

# LC-26-Optimisation d'un procédé chimique (CPGE)

Maud

12 juin 2022

## Pré-requis

•

## Références

- [1] Romain Barbe and Jean-François Le Maréchal. *La chimie expérimentale : CAPES et agrégation de sciences physiques. 2. Chimie organique et minérale*. Sciences sup Chimie. Dunod, Paris, 2007.
- [2] Anne-Sophie Bernard and Sylvain Clède. *Techniques expérimentales en chimie : Réussir les TP aux concours*. Dunod, 2012.
- [3] Danielle Cachau-Herreillat. *Des expériences de la famille acide-base : réussir, exploiter et commenter 50 manipulations de chimie*. LMD Chimie. De Boeck, Bruxelles, 3e édition. édition, 2009.
- [4] Florence Daumarie, Pascal Griesmar, and Solange Salzard. *Florilège de chimie pratique : 59 expériences commentées*. Collection enseignement des sciences 52. Hermann, Paris, 2e édition revue et augmentée. édition, 2002.
- [5] Bruno Fosset. *Chimie physique expérimentale*. Hermann, 2000.
- [6] Pierre Grécias and Stéphane Rédoglia. *Compétences prépas : MP, MP\*, PT, PT\* Chimie*. Tec et Doc, Lavoisier, 2014.
- [7] Florence Porteu-de Buchère. *Épreuves orales de chimie : CAPES, agrégation physique, chimie*. Je prépare. Dunod, Malakoff, 4e édition. édition, 2019.

## Table des matières

|          |                                                                      |          |
|----------|----------------------------------------------------------------------|----------|
| <b>1</b> | <b>Introduction</b>                                                  | <b>2</b> |
| <b>2</b> | <b>Grandeurs pertinentes pour optimiser une réaction</b>             | <b>3</b> |
| 2.1      | Rappel de thermodynamique . . . . .                                  | 3        |
| 2.2      | Variance et déplacement d'équilibre . . . . .                        | 4        |
| <b>3</b> | <b>Optimisation thermodynamique</b>                                  | <b>5</b> |
| 3.1      | Influence de la pression . . . . .                                   | 5        |
| 3.2      | Influence des constituants dans le mélange . . . . .                 | 5        |
| 3.2.1    | Déplacement d'équilibre par ajout d'un constituant inactif . . . . . | 5        |
| 3.2.2    | Déplacement d'équilibre par ajout d'un composé actif . . . . .       | 6        |
| 3.2.3    | Déplacement d'équilibre par élimination d'un sous-produit . . . . .  | 7        |
| 3.3      | Influence de la température . . . . .                                | 8        |
| <b>4</b> | <b>Optimisation cinétique</b>                                        | <b>8</b> |
| 4.1      | Influence de la température : Loi d'Arrhenius . . . . .              | 8        |
| 4.2      | Utilisation d'un catalyseur . . . . .                                | 9        |
| <b>5</b> | <b>Conclusion</b>                                                    | <b>9</b> |

# 1 Introduction

## Introduction pédagogique

### Objectifs pour les profs

- insister sur le compromis entre cinétique et thermo si les deux ne vont pas dans le même sens
- insister sur le fait que le quotient réactionnel est sans unité : il faut ajouter les  $P^\circ$  et les  $C^\circ$
- 

### Objectifs pour les élèves

- se familiariser avec les activités (même si l'eau n'est pas le solvant), surtout les pressions partielles
- reconnaître les paramètres intensifs
- calculer une variance : trouver toutes les relations entre les paramètres intensifs (difficultés)
- citer les principaux facteurs d'équilibre
- vision des enjeux à l'échelle industrielle
- 

### Activités pour les élèves

- 

On prend la synthèse de l'ammoniac comme fil directeur de la leçon et on va illustrer les différents moyens d'optimiser un procédé chimique à l'aide d'autres réactions plus simples. (**faut le dire clairement comme ça !** pour une étude complète voir [6] p.116)

#### Remarque

Les diagrammes binaires ne sont pas au programme de MP donc la variance ne peut pas être en pré-requis pour cette classe, contrairement au PSI.

