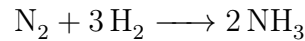


## 1 Bilan de matière

Il s'agit de produire de l'ammoniac ( $\text{NH}_3$ ) à partir de dihydrogène ( $\text{H}_2$ ) et de diazote ( $\text{N}_2$ ). Cela donne l'équation pondérée suivante :



On obtient facilement les masses molaires des différents composés à partir des masses atomiques de l'hydrogène et de l'azote :

$$\begin{aligned} M_{\text{N}_2} &= 28 \text{ g/mol} \\ M_{\text{H}_2} &= 2 \text{ g/mol} \\ M_{\text{NH}_3} &= 17 \text{ g/mol} \end{aligned}$$

En un jour, l'unité produit 1000 t d'ammoniac. Cela correspond à

$$\frac{1000 \text{ t}}{17 \text{ g/mol}} = 5.88 \cdot 10^7 \text{ mol de NH}_3 \quad (1)$$

En utilisant les coefficients stœchiométriques, on trouve que les quantités de réactifs nécessaires sont :

$$\begin{aligned} 1/2 \times 5.88 \cdot 10^7 \text{ mol} &= 2.94 \cdot 10^7 \text{ mol de N}_2 \\ 3/2 \times 5.88 \cdot 10^7 \text{ mol} &= 8.82 \cdot 10^7 \text{ mol de H}_2 \end{aligned}$$

Ce qui correspond aux masses suivantes :

$$\begin{aligned} 2.94 \cdot 10^7 \text{ mol} \times M_{\text{N}_2} &= 824 \text{ t de N}_2 \\ 8.82 \cdot 10^7 \text{ mol} \times M_{\text{H}_2} &= 176 \text{ t de H}_2 \end{aligned}$$

Les flux de réactifs entrants seront donc 824 t/j de diazote et 176 t/j de dihydrogène.

## 2 Bilan thermique

Pour que le réacteur soit maintenu à une température stable, il faut que la puissance  $P_{\text{produite}}$  dégagée par la réaction soit compensée par la puissance  $P_{\text{dissipée}}$  évacuée par l'eau.

## 2.1 Puissance produite

La puissance dégagée par la réaction est proportionnelle à la différence d'enthalpie molaire  $\Delta H_{m,réaction}$ , et au débit de matière  $n_{t,NH_3}$  d'ammoniac produit. Plus précisément :

$$P_{produite} = \Delta H_{m,réaction} \times n_{t,NH_3}$$

Pour calculer  $\Delta H_{m,réaction}$  il faut rechercher l'enthalpie standard de formation du  $NH_3$  dans les tables (à 25 °C) puis l'adapter à une température de 500 °C en utilisant les capacités thermiques des réactifs et des produits. Pour simplifier les calculs nous supposons qu'ils ne dépendent pas de la température.

En tenant compte des coefficients stœchiométriques, on obtient :

$$\begin{aligned}\Delta H_{m,réaction} &= \Delta_f H_{m,NH_3(g)}^\circ + \left( C_{p,m}^{NH_3(g)} - \frac{1}{2} \times C_{p,m}^{N_2(g)} - \frac{3}{2} \times C_{p,m}^{H_2(g)} \right) \Delta T \\ &= -46.11 \text{ kJ/mol} + (-22.73 \text{ J/K mol}) \times 475 \text{ K} \\ &= -56.91 \text{ kJ/mol}\end{aligned}$$

en utilisant  $C_{p,m}^{NH_3(g)} = 35.06 \text{ J/K mol}$ ,  $C_{p,m}^{N_2(g)} = 29.12 \text{ J/K mol}$  et  $C_{p,m}^{H_2(g)} = 28.82 \text{ J/K mol}$ . [1]

