

## LC11 : Optimisation d'une synthèse industrielle

Éléments imposés : optimisation de réacteurs ouverts

Niveau : L3

Pré-requis : Chimie industrielle, thermochimie (premier et deuxième pps), cinétique chimique, catalyse hétérogène, réacteurs (piston, ouvert, fermé)

Bibliographie : Tech Ingé Acide Sulfurique j6095 v1, Tech Ingé Calcul des réacteurs catalytiques - Production de trioxyde de soufre j4030 v2, l'Elementarium

Introduction pédagogique : après un cours sur les réacteurs → voit ici utilité

Difficultés : beaucoup de notions différentes à aborder dans la leçon

Choix : Utilise acide sulfurique comme exemple fil conducteur

### Introduction

Contexte : s'intéresse à la production de acide sulfurique, plus de 560000 t/an en France

Utilisation pour des engrais (données sur l'élémentarium)

Industrie : transformation de composés de base en composés d'intérêts.

Synthèse industrielle différent de procédé industriel qui recouvre des outils plus larges (distillation, filtration...)

Pour tels tonnages synthèse nécessite d'être optimisée pour permettre économie et écologie.

### I. Aspects thermodynamiques

#### A. Cadre de l'étude

Historique : 1ère référence à acide sulfurique VIIIème siècle, 1570 étude de ses propriétés et 1740 production à grande échelle. A partir de 1810 production dans des chambres en plomb (TI j6095)

Aujourd'hui : utilise procédé de contact, écrire ou projeter équations.

(Eventuellement mettre schéma du réacteur TI j6095, préciser qu'il est adiabatique)

On s'intéresse à 2ème étape :  $2\text{SO}_2(\text{g}) + \text{O}_2(\text{g}) = 2\text{SO}_3(\text{g})$

Pour quantifier optimisation de la synthèse, on va s'intéresser au taux de conversion

$x = ([\text{SO}_2]_e - [\text{SO}_2]_s) / [\text{SO}_2]_e$  ou  $x = [\text{SO}_3]_s / ([\text{SO}_2]_s + [\text{SO}_3]_s)$

D'après la règle de Gibbs, la variance vaut :  $v = 3 + 2 - 1 - 1 = 3$ .

On peut faire varier 3 paramètres : lesquels ?

#### B. Influence de la température

Relation de Van't-Hoff :  $\text{dln}K/\text{dT} = \text{deltarH}/(\text{RT}^2)$

Calcul de deltarH à partir des valeur d'enthalpies de formation (à retrouver sur Elementarium)

On obtient deltarH = -99kJ/mol

→ la réaction est exothermique : une diminution de la température favorisera la réaction

graphique  $x = f(T)$  TI j4030 → à 1 atm il faut se placer à  $T < 550^\circ\text{C}$  pour avoir  $x > 0,9$  d'où les réfrigérants sur le réacteur

On voit déjà problème : compromis à trouver avec la cinétique

(si on veut aller plus loin : application du premier principe permet de trouver avancement x en fonction de delta T, résultat dans TI j4010 → au sein d'un réacteur adiabatique, la température varie linéairement avec le taux de conversion)

#### C. Influence de la pression

Loi de Guldberg-Waage :  $Q_r = x\text{SO}_3 / (x\text{SO}_2(x\text{O}_2)^{1/2}) * (P^\circ/P)^{1/2}$

Augmenter P permet d'augmenter  $Q_r$

Illustrer par graphes TI j4030 qui montre pressions supérieures. Mais attention augmenter P demande beaucoup d'énergie et est plus dangereux. Industriellement vers 1,4 bar pour raisons économiques.

Dernier paramètre sur lequel on peut jouer : composition.

#### **D. Influence de la composition**

Composés actifs : rapport  $SO_2/O_2$  doit valoir 2 pour avoir maximum de taux de conversion (montrer courbes TI j4030).

Composés inactifs : (ici  $N_2$  introduit avec  $O_2$ ) lors de l'ajout de gaz inactif déplacement de l'équilibre dans le sens qui entraîne d'augmentation de la quantité de matière du gaz. Ici cela favorise la réaction dans le sens indirect → pas ce qu'on veut.

Mais  $N_2$  absorbera de la chaleur → favorise réaction dans le sens direct.

## **II. Aspects cinétiques**

### **A. Influence de la température**

Si réaction trop rapide, rendement bas

Montrer courbe d'isovitesse fig. 5 TI j4030 → intègre critères cinétiques. Décrire : à basse température cinétique limitante, à haute température thermodynamique limitante.

Il faut trouver un compromis : température pour laquelle taux de conversion est max et vitesse pas trop lente. Courbe de progression optimale de T passe par tous les maxima.

(permet d'adapter longueur des différents lits dans le réacteur, en bout de chaque lit on veut passer par point de la courbe de progression).

### **B. Choix du catalyseur**

Catalyse hétérogène.

Caractéristiques : supports avec grande surface spécifique et grande porosité (silice), phase active  $V_2O_5$  et promoteur (oxydes alcalins), structure bâtonnets pour diminuer perte de charge TI j4030

Doit être résistant aux hautes températures et au flux de gaz.

Ouverture : réaction endothermique.

Questions : - spécificités des deux autres étapes de la synthèse de l'acide sulfurique ?

- Qu'est ce qu'on doit prendre en compte pour choisir un catalyseur ?
- Différence entre modèle présenté et vrai réacteur piston ?
- Possible de faire catalyse hétérogène en réacteur agité ?