### Remarques année précédente

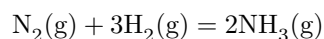
- **La leçon de Sylvio et Lucas est très bien**, du coup je m'en suis bcp bcp inspirée (ça vaut un petit 19 à l'oral pour Nicolas donc bon ...)
- Le fait d'introduire les grandeurs pertinentes : permet de poser les choses dès le départ. Bons liens entre la synthèse de l'ammoniac et les expériences : on fait les expériences, on les interprète, puis on revient au cas de l'ammoniac et on regarde ce que ça ferait. Le fil directeur est bon
- Il faut insister sur le fait que la cinétique est privilégiée par rapport à la thermo (même si on essaye quand même d'optimiser la thermo). Il faut bien expliquer ce qu'on entend par optimiser, et pourquoi on veut le faire.
- Parler de chimie verte en CCL ? Impact écologique, compromis énergétique, pas toujours en faveur de l'écologie...

## Introduction générale

En chimie on cherche à synthétiser des espèces chimiques. Le but est de trouver la meilleure méthode pour arriver aux produits. C'est un enjeu majeur des procédés chimiques industriels. L'idée est d'économiser les ressources et pourquoi pas de faire de la chimie plus verte (utiliser moins de substances toxiques, économie d'énergie). Pour illustrer comment on optimise un procédé chimique, on va étudier la synthèse de l'ammoniac avec le procédé de Haber-Bosch.

**Pourquoi l'ammoniac ?** Pourquoi l'ammoniac L'ammoniac est l'un des composés les plus synthétisés au monde (137 000 tonnes en 2012). En effet, il est utilisé comme réfrigérant, mais aussi pour la synthèse d'autres molécules et notamment des engrais. Il peut également servir de solvant.

Une des voies de synthèse de l'ammoniac se résume par l'équation suivante :



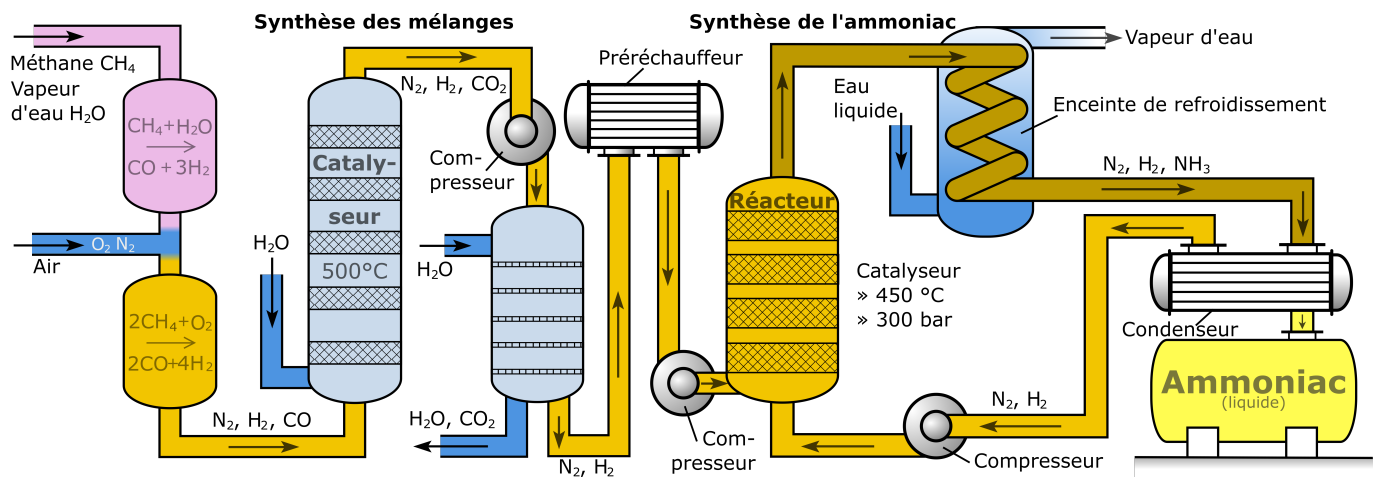


FIGURE 1 – Procédé de Haber-Bosch

Ici c'est le procédé en entier mais nous on va commencer par s'intéresser à la synthèse de l'ammoniac en particulier. On va essayer de comprendre les différentes méthodes mises en oeuvre pour optimiser cette synthèse.