Quant à  $n_{t,NH_3}$  il s'agit simplement du nombre de moles de  $NH_3$  produites par jour, donc en reprenant le résultat du calcul (1), il vaut :

$$n_{t,NH_3} = 5.88 \cdot 10^7 \text{ mol/j}$$

## 2.2 Puissance dissipée

De manière analogue, la puissance évacuée par la circulation d'eau est le produit de la différence d'enthalpie molaire et du débit de matière de l'eau :

$$P_{dissipée} = \Delta H_{m,eau} \times n_{t,eau}$$

Si nous supposons la capacité thermique de l'eau constante, la différence d'enthalpie est simplement cette capacité multipliée par la différence de température :

$$\Delta H_{m,eau} = C_{p,m}^{H_2O(l)} \times \Delta T_{eau}$$

avec  $C_{p,m}^{H_2O(l)} = 75.29 \text{ J/K mol}$  [1] et  $\Delta T_{eau} = 90^\circ\text{C} - 25^\circ\text{C} = 65 \text{ K}$

Et le débit de matière est le quotient du débit en volume par le volume molaire de l'eau :

$$n_{t,eau} = Q_{eau} / V_m^{H_2O(l)}$$

avec  $V_m^{H_2O(l)} = 1 \text{ L/kg} \times 18 \text{ g/mol} = 1.8 \cdot 10^{-5} \text{ m}^3/\text{mol}$  et  $Q_{eau}$  à déterminer.

## 2.3 Résolution pour le débit

Nous avons travaillé avec des puissances absorbées positives et des puissances dégagées négatives. Dès lors, l'équilibre thermique s'écrit :

$$P_{\text{produite}} + P_{\text{dissipée}} = 0$$

Résolvons maintenant cette équation pour trouver le débit  $Q_{\text{eau}}$  :

$$\begin{aligned} -P_{\text{produite}} = P_{\text{dissipée}} &\Rightarrow -\Delta H_{\text{m,réaction}} \times n_{\text{t,NH}_3} = \Delta H_{\text{m,eau}} \times Q_{\text{eau}} / V_{\text{m}}^{\text{H}_2\text{O(l)}} \\ &\Rightarrow Q_{\text{eau}} = -\frac{\Delta H_{\text{m,réaction}}}{\Delta H_{\text{m,eau}}} \times n_{\text{t,NH}_3} \times V_{\text{m}}^{\text{H}_2\text{O(l)}} \end{aligned}$$

En introduisant les valeurs chiffrées, cela donne :

$$\begin{aligned} Q_{\text{eau}} &= -\frac{-56.91 \text{ kJ/mol}}{75.29 \text{ J/K mol} \times 65 \text{ K}} \times 5.88 \cdot 10^7 \text{ mol/j} \times 1.8 \cdot 10^{-5} \text{ m}^3/\text{mol} \\ &= 1.23 \cdot 10^4 \text{ m}^3/\text{j} \\ &= 142 \text{ L/s} \end{aligned}$$

En conclusion, le refroidissement du réacteur nécessitera un débit d'eau d'environ 142 litres par seconde.

## 3 Flow-sheet simplifié

Nous présentons en figure 1 un flow-sheet simplifié du procédé de production d'ammoniac que nous allons étudier. Nous l'avons réalisé à l'aide d'une rapide recherche documentaire, voir sources [2], [3] et [4].

## Références

- [1] P.W. ATKINS, L. JONES et A. POUSSE. *Principes de chimie*. De Boeck, 2007.
- [2] David Léon BANQUY. « Procédé de production d'ammoniac et du gaz de synthèse correspondant ». Brevet européen EP0032096. 26 déc. 1980. URL : <http://worldwide.espacenet.com/publicationDetails/biblio?CC=EP&NR=0032096> (visité le 23/09/2014).
- [3] *Emissions Factors & AP 42. Compilation of Air Pollutant Emission Factors*. U.S. Environmental Protection Agency. URL : <http://www.epa.gov/ttnchie1/ap42/> (visité le 23/09/2014).

