressés aux mesures expérimentales des propriétés volumétriques, acoustiques, optiques et les propriétés d'excès des mélanges binaires contenant du 1-hexène avec divers alcools tels que le méthanol, le 1-propanol et le 1-pentanol, dans des différentes températures allant de 293.15 K à 303.15 K, avec un intervalle de 5 K entre chaque mesure, à une pression atmosphérique. En utilisant un analyseur de densité et de vitesse du son DSA 5000M (Anton Paar) et un réfractomètre numérique (modèle Abbemat 300, Anton Paar). Les propriétés expérimentales d'excès/ dérivées : V_m^E , $\Delta\kappa_s$, ΔL_f , ΔZ , Δu et Δn_D ont été corrélées à l'aide de l'équation de Redlich-Kister.

2.1. Appareillage et procédure

Les mélanges binaires constitués de 1-Hexène et de différents alcools tels que le méthanol, le 1-propanol et le 1-pentanol ont été préparés en utilisant une balance analytique (OHAUS) offrant une précision de ± 0.0001 g avec une marge d'erreur estimée sur la fraction molaire des mélanges de ± 0.0005 a été prise en compte lors de cette préparation. Après l'agitation des mélanges préparés pendant 10 minutes, l'appareil de dégazage (BRANSON 3510) (figure 2.1) a été utilisé pour éliminer les bulles d'air.

Les mesures de la densité et de la vitesse du son, pour les composés purs et les mélanges binaires, ont été réalisées à l'aide d'un analyseur numérique de densité et de vitesse du son, à savoir un densimètre à tube vibrant en U (DSA 5000 M, Anton Paar) (figure 2.2), avec une précision de température de $\pm 0,02$ K. La détermination de la vitesse du son a été réalisée par une technique de propagation d'ondes à une fréquence d'environ 3 MHz, dans laquelle l'échantillon est positionné entre deux capteurs ultrasonores (transducteurs piézoélectriques). Le premier capteur émet des ondes sonores à travers l'échantillon, tandis que le second capteur les reçoit. Ainsi,



Figure 2.1. Appareil de dégazage (BRANSON 3510).



Figure 2.2. Densimètre à tube vibrant en U (DSA 5000 M, Anton Paar).

Chapitre 2. Mesures expérimentales des Propriétés volumétriques, acoustiques et optiques des mélanges binaires étudiés

la vitesse du son est obtenue en divisant la distance entre les deux capteurs par le temps de propagation des ondes sonores.

Les mesures de l'indice de réfraction pour les composés purs ainsi que pour les mélanges binaires ont été effectuées à l'aide d'un réfractomètre automatique numérique (modèle Abbemat 300, Anton Paar) (**figure 2.3**), avec une précision de température de $\pm 0,02$ K.

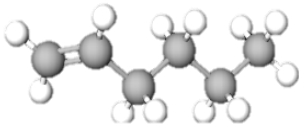
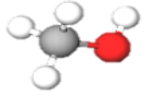
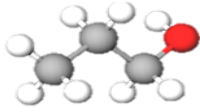
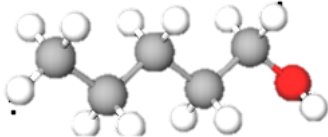


Figure 2.3. Réfractomètre (modèle Abbemat 300, Anton Paar).

2.2. Produits utilisés

Les produits utilisés sont des articles commerciaux, dont la pureté et la source sont consignées dans le **Tableau 2.1**.

Tableau 2.1. Tableau récapitulatif des produits utilisés, leur pureté, CAS #, et source.

Nom	Structure	CAS #	Source	Masse molaire (g/mol)	Pureté
1-hexène		592-41-6	Sigma-Aldrich	84.16	97 %
Méthanol		67-56-1	Sigma-Aldrich	32.04	99,6 %
1-propanol		71-23-8	Sigma-Aldrich	60.10	≥ 99 %
1-pentanol		71-41-0	Sigma-Aldrich	88,15	≥ 99 %

Chapitre 2. Mesures expérimentales des Propriétés volumétriques, acoustiques et optiques des mélanges binaires étudiés

Le tableau 2.2 présente la comparaison entre nos résultats expérimentaux de la densité, vitesse du son et de l'indice de réfraction et les valeurs disponibles dans la littérature afin de vérifier la pureté des corps purs étudiés : 1-hexène, méthanol, 1-propanol et 1-pentanol.

Tableau 2.2. Comparaison entre les valeurs expérimentales (densité ρ , vitesse du son u et indice de réfraction n_D) et les valeurs de la littérature pour les corps purs à différentes températures (293.15 K, 298.15 K et 303.15 K) et à une pression de 0.1 MPa.

Composé	T(K)	ρ (g.cm ⁻³)		u (m.s ⁻¹)		n_D		
		Exp.	Lit..	Exp.	Lit.	Exp.	Lit.	
1-Hexène	293.15	0.674126	0.6735[7]	1088.73	1088.81[7]	1.388090	1.3880[7]	
			0.6733[8]				1.3899[9]	
			0.6732[9]				1.3879[10]	
			0.6732[10]					
			0.6728[11]					
	298.15	0.669411	0.6688[7]	1066.37	1066.46[7]	1.385300	1.3852[7]	
			0.6685[9]				1066.06[12]	1.3870[9]
			0.6684[10]				1065.8[13]	1.3850[10]
			0.66901[12]					1.3850[13]
			0.6685[13]					
			0.66805[14]					
303.15	0.664662	0.6640[7]	1043.96	1044.01[7]	1.382480	1.3824[7]		
Méthanol	293.15	0.791510	0.7912[15]	1118.94	1119.00[15]	1.328930	1.32843[15]	
			0.792[16]				1120.60[16]	1.329[16]
			0.79100[17]				1119.60[17]	1.32941[21]
			0.791243[18]				1118.83[18]	
			0.791418[19]				1119.49[19]	
			0.79165[20]					
	298.15	0.786802	0.7866[15]	1102.55	1102.00[15]	1.327000	1.32645[15]	
			0.787[16]				1103.99[16]	1.327[16]
			0.786710[19]				1102.98[19]	1.32667[21]
			0.78694[20]				1108.00[22]	1.3278[22]
			0.78645[21]					

Chapitre 2. Mesures expérimentales des Propriétés volumétriques, acoustiques et optiques des mélanges binaires étudiés

			0.7869[22]				
	303.15	0.782071	0.7818[15]	1086.14	1086.00[15]	1.324690	1.3241[15]
			0.782[16]		1087.55[16]		1.325[16]
			0.782[17]		1086.6[17]		1.32405[21]
			0.781813[18]		1085.99[18]		1.3265[22]
			0.781983[19]		1086.46[19]		
			0.78224[20]				
			0.78176[21]				
			0.7821[22]				
1-Propanol	293.15	0.804449	0.8034[15]	1224.51	1223[15]	1.38513	1.38494[15]
			0.804[16]		1225.30[16]		1.385[16]
			0.80356[23]		1223.89[24]		1.385100[24]
			0.803756[24]				1.3855[25]
	298.15	0.800433	0.7995[15]	1207.51	1206[15]		1.38307[15]
			0.8000[16]		1208.03[16]		1.383[16]
			0.79950[22]		1216[22]		1.3838[22]
			0.79996[26]		1206.85[24]		1.3826[26]
			0.799710[23]				1.383110[24]
			0.799748[24]				1.3836[25]
	303.15	0.796386	0.7955[15]	1190.43	1189[15]	1.38112	1.38104[15]
			0.796[16]		1190.90[16]		1.381[16]
			0.7955[22]				1.3819[22]
			0.79593[26]				1.3808[26]
			0.79558[23]				1.381120[24]
			0.795709[24]				1.3817[25]
1-Pentanol	293.15	0.814631	0.8144[27]	1291.87	1292.75[27]	1.40985	1.4095[27]
			0.81441[28]		1292[15]		1.40986[15]
			0.8142[15]				
			0.81468[29]				
			0.8148[30]				
			0.81463[31]				
			0.8146[32]				
			0.81412[33]				
	298.15	0.810975	0.8108[27]	1 275.50	1276.05[27]	1.407880	1.4076[27]

Chapitre 2. Mesures expérimentales des Propriétés volumétriques, acoustiques et optiques des mélanges binaires étudiés

		0.81079[28]		1276[15]		1.40789[15]
		0.8109[15]				
		0.81103[29]				
		0.8111[30]				
		0.81096[31]				
		0.8109[32]				
303.15	0.807283	0.8071[27]	1258.43	1259.25[27]	1.40593	1.4056[27]
		0.80710[28]		1259[15]		1.40578[15]
		0.8070[15]				
		0.80737[29]				
		0.8074[30]				
		0.80726[31]				
		0.80711[33]				

2.3. Résultats et discussion

Les systèmes dont ils ont fait l'objet d'étude sont les suivants :

- 1-hexène (1) + méthanol (2)
- 1-hexène (1) + 1-propanol (2)
- 1-hexène (1) + 1-pentanol (2)

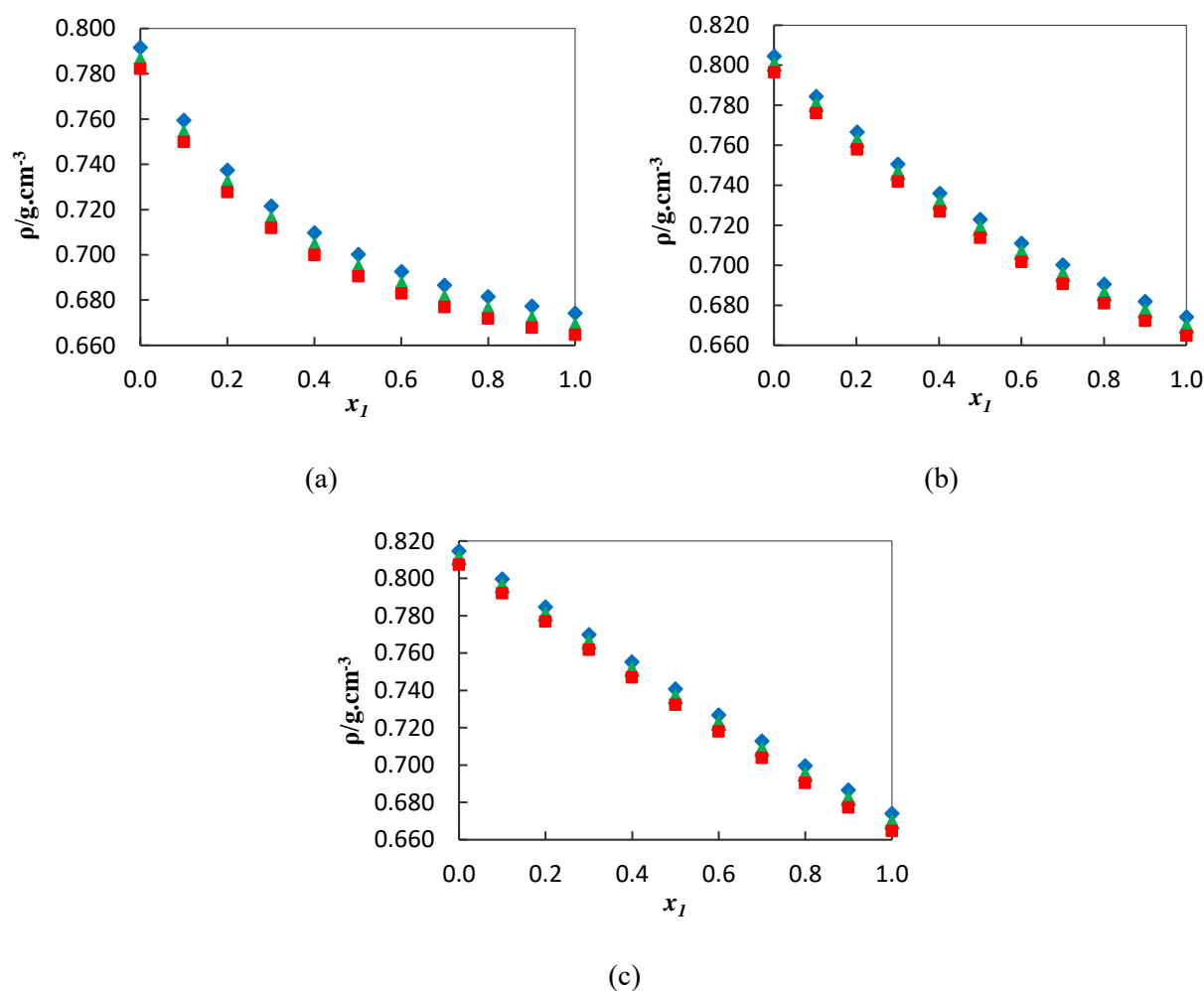
2.3.1. Les propriétés thermodynamiques

Les mesures expérimentales de la densité (ρ), vitesse du son (u) et de l'indice de réfraction (n_D) ont été effectuées à différentes températures (293.15, 298.15 et 303.15) K et à une pression de 0,1 MPa sur l'ensemble de la gamme de composition pour les mélanges binaires considérés. Les valeurs expérimentales sont représentées dans le **Tableau 2.3**.

2.3.1.1. La densité

La densité est l'une des propriétés volumétriques qui représente la masse par unité de volume, elle est fortement influencée par la température, la composition et les interactions moléculaires au sein du système.

Les valeurs expérimentales de la densité (ρ) en fonction de la fraction molaire en 1-hexène (x_1) sont représentées dans les **Figures 2.4 (a-c)**. Il est évident que pour tous les systèmes binaires examinés, les valeurs de ρ diminuent avec l'augmentation de la température et de la fraction x_1 .

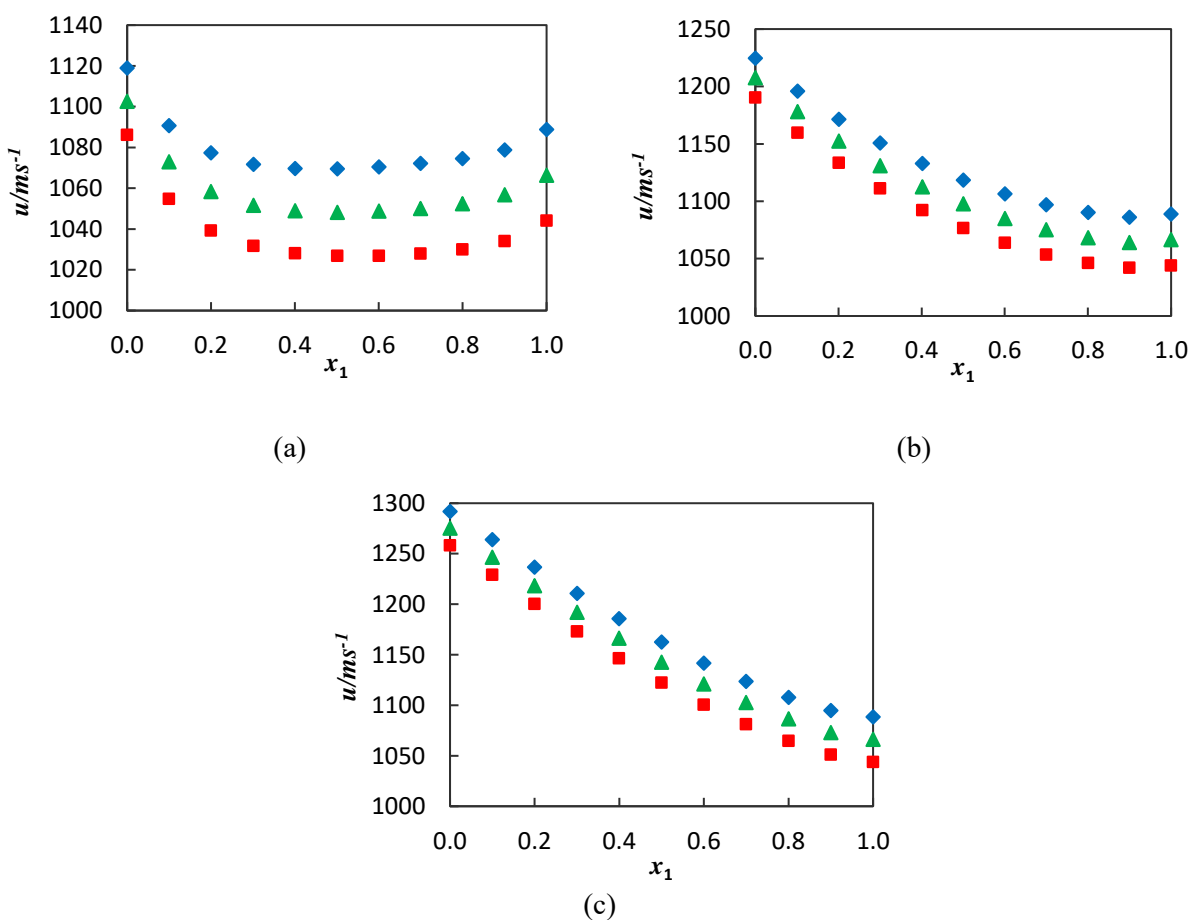


Figures 2.4 (a-c). Variation de la densité (ρ) des systèmes binaires : (a) {1-hexène (1) + méthanol (2)}, (b) {1-hexène (1) + 1-propanol (2)} et (c) {1-hexène (1) + 1-pentanol (2)} en fonction de la fraction molaire en 1-hexène à 293.15K(\blacklozenge), 298.15 K (\blacktriangle), 303.15 K (\blacksquare).

2.3.1.2. Vitesse du son

La vitesse du son, une caractéristique acoustique fondamentale, indique la rapidité de propagation des ondes sonores dans un milieu spécifique. Cette mesure fournit des indications cruciales sur la compressibilité, l'élasticité du mélange, ainsi que sur les interactions entre les composés eux-mêmes au sein du système.

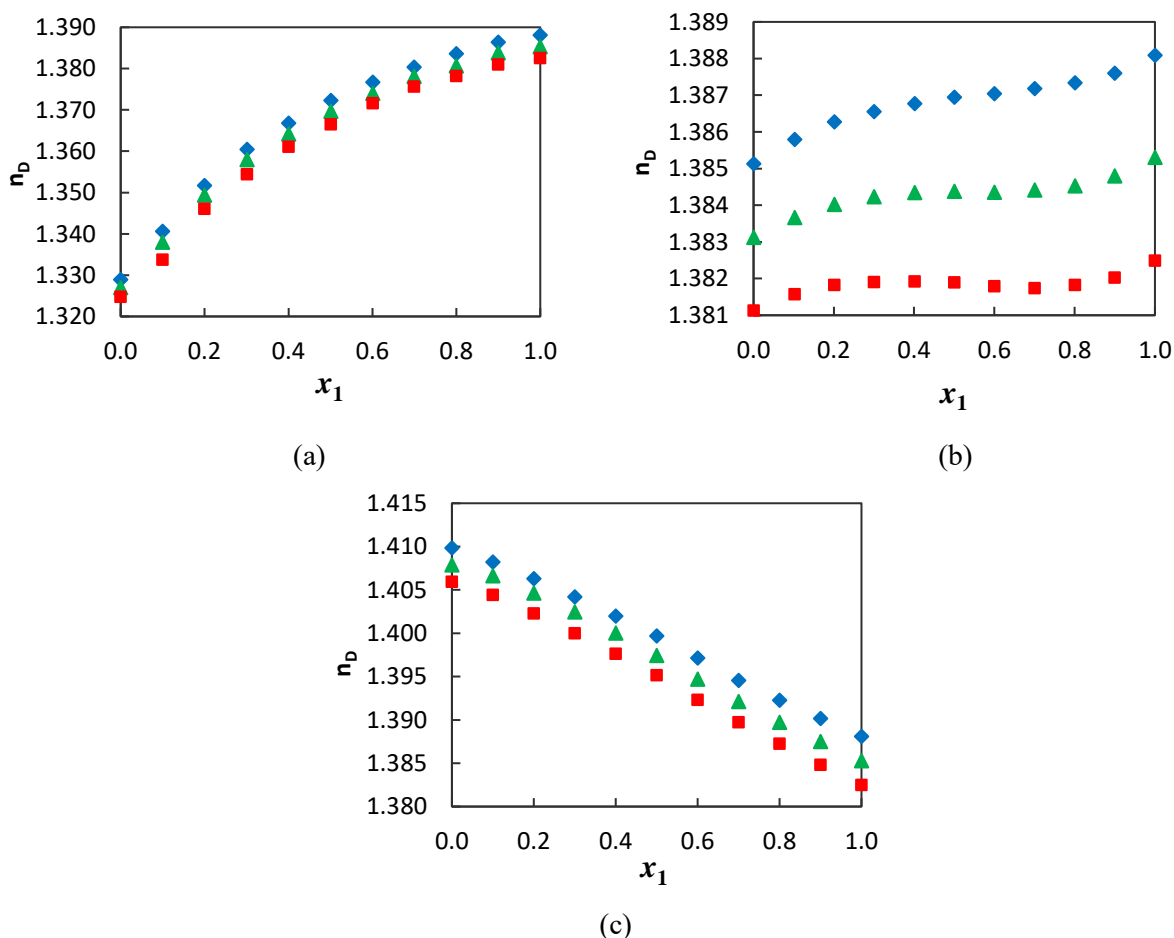
La variation des valeurs expérimentales de la vitesse du son en fonction de la composition en x_1 à différentes températures pour les systèmes binaires sont illustrés dans les **Figures 2.5 (a-c)**. Ces données mettent en évidence une diminution des valeurs de la vitesse du son (u) avec l'augmentation de la température.