### Transition

Dans un premier temps nous voulons qu'il y ait effectivement formation de l'ammoniac, pour cela on va utiliser des outils de thermodynamiques.

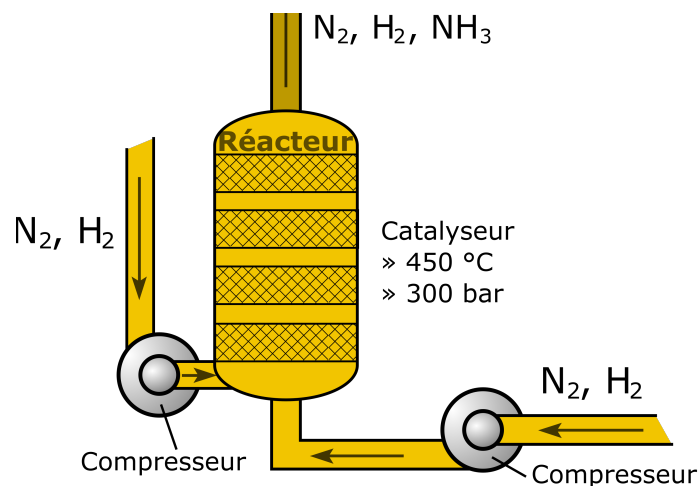


FIGURE 2 – Procédé de Haber-Bosch (zoom)

## 2 Grandeurs pertinentes pour optimiser une réaction

### 2.1 Rappel de thermodynamique

Soit une réaction chimique  $\sum \nu_i A_i = 0$ . On définit le quotient de réaction :

$$Q = \prod_i a_i^{\nu_i} \quad (1)$$

On a noté  $A_i$  le constituant  $i$ ,  $\nu_i$  le coefficient stoechiométrique associé au constituant  $i$  ( $\nu_i$  est positif si le constituant est un produit) et  $a_i$  l'activité du constituant. *Expliciter l'exemple sur  $\text{NH}_3$*

$$Q = \frac{P_{\text{NH}_3}^2 (P^\circ)^2}{P_{\text{H}_2}^3 P_{\text{N}_2}}$$

A l'équilibre thermodynamique, le quotient réactionnel est égale à la constante de réaction  $K^\circ$ . Pour quantifier l'évolution d'un système on s'intéresse à l'enthalpie libre de réaction. En effet on sait que pour un système physico-chimique nous avons la relation :

$$dG = \Delta_r G d\xi < 0 \quad \text{avec} \quad \Delta_r G = RT \ln \left( \frac{Q}{K^\circ} \right) \quad (2)$$

Ainsi on a  $d\xi > 0$  et donc une réaction qui a lieu dans le sens directe si  $\Delta_r G < 0$  soit  $Q < K^\circ$ .

## 2.2 Variance et déplacement d'équilibre

Un système Physico-chimique quelconque est défini par la connaissance de tous les constituants physico-chimiques présents et par la nature de tous les équilibres physiques (changements d'état) ou chimiques (réactions chimiques) entre eux. L'état d'équilibre d'un système se décrit toujours de façon **intensive**, indépendamment de la taille du réacteur : équilibre thermique + mécanique + chimique au sein de chaque phase.

Les paramètres intensifs d'un système peuvent être distingués de la façon suivante :

- les paramètres physiques : T, P
- les paramètres de composition, fraction molaire de chaque constituant dans chaque phase

Ces paramètres sont ce qu'on appelle des facteurs d'équilibre.

### Définition

On appelle **facteur d'équilibre** tout paramètre intensif dont la variation entraîne une évolution du système.

