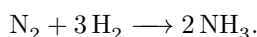


1 Bilan de masse

L'équation de la production d'ammoniac selon le procédé Haber-Bosch est la suivante :



Nous voulons calculer la masse de réactifs nécessaire pour obtenir une quantité de 1000 t d'ammoniac. Pour commencer, nous allons déterminer le nombre de moles d'ammoniac produites à l'aide de la masse molaire du composé, qui est de 17 g/mol.

$$n_{\text{NH}_3} = \frac{m_{\text{NH}_3}}{M_{\text{NH}_3}} = \frac{10^9 \text{ g}}{17 \text{ g/mol}} = 5.8827 \text{ mol}.$$

Ensuite, en utilisant l'équation de réaction, nous pouvons déterminer la quantité de dihydrogène et de diazote nécessaire :

$$n_{\text{H}_2} = \frac{3}{2} n_{\text{NH}_3} \quad \text{et} \quad n_{\text{N}_2} = \frac{1}{2} n_{\text{NH}_3}.$$

Enfin, avec les masses molaires des réactifs, respectivement 2 g/mol et 28 g/mol pour le dihydrogène et le diazote, nous obtenons le bilan de masse suivant :

		Moles	Masse
2* Réactifs	H ₂	8.8237 mol	176.5 t
	N ₂	2.9417 mol	823.5 t
Produits	NH ₃	5.8827 mol	1000.0 t

2 Aspect thermique

Nous devons faire en sorte que notre réacteur soit à une température constante de 500 °C. Étant en présence d'une réaction exothermique, pour le refroidir, nous disposons d'un flux d'eau dont la température varie est de 25 °C à l'entrée et de 90 °C à la sortie. L'objectif ici est de calculer ce flux.

Nous utilisons comme hypothèses que le réacteur est, au départ, à 500 °C et que la réaction se fait en continu.

Chaque jour, le réacteur produit 5.8827 mol d'ammoniac. Pour calculer le flux, nous allons déterminer quelle quantité d'eau est nécessaire pour absorber la chaleur dégagée par la réaction ; nous aurons donc besoin de l'enthalpie molaire de la réaction et de la capacité calorifique volumique de l'eau. Ces deux valeurs, trouvées et calculées grâce aux tables de données, sont respectivement -53.79 kJ/mol et $4167.51 \text{ kJ/K} \cdot \text{m}^3$.

Nous obtenons alors l'expression suivante :

$$\underbrace{n_{\text{NH}_3} \cdot \Delta H_{\text{m}}}_{\text{Chaleur de la réaction}} + \underbrace{C_{\text{vol, eau}} \cdot V_{\text{eau}} \cdot \Delta T}_{\text{Chaleur absorbée par l'eau}} = 0.$$

Il suffit maintenant d'isoler V_{eau} et d'injecter les données :

$$\begin{aligned} V_{\text{eau}} &= -\frac{n_{\text{NH}_3} \cdot \Delta H_{\text{m}}}{C_{\text{vol, eau}} \cdot \Delta T} \\ &= -\frac{(5.8827 \text{ mol}) \cdot (-53.79 \text{ kJ/mol})}{(4167.51 \text{ kJ/K} \cdot \text{m}^3) \cdot (90 \text{ }^\circ\text{C} - 25 \text{ }^\circ\text{C})} \\ &= 1.1684 \text{ m}^3. \end{aligned}$$

Il nous faut donc un flux d'eau de $1.1644 \text{ m}^3/\text{jour}$ pour refroidir le réacteur, ce qui correspond à $0.135 \text{ m}^3/\text{s}$.

3 Provenance des réactifs

Pour ce qui est de la provenance des réactifs plusieurs options ont été considérées. Pour ce qui est de l' H_2 nous avons pensé utiliser l'électrolyse de l'eau ainsi que la décomposition thermochimique. Pour le diazote nous avons pensé utiliser le procédé Lindé qui consiste en une distillation de l'air liquide.

Cependant ces processus étant coûteux et l'air étant composée à 78.1%, nous avons opté pour l'hydrogénation du $\text{N}_2(\text{g})$ atmosphérique par le $\text{H}_2(\text{g})$.

Un flow-sheet de notre procédé se trouve à la figure 1.

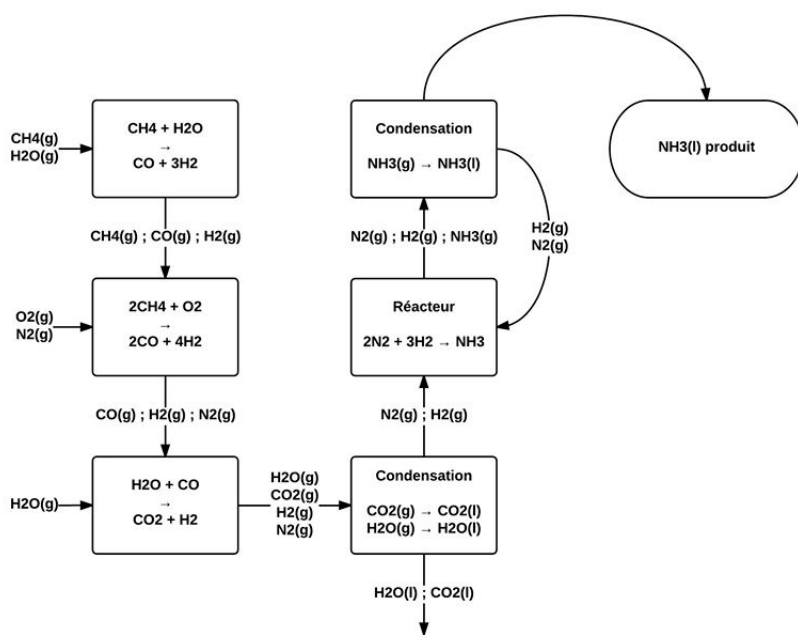


FIGURE 1 – Flow-sheet