

## بررسی سازوکار و میزان تولید هیدروژن سیانید در کوره‌های سوزاندن پلی‌اکریلونیتریل و پیشنهاد روش مناسب جهت حذف گاز سیانید

زینب حاج علی فرد<sup>۱</sup>، فریبرز رشیدی<sup>۲</sup> و رامین بدرنژاد<sup>۳</sup>

۱- کارشناس ارشد، مهندسی شیمی، دانشگاه صنعتی امیرکبیر، zfard@aut.ac.ir

۲- استاد، مهندسی شیمی، دانشگاه صنعتی امیرکبیر (نویسنده مخاطب)، rashidi@aut.ac.ir

۳- دکتری، مهندسی شیمی، دانشگاه صنعتی امیرکبیر، badrnezhad@yahoo.com

(دریافت: ۱۳۹۲/۳/۲۳، دریافت آخرین اصلاحات: ۹۳/۸/۳، پذیرش: ۹۳/۹/۲۰)

امروزه جوامع قوانین سخت‌گیرانه‌ای برای حد مجاز آلاینده‌های هوای خروجی از واحدهای صنعتی تصویب کرده‌اند. هیدروژن سیانید، که یکی از مهم‌ترین و خطرناک‌ترین گازهاست، آلاینده خروجی از فرایند حرارتی پلیمرهای دارای گروه‌های نیتریل مانند پلی‌اکریلونیتریل است. در این مقاله، مکانیزم تولید هیدروژن سیانید از پیرولیز پلی‌اکریلونیتریل بیان شده و مقدار هیدروژن سیانید خروجی از کوره‌های تولید لیاف کربن در یک واحد تحقیقاتی در ایران ارائه شده است. مقدار هیدروژن سیانید خروجی در سه نقطه کوره اکسیداسیون، کوره دما بالا و قبل از ورود به واحد تصفیه در دو حالت تولید ۱۵۰ و ۱۹۶ لیف ارائه شده است. بیش‌ترین مقدار آلاینده خروجی در کوره دما بالا مشاهده شد و در حالت تولید ۱۹۶ لیف کربن، انتشار هیدروژن سیانید به دو برابر افزایش یافت. هدف اصلی در این مقاله انتخاب سیستمی مناسب جهت حذف آلاینده‌های خروجی از کوره‌هاست که مسئله حائز اهمیت در حوزه کوره و احتراق محسوب می‌شود. بدین منظور سیستم‌های مختلف برای کاهش مقدار هیدروژن سیانید خروجی بررسی شدند و با توجه به آنکه جذب سیستمی مناسب برای حذف آلاینده‌ها در دی‌ها و غلظت‌های متفاوت است و همچنین روشی با هزینه کمتر نسبت به سایر روش‌هاست، این روش انتخاب شد. در ادامه، برای حذف هیدروژن سیانید توسط روش جذب، سیستمی شامل دو برج جذب آکنده متوالی با استفاده از نرم‌افزار قدرتمند Aspen Plus و بسته ترمودینامیکی Electrolyte NRTL-RK شبیه‌سازی شده و مقدار بهینه پارامترهای عملیاتی نظیر غلظت سود، دبی مایع و دمای مایع و پارامترهای تجهیزات نظیر ارتفاع برج‌ها پیشنهاد شدند.

**کلیدواژگان:** لیاف کربن، پلی‌اکریلونیتریل، هیدروژن سیانید، کوره، جذب

### مقدمه

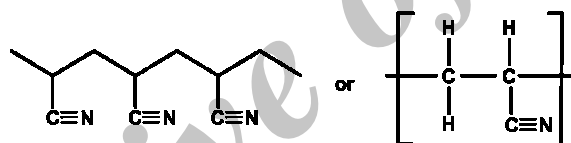
با صنعتی شدن دنیا، پیشرفت فناوری‌ها، افزایش جمعیت و ازدیاد مصرف منابع انرژی کیفیت هوای شهرها کاهش یافت. پایین آمدن کیفیت هوای محلی معمولاً ناشی از تولید و انتشار برخی از آلاینده‌ها مانند ترکیبات پیچیده اسیدی، ازن و سایر آلاینده‌های فتوشیمیایی و همچنین ذرات آلاینده و منوکسیدکربن و ذرات سمی و سرطان‌زای گوناگون است که جزء ترکیبات طبیعی هوا نیستند و در نتیجه عوامل مذکور به وجود آمده‌اند [۱].