### Remarque

La composition est toujours facteur d'équilibre cependant les paramètres physiques ne le sont pas toujours. [6] p.110 : réaction athermique, réaction avec que des états condensés.

Ces paramètres interviennent dans le calcul de ce qu'on appelle la **variance**.

### Définition

La **variance** correspond au nombre nécessaire et suffisant de paramètres intensifs indépendants que l'expérimentateur peut choisir pour fixer totalement l'état d'équilibre du système.

Cela signifie que la variance est égale au nombre total de paramètres intensifs  $X$  diminué du nombre de relations  $Y$  existant entre eux à l'équilibre :  $V = X - Y$

Exemple de la variance pour la synthèse de l'ammoniac.

$$V = \underbrace{3}_{\text{composés}} - \underbrace{1}_{\text{équilibres chimiques indépendants}} + \underbrace{2}_{\text{Pression et température}} - \underbrace{0}_{\text{contraintes}} - \underbrace{1}_{\text{phases}} = 3 \quad (3)$$

On peut donc fixer 3 paramètres intensifs pour atteindre l'équilibre du système. **Cependant dans l'industrie, on impose que les réactifs sont imposés en proportion stoechiométrique, ceci impose une nouvelle contrainte et notre variance est alors égale à  $V = 2$ . Ici nous avons accès aux paramètres suivants :  $P, T, n_i$  avec  $n_i$  les quantités de matière initiales des constituants.**

### Remarque

Si  $V \leq 1$  alors en modifiant un facteur d'équilibre on a une rupture d'équilibre : on obtient un nouveau système où un des constituant a disparu par exemple. (donner un exemple avec une courbe d'ébullition sur un diagramme (P,T) ? Lorsqu'on quitte la courbe, il y a rupture d'équilibre). Si  $V \geq 2$  alors en modifiant un facteur d'équilibre on déplace l'équilibre (les autres paramètres du système vont évoluer vers un nouvel état d'équilibre). C'est dans ce deuxième cas que l'on veut travailler. On va chercher à modifier les paramètres intensifs pour optimiser la synthèse. On peut utiliser le principe de Le Chatelier qui dit que les effets s'opposent aux causes qui l'ont provoqué pour prédire le sens d'évolution du système.

### 3 Optimisation thermodynamique

Le Châtelier (1888) posa le principe de modération, permettant de prévoir qualitativement le sens de déplacement d'un équilibre chimique, à la suite d'une perturbation.

#### Définition

Tout modification d'un facteur d'équilibre entraîne une évolution vers un nouvel état d'équilibre, qui s'effectue dans le sens s'opposant aux causes qui lui ont donné naissance, c'est-à-dire en modère les effets.

#### 3.1 Influence de la pression

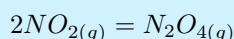
Dans ce cas là, le principe de Le Chatelier s'énonce de la manière suivante :

#### Pression

Si on augmente la pression, le système va évoluer pour faire diminuer sa pression, c'est à dire en consommant des molécules de gaz.

#### Manip' pression

et **BUP** Equilibre  $NO_2/N_2O_4$  On a un mélange de  $NO_2$  (g) et  $N_2O_4$  (g) dans une seringue fermé au bout. Seul  $NO_2$  (g) est coloré et est brun. On a alors l'équilibre suivant :



En soit on peut la faire nous même mais le gaz est toxique et en plus on voit pas bien de loin donc la vidéo c'est mieux.

On observe donc que l'équilibre se déplace dans le sens directe quand P augmente. En effet on peut écrire le quotient de réaction :

$$Q_r = \frac{P_{N_2O_4} P^\circ}{P_{NO_2}^2 P^\circ} = \frac{x_{N_2O_4} P^\circ}{x_{NO_2}^2 P}$$

Donc  $Q_r$  diminue quand la pression augmente ce que diminue  $\Delta_r G$  et donc favorise le sens directe. On peut retenir que l'on regarde la variation de quantité de moles de gaz entre les produits et les réactifs  $\Delta n_{gaz}$ .

