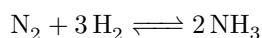


1 Synthèse NH_3 et séparation

Nous allons maintenant étudier de manière plus précise la dernière étape du procédé qui comprend le réacteur de synthèse d'ammoniac et l'étape de séparation des produits. La réaction de synthèse de NH_3 est suivante :



1.1 Manière qualitative

Voyons de quelle manière évolue la réaction en faisant varier d'une part la température, et d'autre part la pression. Pour cela, nous nous basons sur le fait qu'une réaction chimique a toujours tendance à aller à l'encontre des modifications qui lui sont apportées, à savoir le principe énoncé par Le Chatelier. Dans notre cas, nous devons favoriser la réaction allant dans le sens de production de NH_3 .

Tout d'abord, regardons ce qu'il en est au niveau de la pression. Nous devons augmenter celle-ci car de cette manière le système réagira en favorisant le sens de réaction produisant un plus petit nombre de moles de gaz, à savoir NH_3 , dans le but de rétablir la pression.

Ensuite, nous allons étudier le comportement de notre réaction lorsqu'on modifie la température. Pour cela, nous devons déterminer si la réaction est endothermique ou exothermique. Nous calculons donc le ΔH de la réaction.

$$\Delta H_r^0 = -92,4 \text{ kJ/mol}$$

Le signe de ΔH étant négatif, notre réaction est bien exothermique. De ce fait, nous devons diminuer la température afin de favoriser la réaction qui libère de la chaleur, c'est-à-dire, la réaction directe.

Nous en venons donc à la conclusion qu'il nous faudrait une pression théoriquement infinie et une température la plus basse possible. Cependant, nous sommes restreint économiquement et techniquement, nous devons donc trouver un juste milieu, une conversion totale n'est donc pas envisageable.

Une pression très élevée est économiquement et techniquement irréalisable car les tuyaux et autres équipements supportant les flux devront aligner leurs performances pour répondre à des critères beaucoup plus stricts qu'avec de basses pressions. Pour cette raison, il serait plus judicieux de réinjecter le diazote et le dihydrogène qui n'ont pas réagi au cours de la réaction (la réaction est à l'équilibre!) dans le réacteur. Pour effectuer cette séparation, les éléments du réacteur sont refroidis, l'ammoniac est liquéfié (l'ammoniac se condense à température plus élevée que le dihydrogène et diazote) et les réactifs sont réintroduits dans le réacteur.

1.2 Manière quantitative

De manière plus rigoureuse, nous pouvons démontrer l'influence de la température et de la pression sur le rendement de la réaction à l'aide d'une modélisation mathématique.

Démontrons qu'une diminution de la température favorise la production de produits pour toute réaction exothermique avec l'équation de Van't Hoff.

$$\ln \frac{K_2}{K_1} = \frac{\Delta H_r^0}{R} \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right)$$

$\Delta H_r^0 < 0$, si $T_2 < T_1$ alors $1/T_2 > 1/T_1$. Donc $\ln K_2/K_1 > 0$, ce qui implique que $K_2/K_1 > 1$ et donc que $K_2 > K_1$.

Si K augmente, la réaction favorise les produits, le principe de Le Chatelier est donc bien vérifié pour la température.

Pour la pression, il faut étudier l'influence de la pression totale p_{tot} dans le quotient réactionnel Q_r car $K(T)$ ne dépend que de la température. Ensuite, il suffit de comparer Q_r et $K(T)$ sans faire varier la température.

$$Q_r = \frac{(\chi_{\text{NH}_3} p_{tot})^2}{(\chi_{\text{N}_2} p_{tot}) \cdot (\chi_{\text{H}_2} p_{tot})^3} = \frac{\chi_{\text{NH}_3}^2}{\chi_{\text{N}_2} \chi_{\text{H}_2}^3 \left(\frac{p_{tot}}{p^0} \right)^2}$$

Lorsque la pression augmente, Q_r diminue, $Q_r < K$ et donc la réaction favorise les produits.

Lorsque la pression diminue, Q_r augmente, $Q_r > K$ et donc la réaction favorise les réactifs.
Le principe de Le Chatelier est vérifié pour la pression.

1.3 L'influence de la température et de la pression de sortie du réacteur de synthèse d'ammoniac

Pour déterminer l'influence de ces paramètres à la sortie de notre dernier réacteur, il faut établir un tableau d'avancement de notre réaction.

	N_2	$3 H_2$	$2 NH_3$	Σ
n_{init}	a	b	0	a+b
n_{eq}	$a - \xi$	$b - 3\xi$	2ξ	$a + b - 2\xi$
χ_i	$\frac{a-\xi}{a+b-2\xi}$	$\frac{b-3\xi}{a+b-2\xi}$	$\frac{2\xi}{a+b-2\xi}$	1
a_i	$\chi_i \frac{p_{eq}}{p^0}$	$\chi_i \frac{p_{eq}}{p^0}$	$\chi_i \frac{p_{eq}}{p^0}$	$\frac{p_{eq}}{p^0}$

avec a et b respectivement le nombre de moles initiales de N_2 et H_2 , ξ le degré d'avancement, χ_i et a_i respectivement la fraction molaire et l'activité correspondante au composé i .

Il faut maintenant résoudre l'égalité suivante pour déterminer la variable ξ et donc la quantité de NH_3 (qui vaut 2ξ) à la sortie du réacteur en fonction de T et p_{tot} :

$$Q_r = K(T)$$

$$\frac{\chi_{NH_3}^2}{\chi_{N_2} \chi_{H_2}^3 \left(\frac{p_{tot}}{p^0}\right)^2} = \exp\left(-\frac{\Delta G_r}{RT}\right)$$

Notre outil de gestion(cfr. manager.Task2) nous indique que pour 1529.1 moles de N_2 et 509.7 moles de H_2 à T=750 K et p = 270 bars, nous obtenons 152.2542 moles de NH_3 . Ce qui correspond approximativement au rendement du procédé de Haber-Bosch (environ 15 %).