یکی از این صنایع آلاینده، که در سی سال اخیر به شدت مورد توجه قرار گرفته است، صنعت تولید لیاف کربن است. لیاف کربن-الیافی که دارای ۹۰ درصد کربن هستند- به دلیل داشتن خصوصیات نظیر استحکام کششی و حرارتی زیاد، مدول الاستیکی بالا و وزن مخصوص کم بسیار مورد توجه قرار گرفته‌اند و کاربردهای چشمگیر آن‌ها در تمام عرصه‌ها نظیر صنایع هوافضا، حمل‌ونقل، پزشکی، ساختمانی و ورزشی مشاهده می‌شود [۲]. با کمک مهندسان و متخصصان کشور، ایران یازدهمین

کشور در دنیا است که الیاف کربن تولید می‌کند. با این حال، این فناوری نوین، که به‌تازگی در کشور ما هم به همت متخصصان پایه‌گذاری شده است، مانند سایر صنایع پیشرفته عاری از مضراتی برای محیط پیرامون ما نیست.

الیاف کربن از طریق پیرولیز پیش‌زمینه‌های آلی که به شکل الیاف‌اند ساخته می‌شوند. الیاف پیش‌زمینه عبارت‌اند از: پلی‌اکریلونیتریل، الیاف سلولزی و قیر حاصل از قطران زغال سنگ، که حدود ۹۰ درصد الیاف کربن تولیدی در سطح تجاری در دنیا از الیاف پلی‌اکریلونیتریل به‌دست می‌آیند [۲]. در واقع انجام عملیات حرارتی موجب حذف عناصری مانند اکسیژن، نیتروژن و هیدروژن می‌شود و در نهایت فقط کربن به شکل الیاف باقی می‌ماند.

مطالعه رفتار پلیمرهای دارای نیتروژن در هنگام حرارت دیدن، برای به‌دست آوردن اطلاعات بهتری درباره نقشی که آن‌ها در محیط زیست ایفا می‌کنند، حائز اهمیت است. تجزیه حرارتی پلیمرهای دارای نیتروژن همواره گازهای سمی نظیر هیدروژن سیانید و آمونیاک تولید می‌کنند که این موضوع باعث آسیب‌های خطرناکی به محیط زیست می‌شود [۳]. ساختار پلیمر پلی‌اکریلونیتریل در شکل ۱ آمده است [۴]. مهم‌ترین این آلاینده‌ها هیدروژن سیانید است که ترکیبی بسیار خطرناک و سمی با بوی بادام تلخ است که به‌راحتی در آب و الکل حل می‌شود و میزان ۲۰۰ میلی گرم از آن در هوا باعث کشته‌شدن انسان پس از ۱۰ دقیقه می‌شود و این گاز از طریق پوست انسان نیز جذب می‌شود [۵]. همچنین در صورت انتشار هیدروژن سیانید در اتمسفر، این ماده تا زمان‌های طولانی باقی می‌ماند و با سازوکارهای طبیعی اتمسفر حذف نمی‌شود. بنابراین، باید از ورود این گاز به اتمسفر جلوگیری کرد. همچنین ماده ۱۵ قانون نحوه جلوگیری از آلودگی هوا مصوب ۱۳۷۴/۲/۳ مجلس شورای اسلامی مقدار حد مجاز خروجی به هوا برای هیدروژن سیانید را ۸ پی‌پی‌ام اعلام کرده است. با توجه به مسایل گفته شده لازم است مکانیزم تولید این آلاینده در فرایند تولید الیاف کربن و میزان آن بررسی شود.