Figures 2.5 (a-c). Variation de la vitesse du son (u) des systèmes binaires : (a) {1-hexène (1) + méthanol (2)}, (b) {1-hexène (1) + 1-propanol (2)} et (c) {1-hexène (1) + 1-pentanol (2)} en fonction de la fraction molaire en 1-hexène à 293.15K (◆), 298.15 K (▲), 303.15 K (■).

2.3.1.3. Indice de réfraction

L'indice de réfraction (n_D) représente une grandeur physique adimensionnelle a une importance fondamentale dans la propagation de la lumière à travers les matériaux. Il offre des indications cruciales sur les liaisons chimiques, la miscibilité et les interactions intermoléculaires. Les mesures de l'indice de réfraction ont été réalisées à une pression atmosphérique de $P = 0,1$ MPa sur l'ensemble de la gamme de compositions à différentes températures : 293.15 K, 298.15 K et 303.15 K. Les résultats obtenus sont représentés dans les **Figures 2.6 (a-c)**. Nous constatons que pour tous les systèmes binaires étudiés, les valeurs de l'indice de réfraction (n_D) diminuent en fonction de l'élévation de la température.



Figures 2.6 (a-c). Variation de l'indice de réfraction (n_D) des systèmes binaires : (a) $\{1\text{-hexène (1)} + \text{méthanol (2)}\}$, (b) $\{1\text{-hexène (1)} + 1\text{-propanol (2)}\}$ et (c) $\{1\text{-hexène (1)} + 1\text{-pentanol (2)}\}$ en fonction de la fraction molaire en 1-hexène à 293.15K(\blacklozenge), 298.15 K (\blacktriangle), 303.15 K (\blacksquare).

Chapitre 2. Mesures expérimentales des Propriétés volumétriques, acoustiques et optiques des mélanges binaires étudiés

2.3.2. Les paramètres acoustiques et thermodynamiques

Afin d'améliorer notre compréhension sur les forces intermoléculaires et d'autres caractéristiques du comportement des mélanges binaires étudiés, les paramètres acoustiques et thermodynamiques tels que la longueur libre intermoléculaire (L_f), l'association relative (R_A), la force de relaxation (r), la fonction du son molaire de Rao (R), l'impédance acoustique (z) et la compressibilité isentropique (K_s), ont été calculés à partir des valeurs expérimentales de la densité et de la vitesse du son.

Les paramètres calculés dans cette partie pour les trois systèmes étudiés à différentes températures (293.15 K, 298.15 K et 303.15 K) sont regroupés dans le **Tableau 2.4**.

2.3.2.1. La longueur libre intermoléculaire (L_f)

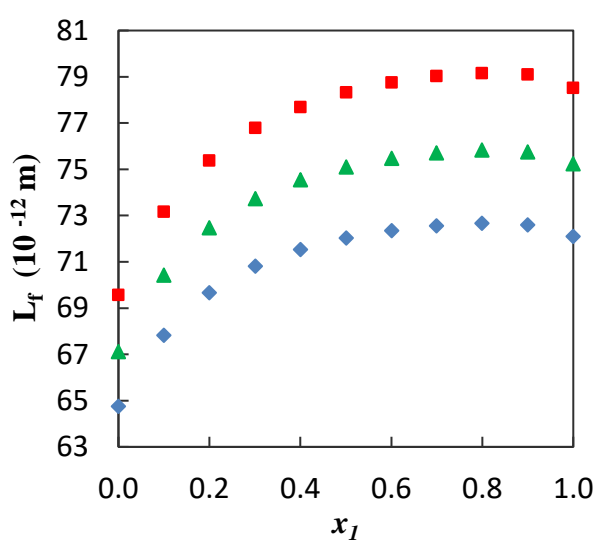
La longueur libre intermoléculaire (L_f) est la longueur libre moyenne entre les molécules dans un milieu. Elle dépend de la température (T) selon une relation empirique établie par Jacobson en 1952 :

$$L_f = \kappa_{jacob} \kappa_s^{1/2} \quad (2.1)$$

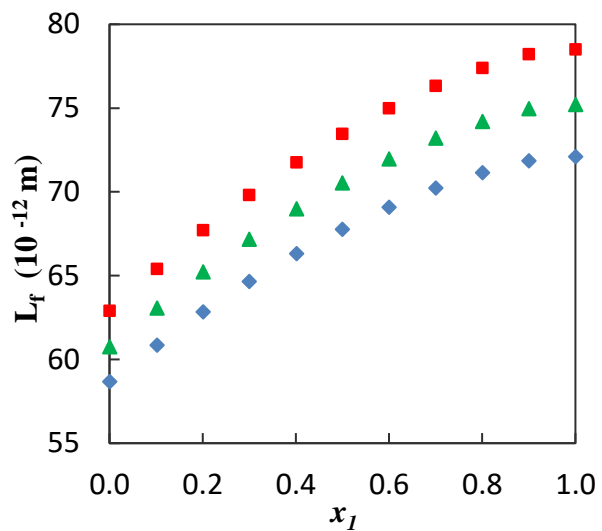
La constante de Jacobson (κ_{jacob}) est calculée en fonction de la température.

$$\kappa_{jacob} = (93.875 + 0.375T)10^{-8} \quad (2.2)$$

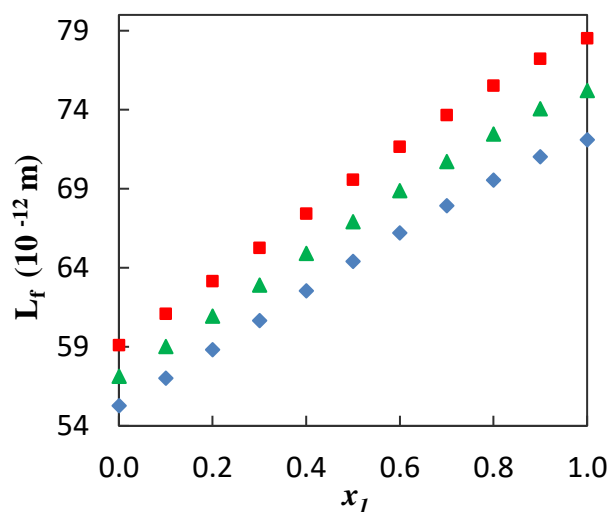
Pour les systèmes binaires 1-hexène + méthanol, + 1propanol, +1-pentanol la variation de L_f en fonction de la fraction molaire en 1-hexène (x_1) à différente température est représentée dans les **Figures 2.7 (a-c)**. Nous constatons que la longueur libre intermoléculaire (L_f), augmente avec la température sur toute la gamme de composition allant de $x_1= 0$ à $x_1= 1$. Cette augmentation favorise une réduction des forces répulsives et renforce l'interaction dipôle-dipôle.



(a)



(b)



(c)

Figures 2.7 (a-c). Variation de la longueur libre intermoléculaire (L_f) des systèmes binaires : (a) {1-hexène (1) + méthanol (2)}, (b) {1-hexène (1) + 1-propanol (2)} et (c) {1-hexène (1) + 1-pentanol (2)} en fonction de la fraction molaire en 1-hexène à 293.15K(♦), 298.15 K (▲), 303.15 K (■).

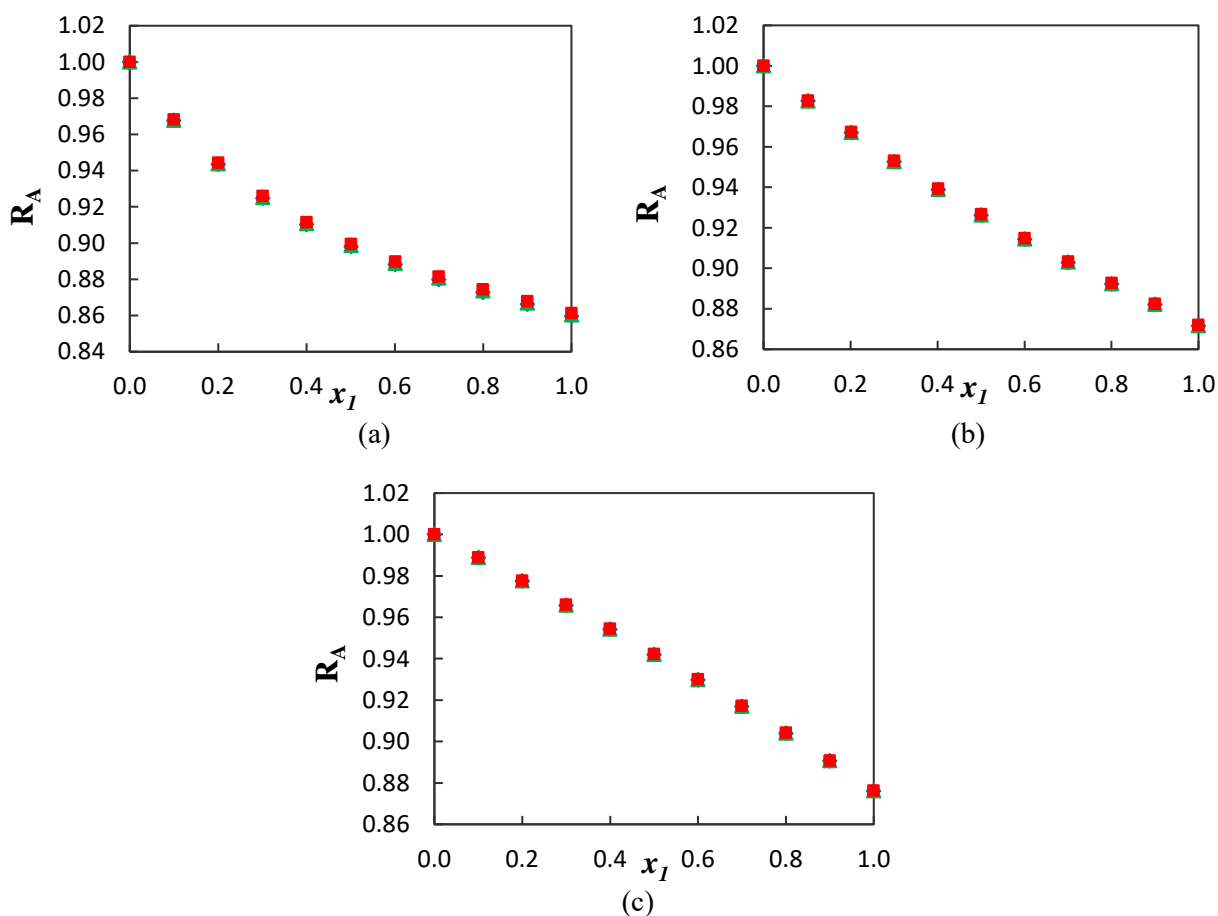
2.3.2.2. L'association Relative (R_A)

L'association Relative (R_A) est le degré d'association des molécules dans un mélange, a été calculée en utilisant l'équation suivante :

$$R_A = \left(\frac{\rho}{\rho_0}\right) \left(\frac{u_0}{u}\right)^{1/3} \quad (2.3)$$

Où ρ , ρ_0 et u , u_0 sont respectivement les densités et les vitesses du son du mélange et du solvant.

Les valeurs de l'association R_A en fonction de x_1 pour les trois températures envisagées sont illustrées dans les **Figures 2.8 (a-c)**. Nous constatons que l'effet de la température sur ces valeurs pour les trois systèmes n'est pas observé, tandis que les valeurs de R_A diminuent avec l'accroissement de la composition en 1-hexène pour les trois systèmes binaires étudiés.



Figures 2.8 (a-c). Variation de l'association Relative (R_A) des systèmes binaires : (a) {1-hexène (1) + méthanol (2)}, (b) {1-hexène (1) + 1-propanol (2)} et (c) {1-hexène (1) + 1-pentanol (2)} en fonction de la fraction molaire en 1-hexène à 293.15K(\blacklozenge), 298.15 K (\blacktriangle), 303.15 K (\blacksquare).

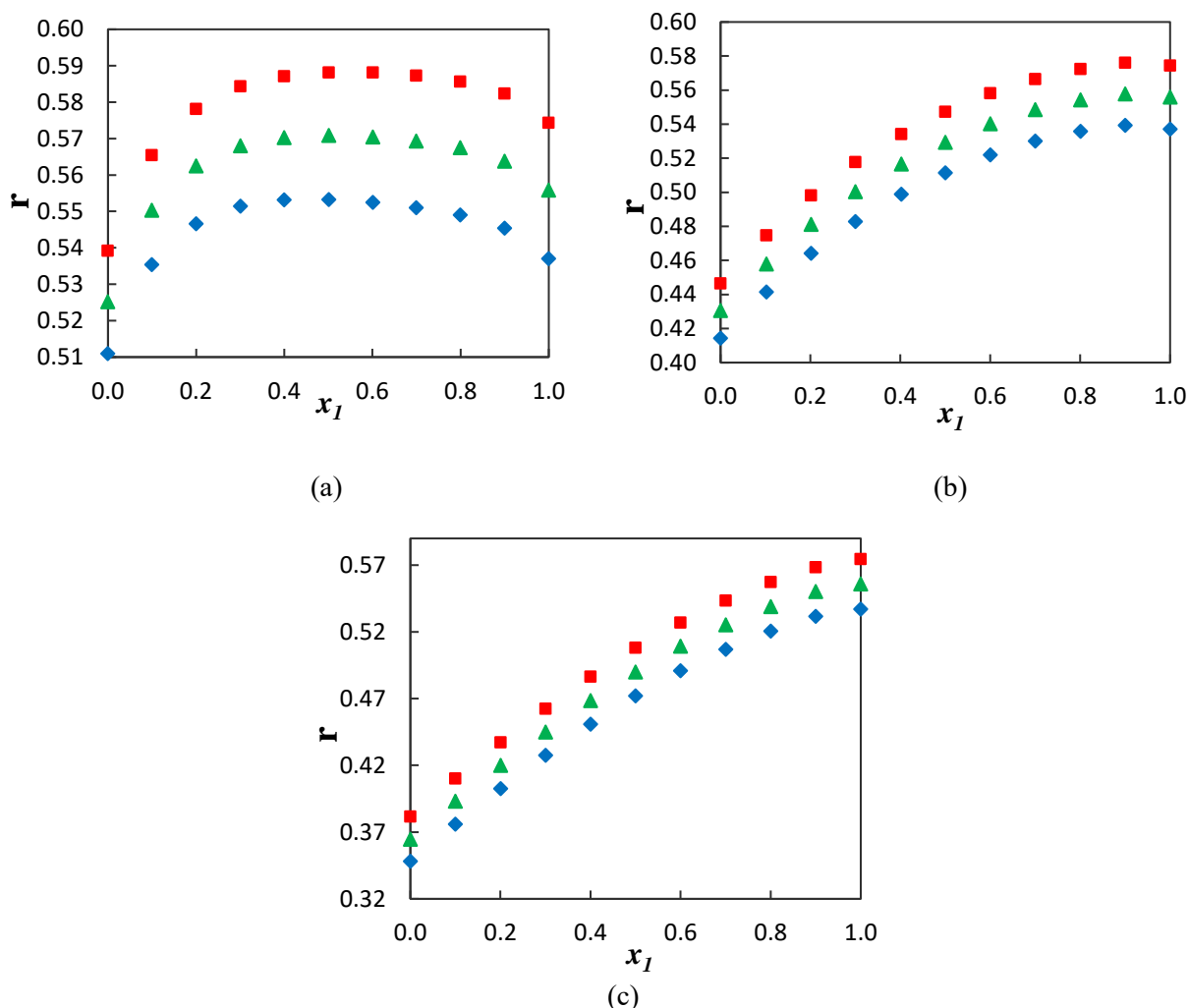
2.3.2.3. Force de relaxation (r)

La relaxation des forces dans le milieu est déterminée par l'équation suivante :

$$r = 1 - \left(\frac{u}{u_{\infty}}\right)^2 \quad (2.4)$$

Où u est la vitesse du son dans le milieu, et u_{∞} est la valeur de la vitesse du son à l'infini, soit 1600 m/s.

Les **Figures 2.9 (a-c)** montrent la variation de la force de relaxation avec la composition x_1 et la température pour les trois systèmes binaires étudiés. Nous observons l'augmentation des valeurs de (r) avec la température dans le domaine de fraction molaire en 1-hexène $0 < x_1 < 1$.



Figures 2.9 (a-c). Variation de la force de relaxation (r) des systèmes binaires : (a) {1-hexène (1) + méthanol (2)}, (b) {1-hexène (1) + 1-propanol (2)} et (c) {1-hexène (1) + 1-pentanol (2)} en fonction de la fraction molaire en 1-hexène à 293.15K(♦), 298.15 K (▲), 303.15 K (■).

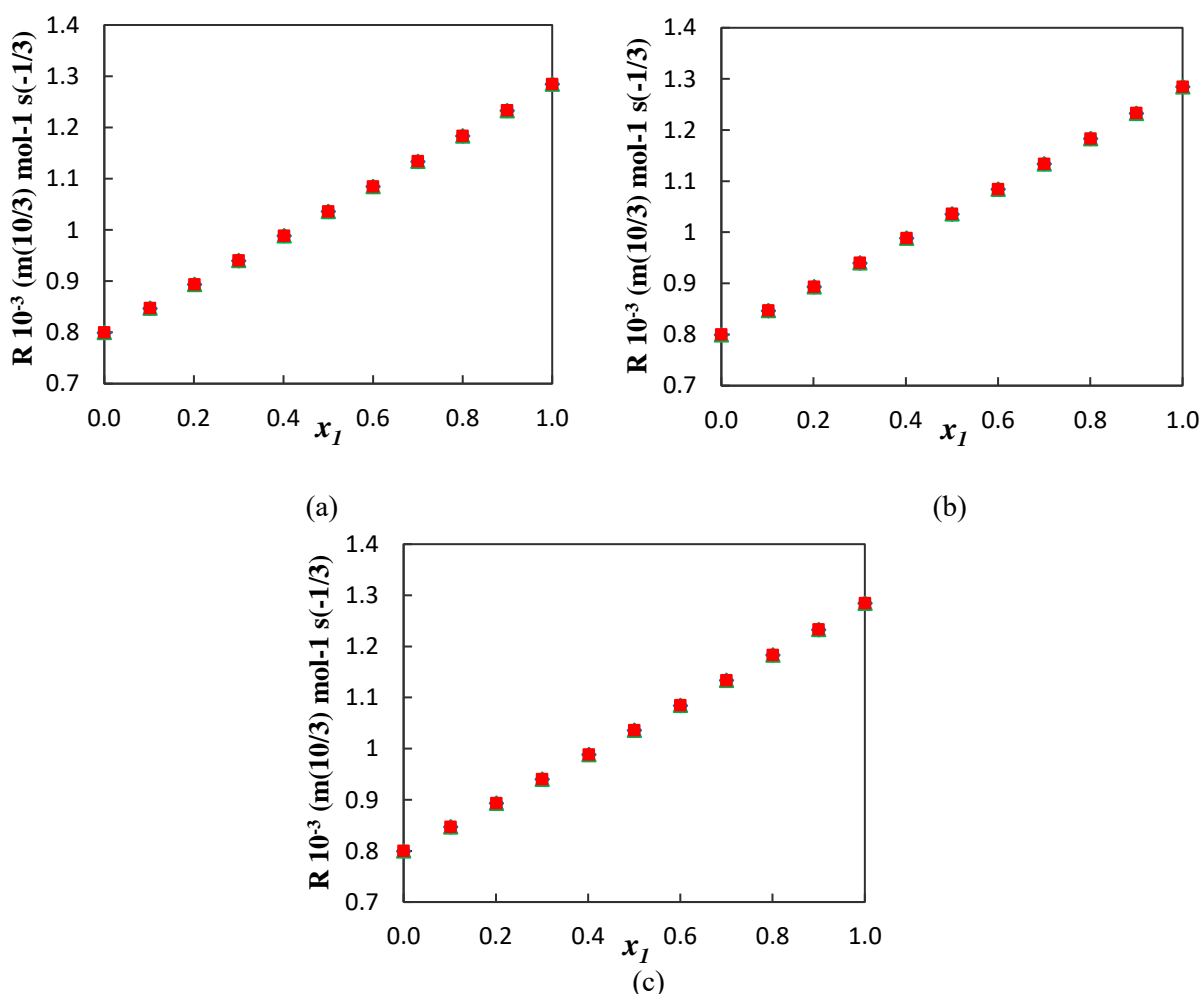
2.3.2.4. Fonction du son molaire de Rao (R) :

La fonction du son molaire de Rao (R) est donnée par la relation suivante :

$$R = \left(\frac{M}{\rho}\right) u^{1/3} \quad (2.5)$$

Où M , ρ et u sont la masse molaire, la densité et la vitesse du son de mélange respectivement.