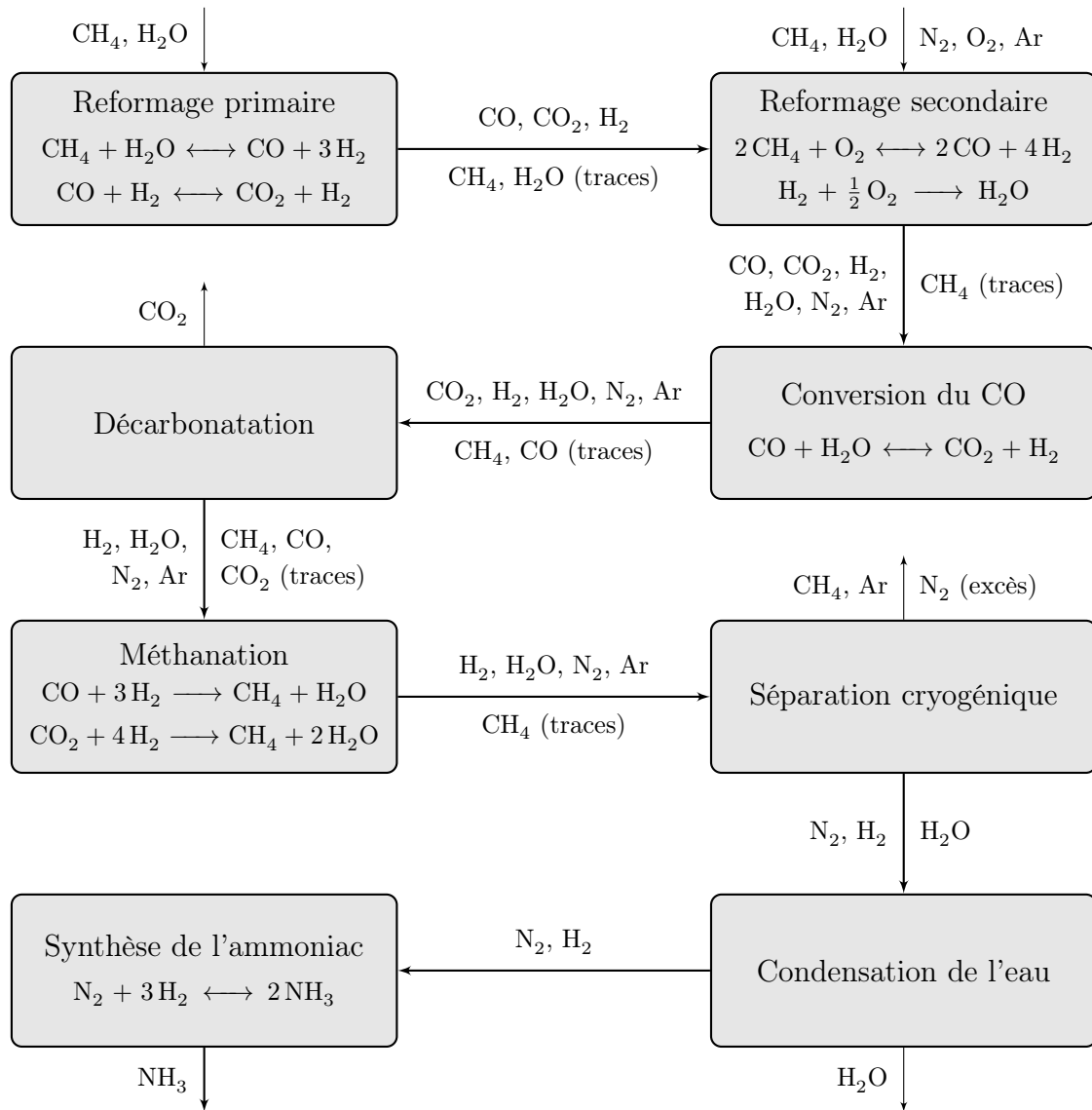


FIGURE 1 – Flow-sheet simplifié d'un procédé de production d'ammoniac. La mention « (traces) » indique des réactifs résiduels issus d'une réaction incomplète.

- [4] W.P. SCHMIDT et al. *Managing trace contaminants in cryogenic air separation*. Air Products et Chemicals, Inc. 2000. URL : <http://www.airproducts.com/~media/downloads/white-papers/M/en-managing-trace-contaminants-in-cryogenic-air-separation-whitepaper.pdf> (visit  le 23/09/2014).