**Pour l'ammoniac :**

$$Q = \frac{P_{NH_3}^2 P^\circ}{P_{H_2}^3 P_{N_2} P^\circ} = \frac{x_{NH_3}^2 P^\circ}{x_{H_2}^3 x_{N_2} P^2} \quad (4)$$

Donc on est dans le même cas, il faut augmenter la pression pour favoriser la production d'ammoniac, d'où la pression de plus de 300 bar.

#### Transition

On peut modifier un autre facteur d'équilibre, comme la compositions du système.

#### 3.2 Influence des constituants dans le mélange

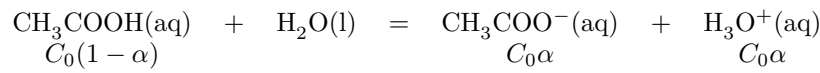
Un autre manière de modifier  $Q$  pour favoriser un sens de réaction est de modifier les constituants du mélange.

##### 3.2.1 Déplacement d'équilibre par ajout d'un constituant inactif

On peut se demander ce qui se passe si on ajoute, dans le système des constituant qui ne participe pas à la réaction, comment cela va-t-il modifier  $Q$  et ainsi dans quel sens va évoluer notre réaction ? Nous allons étudier ceci dans l'exemple de la dilution de l'acide éthanoïque.

#### Dilution de l'acide éthanoïque

[3] p.141 Il faut étalonner le conductimètre pour avoir le taux de dissociation.



$$Q = \frac{[\text{CH}_3\text{COO}^-][\text{H}_3\text{O}^+]}{[\text{CH}_3\text{COOH}]C_0} = \frac{1}{V} \frac{n(\text{CH}_3\text{COO}^-)n(\text{H}_3\text{O}^+)}{n(\text{CH}_3\text{COOH})C_0} \quad (5)$$

On observe que plus le volume va être important et plus on va diminuer  $Q$ . Ceci va donc entraîner un déplacement de l'équilibre dans le sens direct. Ceci s'appelle la loi de dilution d'Oswald.

On peut être plus quantitatif en mesurant le taux de dissociation de l'acide :  $\alpha = \frac{[\text{CH}_3\text{COO}^-]_t}{[\text{CH}_3\text{COOH}]_0}$ . On peut alors réécrire  $Q$  en fonction de  $\alpha$  :

$$Q = \frac{[\text{CH}_3\text{COOH}]_0}{C^\circ} \frac{\alpha^2}{1-\alpha}$$

Loi de Kohlrausch :

$$\sigma = \sum_i c_i \lambda_i^\circ \quad (6)$$

$$= [\text{CH}_3\text{COO}^-] \lambda^\circ(\text{CH}_3\text{COO}^-) + [\text{H}_3\text{O}^+] \lambda^\circ(\text{H}_3\text{O}^+) \quad (7)$$

$$= \alpha [\text{CH}_3\text{COOH}]_0 (\lambda^\circ(\text{CH}_3\text{COO}^-) + \lambda^\circ(\text{H}_3\text{O}^+)) \quad (8)$$

$$(9)$$

### Remarque

domaine de validité de Kohlrausch : aller voir [2] p.65

On peut ainsi déduire  $\alpha$  et en posant  $R = \frac{1-\alpha}{\alpha^2}$ , on a

$$pR = pC_0 - pKa$$

ceci nous permet de vérifier que nous avons bien le bon comportement. L'ordonnée à l'origine nous donne  $-pKa$  et on trouve  $4.8 \pm 1.2$  (avec la valeur tabulée : 4.76).

**Pour l'ammoniac** : avec le même raisonnement on trouve qu'il ne faut pas mettre de gaz inerte, il faut avoir les deux réactif :

$$Q = \frac{n_{\text{NH}_3}^2 n_{\text{tot}}^{\text{gaz}^2}}{n_{\text{H}_2}^3 n_{\text{N}_2}} \left( \frac{P^\circ}{P_{\text{tot}}} \right)^2 \quad (10)$$

### Transition

Ici, on peut se demander dans quelle proportion chaque réactif doit être introduit pour optimiser la réaction.