Les valeurs de la fonction du son molaire de Rao (R) augmentent linéairement avec la composition allant du $x_1=0$ à $x_1=1$, nous pouvons dire que ces valeurs sont indépendantes de la température pour les trois systèmes binaires étudiés, comme le montre les **Figures 2.10 (a-c)**.



Figures 2.10 (a-c). Variation de la fonction du son molaire de Rao (R) des systèmes binaires : (a) {1-hexène (1) + méthanol (2)}, (b) {1-hexène (1) + 1-propanol (2)} et (c) {1-hexène (1) + 1-pentanol (2)} en fonction de la fraction molaire en 1-hexène à 293.15K(♦), 298.15 K (▲), 303.15 K (■).

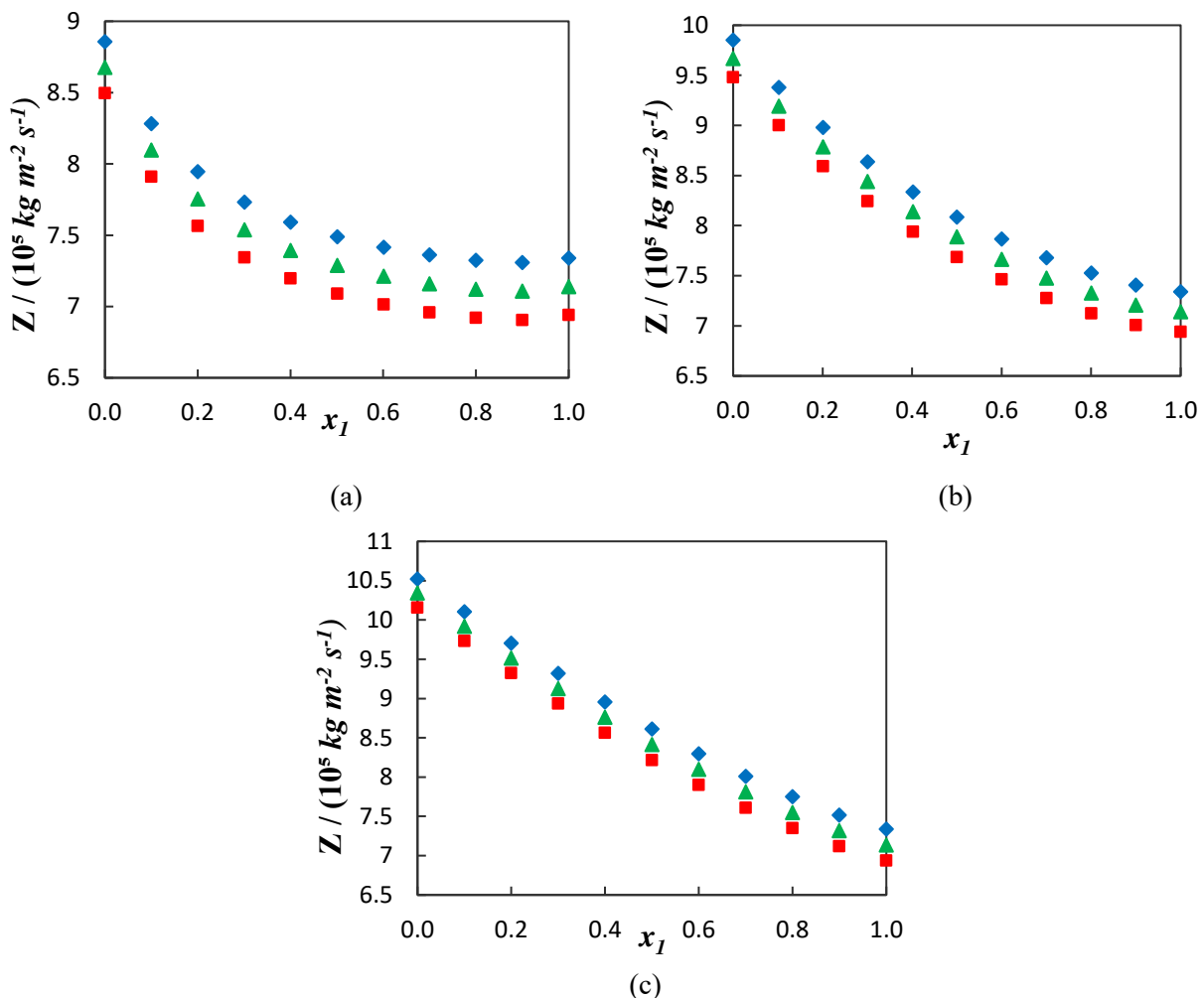
2.3.2.5. L'impédance acoustique (Z)

L'impédance acoustique spécifique d'un milieu est donnée comme suit :

$$Z = \rho u \quad (2.6)$$

Avec ρ , est la densité et u est la vitesse du son.

Les **Figures 2.11 (a-c)** représentent les valeurs de l'impédance acoustique (Z) en fonction de x_1 pour les trois températures envisagées. A partir de ces figures, nous constatons que les valeurs de Z diminuent avec l'accroissement de la composition en 1-hexène et avec la température allant de 293.15 K à 303.15K pour tous les systèmes binaires étudiés.



Figures 2.11 (a-c) : Variation de l'impédance acoustique spécifique (Z) du système binaire : (a) {1-hexène (1) + méthanol (2)}, (b) {1-hexène (1) + 1-propanol (2)} et (c) {1-hexène (1) + 1-pentanol (2)} en fonction de la fraction molaire en 1-hexène à 293.15K(♦), 298.15 K (▲), 303.15 K (■).

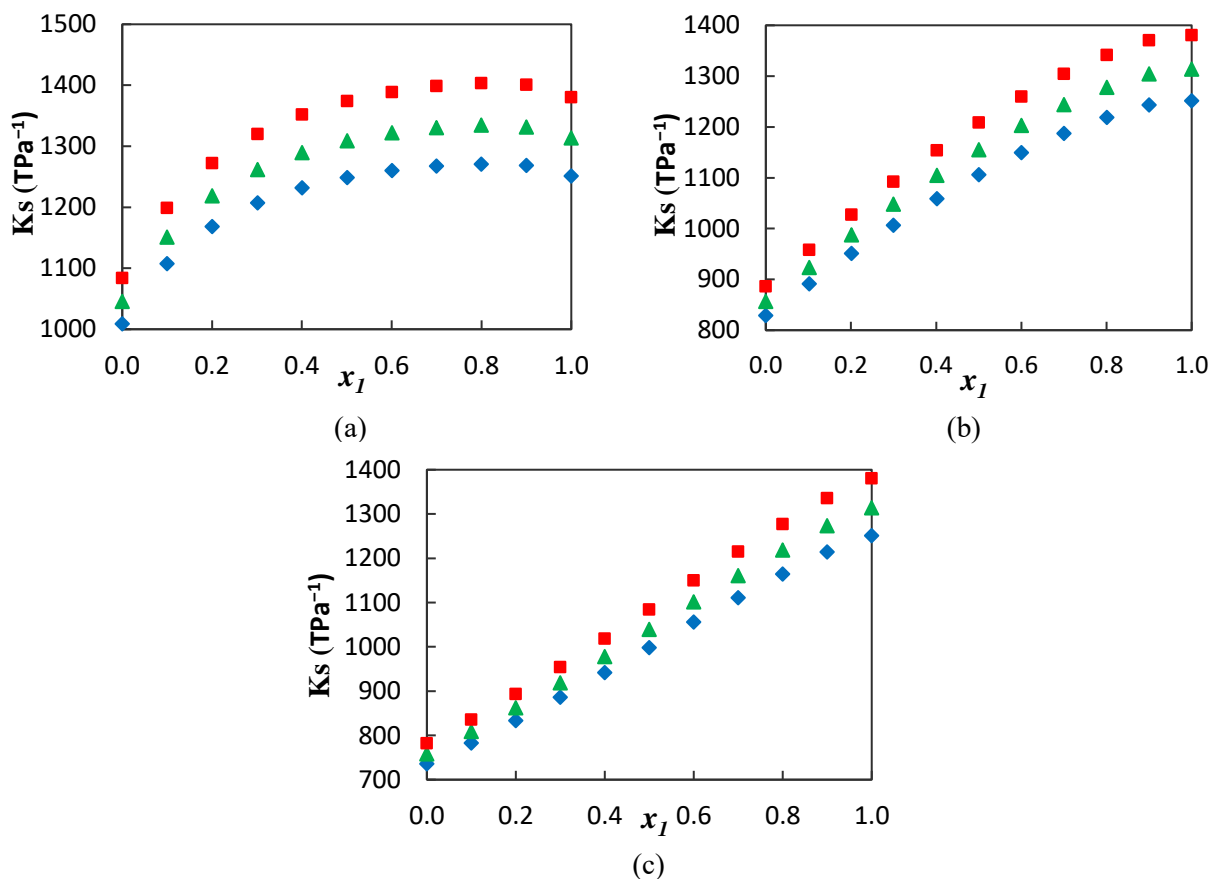
2.3.2.6. La compressibilité isentropique (K_s)

La compressibilité isentropique est une mesure de la réponse d'un matériau à une compression adiabatique avec l'environnement. L'équation de Newton-Laplace a été utilisée pour calculer la compressibilité isentropique, K_s .

$$\kappa_s = \frac{1}{\rho u^2} \quad (2.7)$$

Où ρ est la densité et u est la vitesse du son de mélange.

Les données de compressibilité isentropique k_s calculées pour les systèmes examinés à (293.15, 298.15 et 303.15) K sont schématisées graphiquement dans les **Figures 2.12 (a-c)**. Nous remarquons que la compressibilité isentropique k_s augmente avec la température sur toute la gamme de composition.



Figures 2.12 (a-c). Variation de la compressibilité isentropique (k_s) du système binaire : (a) {1-hexène (1) + méthanol (2)}, (b) {1-hexène (1) + 1-propanol (2)} et (c) {1-hexène (1) + 1-pentanol (2)} en fonction de la fraction molaire en 1-hexène à 293.15K (◆), 298.15 K (▲), 303.15 K (■).

Chapitre 2. Mesures expérimentales des Propriétés volumétriques, acoustiques et optiques des mélanges binaires étudiés

2.3.3. Propriétés d'excès/ dérivées et leur corrélation

2.3.3.1. Propriétés d'excès/ dérivées

Les propriétés d'excès sont des outils fondamentaux en thermodynamique pour quantifier et comprendre les écarts entre les comportements réels et idéaux des mélanges, facilitant ainsi la modélisation précise et l'optimisation des processus chimiques.

Dans le cadre de ce travail, les données expérimentales ont été utilisées pour calculer les propriétés molaires d'excès à l'aide de l'équation suivante :

$$Y^E = Y - (x_1 Y_1 + x_2 Y_2) \quad (2.8)$$

Où Y est la propriété thermodynamique, représente dans ce cas V , K_s , L_f , Z , u ou n_D du mélange, 1 et 2 correspondent aux composés purs, x_i , la fraction molaire du composant i .

2.3.3.2. Corrélation des propriétés d'excès/ dérivées :

Les propriétés expérimentales d'excès/ dérivées : V_m^E , $\Delta\kappa_s$, ΔL_f , ΔZ , Δu et Δn_D pour les systèmes (1-hexène + méthanol, 1-propanol ou 1-pentanol) à différentes températures (293.15, 298.15, 303.15 K) ont été corrélées à l'aide de l'équation polynômial de Redlich-Kister [34].

$$Y = x_1 x_2 \sum_{i=1}^k A_i (2x_1 - 1)^{i-1} \quad (2.9)$$

Y désigne V_m^E , $\Delta\kappa_s$, ΔL_f , ΔZ , Δu et Δn_D .

A_i : Les paramètres d'ajustement, déterminés à l'aide de la méthode des moindres carrés.

Les écarts-types notés σ , calculés selon l'équation suivante :

$$\sigma = \left[\frac{\sum_{i=1}^N (Y_{exp} - Y_{cal})^2}{(N - k)} \right]^{1/2} \quad (2.10)$$

Avec :

N représente le nombre de points expérimentaux, et k est le nombre de coefficients utilisés dans l'équation de Redlich-Kister.

Chapitre 2. Mesures expérimentales des Propriétés volumétriques, acoustiques et optiques des mélanges binaires étudiés

2.3.3.3. Résultats et discussion :

Les résultats obtenus des propriétés d'excès/ dérivées sont regroupées dans les **Tableaux (2.5) et (2.6)**, ainsi que la représentation et la comparaison graphique entre les valeurs expérimentales et corrélées par l'équation polynomiale de Redlich-Kister des propriétés d'excès/ dérivées : $V_m^E, \Delta\kappa_S, \Delta L_f, \Delta Z, \Delta u$ et Δn_D en fonction de la fraction molaire en 1- hexène à $T = (293.15, 298.15 \text{ et } 303.15) \text{ K}$ pour les trois systèmes binaires sont illustrées dans les **figures 2.13 (a-c), 15 (a-c), 16 (a-c), 17 (a-c), 18 (a-c), 19 (a-c)** respectivement. Les paramètres A_i obtenus par ajustement sont présentés dans le **tableau 2.7** avec les valeurs des écarts types σ .

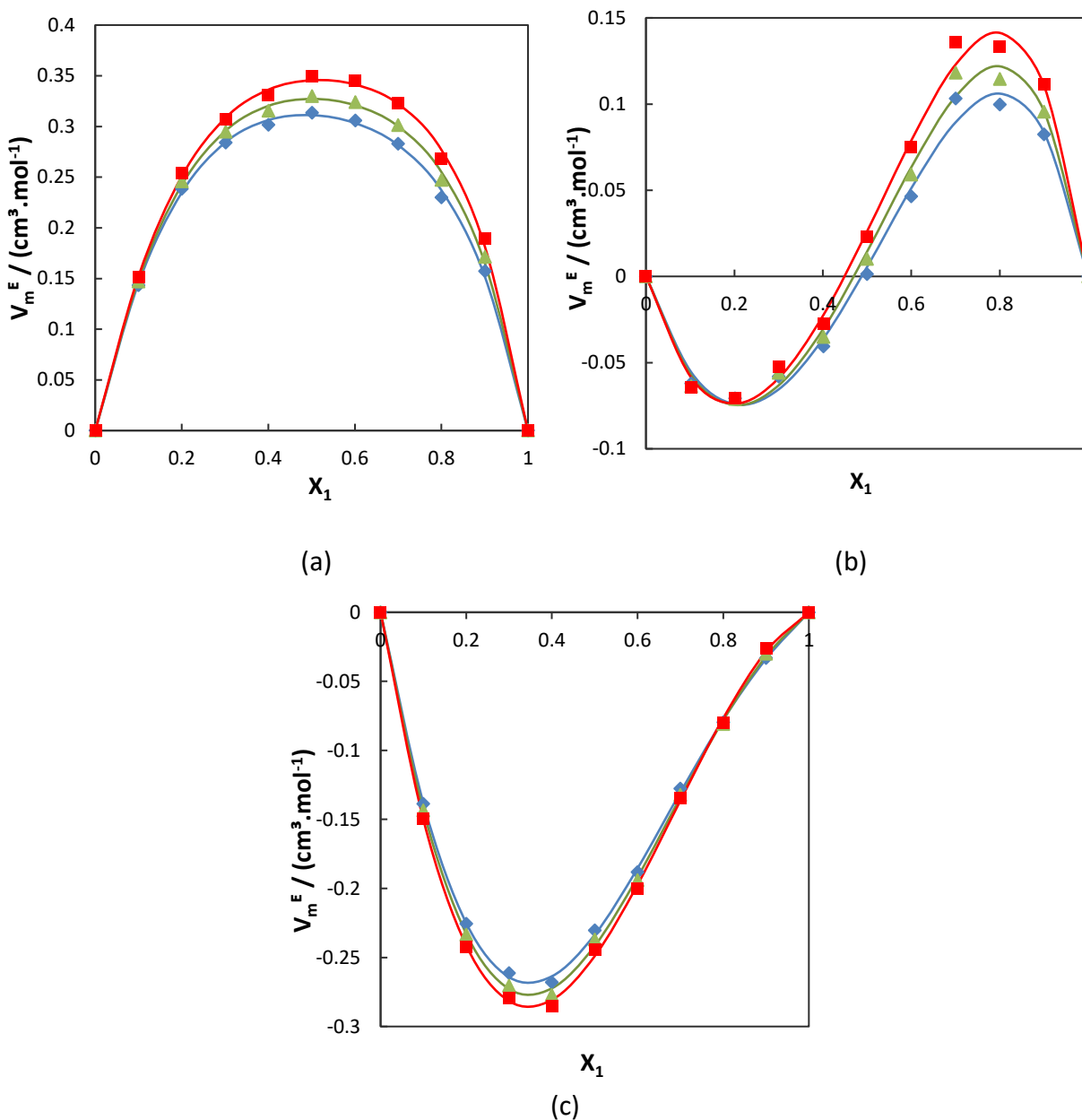
- **Volume molaire d'excès**

En thermodynamique, le volume d'excès est l'écart par rapport au comportement idéal des solutions, est une propriété d'excès pouvant décrire les différentes interactions mises en jeu dans un mélange est défini comme étant la différence entre le volume molaire du mélange et le volume molaire idéal.

Les volumes molaires d'excès ont été calculés en utilisant l'équation suivante :

$$V_m^E = \sum_{i=1}^2 x_i M_i (\rho^{-1} - \rho_i^{-1}) \quad (2.11)$$

Où ρ désigne la densité du mélange, ρ_i, x_i et M_i représentent la densité, la fraction molaire et la masse molaire du composé i , respectivement.



Figures 2.13 (a-c). Le volume molaire d'excès V_m^E du système binaire : (a) {1-hexène (1) + méthanol (2)}, (b) {1-hexène (1) + 1-propanol (2)} et (c) {1-hexène (1) + 1-pentanol (2)} en fonction de la fraction molaire en 1-hexène à 293.15K (◆), 298.15 K (▲), 303.15 K (■). (—) Les valeurs calculées en utilisant l'équation de Redlich-Kister.

Chapitre 2. Mesures expérimentales des Propriétés volumétriques, acoustiques et optiques des mélanges binaires étudiés

a- Le système 1-hexène (1) + méthanol (2) :

Pour ce système le volume d'excès est positif pour toute la gamme de la composition, ce qui signifie une expansion du volume du mélange réel par rapport au volume idéal, ce comportement peut s'expliquer par la présence des interactions répulsives telles que les interactions dipôle-dipôle ou des effets stériques entre les molécules des deux composants. Par ailleurs, les valeurs de V_m^E augmentent avec l'élévation de la température pour ce système comme montre la **Figure 2.13 (a)**.

b- Le système 1-hexène (1) + 1-propanol (2) :

Le système binaire 1-hexène (1) + 1-propanol (2), présente un comportement sinusoïdal, ce phénomène asymétrique s'explique par la présence de différents types des interactions moléculaires dominantes dans ce système en fonction de la composition. Plus précisément, lorsque x_1 est inférieur à 0.5, les interactions attractives entre les molécules des deux composants prévalent, ce qui se traduit par des valeurs négatives du volume d'excès. À l'inverse, lorsque x_1 atteint ou dépasse 0.5, les interactions répulsives deviennent prédominantes, engendrant des valeurs positives du volume d'excès. De plus, les valeurs de V_m^E augmentent avec l'élévation de la température pour ce système comme montre la **Figure 2.13 (b)**.

c- Le système 1-hexène (1) + 1-pentanol (2) :

Contrairement aux autres systèmes, le mélange, 1-hexène (1) + 1-pentanol (2) présente des valeurs du volume d'excès négatives dans tous l'intervalle de la composition, ce qui signifie généralement une contraction du volume. Ce phénomène peut s'expliquer par la présence des interactions différentes plus fortes dans les mélanges ainsi que la formation des liaisons hydrogène intermoléculaires entre les molécules dans ce mélange. Les valeurs de V_m^E diminuent avec l'augmentation de la température comme montre la **Figure 2.13 (c)**.

d- Influence de la chaîne alcoolique sur le comportement du mélange

Afin d'étudier l'influence de la chaîne alcoolique sur le comportement du mélange, une comparaison graphique entre les valeurs de volume d'excès pour les trois systèmes binaires à 298.15 K a été représenté dans **la Figure 2.14**. Le volume d'excès augmente selon l'ordre suivant : (1-hexène (1)+1-pentanol (2)) <(1-hexène (1) + 1-propanol (2)) <(1-hexène (1) + méthanol (2)).

