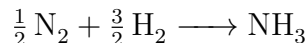


Bilan de masse

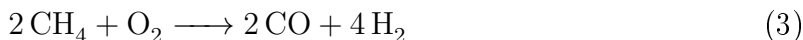
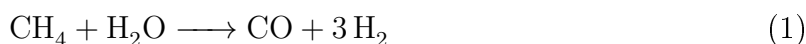
Nous cherchons à produire une masse m de NH_3 . La masse molaire de la molécule étant de 0.017 kg/mol, cela est équivalent à un nombre de moles $n = m/(0.017 \text{ kg/mol})$ de NH_3 . Pour cela, nous utilisons la réaction suivante :



Nous en déduisons qu'il nous faut les quantités suivantes de N_2 et de H_2 :

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

L'azote utilisé dans le réacteur provient directement de l'air, tandis que l'hydrogène est à produire à l'aide des réactions suivantes :



Il est important de noter que ces réactions se produisent de façon séparées, l'une après l'autre. Une fois la quatrième réaction effectuée, les produits inutiles (CO_2 et H_2O) sont rejetés, tandis que l'hydrogène et l'azote sont envoyés dans le réacteur pour la production d'ammoniac.

Nous allons maintenant déterminer la quantité de chaque réactif nécessaires afin d'obtenir dans le réacteur une composition stœchiométrique de diazote et de dihydrogène, telle que décrite par la réaction de production de l'ammoniac. Commençons par l'azote : celui-ci provient de l'air, dont la composition est 78.08 % de N_2 et 20.95 % de O_2 . Il est donc nécessaire d'injecter

$$n_{\text{air}} = \frac{n_{\text{N}_2}}{0.7808} = \frac{\frac{1}{2}n}{0.7808} = 0.6404n$$

moles d'air pour produire une quantité n d'ammoniac.

Passons à l'hydrogène. Nous avons plusieurs réactions responsables de sa production et il est important de saisir les différences entre celles-ci. Les réactions (1-2) nécessitent un apport de méthane et d'eau que l'on peut aisément contrôler, tandis que les réactions (3-4) nécessitent notamment un apport d'oxygène qui, lui, est déterminé à l'avance par la composition de l'air et la quantité d'azote injectée dans le système. Nous allons donc déterminer quelle quantité d'hydrogène est produite par les réactions (3-4) à partir de l'oxygène disponible, puis nous compléterons le manque à l'aide des réactions (1-2).

Commençons par calculer la quantité de O_2 disponible :

$$n_{\text{O}_2} = 0.2095n_{\text{air}} = 0.2095 \times (0.6404n) = 0.1342n.$$

Les équations (3-4) nous indiquent que chaque mole de O_2 utilise 2 mol de CH_4 et 2 mol

de H_2O pour produire en tout 6 mol de H_2 :

$$n_{\text{CH}_4 \text{ util. (3-4)}} = 2n_{\text{O}_2} = 0.2684n$$

$$n_{\text{H}_2\text{O util. (3-4)}} = 2n_{\text{O}_2} = 0.2684n$$

$$n_{\text{H}_2 \text{ prod. (3-4)}} = 6n_{\text{O}_2} = 0.8052n.$$

Il reste donc

$$n_{\text{H}_2 \text{ prod. (1-2)}} = n_{\text{H}_2} - n_{\text{H}_2 \text{ prod. (3-4)}} = 0.6948n$$

de H_2 à produire afin d'obtenir une composition stœchiométrique. Pour cela, nous allons utiliser les réactions (1-2). Dans celles-ci, 1 mol de CH_4 et 2 mol de H_2O sont consommées pour la production de 4 mol de H_2 . Nous pouvons aisément calculer la quantité de réactifs nécessaires pour obtenir l'hydrogène manquant :

$$n_{\text{CH}_4 \text{ util. (1-2)}} = \frac{1}{4}n_{\text{H}_2 \text{ prod. (1-2)}} = 0.1737n$$

$$n_{\text{H}_2\text{O util. (1-2)}} = \frac{1}{2}n_{\text{H}_2 \text{ prod. (1-2)}} = 0.3474n.$$

Nous pouvons maintenant résumer le bilan de masse :

	Air ¹	CH_4	H_2O	H_2	NH_3
Réactions 1-2		$-0.1737n$	$-0.3474n$	$+0.6948n$	
Réactions 3-4		$-0.2684n$	$-0.2684n$	$+0.8052n$	
Réac. finale	$-0.6404n$			$-1.500n$	$+1.000n$
Total	$-0.6404n$	$-0.4421n$	$-0.6158n$		$+1.000n$
Total (masse)	$-1.091m$	$-0.4161m$	$-0.6520m$		$+1.000m$

1. Composition : 78.08 % N_2 et 20.95 % O_2 , plus d'autres gaz en très faible proportions.