## 3.2.2 Déplacement d'équilibre par ajout d'un composé actif

Tout d'abord il faut se demander ce que l'on veut maximiser. Ici dans le cas de l'ammoniac pour des raisons de séparation on préfère maximiser la fraction molaire en produit :  $x_{\text{NH}_3}$ . Le quotient réactionnel s'écrit :

$$Q = \frac{x_{\text{NH}_3}^2}{x_{\text{H}_2}^3 x_{\text{N}_2}} \frac{P^\circ 2}{P^2} \quad (11)$$

A l'équilibre,  $K^\circ = Q_r$ . On fait un tableau d'avancement avec le nombre totale de moles.

$$\begin{array}{ccc|c} \text{N}_{2(\text{g})} & + & 3\text{H}_{2(\text{g})} & = & 2\text{NH}_{3(\text{g})} & \left| \begin{array}{c} n_{\text{tot}} \\ 1+a \\ 1+a-2\xi \end{array} \right. \\ 1 & & a & & 0 & \\ 1-\xi & & a-3\xi & & 2\xi & \end{array}$$

On peut résoudre l'équation qui revient à écrire

$$K = \frac{4\xi^2 (1+a-2\xi)^2}{(a-3\xi)^3 (1-\xi)}$$

On peut alors le tracer en fonction de  $x_{\text{NH}_3} = \frac{2\xi}{1+a-2\xi}$ . (on la trace sur python.

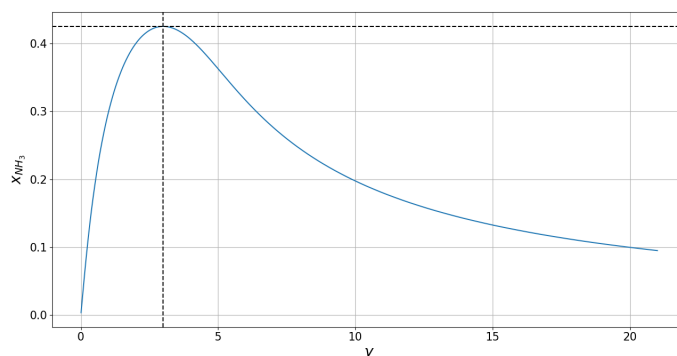


FIGURE 3 – Evolution de la fraction molaire en sortie en fonction du rapport entre les quantité de matière initiale

On observe un maximum pour  $\xi = 3$  ce qui justifie le fait que dans le procédé Haber Bosch les réactifs sont introduit en quantités stoechiométrique. C'est cette contrainte qui faisait tomber notre variance à 2.

#### Transition

On vient de voir comment modifier les quantités des réactifs pour optimiser le procédé, quant est-il pour les produits ?

### 3.2.3 Déplacement d'équilibre par élimination d'un sous-produit

#### Remarque

Certes cette partie ne va pas nous éclairer sur la synthèse de l'ammoniac MAIS on veut des questions sur le Dean Stark ... Si on est à la bourre on en parle pas. Si on est chaud, on peut en préparation faire un avec et un sans Dean-Stark mais ça paraît un peu tendu.

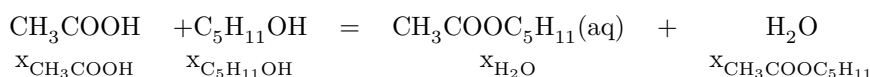
#### Manip' : Dean Stark

[1] P.76, on doit peser et évaporer.

$$Q_r = \frac{[ester][H_2O]}{[alcool][acide]} \quad (12)$$

#### Attention

Ici, l'activité de l'eau n'est pas 1 car ici il ne s'agit pas d'un solvant.



$$Q_r = \frac{x_{ester}x_{H_2O}}{x_{alcool}x_{acide}} \quad (13)$$

Donc  $Q_r$  diminue lorsque l'on élimine l'eau. Donc on va tirer la réaction dans le sens 1.

#### Transition

Il reste un dernier facteur de d'équilibre dont on a pas étudié l'influence : la température. On vient de voir différentes façon de modifier le quotient réactionnel pour optimiser la réaction. Voyons maintenant comment on peut modifier la constante d'équilibre pour optimiser le procédé.