Chapitre 2. Mesures expérimentales des Propriétés volumétriques, acoustiques et optiques des mélanges binaires étudiés

Les fortes interactions intermoléculaires entre les mélanges binaires ont été observées dans l'ordre suivant : 1-pentanol > 1-propanol > méthanol avec 1-hexène.

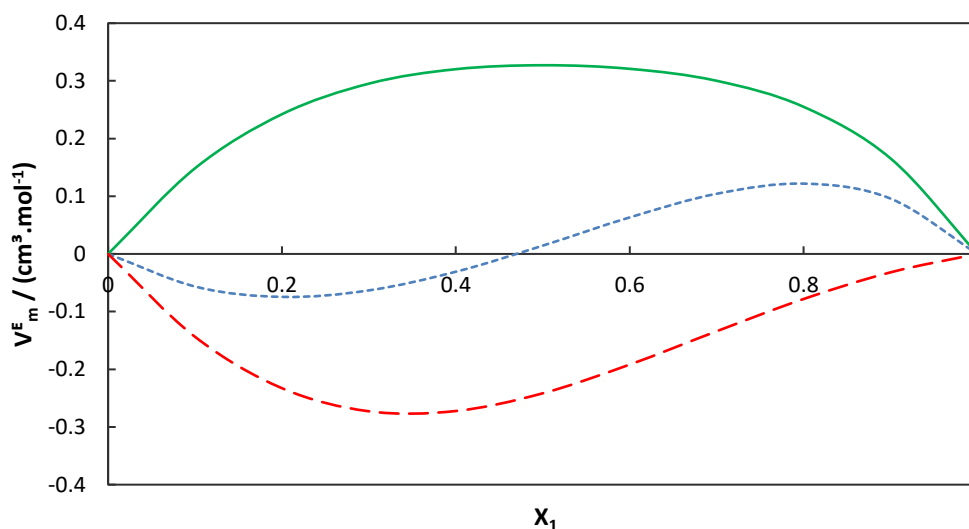


Figure 2.14 : Comparaison du volume molaire d'excès V_m^E du système binaire : (—) {1-hexène (1) + méthanol (2)}, (---) {1-hexène (1) + 1-propanol (2)} et (-.-) {1-hexène (1) + 1-pentanol (2)} en fonction de la fraction molaire en 1-hexène à 298.15 K.

- **Déviati on en compression isentropique (Δk_S)**

La déviation en compression isentropique Δk_S , a été calculée en utilisant l'équation suivante :

$$\Delta k_S = k_S - \sum_{i=1}^2 x_i k_{Si} \quad (2.12)$$

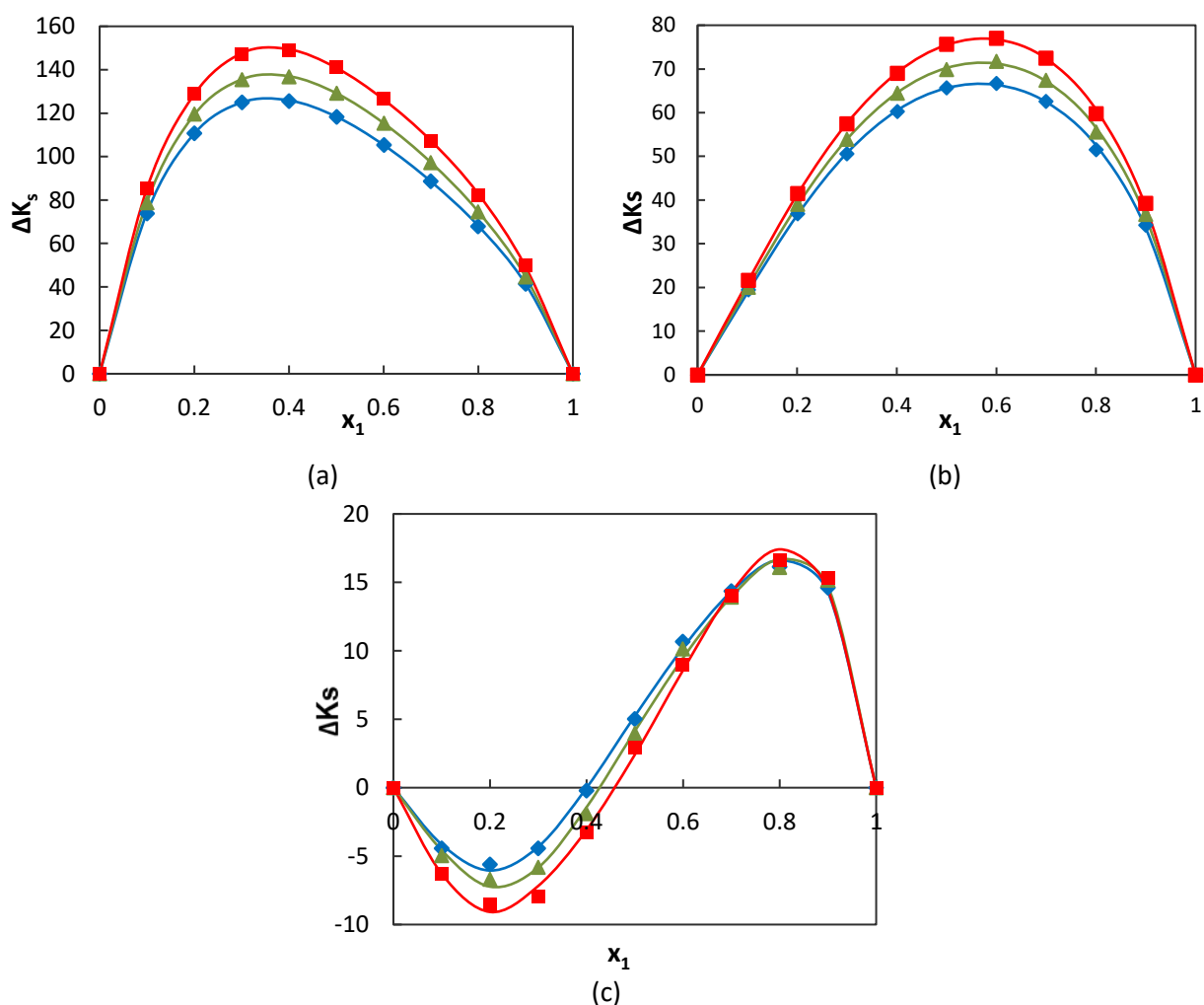
Où k_S représente le facteur de compressibilité du mélange et k_{Si} et x_i désignent respectivement le facteur de compressibilité et la fraction molaire du composé i .

- a. **Systèmes 1-hexène + méthanol, ou 1-propanol**

Nous observons à partir des Figures 2.15 (a et b) que les valeurs de la déviation en compression isentropique des mélanges binaires 1-hexène + méthanol, ou 1-propanol sont positives sur l'ensemble la gamme de composition. Ce comportement signifie que les mélanges sont plus compressibles que les composants purs, ce qui suggère qu'une augmentation de l'espace libre pour ces deux mélanges étudiés selon l'ordre suivant : {1-hexène (1) + méthanol (2)} > {1-hexène (1) + 1-propanol (2)}.

b. Systèmes 1-hexène + 1-pentanol

Le troisième système binaire (1-hexène (1) + 1-pentanol (2)), présente une forme sinusoïdale. La déviation en k_s est négative lorsque la fraction molaire de 1-hexène (x_1) est comprise entre 0 et 0.4, ce qui suggère une diminution de l'espace libre pour ce mélange. En revanche, lorsque la fraction molaire de 1-hexène est supérieure à 0.4, la déviation en compression isentropique est positive, ce qui signifie que les molécules dans ce mélange occupent plus d'espace libre que dans un mélange idéal comme montre la **Figure 2.15 (c)**.



Figures 2.15 (a-c). La déviation en compression isentropique ΔK_s du système binaire : (a) {1-hexène (1) + méthanol (2)}, (b) {1-hexène (1) + 1-propanol (2)} et (c) {1-hexène (1) + 1-pentanol (2)} en fonction de la fraction molaire en 1-hexène à 293.15K(♦), 298.15 K (▲), 303.15 K (■). (—) Les valeurs calculées en utilisant l'équation de Redlich-Kister.

- **Déviatiun en longueur libre intermoléculaire (ΔL_f)**

La déviation en longueur libre intermoléculaire ΔL_f est calculée par l'équation suivante :

$$\Delta L_f = L_f - \sum_{i=1}^2 x_i L_{fi} \quad (2.13)$$

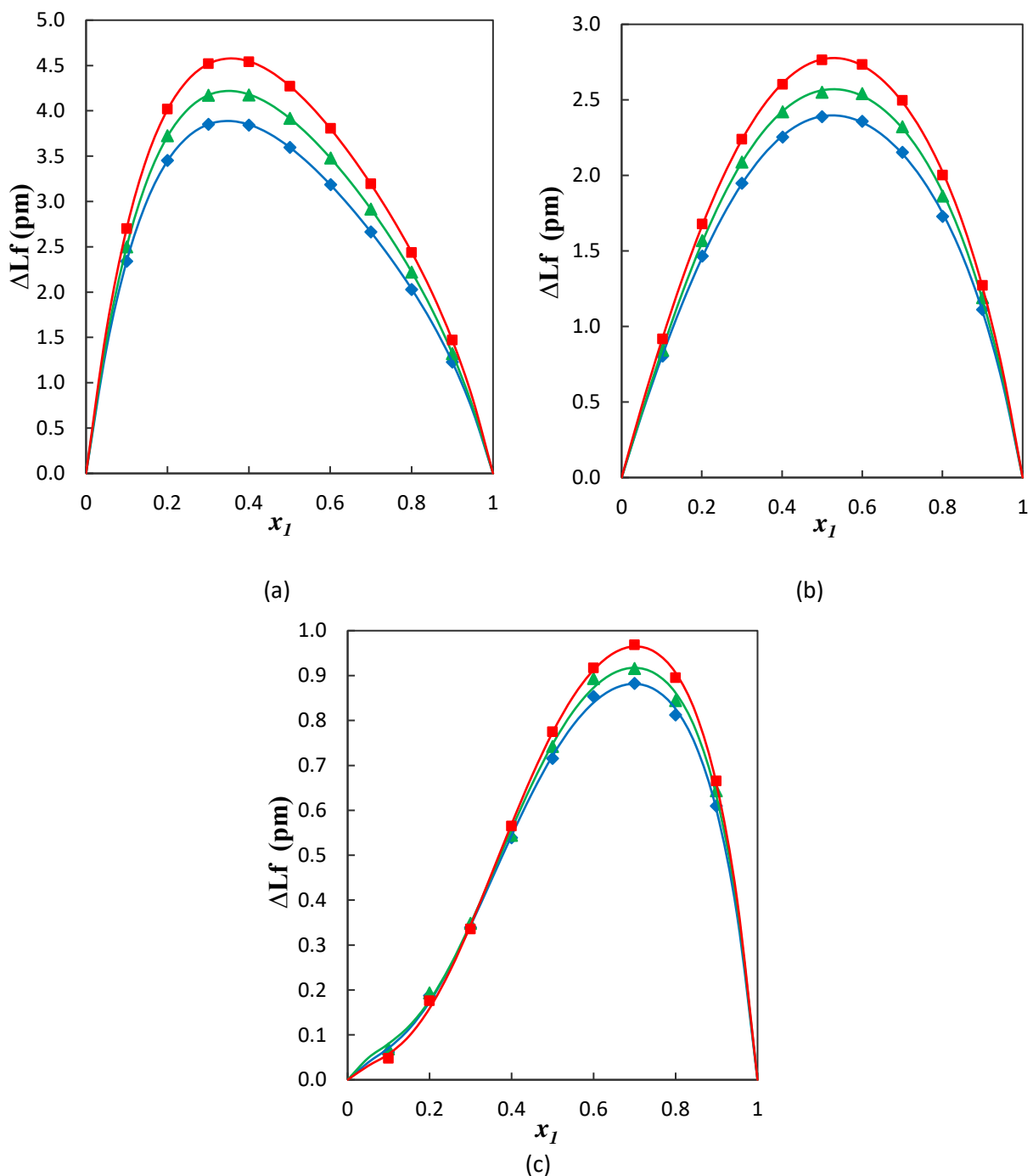
Où

L_f et L_{fi} sont les longueurs libres intermoléculaires du mélange et du composé i respectivement.

x_i est la fraction molaire du composé i .

- **Systèmes 1-hexène + méthanol, 1-propanol, ou 1-pentanol**

Les **Figures 2.16 (a-c)** montrent que les valeurs de ΔL_f sont positives pour ces trois systèmes à différentes températures sur toute la gamme de composition. Nous constatons que la déviation en longueur libre intermoléculaire (ΔL_f) augmente en fonction de l'augmentation de la température. Les valeurs positives de (ΔL_f) signifient que les molécules se trouvent plus éloignées les unes des autres à cause de interactions physiques dues aux forces de dispersion ou de faible interaction dipôle – dipôle.



Figures 2.16 (a-c). La déviation de la longueur libre intermoléculaire (ΔL_f) du système binaire : (a) {1-hexène (1) + méthanol (2)}, (b) {1-hexène (1) + 1-propanol (2)} et (c) {1-hexène (1) + 1-pentanol (2)} en fonction de la fraction molaire en 1-hexène à 293.15K (◆), 298.15 K (▲), 303.15 K (■). (—) Les valeurs calculées en utilisant l'équation de Redlich-Kister.

Chapitre 2. Mesures expérimentales des Propriétés volumétriques, acoustiques et optiques des mélanges binaires étudiés

- Déviatiun de l'impédance acoustique spécifique ΔZ :

La déviation en impédance acoustique spécifique, Δz , a été calculée à l'aide de l'équation suivante :

$$\Delta z = z - \sum_{i=1}^2 x_i z_i \quad (2.14)$$

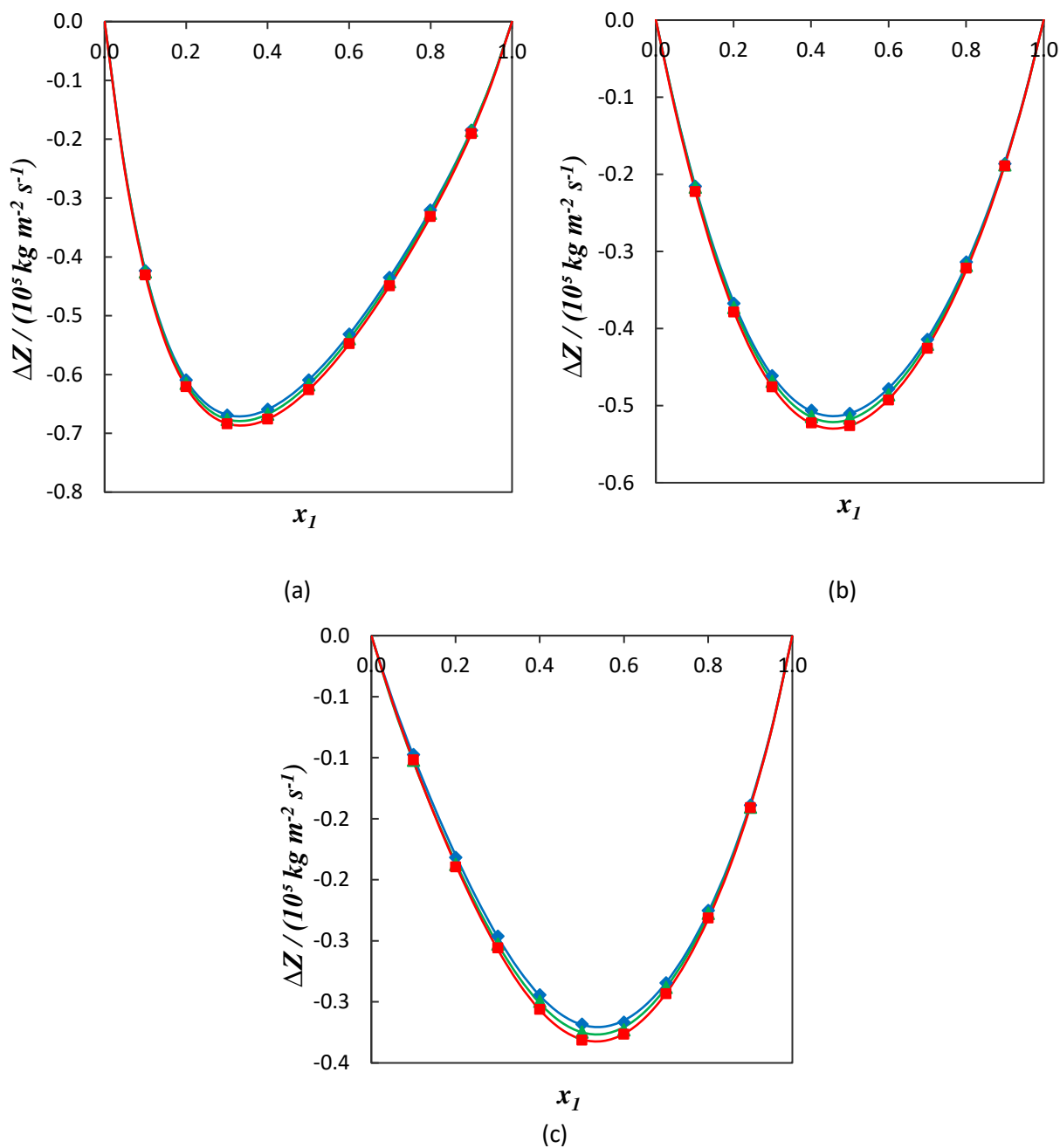
Où

z et z_i sont l'impédance acoustique spécifique du mélange et du composé i respectivement.

x_i est la fraction molaire du composé i .

- Systemes 1-hexène + méthanol, 1-propanol, ou 1-pentanol

Les valeurs de Δz sont négatives pour les trois systèmes sur toute la gamme de composition comme présente les **Figures 2.17 (a-c)**. Les valeurs négatives de la déviation de l'impédance acoustique spécifique (ΔZ) indiquent une diminution de l'association entre les molécules dans le système avec des fortes forces de dispersion.



Figures 2.17 (a-c). La déviation de l'impédance acoustique (ΔZ) du système binaire : (a) {1-hexène (1) + méthanol (2)}, (b) {1-hexène (1) + 1-propanol (2)} et (c) {1-hexène (1) + 1-pentanol (2)} en fonction de la fraction molaire en 1-hexène à 293.15K (◆), 298.15 K (▲), 303.15 K (■). (—) Les valeurs calculées en utilisant l'équation de Redlich-Kister.

