Konverze normálně probíhá při tlaku 15–25 MPa a teplotě 400–500 °C. Plyny (dusík a vodík) procházejí čtyřmi vrstvami katalyzátoru, mezi každým průchodem jsou chlazeny kvůli udržení přijatelné rovnovážné konstanty (poměr reaktantů a produktu) a tím efektivity procesu. Během každého průchodu dochází k jen asi 15% konverzi, nezreagované plyny jsou však recyklovány a výsledná konverze dosahuje asi 97 %.

Další kroky, jako parní reforming, konverze vodního plynu, odstranění CO2 a methanace probíhají za tlaku asi 2,5–3,5 MPa. Celý systém syntézy amoniaku pracuje za tlaků 6–18 MPa, v závislosti na konkrétním použitém patentovém postupu.

Schéma procesu

Zdroje vodíku

Nejužívanějším zdrojem vodíku je methan získaný ze zemního plynu. Konverze (tzv. parní reforming) je prováděna parou za vysoké teploty a tlaku za přítomnosti niklového katalyzátoru. Jejím výsledkem je rozdělení molekul uhlíku a vodíku.

Methan katalyticky reaguje s vodní párou za vzniku oxidu uhelnatého a vodíku:

CH4 (g) + H2O (g) → CO (g) + 3 H2 (g)

Vytvořený oxid uhelnatý reaguje s vodou za vzniku oxidu uhličitého a vodíku:

CO (g) + H2O (g) → CO2 (g) + H2 (g)

Celková reakce je tedy:

CH4 (g) + 2 H2O (g) → CO2 (g) + 4 H2 (g)

Reakční rychlost a rovnováha

Schéma amoniakového reaktoru

Dusík (N2) je velmi nereaktivní, protože atomy v molekule váže extrémně silná trojná vazba. Haberův proces používá katalyzátor, který urychluje rozštěpení této trojné vazby.

Při této syntéze je nutné zohlednit dvě protichůdná kritéria: složení rovnovážné směsi a reakční rychlost. Při pokojové teplotě chemická rovnováha směsi silně upřednostňuje amoniak, avšak reakce probíhá s prakticky nulovou rychlostí. Zjevným řešením je zvýšit teplotu, jelikož je ale reakce exotermická, rovnovážná konstanta dosahuje hodnoty 1 (stejné množství reaktantů a produktů) při teplotách okolo 150–200 °C (viz Le Chatelierův princip).

Kp(T) pro N2 + 3 H2 ⇌ 2 NH3[10]

Teplota (°C) Kp

300 4.34 × 10−3

400 1.64 × 10−4

450 4.51 × 10−5

500 1.45 × 10−5

550 5.38 × 10−6

600 2.25 × 10−6

Nad touto teplotou a za atmosférického tlaku se rovnováha rychle posouvá na stranu reaktantů, jak vyplývá z Van 't Hoffovy rovnice. Zdálo by se, že je vhodné pracovat za nižších teplot a použít jiný způsob k dosažení dostatečné reakční rychlosti. Avšak samotný katalyzátor pro svou efektivní funkci potřebuje teplotu alespoň 400 °C. Tato teplota, používaná při Haberově procesu, je tedy kompromisem mezi přijatelnou efektivitou a rychlostí reakce.

Protože v rovnici syntézy N2 + 3 H2 → 2 NH3 figurují čtyři moly reaktantů na dva moly produktu, je zvýšení tlaku další zjevnou volbou k posunutí reakční rovnováhy na stranu produktu. Z ekonomického hlediska je použití velmi vysokého tlaku nákladné (potřeba dostatečně dimenzovaných vysokotlakých aparátů, armatur, značná energetická náročnost vysokotlakých kompresorů, nutnost zvýšených bezpečnostních opatření atd.). Haberův–Boschův proces běžně využívá tlaky kolem 15–25 MPa, umožňující dosažení přijatelné 15% konverze při pracovních teplotách kolem 400–500 °C.[11]

Další cestou ke zvýšení výnosu reakce by bylo odvedení produktu (tj. plynného amoniaku) ze systému. V praxi však odchází v rovnovážné směsi plynů, opouštějících reaktor. Horké plyny jsou ochlazeny, avšak zůstávají na vysokém tlaku, což dovoluje kondenzaci amoniaku. Nezreagovaný dusík a vodík se vrací zpět do reaktoru na opětovnou syntézu.

Katalyzátory

Energetický diagram

Nejpoužívanější katalyzátory jsou na bázi železa, doplněné přídavkem K2O, CaO, SiO2, a Al2O3. Původní Haberovy–Boschovy reakční komory používaly jako katalyzátor osmium, které však bylo těžce dostupné. Haber poznamenal, že uran je téměř stejně efektivní a snadněji dostupný než osmium. Pod Boschovým vedením objevil roku 1909 výzkumník BASFu Alwin Mittasch mnohem méně nákladný katalyzátor založený na železe, který se používá dodnes. Některé postupy používají katalyzátory na bázi ruthenia (proces KAAP). Ruthenium tvoří aktivnější katalytické prostředí, které dovoluje nižší pracovní tlaky.

V průmyslové praxi se železný katalyzátor získává z jemně namletého práškového železa, které se obvykle vyrábí redukcí vysoce čistého magnetitu (Fe3O4). Práškové železo se spálí (oxiduje), aby se dosáhlo magnetitu o definované velikosti částic. Částice magnetitu se poté částečně redukují pro odstranění části kyslíku. Výsledné částice katalyzátoru mají jádro z magnetitu obklopené obalem z oxidu železnatého (FeO), který je dále obalen slupkou z kovového železa. Katalyzátor si během redukce udržuje většinu objemu. Výsledkem je vysoce porézní materiál s velkorozměrným aktivním povrchem, což zlepšuje jeho katalytické vlastnosti. Další doplňkové složky katalyzátoru tvoří oxidy vápníku a hliníku, které zpevňují železný katalyzátor a pomáhají mu udržet jeho povrch. Tyto oxidy Ca, Al, K, a Si jsou netečné k redukci vodíkem.

Reakční mechanismus, zahrnující heterogenní katalyzátor, zřejmě obsahuje následující kroky:[12]

N2 (g) → N2 (adsorbovaný)

N2 (adsorbovaný) → 2 N (adsorbovaný)

H2 (g) → H2 (adsorbovaný)

H2 (adsorbovaný) → 2 H (adsorbovaný)

N (adsorbovaný) + 3 H (adsorbovaný)→ NH3 (adsorbovaný)

NH3 (adsorbovaný) → NH3 (g)

Reakce 5 probíhá ve třech krocích: tvorba NH, NH2, a poté NH3. Experimentální důkazy naznačují, že reakce 2 probíhá pomalu a určuje celkovou rychlost syntézy. Tato skutečnost není překvapivá vzhledem k tomu, že se při této reakci štěpí nejsilnější vazba - trojná vazba dusíkové molekuly.