### 3.3 Influence de la température

#### Remarque

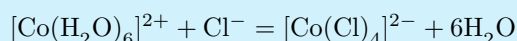
On peut faire la dissolution de l'acide benzoïque. cf. LC evolution et équilibre chimique [5] p.106

On a identifié un autre paramètre dans la première partie, la température, comment joue-t-elle ? En effet on observe que  $Q_r$  ne dépend pas explicitement de la température dans nos formules.

On a déjà vu l'influence de la température mais dans un autre cadre. En effet, du cours sur les conditions d'équilibre et d'évolution, on a pu voir que la température intervenait dans la valeur de la constante d'équilibre.

#### Manip' température

Complexation du cobalt [7] P.69



Dans un erlenmeyer de 100ml introduire :

- 10 ml d'eau
- 40 ml d'acétone
- 1.19g de chlorure de cobalt hexahydraté (attention prendre les précautions nécessaires, c'est un CMR cancérigène, mutagène et reprotoxique)

répartir dans trois tubes à essai et plonger en un dans de la glace, et un dans un bain chaud à 70°C On a déplace alors l'équilibre avec le  $[\text{Co}(\text{H}_2\text{O})_6]^{2+}$  bleu et le  $[\text{Co}(\text{Cl})_4]^{2-}$  rose. La réaction est endothermique ( $\Delta_r H^\circ = 92.7 \text{ kJ.mol}^{-1}$ )

Usuellement, on fait le raisonnement inverse : on calcule l'enthalpie de réaction à l'aide la loi de Hess et on en déduit s'il vaut mieux être à haute ou basse température. Pour interpréter l'influence de la température, on utilise la loi de Van't Hoff.

$$\frac{\ln(K^\circ)}{dT} = \frac{\Delta_r H^\circ}{RT^2} \quad (14)$$

On distingue alors deux cas en fonction de si la réaction est exothermique ou endothermique.

- Cas endothermique :  $\Delta_r H^\circ > 0$  donc  $K^\circ$  augmente avec  $T$ , on favorise le sens direct.
- Cas exothermique :  $\Delta_r H^\circ < 0$  donc  $K^\circ$  diminue avec  $T$ , on favorise le sens indirect.

**Pour l'ammoniac** : Pour une la synthèse de l'ammoniac :  $\Delta H^\circ = -92,4 \text{ kJ.mol}^{-1}$  à 25°C. Nous avons donc une réaction exothermique, la réaction est donc favorisé à basse température.  $K^\circ(400^\circ\text{C}) = 10^{-6}$  alors que  $K^\circ(25^\circ\text{C}) = 10^5$ .

#### Transition

Mais là dans le cas de la température c'est pas bon du tout pour l'ammoniac ? pourquoi ce choix ? question de cinétique

## 4 Optimisation cinétique

Nous avons mis de côté tout un aspect des réactions chimiques : en effet il est possible que des réaction soient favorisées thermodynamiquement mais soit très lentes si bien qu'en pratique elle ne se produise pas. Par exemple, le verre est instable...

### 4.1 Influence de la température : Loi d'Arrhenius

Or si vous vous rappelez de vos cours de première année la température est un facteur important de la cinétique chimique. En augmentant l'agitation thermique, nous augmentons les chances de contacts et les chance que la réaction se face (passage de la barrière énergétique : je sais pas si j'ai le droit d'en parler, mais je peux dire : les molécules des réactifs pour se transformer en leurs produit on doit aller casser des liaisons, pour en créer d'autre, mais il faut



imaginer que pendant le processus, la molécule passe par des états qui ne sont pas favorables énergétiquement, aussi il faut que la molécule ait assez d'énergie pour dépasser cette "barrière" énergétique). Ceci est notamment décrit par la loi d'Arrhenius :

$$k = A \exp\left(\frac{-E_a}{RT}\right)$$

Avec  $k$  la constante de vitesse de la réaction,  $E_a$  l'énergie d'activation (en générale de l'ordre de 100 kJ/mol et  $A$  le facteur préexponentiel. Pour se donner une idée de l'influence de la température, si on passe de  $T_1 = 20\text{ °C}$  à  $T_2 = 30\text{ °C}$ , on a alors :

$$\frac{k_2}{k_1} = \exp\left\{-\frac{E_a}{R} \left(\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1}\right)\right\} = 3.87 \simeq 4$$