Chapitre 2. Mesures expérimentales des Propriétés volumétriques, acoustiques et optiques des mélanges binaires étudiés

- Déviaton de la vitesse du son Δu

La déviation de vitesse du son Δu est calculée par l'équation suivante :

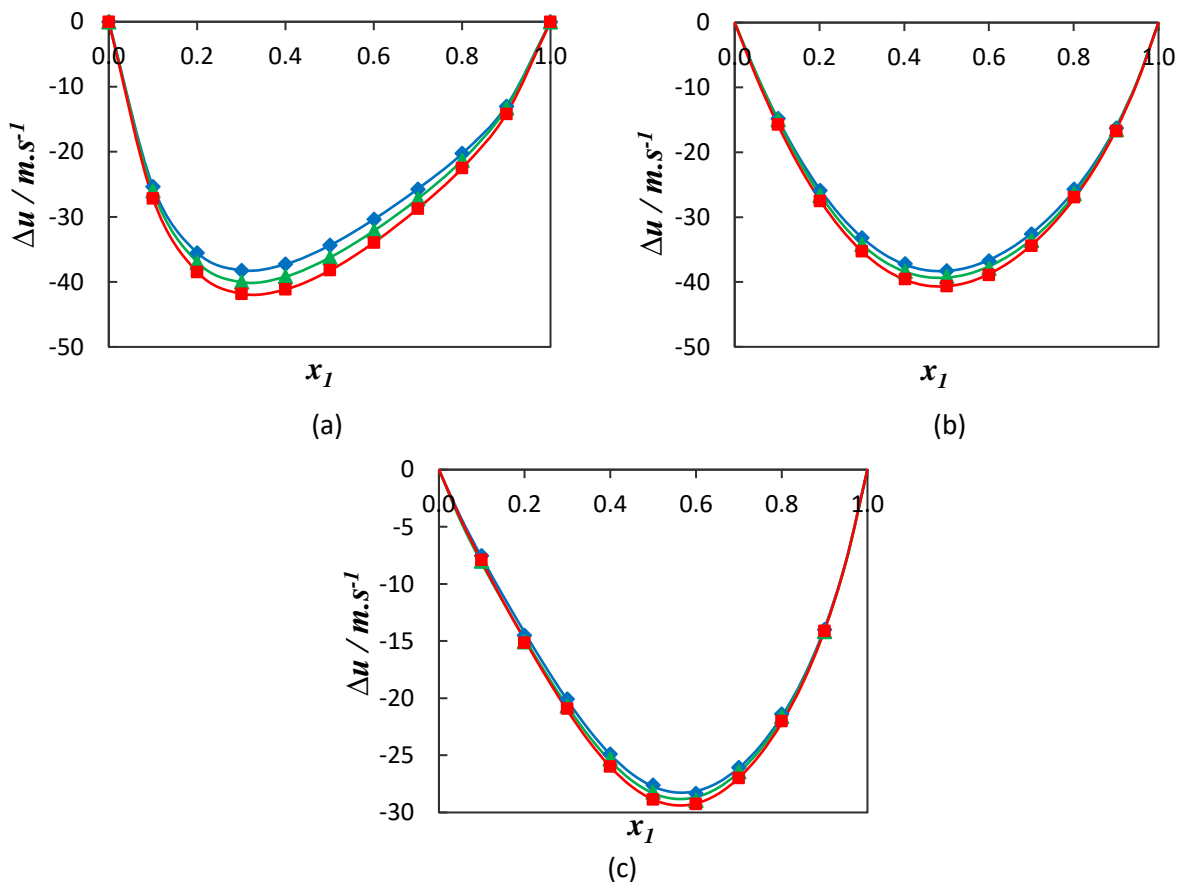
$$\Delta u = u - \sum_{i=1}^2 x_i u_i \quad (2.15)$$

Où

u et u_i sont la vitesse du son du mélange et du composé i respectivement. x_i représente la fraction molaire du composé i .

- Systèmes 1-hexène + méthanol, 1-propanol, ou 1-pentanol

Les déviations de la vitesse du son Δu des systèmes binaires sont négatives sur toute la gamme de composition et diminuent avec la température comme montre les **Figures 2.18 (a-c)**. Les valeurs négatives de Δu suggèrent souvent des forces de dispersion résultant d'interactions faibles.



Figures 2.18 (a-c). La déviation de la vitesse du son (Δu) du système binaire : (a) {1-hexène (1) + méthanol (2)}, (b) {1-hexène (1) + 1-propanol (2)} et (c) {1-hexène (1) + 1-pentanol (2)} en fonction de la fraction molaire en 1-hexène à 293.15K (◆), 298.15 K (▲), 303.15 K (■). (—) Les valeurs calculées en utilisant l'équation de Redlich-Kister.

- **Déviaton en indice de réfraction Δn_D**

La déviaton en indice de réfraction, Δn_D , a été calculée en utilisant l'équation suivante :

$$\Delta n_D = n_D - \sum_{i=1}^2 x_i n_{Di} \quad (2.16)$$

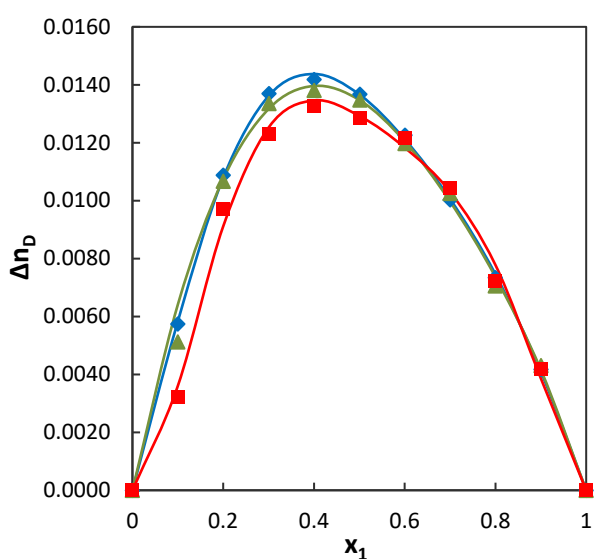
Où n_D est l'indice de réfraction du mélange, x_i , n_{Di} désignent respectivement la fraction molaire et l'indices de réfraction du composé i pur.

- **Système 1-hexène + méthanol**

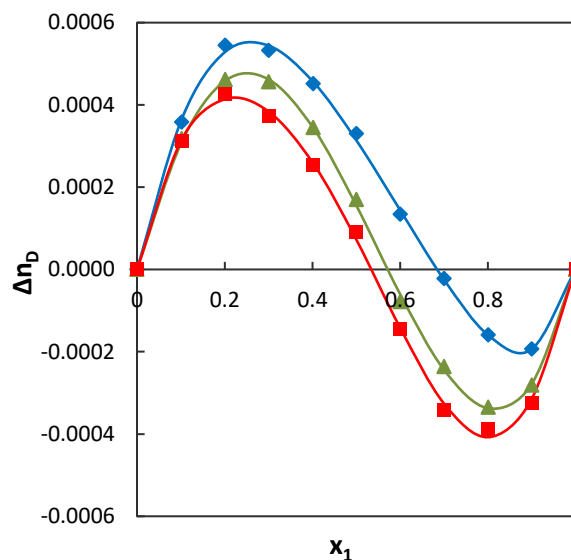
Il est observé à partir de la **Figure 2.19 (a)**, que les valeurs de la déviaton en indice de réfraction sont positives dans l'intervalle de x_1 [0 – 1] et à (293.15, 298.15 et 303.15) K pour le système binaire 1-hexène (1) + méthanol (2).

- **Systèmes 1-hexène + 1-propanol, ou 1-pentanol**

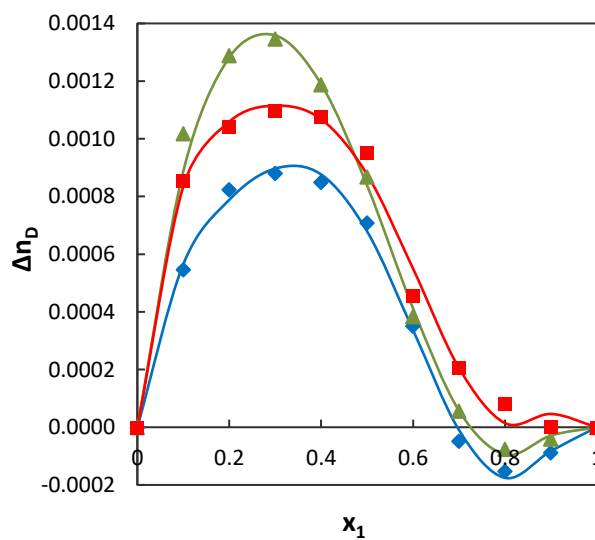
Il est observé à partir des courbes des **Figures 2.19 (b et c)** que les valeurs de la déviaton en indice de réfraction pour les systèmes binaires (1-hexène (1) + 1-propanol (2)) et (1-hexène (1) + 1-pentanol (2)) sont positives et négatives (sinusoïdale). Les mélanges riches en alcool présentent une déviaton positive. En revanche, pour les mélanges riches en 1-hexène les valeurs de Δn_D sont négatives.



(a)



(b)



(c)

Figures 2.19 (a-c). La déviation en l'indice de réfraction Δn_D du système binaire : (a) {1-hexène (1) + méthanol (2)}, (b) {1-hexène (1) + 1-propanol (2)} et (c) {1-hexène (1) + 1-pentanol (2)} en fonction de la fraction molaire en 1-hexène à 293.15K (◆), 298.15 K (▲), 303.15 K (■). (—) Les valeurs calculées en utilisant l'équation de Redlich-Kister.

Chapitre 2. Mesures expérimentales des Propriétés volumétriques, acoustiques et optiques des mélanges binaires étudiés

Tableau 2.3. Les valeurs expérimentales de densités ρ , de vitesse du son u , et de l'indice de réfraction pour les trois systèmes binaires 1-hexène (1) + méthanol (2), 1-propanol (2), ou 1-pentanol (2) aux différentes températures (293.15, 298.15, 303.15) K et à la pression $P = 0.1$ MPa.

x_1	$\rho / (\text{g.cm}^3)$	$u / (\text{m.s}^{-1})$	n_D
<i>1-hexène (1) + méthanol (2)</i>			
T=293.15 K			
0.0000	0.79151	1118.94	1.32893
0.1000	0.759332	1090.59	1.34059
0.2001	0.737332	1077.38	1.35165
0.3011	0.721431	1071.61	1.36044
0.4003	0.709624	1069.59	1.3668
0.5010	0.700129	1069.44	1.37224
0.6008	0.692610	1070.41	1.37673
0.6997	0.686513	1072.08	1.38036
0.7997	0.681492	1074.54	1.38359
0.9003	0.677281	1078.77	1.38637
1.0000	0.674126	1088.73	1.38809
T=298.15 K			
0.0000	0.786802	1 102.55	1.327000
0.1000	0.754572	1 072.93	1.337950
0.2001	0.732537	1 058.33	1.34934
0.3011	0.716612	1 051.63	1.357910
0.4003	0.704791	1 048.89	1.36415
0.5010	0.695292	1 048.17	1.369680
0.6008	0.687776	1 048.69	1.374000
0.6997	0.681688	1 050.03	1.37805
0.7997	0.676682	1052.29	1.38068
0.9003	0.672494	1 056.72	1.38379
1.0000	0.669411	1 066.37	1.3853
T=303.15 K			
0.0000	0.782071	1086.14	1.32469
0.1000	0.749778	1054.77	1.33369
0.2001	0.727698	1039.23	1.34598
0.3011	0.711753	1031.60	1.35438
0.4003	0.699914	1028.10	1.36108
0.5010	0.690403	1026.81	1.3665
0.6008	0.682891	1026.84	1.37156
0.6997	0.676810	1027.89	1.37558
0.7997	0.671821	1029.93	1.37814
0.9003	0.667655	1033.99	1.38093
1.0000	0.664662	1043.96	1.38248

Chapitre 2. Mesures expérimentales des Propriétés volumétriques, acoustiques et optiques des mélanges binaires étudiés

1-hexène (1) +1-propanol (2)

T=293.15 K

0.0000	0.804449	1224.51	1.38513
0.1020	0.784274	1195.88	1.38579
0.2012	0.766485	1171.32	1.38627
0.3000	0.750553	1150.61	1.38655
0.4016	0.735873	1132.79	1.38677
0.5000	0.722912	1118.38	1.38694
0.6000	0.710974	1106.29	1.38704
0.7000	0.700066	1096.85	1.38718
0.8005	0.690439	1090.12	1.38734
0.8998	0.681796	1086.08	1.3876
1.0000	0.674126	1088.73	1.38809

T=298.15 K

0.0000	0.800433	1 207.51	1.383120
0.1020	0.780121	1 178.15	1.383660
0.2012	0.762203	1 152.45	1.38402
0.3000	0.746158	1 130.95	1.384230
0.4016	0.731376	1 112.48	1.38434
0.5000	0.718334	1 097.81	1.384380
0.6000	0.706323	1 084.97	1.384350
0.7000	0.695366	1 075.15	1.38441
0.8005	0.685705	1068.17	1.38453
0.8998	0.677042	1 064.01	1.3848
1.0000	0.669411	1 066.37	1.3853

T=303.15 K

0.0000	0.796386	1190.43	1.38112
0.1020	0.775926	1159.76	1.38157
0.2012	0.757879	1133.47	1.38182
0.3000	0.741717	1111.22	1.3819
0.4016	0.726829	1092.06	1.38192
0.5000	0.713695	1076.59	1.38189
0.6000	0.701619	1063.65	1.38179
0.7000	0.690615	1053.49	1.38173
0.8005	0.680917	1046.26	1.38182
0.8998	0.672240	1041.93	1.38202
1.0000	0.664662	1043.96	1.38248

Chapitre 2. Mesures expérimentales des Propriétés volumétriques, acoustiques et optiques des mélanges binaires étudiés

1-hexène (1) +1-pentanol (2)

T=293.15 K

0.0000	0.814631	1291.87	1.40985
0.1000	0.799683	1264.02	1.40822
0.2001	0.784756	1236.73	1.40632
0.3001	0.769910	1210.83	1.4042
0.3998	0.755331	1185.75	1.402
0.4999	0.740846	1162.71	1.39968
0.5998	0.726773	1141.68	1.39715
0.7000	0.712943	1123.59	1.39457
0.8000	0.699607	1107.94	1.39229
0.8999	0.686669	1095.07	1.39018
1.0000	0.674126	1088.73	1.38809

T=298.15 K

0.0000	0.810975	1 275.50	1.407880
0.1000	0.795895	1 246.59	1.406640
0.2001	0.780840	1 218.60	1.40465
0.3001	0.765868	1 192.04	1.402450
0.3998	0.751167	1 166.56	1.40004
0.4999	0.736560	1 142.73	1.397460
0.5998	0.722385	1 121.10	1.394720
0.7000	0.708462	1 102.68	1.39213
0.8000	0.695029	1086.58	1.38974
0.8999	0.681999	1 073.14	1.38752
1.0000	0.669411	1 066.37	1.3853

T=303.15 K

0.0000	0.807283	1258.43	1.40593
0.1000	0.792080	1229.10	1.40444
0.2001	0.776891	1200.36	1.40228
0.3001	0.761786	1173.16	1.39999
0.3998	0.746957	1146.69	1.39763
0.4999	0.732237	1122.34	1.39516
0.5998	0.717959	1100.53	1.39232
0.7000	0.703929	1081.30	1.38972
0.8000	0.690403	1064.83	1.38725
0.8999	0.677290	1051.30	1.38483
1.0000	0.664662	1043.96	1.38248

Chapitre 2. Mesures expérimentales des Propriétés volumétriques, acoustiques et optiques des mélanges binaires étudiés

Tableau 2.4. Les paramètres dérivés : la longueur libre intermoléculaire (L_f), l'association relative (R_A), la force de relaxation (r), la fonction du son molaire de Rao (R), et l'impédance acoustique (Z) pour les systèmes binaires (1-hexène (1) + méthanol (2) ou 1-propanol (2) ou 1-pentanol (2)) à (293.15, 298.15, 303.15) K

x_1	$\kappa_s/(\text{TPa}^{-1})$	$L_f/(\text{10}^{-12} \text{ m})$	$Z/(\text{10}^5 \text{ kg m}^{-2} \text{ s}^{-1})$	R_A	r	$R(\text{m}^{(10/3)} \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{(-1/3)})$
<i>1-hexène (1) + méthanol (2)</i>						
T=293.15 K						
0.0000	1 009.09	64.741	8.857	1.0000	0.5109	0.4202
0.1000	1 107.25	67.817	8.281	0.9676	0.5354	0.5050
0.2001	1 168.42	69.665	7.944	0.9434	0.5466	0.5904
0.3011	1 207.07	70.808	7.731	0.9247	0.5514	0.6770
0.4003	1 231.79	71.530	7.590	0.9101	0.5531	0.7624
0.5010	1 248.85	72.023	7.487	0.8980	0.5532	0.8494
0.6008	1 260.12	72.347	7.414	0.8881	0.5524	0.9357
0.6997	1 267.35	72.555	7.360	0.8798	0.5510	1.0213
0.7997	1 270.85	72.655	7.323	0.8727	0.5490	1.1080
0.9003	1 268.74	72.595	7.306	0.8662	0.5454	1.1957
1.0000	1 251.46	72.099	7.339	0.8595	0.5370	1.2843
T=298.15 K						
0.0000	1045.534	67.113	8.675	1.0000	0.5251	0.4207
0.1000	1151.215	70.423	8.096	0.9678	0.5503	0.5054
0.2001	1218.788	72.460	7.753	0.9438	0.5625	0.5908
0.3011	1261.798	73.728	7.536	0.9253	0.5680	0.6773
0.4003	1289.673	74.538	7.392	0.9108	0.5702	0.7627
0.5010	1309.089	75.097	7.288	0.8987	0.5708	0.8496
0.6008	1322.083	75.468	7.213	0.8889	0.5704	0.9358
0.6997	1330.488	75.708	7.158	0.8806	0.5693	1.0215
0.7997	1334.580	75.824	7.121	0.8735	0.5675	1.1081
0.9003	1331.655	75.741	7.106	0.8669	0.5638	1.1960
1.0000	1313.685	75.228	7.138	0.8603	0.5558	1.2844
T=303.15 K						
0.0000	1083.882	69.567	8.494	1.0000	0.5392	0.4211
0.1000	1198.814	73.162	7.908	0.9681	0.5654	0.5057
0.2001	1272.405	75.375	7.562	0.9443	0.5781	0.5911
0.3011	1320.225	76.778	7.342	0.9259	0.5843	0.6776
0.4003	1351.713	77.688	7.196	0.9115	0.5871	0.7629
0.5010	1373.780	78.320	7.089	0.8995	0.5881	0.8497
0.6008	1388.811	78.747	7.012	0.8897	0.5881	0.9359
0.6997	1398.427	79.019	6.957	0.8815	0.5873	1.0216
0.7997	1403.237	79.155	6.919	0.8744	0.5856	1.1081
0.9003	1400.926	79.090	6.903	0.8678	0.5824	1.1959
1.0000	1380.484	78.511	6.939	0.8612	0.5743	1.2845

1-hexène (1) + 1-propanol (2)

T=293.15 K

Chapitre 2. Mesures expérimentales des Propriétés volumétriques, acoustiques et optiques des mélanges binaires étudiés

0.0000	829.04	58.682	9.851	1.0000	0.4143	0.7993
0.1020	891.57	60.855	9.379	0.9826	0.4414	0.8466
0.2012	950.92	62.848	8.978	0.9670	0.4641	0.8931
0.3000	1 006.38	64.654	8.636	0.9526	0.4829	0.9398
0.4016	1 059.01	66.323	8.336	0.9388	0.4987	0.9883
0.5000	1 105.95	67.777	8.085	0.9262	0.5114	1.0357
0.6000	1 149.23	69.091	7.865	0.9142	0.5219	1.0843
0.7000	1 187.32	70.226	7.679	0.9028	0.5300	1.1335
0.8005	1 218.78	71.151	7.527	0.8922	0.5358	1.1830
0.8998	1 243.43	71.867	7.405	0.8821	0.5392	1.2325
1.0000	1 251.46	72.099	7.339	0.8715	0.5370	1.2843

T=298.15 K

0.0000	856.828	60.755	9.665	1.0000	0.4304	0.7996
0.1020	923.500	63.075	9.191	0.9827	0.4578	0.8469
0.2012	987.837	65.235	8.784	0.9672	0.4812	0.8933
0.3000	1047.810	67.186	8.439	0.9528	0.5004	0.9400
0.4016	1104.778	68.988	8.136	0.9390	0.5166	0.9883
0.5000	1155.099	70.542	7.886	0.9264	0.5292	1.0358
0.6000	1202.711	71.981	7.663	0.9145	0.5402	1.0844
0.7000	1244.080	73.208	7.476	0.9030	0.5485	1.1336
0.8005	1278.150	74.204	7.324	0.8924	0.5543	1.1831
0.8998	1304.647	74.969	7.204	0.8823	0.5578	1.2327
1.0000	1313.685	75.228	7.138	0.8717	0.5558	1.2844

