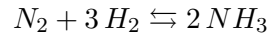


Modèle de gaz parfait pour la synthèse de l'ammoniac

Le procédé Haber Bosch – finalisé en 1913 - de synthèse chimique industrielle de l'ammoniac utilise la réaction



tous les composés étant gazeux. L'ammoniac est utilisé, entre autre, pour la production d'engrais azotés. Selon l'agence internationale de l'énergie, en 2020, la production mondiale d'ammoniac s'élevait à 152 millions de tonnes et représentait environ 2% de la consommation d'énergie primaire mondiale. Cette synthèse se déroule à haute pression (entre 200 et 300 bar) et haute température $\theta_0=500$ ° C.

On considère une enceinte de volume constant $V=13,0$ m³ dans laquelle on introduit les quantités suivantes : $n(N_2) = 20,0$ kmol et $n(H_2) = 45,0$ kmol. On considère que tous les gaz se comportent comme des gaz parfaits et que la réaction se déroule à température constante θ_0 .

1) Déterminer les expressions puis calculer, avant réaction chimique, pour chacun des constituants

- les fractions molaires
- les pressions partielles.

2) Soit t_1 la date à laquelle la moitié de la quantité de N_2 initialement présente a réagi. Calculer, à cette date, la pression P_1 dans l'enceinte. Commenter.

Application numérique : $x_{N_2} = 0,31$ et $x_{H_2} = 0,69$.

Pour les pressions partielles, on calcule la pression totale P_{tot} dans l'enceinte. Le mélange gazeux se comporte comme un gaz parfait. On a donc

$$P_{tot} = \frac{(n(N_2) + n(H_2)) RT_0}{V}$$

Et on a les relations suivantes pour les pressions partielles :

$$P_{N_2} = x_{N_2} P_{tot} \quad P_{H_2} = x_{H_2} P_{tot}$$

Application numérique :

$$P_{tot} = 321 \text{ bar} \quad P_{N_2} = 99 \text{ bar} \quad \text{et} \quad P_{H_2} = 222 \text{ bar.}$$

2) Si la moitié de la quantité de N_2 a réagi, l'avancement de la réaction vaut $\xi = \frac{n(N_2)}{2} = 10,0$ kmol.

A l'instant t_1 , on a donc les quantités suivantes :

$n(N_2)_1 = n(N_2) - \xi = 10,0$ kmol, $n(H_2)_1 = n(H_2) - 3\xi = 15,0$ kmol et $n(NH_3)_1 = 2\xi = 20,0$ kmol.

Toutes les espèces sont en phase gazeuse. On trouve pour la pression P_1 :

$$P_1 = \frac{(n(N_2)_1 + n(H_2)_1 + n(NH_3)_1) RT_0}{V}$$

Application numérique : $P_1 = 222$ bar

On a une diminution du nombre de molécules de gaz au cours de la réaction (4 molécules de réactifs pour 2 molécules de produit) ce qui implique une diminution de la pression totale du gaz.

On trouve bien une pression située entre 200 et 300 bars - voir données.

La pression est très élevée, il est probable que le modèle du gaz parfait ne soit pas adapté pour décrire cette phase gazeuse.

Correction :

1) On donne les expressions suivantes pour les fractions molaires de N_2 et de H_2 :

$$x_{N_2} = \frac{n(N_2)}{n(N_2) + n(H_2)}$$

$$x_{H_2} = \frac{n(H_2)}{n(N_2) + n(H_2)}$$