Donc la vitesse de la réaction est multipliée par 4. En augmentant la température on augmente la vitesse de réaction. Il y a donc un compromis à faire dans la synthèse de l'ammoniac. Ce n'est pas toujours le cas : une réaction endothermique sera favorisée thermodynamiquement et cinétiquement à haute température.

### Manip : cinétique

CF. LC Rémi [4] p.71 pour déterminer l'énergie d'activation, ça peut être pas mal parce qu'on a une manip thermo et une cinétique

## 4.2 Utilisation d'un catalyseur

Un catalyseur est une espèce que n'apparaît pas de le bilan mais qui est favorise la réaction. Il est important de souligner que l'on ne vas pas déplacer l'équilibre, nous allons simplement accélérer la réaction. On peut citer l'exemple de la catalyse enzymatique dans le vivant, ou des pots d'échappement qui permettent de limiter la nocivité des gaz d'échappement et permet notamment d'oxyder le CO ([lire ici un peu](#)).

| Catalyse      | Homogène                                              | Hétérogène                                     | Enzymatique                                                                            |
|---------------|-------------------------------------------------------|------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------|
| Avantages     | Toutes les molécules de catalyseurs sont disponibles. | Facilement recyclable.                         | Diminution du coût énergétique, augmentation du rendement, limite les rejets toxiques. |
| Inconvénients | Difficilement recyclable                              | Seule la surface du catalyseur est disponible. | Spécifique pour une réaction en particulier. Spécifique d'un milieu (solvant, pH)      |

Dans le cas de l'ammoniac : C'est le cas pour l'ammoniac, avec un catalyseur au fer alpha (cubique centré). Ici c'est une catalyse hétérogène.

## 5 Conclusion

Nous avons vu que pour un procédé chimique, il fallait réfléchir à tout les paramètres à notre disposition pour optimiser la synthèse. On a vu que d'un point de vue thermodynamique (stabilité) si nous voulons favoriser le sens direct d'une réaction il nous faut soit augmenter  $K^\circ$  soit diminuer  $Q_r$ . Pour ce faire nous pouvons modifier les paramètres suivant (en fonction de la variance) : la température, la pression et les quantité des matières initiales (ou au cours de la réaction). Cependant, il nous est apparu que ce n'est pas le seul facteur permettant une production efficace, en effet si les produit sont thermodynamiquement plus stable mais que la cinétique de la réaction est très lente, nous n'avons pas un rendement optimal (rendement a mettre plus haut aussi). Aussi il faut également étudier les facteurs influençant la vitesse de réaction tels que la température et l'utilisation de catalyseur.

## BO

|                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                          |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <p>Caractérisation de l'état intensif d'un système en équilibre : nombre de degrés de liberté (variance) d'un système à l'équilibre.</p> <p>Optimisation d'un procédé chimique :</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- par modification de la valeur de <math>K^\circ</math>;</li> <li>- par modification de la valeur du quotient réactionnel.</li> </ul> | <p><b>à l'équilibre en solution aqueuse.</b></p> <p>Reconnaître si une variable intensive est ou non un paramètre d'influence d'un équilibre chimique. Recenser les variables intensives pertinentes de description du système à l'équilibre pour en déduire le nombre de degrés de liberté de celui-ci.</p> <p>Identifier les paramètres d'influence et leur sens d'évolution pour optimiser une synthèse ou minimiser la formation d'un produit secondaire indésirable.</p> <p><b>Approche documentaire</b> : à partir de documents décrivant une unité de synthèse industrielle, analyser les choix industriels, aspects environnementaux inclus.</p> |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|

FIGURE 4 – BO MP