T=303.15 K

0.0000	886.071	62.899	9.480	1.0000	0.4464	0.7998
0.1020	958.172	65.408	8.999	0.9828	0.4746	0.8470
0.2012	1027.023	67.718	8.590	0.9673	0.4981	0.8934
0.3000	1091.847	69.822	8.242	0.9530	0.5177	0.9401
0.4016	1153.652	71.771	7.937	0.9393	0.5341	0.9884
0.5000	1208.890	73.469	7.684	0.9267	0.5472	1.0358
0.6000	1259.799	75.000	7.463	0.9147	0.5581	1.0844
0.7000	1304.677	76.324	7.276	0.9032	0.5665	1.1336
0.8005	1341.611	77.397	7.124	0.8926	0.5724	1.1832
0.8998	1370.246	78.219	7.004	0.8824	0.5759	1.2328
1.0000	1380.484	78.511	6.939	0.8719	0.5743	1.2845

Chapitre 2. Mesures expérimentales des Propriétés volumétriques, acoustiques et optiques des mélanges binaires étudiés

1-hexène (1) +1-pentanol (2)

T=293.15 K

0.0000	735.53	55.274	10.524	1.0000	0.3481	1.1785
0.1000	782.66	57.017	10.108	0.9888	0.3759	1.1865
0.2001	833.14	58.827	9.705	0.9774	0.4025	1.1948
0.3001	885.92	60.662	9.322	0.9657	0.4273	1.2038
0.3998	941.62	62.540	8.956	0.9541	0.4508	1.2129
0.4999	998.46	64.399	8.614	0.9419	0.4719	1.2229
0.5998	1 055.63	66.218	8.297	0.9297	0.4908	1.2333
0.7000	1 111.04	67.933	8.011	0.9168	0.5069	1.2447
0.8000	1 164.43	69.546	7.751	0.9039	0.5205	1.2566
0.8999	1 214.42	71.023	7.520	0.8907	0.5316	1.2693
1.0000	1 251.46	72.099	7.339	0.8761	0.5370	1.2843

T=298.15 K

0.0000	757.934	57.141	10.344	1.0000	0.3645	1.1788
0.1000	808.532	59.018	9.922	0.9889	0.3930	1.1866
0.2001	862.414	60.953	9.515	0.9776	0.4199	1.1949
0.3001	918.892	62.917	9.129	0.9659	0.4449	1.2038
0.3998	978.249	64.917	8.763	0.9542	0.4684	1.2130
0.4999	1039.692	66.925	8.417	0.9421	0.4899	1.2229
0.5998	1101.394	68.882	8.099	0.9299	0.5090	1.2332
0.7000	1160.872	70.718	7.812	0.9170	0.5250	1.2447
0.8000	1218.635	72.456	7.552	0.9041	0.5388	1.2567
0.8999	1273.220	74.061	7.319	0.8908	0.5501	1.2694
1.0000	1313.685	75.228	7.138	0.8762	0.5558	1.2844

T=303.15 K

0.0000	782.197	59.098	10.159	1.0000	0.3814	1.1789
0.1000	835.712	61.086	9.735	0.9889	0.4099	1.1867
0.2001	893.340	63.157	9.325	0.9776	0.4372	1.1949
0.3001	953.789	65.259	8.937	0.9660	0.4624	1.2038
0.3998	1018.151	67.425	8.565	0.9544	0.4864	1.2129
0.4999	1084.175	69.576	8.218	0.9423	0.5080	1.2228
0.5998	1149.997	71.657	7.901	0.9300	0.5269	1.2332
0.7000	1215.007	73.655	7.612	0.9172	0.5433	1.2446
0.8000	1277.429	75.523	7.352	0.9042	0.5571	1.2566
0.8999	1335.894	77.232	7.120	0.8908	0.5683	1.2695
1.0000	1380.484	78.511	6.939	0.8762	0.5743	1.2845

Chapitre 2. Mesures expérimentales des Propriétés volumétriques, acoustiques et optiques des mélanges binaires étudiés

Tableau 2.5. Le volume molaire d'excès V_m^E , la déviation en indice de réfraction Δn_D et la déviation en compression isentropique $\Delta \kappa_s$, pour les systèmes binaires 1-hexène (1) + méthanol (2), 1-propanol (2), ou 1-pentanol (2) aux différentes températures (293.15, 298.15, 303.15) K et à la pression P = 0.1 MPa.

x_1	293.15 K			298.15 K			303.15 K		
	$V_m^E /$ $cm^3 mol^{-1}$	$\Delta \kappa_s /$ TPa^{-1}	Δn_D	$V_m^E /$ $cm^3 mol^{-1}$	$\Delta \kappa_s /$ TPa^{-1}	Δn_D	$V_m^E /$ $cm^3 mol^{-1}$	$\Delta \kappa_s /$ TPa^{-1}	Δn_D
<i>1-hexène (1) + méthanol (2)</i>									
0.0000	0.000	0.00	0.0000	0.000	0.00	0.0000	0.000	0.00	0.0000
0.1000	0.143	73.93	0.0057	0.147	78.88	0.0051	0.151	85.28	0.0032
0.2001	0.238	110.84	0.0109	0.246	119.61	0.0107	0.254	129.19	0.0097
0.3011	0.284	125.01	0.0137	0.295	135.54	0.0134	0.307	147.05	0.0123
0.4003	0.301	125.68	0.0142	0.315	136.80	0.0138	0.331	149.10	0.0133
0.5010	0.314	118.33	0.0137	0.330	129.21	0.0135	0.349	141.30	0.0129
0.6008	0.306	105.41	0.0123	0.324	115.45	0.0120	0.345	126.74	0.0122
0.6997	0.283	88.67	0.0100	0.301	97.33	0.0103	0.323	107.01	0.0105
0.7997	0.230	67.94	0.0074	0.247	74.61	0.0071	0.268	82.17	0.0072
0.9003	0.157	41.45	0.0042	0.171	44.71	0.0043	0.189	50.02	0.0042
1.0000	0.000	0.00	0.0000	0.000	0.00	0.0000	0.000	0.00	0.0000
<i>1-hexène (1) +1-propanol (2)</i>									
0.0000	0.000	0.00	0.0000	0.000	0.00	0.0000	0.000	0.00	0.0000
0.1020	-0.062	19.46	0.0004	-0.064	20.09	0.0003	-0.064	21.68	0.0003
0.2012	-0.071	36.89	0.0005	-0.071	39.09	0.0005	-0.070	41.48	0.0004
0.3000	-0.058	50.62	0.0005	-0.056	53.93	0.0005	-0.052	57.46	0.0004
0.4016	-0.041	60.32	0.0005	-0.035	64.48	0.0003	-0.027	69.03	0.0003
0.5000	0.001	65.71	0.0003	0.010	69.86	0.0002	0.023	75.63	0.0001
0.6000	0.046	66.73	0.0001	0.059	71.76	-0.0001	0.075	77.07	-0.0001
0.7000	0.103	62.57	0.0000	0.118	67.44	-0.0002	0.136	72.50	-0.0003
0.8005	0.100	51.58	-0.0002	0.115	55.60	-0.0003	0.133	59.75	-0.0004
0.8998	0.082	34.28	-0.0002	0.096	36.72	-0.0003	0.112	39.28	-0.0003
1.0000	0.000	0.00	0.0000	0.000	0.00	0.0000	0.000	0.00	0.0000

Chapitre 2. Mesures expérimentales des Propriétés volumétriques, acoustiques et optiques des mélanges binaires étudiés

1-hexène (1) +1-pentanol (2)

0.0000	0.000	0.00	0.0000	0.000	0.00	0.0000	0.000	0.00	0.0000
0.1000	-0.139	-4.44	0.0005	-0.143	-4.95	0.0010	-0.150	-6.29	0.0009
0.2001	-0.225	-5.61	0.0008	-0.233	-6.70	0.0013	-0.242	-8.54	0.0010
0.3001	-0.261	-4.43	0.0009	-0.271	-5.81	0.0013	-0.280	-7.94	0.0011
0.3998	-0.268	-0.20	0.0008	-0.277	-1.90	0.0012	-0.285	-3.26	0.0011
0.4999	-0.230	5.02	0.0007	-0.237	3.95	0.0009	-0.244	2.91	0.0010
0.5998	-0.188	10.67	0.0004	-0.194	10.15	0.0004	-0.200	8.98	0.0005
0.7000	-0.128	14.36	0.0000	-0.132	13.92	0.0001	-0.134	14.02	0.0002
0.8000	-0.080	16.14	-0.0002	-0.081	16.09	-0.0001	-0.080	16.59	0.0001
0.8999	-0.033	14.61	-0.0001	-0.030	15.18	0.0000	-0.026	15.31	0.0000
1.0000	0.000	0.00	0.0000	0.000	0.00	0.0000	0.000	0.00	0.0000

Chapitre 2. Mesures expérimentales des Propriétés volumétriques, acoustiques et optiques des mélanges binaires étudiés

Tableau 2.6. La déviation de la longueur libre intermoléculaire (ΔL_f), déviation de l'impédance acoustique (ΔZ) et la déviation de vitesse du son (Δu) pour les systèmes binaires (1-hexène (1) + méthanol (2) ou 1-propanol (2) ou 1-pentanol (2)) à (293.15, 298.15, 303.15) K.

x_1	293.15 K			298.15 K			303.15 K		
	$\Delta L_f /$ ($10^{-12} m$)	$\Delta Z /$ (10^5 kg $m^{-2}s^{-1}$)	Δu (ms^{-1})	$\Delta L_f /$ ($10^{-12} m$)	$\Delta Z /$ (10^5 kg $m^{-2}s^{-1}$)	Δu (ms^{-1})	$\Delta L_f /$ ($10^{-12} m$)	$\Delta Z /$ (10^5 kg $m^{-2}s^{-1}$)	Δu (ms^{-1})
1-hexène (1) + méthanol (2)									
0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.1000	2.3403	-0.4237	-25.3300	2.4989	-0.4253	-26.0032	2.7014	-0.4304	-27.1534
0.2001	3.4521	-0.6091	-35.5163	3.7240	-0.6148	-36.9819	4.0184	-0.6207	-38.4716
0.3011	3.8518	-0.6689	-38.2351	4.1718	-0.6762	-40.0278	4.5184	-0.6836	-41.8415
0.4003	3.8432	-0.6592	-37.2573	4.1763	-0.6674	-39.1775	4.5411	-0.6759	-41.1558
0.5010	3.5958	-0.6090	-34.3651	3.9181	-0.6173	-36.2542	4.2720	-0.6259	-38.1983
0.6008	3.1859	-0.5313	-30.3805	3.4800	-0.5392	-32.1238	3.8069	-0.5476	-33.9592
0.6997	2.6654	-0.4350	-25.7217	2.9166	-0.4419	-27.2045	3.1942	-0.4491	-28.7362
0.7997	2.0300	-0.3204	-20.2417	2.2216	-0.3255	-21.3276	2.4359	-0.3311	-22.4796
0.9003	1.2297	-0.1844	-12.9730	1.3222	-0.1853	-13.2584	1.4711	-0.1905	-14.1768
1.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
1-hexène (1) +1-propanol (2)									
0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.1020	0.8047	-0.2155	-14.7842	0.8436	-0.2166	-14.9677	0.9172	-0.2224	-15.7341
0.2012	1.4664	-0.3673	-25.8719	1.5677	-0.3729	-26.6635	1.6774	-0.3787	-27.4911
0.3000	1.9477	-0.4613	-33.1687	2.0890	-0.4686	-34.2208	2.2397	-0.4759	-35.2719
0.4016	2.2534	-0.5062	-37.1925	2.4206	-0.5141	-38.3500	2.6025	-0.5223	-39.5495
0.5000	2.3877	-0.5102	-38.2457	2.5505	-0.5160	-39.1359	2.7649	-0.5261	-40.6111
0.6000	2.3587	-0.4784	-36.7490	2.5414	-0.4857	-37.8529	2.7338	-0.4926	-38.8947
0.7000	2.1524	-0.4140	-32.6101	2.3215	-0.4202	-33.5580	2.4968	-0.4257	-34.4068
0.8005	1.7287	-0.3137	-25.6959	1.8628	-0.3180	-26.3552	2.0009	-0.3217	-26.9184
0.8998	1.1121	-0.1861	-16.2504	1.1905	-0.1877	-16.4973	1.2720	-0.1891	-16.7012
1.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000

Chapitre 2. Mesures expérimentales des Propriétés volumétriques, acoustiques et optiques des mélanges binaires étudiés

1-hexène (1) +1-pentanol (2)

0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.1000	0.0616	-0.0975	-7.5452	0.0686	-0.1020	-8.0065	0.0478	-0.1018	-7.8927
0.2001	0.1873	-0.1816	-14.5018	0.1930	-0.1874	-15.0635	0.1757	-0.1894	-15.1652
0.3001	0.3393	-0.2461	-20.0832	0.3481	-0.2526	-20.7058	0.3358	-0.2558	-20.9134
0.3998	0.5387	-0.2943	-24.8965	0.5440	-0.2994	-25.3214	0.5649	-0.3062	-25.9863
0.4999	0.7155	-0.3182	-27.6160	0.7424	-0.3247	-28.2317	0.7748	-0.3312	-28.8824
0.5998	0.8532	-0.3166	-28.3565	0.8931	-0.3228	-28.9740	0.9168	-0.3264	-29.2714
0.7000	0.8823	-0.2843	-26.0842	0.9156	-0.2880	-26.4313	0.9684	-0.2933	-27.0033
0.8000	0.8125	-0.2251	-21.4150	0.8445	-0.2274	-21.6129	0.8950	-0.2312	-22.0209
0.8999	0.6094	-0.1387	-13.9986	0.6432	-0.1405	-14.1683	0.6653	-0.1409	-14.1329
1.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000

Chapitre 2. Mesures expérimentales des Propriétés volumétriques, acoustiques et optiques des mélanges binaires étudiés

Tableau 2.7. Valeurs des coefficients A_i , et les déviations standard σ , obtenues par l'équation de Redlich-Kister, pour les systèmes binaires 1-hexène (1) + méthanol (2), 1-propanol (2), ou 1-pentanol (2) aux différentes températures (293.15, 298.15, 303.15) K et à la pression $P = 0.1$ MPa.

	T (K)	A_1	A_2	A_3	A_4	A_5	Σ
<i>1-hexène (1) + méthanol (2)</i>							
$V_m^E / (\text{cm}^3 \text{ mol}^{-1})$	293.15	1.244	-0.035	0.639	0.130	-	0.005
	298.15	1.308	-0.001	0.682	0.187	-	0.006
	303.15	1.382	0.043	0.742	0.256	-	0.006
$\Delta\kappa_s / (\text{TPa}^{-1})$	293.15	473.620	-213.023	201.813	-22.544	94.537	0.257
	298.15	516.894	-223.911	223.758	-23.381	67.167	0.251
	303.15	563.630	-240.671	270.791	5.966	52.181	0.839
$\Delta L_t / (10^{-12} \text{ m})$	293.15	14.395	-6.844	6.404	-1.420	3.306	0.006
	298.15	15.676	-7.236	7.091	-1.514	2.545	0.006
	303.15	17.107	-7.657	7.182	-1.460	3.646	0.007
$\Delta Z / (10^5 \text{ kg m}^{-2} \text{ s}^{-1})$	293.15	-2.439	1.304	-1.070	0.556	-0.627	0.0003
	298.15	-2.471	1.307	-1.103	0.559	-0.532	0.0002
	303.15	-2.507	1.308	-1.073	0.557	-0.630	0.0003
$\Delta u / (\text{m. s}^{-1})$	293.15	-137.649	70.818	-81.558	23.648	-56.211	0.036
	298.15	-145.098	72.385	-86.925	25.198	-43.214	0.029
	303.15	-153.076	74.036	-83.748	25.258	-56.216	0.037
Δn_D	293.15	0.055	-0.024	0.014	0.019	-0.021	0.0002
	298.15	0.0539	-0.0202	0.0073	0.0072	0.0004	0.0003
	303.15	0.052	-0.018	0.027	0.031	-0.068	0.0005
<i>1-hexène (1) +1-propanol (2)</i>							
$V_m^E / (\text{cm}^3 \text{ mol}^{-1})$	293.15	0.022	0.909	0.216	0.081	-	0.009
	298.15	0.057	0.976	0.252	0.129	-	0.009
	303.15	0.105	1.053	0.296	0.185	-	0.009
$\Delta\kappa_s / (\text{TPa}^{-1})$	293.15	262.463	58.613	44.024	68.787	-	0.552
	298.15	280.864	67.498	46.579	71.118	-	0.577
	303.15	302.017	77.166	46.106	67.875	-	0.550
$\Delta L_t / (10^{-12} \text{ m})$	293.15	9.566	0.876	0.880	1.905	0.983	0.015
	298.15	10.253	1.001	1.353	2.116	0.113	0.019

Chapitre 2. Mesures expérimentales des Propriétés volumétriques, acoustiques et optiques des mélanges binaires étudiés

	303.15	11.074	1.170	0.922	1.989	0.894	0.015
$\Delta Z / (10^5 \text{ kg m}^{-2} \text{ s}^{-1})$	293.15	-2.041	0.316	-0.253	-0.185	-	0.0018
	298.15	-2.071	0.327	-0.244	-0.203	-	0.0022
	303.15	-2.105	0.331	-0.240	-0.171	-	0.0016
$\Delta u / (\text{m. s}^{-1})$	293.15	-153.241	8.246	-16.718	-28.441	-16.137	0.213
	298.15	-157.324	9.281	-23.922	-30.340	-0.343	0.268
	303.15	-162.639	9.784	-17.186	-26.161	-10.884	0.180
Δn_D	293.15	0.00126	-0.00323	0.00001	-0.00096	-0.00083	0.000014
	298.15	0.00062	-0.00425	-0.00061	0.00030	-0.00020	0.000013
	303.15	0.00029	-0.00418	-0.00112	-0.00027	0.00100	0.000018
<i>1-hexène (1) +1-pentanol (2)</i>							
$V_m^E / (\text{cm}^3 \text{ mol}^{-1})$	293.15	-0.934	0.820	-0.034	-0.148	-	0.003
	298.15	-0.966	0.843	-0.015	-0.104	-	0.004
	303.15	-0.996	0.870	0.006	-0.037	-	0.004
$\Delta \kappa_s / (\text{TPa}^{-1})$	293.15	20.918	105.249	5.640	35.550	77.628	0.473
	298.15	16.530	112.339	2.435	33.986	93.864	0.646
	303.15	9.623	119.588	45.611	51.045	32.026	0.833
$\Delta L_t / (10^{-12} \text{ m})$	293.15	2.886	3.045	-0.181	0.983	2.330	0.014
	298.15	2.989	3.247	-0.307	0.893	2.823	0.019
	303.15	3.094	3.535	-0.262	0.989	2.549	0.013
$\Delta Z / (10^5 \text{ kg m}^{-2} \text{ s}^{-1})$	293.15	-1.275	-0.207	0.109	-0.099	-0.262	0.002
	298.15	-1.300	-0.201	0.123	-0.074	-0.308	0.002
	303.15	-1.323	-0.200	0.127	-0.092	-0.263	0.001
$\Delta u / (\text{m. s}^{-1})$	293.15	-110.911	-32.595	10.432	-15.831	-37.816	0.232
	298.15	-113.255	-32.268	12.108	-12.373	-43.187	0.288
	303.15	-115.472	-32.821	12.374	-13.758	-36.765	0.194
Δn_D	293.15	0.00271	-0.00570	-0.00501	0.00188	0.00775	0.00004
	298.15	0.00335	-0.00821	-0.00057	0.00288	0.00436	0.00002
	303.15	0.00350	-0.00540	-0.00375	-0.00013	0.00926	0.00007

Chapitre 3

Modélisation de la densité à l'aide des équations d'état PSRK et VTPR

Chapitre 3. Modélisation de la densité à l'aide des équations d'état PSRK et VTPR

La modélisation thermodynamique joue un rôle essentiel dans l'analyse et la prédiction des comportements des systèmes chimiques. Elle permet de comprendre et d'anticiper les propriétés physiques et les interactions moléculaires au sein des mélanges, ce qui est crucial pour de nombreuses applications.

Parmi les nombreux modèles thermodynamiques disponibles, les équations d'état PSRK (Predictive Soave-Redlich-Kwong) et VTPR (Volume-Translated Peng-Robinson) se distinguent par leur précision et leur polyvalence pour la modélisation des mélanges liquides et gaz-liquides. Ces modèles offrent des outils robustes pour prédire diverses propriétés thermodynamiques, telles que la densité des mélanges.

Le modèle PSRK est une extension de l'équation d'état classique de Soave-Redlich-Kwong, intégrant des paramètres empiriques ajustables pour améliorer la précision des prédictions, notamment pour les mélanges polaires ou légèrement polaires. Quant au modèle VTPR, il incorpore une translation du volume pour mieux représenter les propriétés des mélanges à haute pression.

3.1. PSRK (Predictive Soave-Redlich-Kwong):

L'équation d'état PSRK est une méthode avancée de modélisation thermodynamique développée par Soave et Redlich-Kwong en 1972. Dérivée de l'équation d'état classique de Redlich-Kwong, elle intègre des paramètres empiriques ajustables pour optimiser la prédiction du comportement des mélanges de liquides. Cette approche permet de prédire la densité d'un mélange liquide binaire en utilisant une combinaison linéaire des densités des composants purs, pondérées par leurs fractions molaires. Les paramètres ajustables sont déterminés à partir de données expérimentales, assurant ainsi une meilleure précision dans les prédictions thermodynamiques.

L'équation PSRK se présentant sous la forme suivante :

$$p = \frac{RT}{V - b} - \frac{a(T)}{V(V + b)} \quad (3.1)$$

Pour améliorer la prédiction de l'équation d'état et inclure les mélanges de composés polaires et non polaires, deux ajustements majeurs ont été apportés. Le premier ajustement

Chapitre 3. Modélisation de la densité à l'aide des équations d'état PSRK et VTPR

concerne la variation de température du paramètre a_i de composé pur, initialement formulé par Soave en fonction du facteur acentrique ω .

Les formulations originales des paramètres attractifs a_i et du covolume b_i pour les composés purs, telles que définies par Soave sont

$$a_i(T) = 0,42748 \frac{R^2 T_{c,i}^2}{P_{c,i}} \alpha(T_r) \quad (3.2)$$

$$\alpha(T) = (1 + c_1 (1 - T_r^{0,5}))^2 \quad (3.3)$$

$$c_1 = 0,48 + 1,574 \omega - 0,176 \omega^2 \quad (3.4)$$

$$b_i = 0,08664 \frac{R T_{c,i}}{P_{c,i}} \quad (3.5)$$

Cette dépendance de la température est efficace pour obtenir des données précises pour les composés non polaires. Toutefois, pour améliorer la prédiction des composés polaires, des ajustements supplémentaires sont nécessaires.

L'expression $\alpha(T_r)$ proposée par Mathias et Copeman en 1983 est donc intégrée dans l'équation PSRK :

$$\alpha(Tr) = [1 + c_1 (1 - Tr^{0,5}) + c_2 (1 - Tr^{0,5})^2 + c_3 (1 - Tr^{0,5})^3]^2 \quad Tr < 1 \quad (3.6)$$

$$\alpha(Tr) = [1 + c_1 (1 - Tr^{0,5})]^2 \quad Tr > 1 \quad (3.7)$$

Les paramètres ajustables c_1 , c_2 et c_3 sont disponibles dans la base de données Dortmund Data Bank (D.D.B) pour de nombreux composés purs.

La deuxième modification concerne la règle de mélange du paramètre a_i . En se basant sur les avancées dans les règles de mélange, une relation entre a_i et l'énergie d'excès de Gibbs g_0^E à pression nulle est établie. Pour estimer $a(T)$, la méthode de contribution de groupes UNIFAC [35] est utilisée, comme recommandé par Holderbaum et Gmehling (1991). Les règles de mélange PSRK sont ainsi formulées :

$$\frac{a}{bRT} = \sum_i x_i \frac{a_i}{b_i RT} + \frac{\frac{g_0^E}{RT} + \sum_i x_i \ln b/b_i}{0,64663} \quad (3.8)$$

Où:

$$b = \sum_{i=1}^n x_i b_i \quad (3.9)$$

On peut employer ces règles de mélange avec n'importe quelle équation d'état cubique.

La méthode PSRK s'avère efficace pour prédire les équilibres liquide-vapeur ainsi que les solubilités de gaz à différentes pressions, qu'elles soient basses ou élevées. Elle offre des prédictions fiables sur une large gamme de températures et de pressions.

3.2. VTPR (Volume-Translated Peng-Robinson)

L'équation d'état VTPR, introduite par Ahlers et Gmehling entre 2001 et 2004, est une avancée significative pour la modélisation des mélanges liquides, surmontant les limitations du modèle PSRK. Fondée sur l'équation de Peng-Robinson, VTPR intègre une correction de volume pour mieux appréhender les interactions moléculaires non idéales. Contrairement à Peng-Robinson, VTPR prédit précisément les densités des mélanges binaires liquides en utilisant une combinaison linéaire des volumes molaires des composants.

L'équation d'état VTPR combine l'équation de Peng-Robinson avec la méthode de contribution de groupes UNIFAC (Do) [36]. De plus, elle utilise des règles de mélange améliorées suggérées par Chen (2002) et intègre des paramètres d'interaction dépendant de la température, offrant ainsi une modélisation plus complète et précise du comportement des mélanges liquides.

L'équation modifiée VTPR est définie par :

$$p = \frac{RT}{v + c - b} - \frac{a(T)}{(v + c)(v + c + b) + b(v + c - b)} \quad (3.10)$$

Les paramètres attractifs a_i et les covolumes b_i des composés purs peuvent être calculés directement à partir des données critiques :

$$a_i(T) = 0,45724 \frac{R^2 T_{c,i}^2}{P_{c,i}} \alpha(T_r) \quad (3.11)$$

$$b_i = 0,0778 \frac{R T_{c,i}}{P_{c,i}} \quad (3.12)$$

La dépendance de la température du paramètre d'attraction a est prise en compte en utilisant la fonction $\alpha(T)$.

La fonction $\alpha(T)$ proposée par Twu en 1991 [37]. Cette fonction est définie comme suit pour une température réduite T_r :

$$\alpha(T_r) = T_r^{N(M-1)} \exp [L(1 - T_r^{NM})] \quad (3.13)$$

Les valeurs de N , M et L pour les composés purs sont déterminées par régression des données expérimentales de pression de vapeur. Pour $T_r > 1$, une forme généralisée de la fonction α a été suggérée par Twu :

$$\alpha(T_r) = \alpha^{(0)} + \omega(\alpha^{(1)} - \alpha^{(0)}) \quad (3.14)$$

Dans cette forme généralisée, la valeur de la fonction α est calculée en prenant en compte le facteur acentrique ω et les paramètres L , M et N généralisés, dérivés des solubilités des gaz azote et hydrogène dans les alcanes à longues chaînes.

La fonction alpha de Soave-Boston-Mathias (S.B.M) est une modification de la forme originale proposée par Soave :

$$\alpha(T_r) = [1 + k(1 - T_r)]^2 \quad (3.15)$$

Où le paramètre k est donné par :

$$k = 0.37464 + 1.54226\omega - 0.26992\omega^2 \quad (3.16)$$

Avec ω étant le facteur acentrique de la substance.

3.3. Résultats de la modélisation de la densité

La modélisation de la densité des mélanges liquides binaires, tels que le 1-hexène avec divers alcools, est cruciale pour comprendre leur comportement en fonction de la composition et des conditions thermodynamiques. Cette modélisation permet de prédire comment la densité du mélange évolue lorsque les fractions molaires des composants varient à différentes températures.

Dans cette étude, nous nous concentrerons sur deux méthodes thermodynamiques couramment utilisées pour modéliser la densité : PSRK (Predictive Soave-Redlich-Kwong) et VTPR (Volume-Translated Peng-Robinson). Nous utiliserons le logiciel "Simulis-Thermodynamics" pour la modélisation de la densité des mélanges liquides binaires et pour la régression des paramètres d'interaction binaires à partir de données expérimentales sur Excel.

La modélisation avec le logiciel Simulis-Thermodynamics se déroule en suivant trois étapes :

1. Ajustement des paramètres d'interactions par régression sur les données expérimentales liquide-liquide.
2. Optimisation des paramètres d'interactions binaires à chaque température.
3. Minimisation de l'erreur (SSQ), à chaque température, puis dans tout le domaine de température.

$$SSQ = \frac{100}{N} \sum \left(\frac{\rho_{exp} - \rho_{cal}}{\rho_{exp}} \right)^2 \quad (3.17)$$

Les valeurs de (SSQ) sont résumées dans les **tableaux 3.1, 3.2 , 3.3 et 3.4**

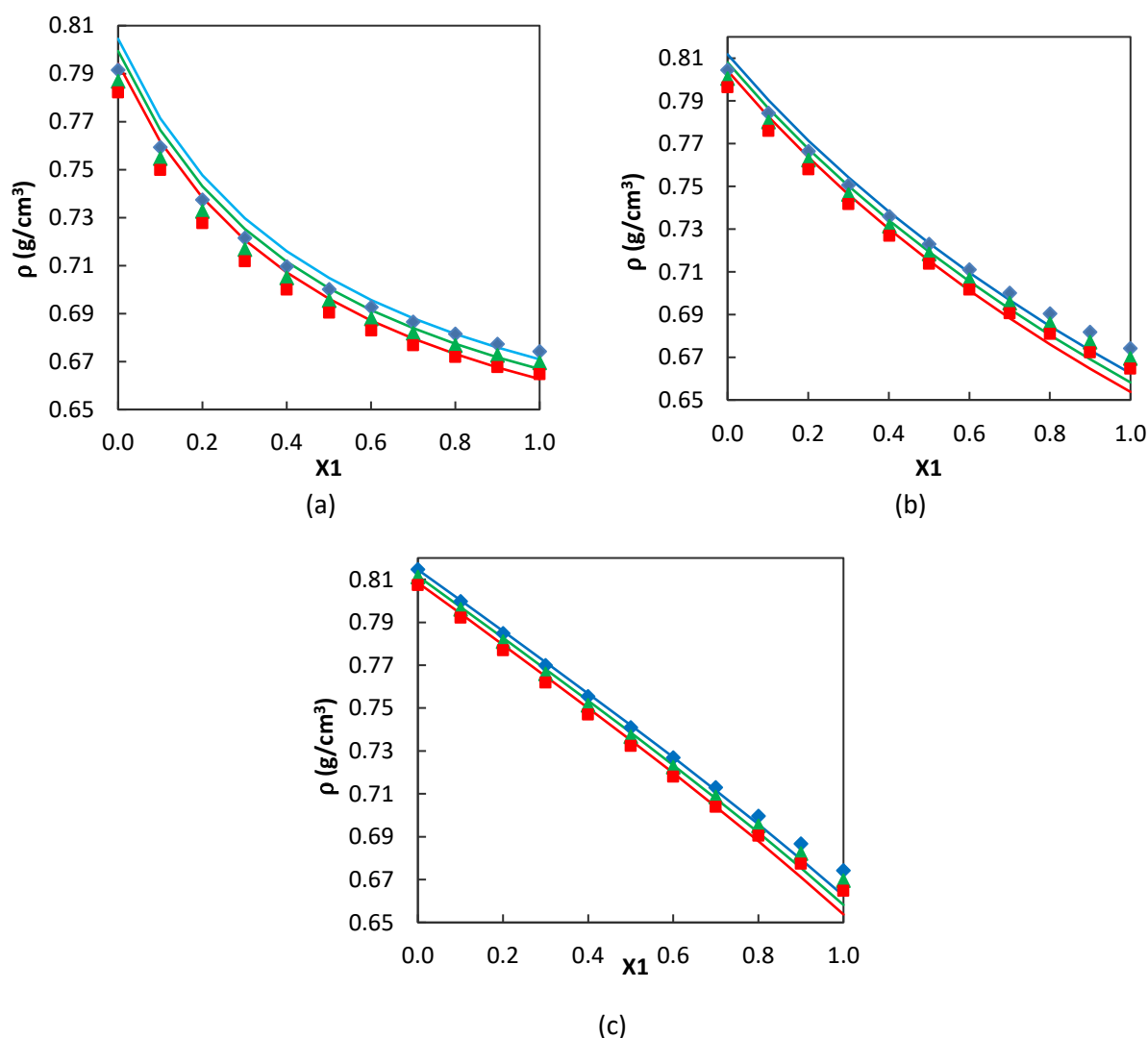
3.4. Modélisation à l'aide de l'équation VTPR (fonction α (TWU) et la règle de mélange (Stryjek-Vera)

Les résultats de la modélisation de la densité à l'aide de l'équation VTPR avec la fonction α (TWU) et la règle de mélange (Stryjek-Vera) pour les trois systèmes étudiés sont rapportés graphiquement sur les **Figures 3.1 (a-c)**.

Pour les systèmes binaire 1-hexène (1) + méthanol (2), 1-propanol (2) ou 1-pentanol (2), l'équation VTPR (fonction α (TWU), règle de mélange "Stryjek-Vera") est capable de représenter correctement nos valeurs expérimentales de la densité pour toutes les températures avec des paramètres d'interaction k_{ij} relativement faibles, nous constatons que l'écart entre les valeurs expérimentales et calculées (SSQ) varie entre 0.001 et 0.003, Le système (1-hexène + pentanol) présente un écart inférieure par rapport aux autre systèmes.

Tableau 3.1. Les paramètres d'interactions k_{ij0} et k_{ijT} , et les erreurs SSQ des trois systèmes étudiées avec l'équation de VTPR avec la fonction α (TWU) et règle de mélange (Stryjek-vera).

Système	k_{ij0}	k_{ijT}	SSQ
<i>1-hexène (1) + méthanol (2)</i>	-0.075	0.000	0.003
<i>1-hexène (1) + 1-propanol (2)</i>	-0.003	0.000	0.002
<i>1-hexène (1) + 1-pentanol (2)</i>	-0.014	0.000	0.001



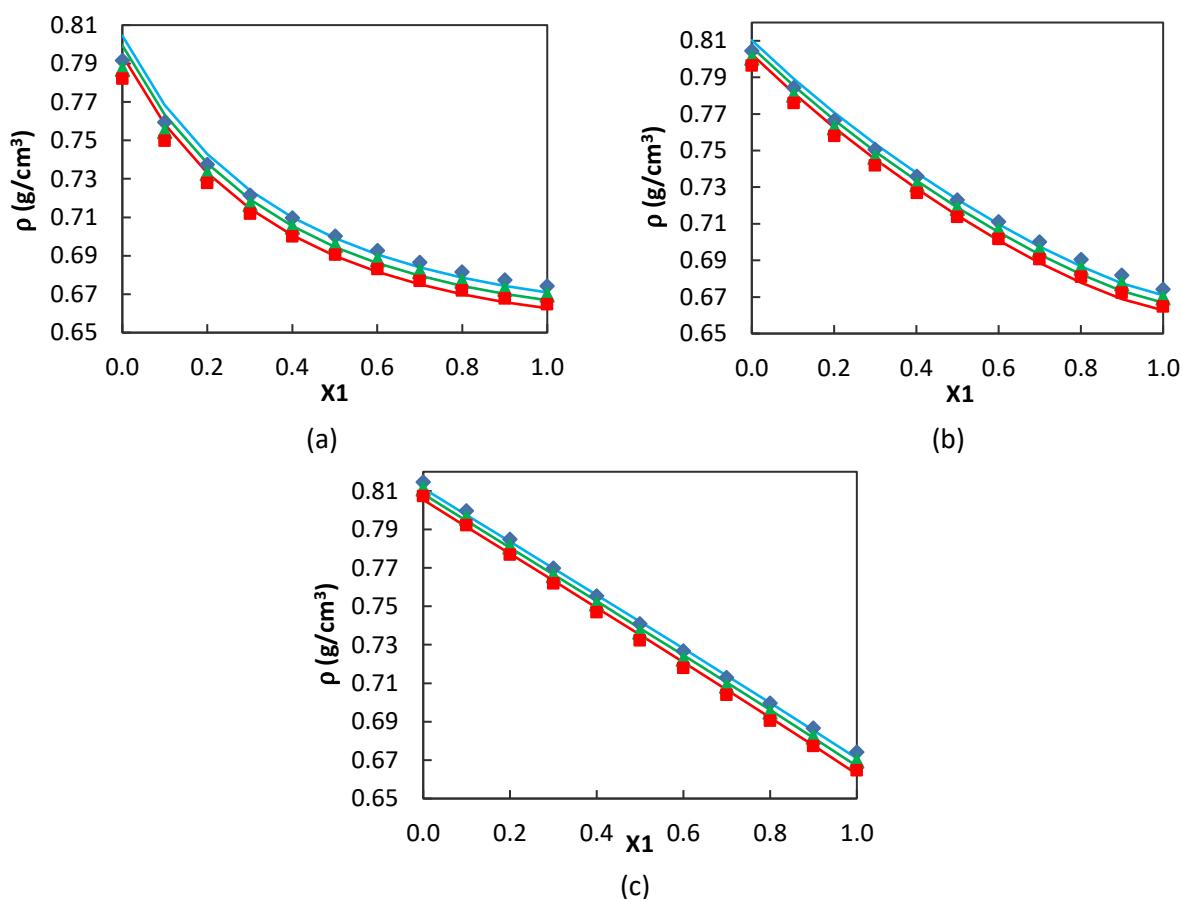
Figures 3.1 (a-c). La densité (ρ) des systèmes binaires : (a) {1-hexène (1) + méthanol (2)}, (b) {1-hexène (1) + 1-propanol (2)} et (c) {1-hexène (1) + 1-pentanol (2)} en fonction de la fraction molaire en 1-hexène à 293.15K (◆), 298.15 K (▲), 303.15 K (■). (—) Les valeurs calculées en utilisant l'équation de VTPR avec la fonction α (TWU) et règle de mélange (Stryjek-vera).

3.5. Modélisation à l'aide de l'équation VTPR avec fonction α (Soave Boston-Mathias)

L'application de l'équation VTPR avec la fonction α (Soave Boston-Mathias) à la modélisation de la densité pour les systèmes binaires à différentes températures donne des faibles erreurs (SSQ) il est de l'ordre de 10^{-4} nous pouvons donc dire que les valeurs expérimentales des densités ont été correctement représentées sur toutes la gamme de la fraction molaire comme montre les **Figures 3.2 (a-c)**.

Tableau 3.2. Les erreurs SSQ selon l'équation VTPR avec fonction α (Soave Boston-Mathias) pour les trois systèmes binaires

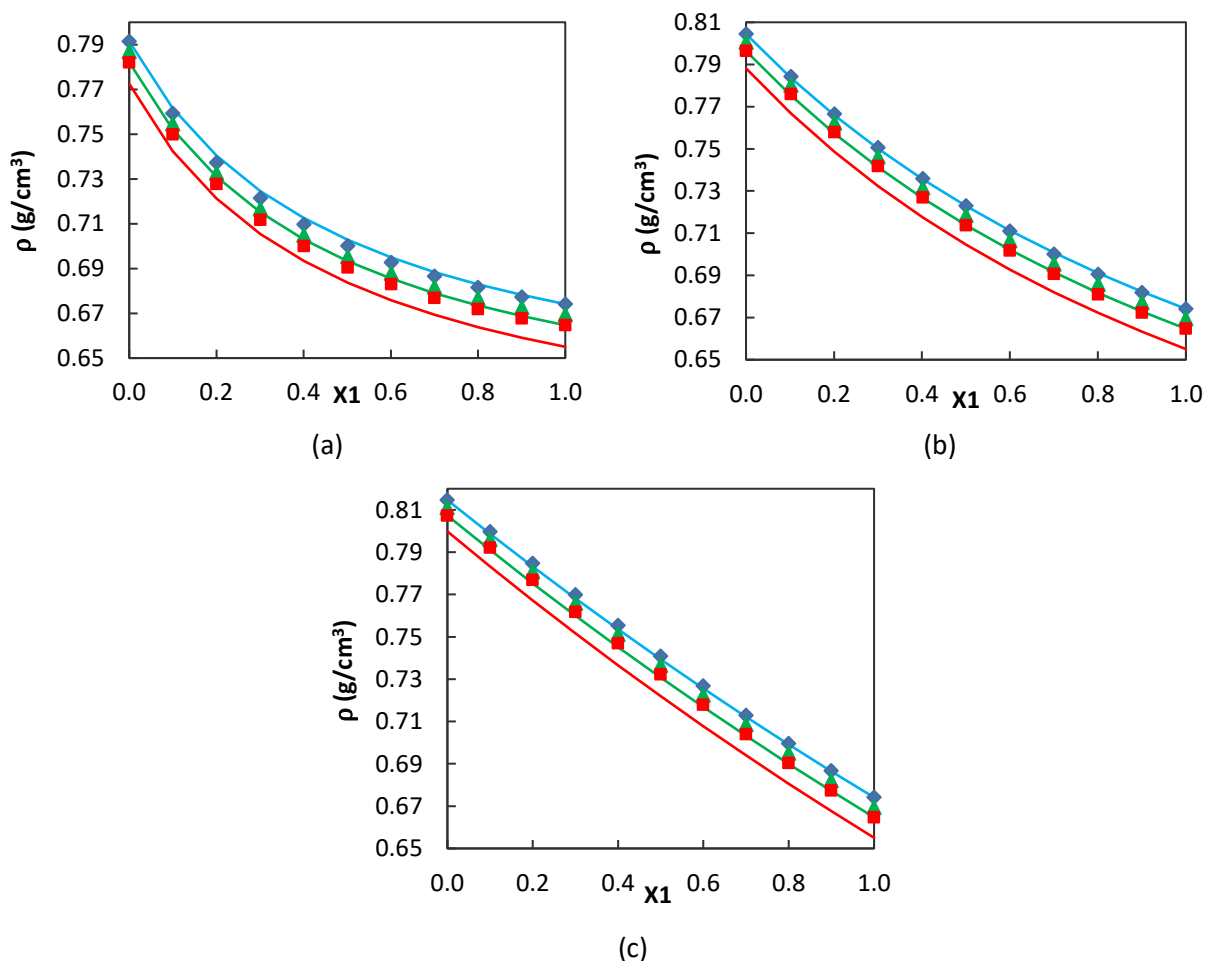
Système	SSQ
<i>1-hexène (1) + méthanol (2)</i>	0.0032
<i>1-hexène (1) + 1-propanol (2)</i>	0.0004
<i>1-hexène (1) + 1-pentanol (2)</i>	0.0001



Figures 3.2 (a-c). La densité (ρ) du système binaire : (a) $\{1\text{-hexène (1) + méthanol (2)}\}$, (b) $\{1\text{-hexène (1) + 1-propanol (2)}\}$ et (c) $\{1\text{-hexène (1) + 1-pentanol (2)}\}$ en fonction de la fraction molaire en 1-hexène à 293.15K (\blacklozenge), 298.15 K (\blacktriangle), 303.15 K (\blacksquare). (—) Les valeurs calculées en utilisant l'équation de VTPR réglée à fonction α (Soave Boston-Mathias).

3.6. Modélisation à l'aide de l'équation PSRK avec fonction α (Mathias Copeman)

Les **Figures 3.3 (a-c)** montrent que pour les systèmes binaire 1-hexène (1) + méthanol (2), 1-propanol (2) ou 1-pentanol (2), l'équation PSRK (la fonction α (Mathias Copeman) est capable de représenter correctement nos valeurs expérimentales des densités pour toutes les températures à l'exception de la température 303.15K cette équation présente des écarts importants par rapport aux valeurs expérimentales. Nous signalons que les erreurs SSQ varient entre 0.0016 et 0.0026 comme montre le **Tableau 3.3**.



Figures 3.3 (a-c). La densité (ρ) du système binaire : (a) {1-hexène (1) + méthanol (2)}, (b) {1-hexène (1) + 1-propanol (2)} et (c) {1-hexène (1) + 1-pentanol (2)} en fonction de la fraction molaire en 1-hexène à 293.15K (◆), 298.15 K (▲), 303.15 K (■). (—) Les valeurs calculées en utilisant l'équation de PSRK réglée à fonction α (Mathias Copeman).

Chapitre 3. Modélisation de la densité à l'aide des équations d'état PSRK et VTPR

Tableau 3.3. Les erreurs SSQ selon l'équation PSRK avec fonction α (Mathias Copeman) pour les trois systèmes binaires.

Système	SSQ
<i>1-hexène (1) + Méthanol (2)</i>	0.0016
<i>1-hexène (1) + 1-propanol (2)</i>	0.0022
<i>1-hexène (1) + 1-pentanol (2)</i>	0.0026

La comparaison entre les modèles VTPR (Volume Translated Peng-Robinson) et PSRK (Predictive Soave-Redlich-Kwong) pour la prédiction de la densité des mélanges à différentes températures montrent des performances variées en fonction des systèmes étudiés et des règles de mélange utilisées.

En analysant les résultats obtenus, il apparaît que le modèle PSRK avec la règle de mélange "Mathias Copeman" (M.C) est globalement moins efficace que le modèle VTPR, en particulier lorsque ce dernier utilise la fonction alpha (α) de Soave Boston-Mathias (S.B.M) à l'exception du mélange 1-hexène + méthanol, le modèle PSRK/M.C donne un écart (SSQ) de 0.0016 plus faible que les autres modèles.

Pour les mélanges 1-hexène + 1-propanol ou 1-pentanol SSQ le plus faible est obtenu avec le modèle VTPR/S.B.M. En général, le modèle VTPR/S.B.M est le plus précis pour la prédiction de la densité des mélanges étudiés.

Tableau 3.4. Comparaison entre les SSQ obtenues à l'aide les deux équations les trois systèmes binaires

Système	SSQ		
	VTPR/TWU	VTPR/S.B.M	PSRK/M.C
<i>1-hexène (1) + Méthanol (2)</i>	0.003	0.0032	0.0016
<i>1-hexène (1) + 1-propanol (2)</i>	0.002	0.0004	0.0022
<i>1-hexène (1) + 1-pentanol (2)</i>	0.001	0.0001	0.0026

CONCLUSION

Conclusion

Dans ce travail nous avons étudié les propriétés volumétriques, acoustiques, optiques et les propriétés d'excès des systèmes binaires : {1-hexène + méthanol}, {1-hexène + 1-propanol} et {1-hexène + 1-pentanol} à températures comprise entre 293.15K et 303.15K et sous pression atmosphérique. Ces propriétés offrent des informations sur les interactions intermoléculaires.

Dans un premier temps, nous avons déterminé expérimentalement les propriétés thermo physique telle que la densité, la vitesse du son et l'indice de réfraction à l'aide d'un analyseur de densité et de vitesse du son DSA 5000M (Anton Paar) et un réfractomètre numérique (modèle Abbemat 300, Anton Paar).

Les résultats expérimentaux obtenus ont été utilisé pour calculer divers propriétés thermodynamiques, notamment la longueur libre intermoléculaire, l'association relative, la force de relaxation, la fonction du son molaire de Rao, l'impédance acoustique, la compressibilité isentropique ainsi que les propriétés d'excès/ dérivées telle que volume d'excès, déviation en longueur libre intermoléculaire, déviation en impédance acoustique, déviation en vitesse du son, déviation en compressibilité isentropique et déviation en indice de réfraction.

L'équation polynomiale de Redlich-Kister a été utilisée pour corréler les différentes propriétés d'excès/ dérivées pour les trois systèmes binaires. Le signe de ces propriétés a été interprété en termes des interactions intermoléculaires dans les mélanges binaires.

Dans une seconde étape, nous avons modélisé les valeurs expérimentales de la densité des systèmes binaires à l'aide des équations PSRK et VTPR à différentes températures et sur toute la gamme de composition. L'application de ces deux équations a permis de représenter correctement nos valeurs expérimentales de la densité. Nous pouvons conclure que l'équation PSRK est globalement moins efficace que le modèle VTPR, à l'exception du mélange 1-hexène + méthanol, le modèle PSRK/M.C donne un écart (SSQ) le plus faible que les autres modèles.

1. Union E. Directive 2009/28/EC of the European Parliament and of the Council of 23 April 2009 on the promotion of the use of energy from renewable sources and amending and subsequently repealing Directives 2001/77/EC and 2003/30/EC. Official Journal of the European Union. 2009;5:2009.
2. Scarlat N, Dallemand J-F. Recent developments of biofuels/bioenergy sustainability certification: A global overview. *Energy policy*. 2011;39(3):1630-46.
3. Belabbaci A. Etude des équilibres liquide–vapeur des mélanges {amines–eau} et {alcools–hydrocarbures}: mesure Et modélisation. Université Abou-Bekr Belkaid de Tlemcen. 2012.
4. Morris DM, Quintana RL, Harvey BG. High-performance jet fuels derived from bio-based alkenes by iron-catalyzed [2+ 2] cycloaddition. *ChemSusChem*. 2019;12(8):1646-52.
5. Ghellai S, Belabbaci A, Villamañán RM, Martín MC, Villamañán MA, Negadi L. Vapour–liquid equilibria of binary and ternary mixtures containing 1-butanol, 2, 2, 4-trimethylpentane and 1-hexene at T= 313.15 K. *The Journal of Chemical Thermodynamics*. 2013;63:164-8.
6. Fayyazbakhsh A, Pirouzfard V. Comprehensive overview on diesel additives to reduce emissions, enhance fuel properties and improve engine performance. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*. 2017;74:891-901.
7. Belhadj D, Negadi A, Hernández A, Mokbel I, Bahadur I, Negadi L. A study on mixing properties of binary mixtures of 1-hexene with alkoxyethanols at different temperatures. *The Journal of Chemical Thermodynamics*. 2022;172:106820.
8. Vega-Maza D, Martín MC, Trusler JM, Segovia JJ. Heat capacities and densities of the binary mixtures containing ethanol, cyclohexane or 1-hexene at high pressures. *The Journal of Chemical Thermodynamics*. 2013;57:550-7.
9. Burkat RK, Richard AJ. Low-pressure studies of the isothermal compressibilities and specific volumes of organic liquids. *The Journal of Chemical Thermodynamics*. 1975;7(3):271-7.
10. Mears TW, Fookson A, Pomerantz P, Rich EH, Dussinger C, Howard F. Syntheses and properties of two olefins, six paraffins, and their intermediates. *J Res Natl Bur Stand*. 1950;44(3):299-304.
11. Torín-Ollarves GA, Segovia JJ, Martín MC, Villamañán MA. Density, viscosity, and isobaric heat capacity of the mixture (1-butanol+ 1-hexene). *Journal of Chemical & Engineering Data*. 2013;58(10):2717-23.
12. Tardajos G, Diaz Pena M, Lainez A, Aicart E. Speed of sound in and isothermal compressibility and isobaric expansivity of pure liquids at 298.15 K. *Journal of Chemical and Engineering Data*. 1986;31(4):492-3.
13. Lifi M, Lorenzo J, Aguilar F, Muñoz-Rujas N, Montero EA, Chhiti Y, et al. Excess enthalpy, density, speed of sound and refractive index of binary mixtures {2-(2-ethoxyethoxy) ethanol+ 1-hexene, or cyclohexane, or methylcyclohexane at (298.15 and 313.15) K: Application of the PPR-78 cubic equation of state, NRTL and UNIQUAC models. *The Journal of Chemical Thermodynamics*. 2021;153:106306.
14. Aicart E, Junquera E, Letcher TM. Isobaric thermal expansivity and isothermal compressibility of several nonsaturated hydrocarbons at 298.15 K. *Journal of Chemical and Engineering Data*. 1995;40(6):1225-7.
15. Rodriguez A, Canosa J, Tojo J. Density, refractive index, and speed of sound of binary mixtures (diethyl carbonate+ alcohols) at several temperatures. *Journal of Chemical & Engineering Data*. 2001;46(6):1506-15.
16. Belhadj D, Bahadur I, Negadi A, Muñoz-Rujas N, Montero E, Negadi L. Thermodynamic, ultrasonic, and transport study of binary mixtures containing 2-(2-methoxyethoxy) ethanol and alcohols at (293.15–323.15) K. *Journal of Chemical & Engineering Data*. 2020;65(11):5192-209.

17. Negadi L, Feddal-Benabed B, Bahadur I, Saab J, Zaoui-Djelloul-Daouadji M, Ramjugernath D, et al. Effect of temperature on density, sound velocity, and their derived properties for the binary systems glycerol with water or alcohols. *The Journal of Chemical Thermodynamics*. 2017;109:124-36.
18. García-Mardones M, Perez-Gregorio V, Guerrero H, Bandres I, Lafuente C. Thermodynamic study of binary mixtures containing 1-butylpyridinium tetrafluoroborate and methanol, or ethanol. *The Journal of Chemical Thermodynamics*. 2010;42(12):1500-5.
19. Alvarez VH, Mattedi S, Martin-Pastor M, Aznar M, Iglesias M. Thermophysical properties of binary mixtures of {ionic liquid 2-hydroxy ethylammonium acetate+(water, methanol, or ethanol)}. *The Journal of Chemical Thermodynamics*. 2011;43(7):997-1010.
20. Gonfa G, Bustam MA, Muhammad N, Ullah S. Density and excess molar volume of binary mixture of thiocyanate-based ionic liquids and methanol at temperatures 293.15–323.15 K. *Journal of Molecular Liquids*. 2015;211:734-41.
21. Kurnia KA, Taib MM, Mutalib MA, Murugesan T. Densities, refractive indices and excess molar volumes for binary mixtures of protic ionic liquids with methanol at T= 293.15 to 313.15 K. *Journal of Molecular Liquids*. 2011;159(3):211-9.
22. Aralaguppi M, Jadar C, Aminabhavi T. Density, viscosity, refractive index, and speed of sound in binary mixtures of acrylonitrile with methanol, ethanol, propan-1-ol, butan-1-ol, pentan-1-ol, hexan-1-ol, heptan-1-ol, and butan-2-ol. *Journal of Chemical & Engineering Data*. 1999;44(2):216-21.
23. Awwad AM, Alsayouri HM, Abu-Daabes MA, Jbara KA. Densities and volumetric properties of (N-(2-hydroxyethyl) morpholine+ ethanol,+ 1-propanol,+ 2-propanol,+ 1-butanol, and+ 2-butanol) at (293.15, 298.15, 303.15, 313.15, and 323.15) K. *The Journal of Chemical Thermodynamics*. 2008;40(4):592-8.
24. Ouaar F, Mokbel I, Negadi A, Aguilar F, Montero EA, Jose J, et al. Vapor–liquid equilibria, density, sound velocity, and refractive index for binary mixtures containing 2-(2-ethoxyethoxy) ethanol and 1-propanol or 2-propanol or 1-butanol or 2-butanol at different temperatures. *Journal of Chemical & Engineering Data*. 2020;65(5):2351-72.
25. Nain AK. Deviations in refractive indices and applicability of mixing rules in aniline+ alkanol binary mixtures at different temperatures. *Physics and Chemistry of Liquids*. 2010;48(1):41-9.
26. Mutalik V, Manjeshwar LS, Sairam M, Aminabhavi TM. Excess molar volumes, deviations in viscosity and refractive index of the binary mixtures of mesitylene with ethanol, propan-1-ol, propan-2-ol, butan-1-ol, pentan-1-ol, and 3-methylbutan-1-ol at 298.15, 303.15, and 308.15 K. *Journal of molecular liquids*. 2006;129(3):147-54.
27. Ayad A, Belabbaci A, Negadi A, Hernández A, Kabane B, Bahadur I, et al. Measurements and Modeling of Thermodynamic Properties of Binary Systems Comprising (2-Amino-2-methyl-1-propanol with Acetonitrile, Toluene, 1-Pentanol or 1-Hexanol) at Different Temperatures. *Journal of Chemical & Engineering Data*. 2023;68(11):2789-806.
28. Hoga H, Torres R. Volumetric and viscometric properties of binary mixtures of {methyl tert-butyl ether (MTBE)+ alcohol} at several temperatures and p= 0.1 MPa: Experimental results and application of the ERAS model. *The Journal of Chemical Thermodynamics*. 2011;43(8):1104-34.
29. Iglesias-Silva GA, Guzmán-López A, Pérez-Durán G, Ramos-Estrada M. Densities and viscosities for binary liquid mixtures of n-undecane+ 1-propanol,+ 1-butanol,+ 1-pentanol, and+ 1-hexanol from 283.15 to 363.15 K at 0.1 MPa. *Journal of Chemical & Engineering Data*. 2016;61(8):2682-99.
30. Estrada-Baltazar A, Bravo-Sanchez MG, Iglesias-Silva GA, Alvarado JFJ, Castrejon-Gonzalez EO, Ramos-Estrada M. Densities and viscosities of binary mixtures of n-decane+ 1-pentanol,+ 1-hexanol,+ 1-heptanol at temperatures from 293.15 to 363.15 K and atmospheric pressure. *Chinese Journal of Chemical Engineering*. 2015;23(3):559-71.
31. Romano E, Trenzado JL, González E, Matos JS, Segade L, Jiménez E. Thermophysical properties of four binary dimethyl carbonate+ 1-alcohol systems at 288.15–313.15 K. *Fluid Phase Equilibria*. 2003;211(2):219-40.

Bibliographie

32. Shan Z, Asfour A-FA. Viscosities and densities of nine binary 1-alkanol systems at 293.15 K and 298.15 K. *Journal of Chemical & Engineering Data*. 1999;44(1):118-23.
33. Indraswati N, Mudjijati, Wicaksana F, Hindarso H, Ismadji S. Measurements of density and viscosity of binary mixtures of several flavor compounds with 1-butanol and 1-pentanol at 293.15 K, 303.15 K, 313.15 K, and 323.15 K. *Journal of Chemical & Engineering Data*. 2001;46(3):696-702.
34. Redlich O, Kister A. Algebraic representation of thermodynamic properties and the classification of solutions. *Industrial & Engineering Chemistry*. 1948;40(2):345-8.
35. Fredenslund A, Jones RL, Prausnitz JM. Group-contribution estimation of activity coefficients in nonideal liquid mixtures. *AIChE Journal*. 1975;21(6):1086-99.
36. Weidlich U, Gmehling J. A modified UNIFAC model. 1. Prediction of VLE, hE, and γ_{∞} . *Industrial & engineering chemistry research*. 1987;26(7):1372-81.
37. Twu CH, Bluck D, Cunningham JR, Coon JE. A cubic equation of state with a new alpha function and a new mixing rule. *Fluid Phase Equilibria*. 1991;69:33-50.

Abstract

In a world where fossil fuels dominate energy supply and cause environmental degradation, transitioning to sustainable alternatives is crucial. This thesis examines the use of oxygenated compounds as additives in hydrocarbons to improve their properties and reduce polluting emissions. We study the thermophysical properties of three binary systems: 1-hexene with methanol, 1-propanol, and 1-pentanol. The manuscript is divided into three chapters: a literature review of hydrocarbons and their applications, an experimental analysis of the density, speed of sound, and refractive index of the mixtures, and a thermodynamic modeling of the obtained data. The results provide essential information for optimizing the use of these mixtures in producing cleaner fuels.

Keywords: Density, Speed of sound, Refractive index, Experimental measurements, Derived properties, Excess properties, Hydrocarbons, Oxygenated compounds, Modeling.

Résumé

Dans un monde où les combustibles fossiles prédominent dans l'approvisionnement énergétique et provoquent des dégradations environnementales, il est essentiel de passer à des alternatives durables. Ce mémoire explore l'utilisation des composés oxygénés comme additifs dans les hydrocarbures pour améliorer leurs propriétés et pour diminuer les émissions polluantes. Nous étudions les propriétés thermo-physiques de trois systèmes binaires : 1-hexène avec méthanol, 1-propanol, et 1-pentanol. Le manuscrit se divise en trois chapitres : une revue bibliographique des hydrocarbures et leurs applications, une analyse expérimentale de la densité, vitesse du son et indice de réfraction des mélanges, et une modélisation thermodynamique des données obtenues. Les résultats fournissent des informations essentielles pour optimiser l'utilisation de ces mélanges dans la production de carburants plus propres.

Mots clés : Densité, Vitesse du son, Indice de réfraction, Mesures expérimentales, Propriétés dérivées, Propriétés d'excès, Hydrocarbures, Composés oxygénés, Modélisation.

ملخص

في عالم يهيمن فيه الوقود الأحفوري على إمدادات الطاقة ويسبب تدهورًا بيئيًا، أصبح التحول إلى بدائل مستدامة أمرًا بالغ الأهمية. يتناول هذا البحث استخدام الهيدروكربونات والإضافات المؤكسجة لتقليل انبعاثات الملوثات. ندرس الخصائص الترموفيزيائية لثلاثة أنظمة ثنائية: 1-هيكسين مع الميثانول، 1-بروبانول، و1-بنتانول. ينقسم العمل إلى ثلاثة فصول: مراجعة أدبية للهيدروكربونات وتطبيقاتها، تحليل تجريبي للكثافة وسرعة الصوت ومؤشر الانكسار للمخاليط، ونمذجة ديناميكية حرارية للبيانات المستخلصة. توفر النتائج معلومات أساسية لتحسين استخدام هذه المخاليط في إنتاج وقود أنظف.

الكلمات المفتاحية: الكثافة، سرعة الصوت، مؤشر الانكسار، القياسات التجريبية، الخصائص المشتقة، الخصائص الزائدة، الهيدروكربونات، المركبات المؤكسجة، النمذجة.