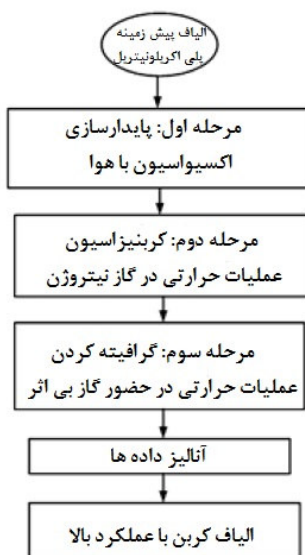


شکل ۱- ساختار پلیمر پلی‌اکریلونیتریل [۴]

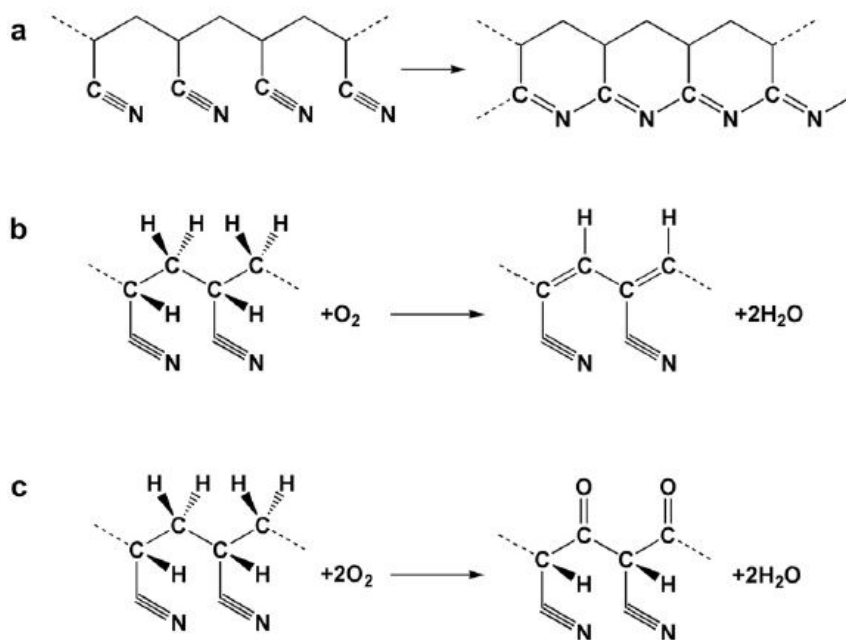
### مکانیزم تولید گازهای آلاینده در طی فرایند تولید الیاف کربن

تولید الیاف کربن از الیاف پیش‌زمینه پلی‌اکریلونیتریل به‌ترتیب در سه مرحله پایدارسازی، کربنیزاسیون و گرافیت‌شدن تحت شرایط کنترل شده انجام می‌گیرد. درک صحیح از عملیات حرارتی و اکسیداسیون در این فرایند پیچیده لازمه دست‌یافتن به الیافی با مقاومت کششی بالا و در عین حال رسیدن به حداقل میزان گازهای انتشار یافته است، هرچند که این دو موضوع معمولاً در جهت عکس یکدیگر تغییر می‌کنند. به‌دلیل جدید بودن فناوری الیاف کربن در دنیا مطالعات کمی روی این موضوع صورت گرفته است. الیاف پلی‌اکریلونیتریل ابتدا تحت عملیات کششی قرار می‌گیرند و به‌طور هم‌زمان در دمای ۲۰۰ تا ۳۰۰ درجه سانتی‌گراد در هوا اکسید می‌شوند که پس از آن زنجیره دراز پلیمر پلاستیک‌مانند به یک ترکیب حلقه‌ای غیرپلاستیکی یا یک ترکیب راست زنجیر تبدیل می‌شود. سپس، الیاف در دمای حدود ۱۰۰۰ درجه سانتی‌گراد در گاز بی‌اثر که معمولاً نیتروژن است کربنیزه می‌شود. سپس برای بهبود قرارگیری بلورها در جهت محور الیاف باید آن‌ها را در دمایی بین ۱۵۰۰ تا ۳۰۰۰ درجه سانتی‌گراد باز هم حرارت داد تا اینکه الیاف نهایی دارای ۹۲ تا ۱۰۰ درصد کربن باشد. در طی این زنجیره عملیات حرارتی، قطر الیاف کاهش می‌یابد، ساختار آنها بزرگ‌تر می‌شود و ناخالصی‌های نیتروژن آنها حذف می‌شوند. طرحواره فرایند تولیدی الیاف کربن در شکل ۲ آورده شده است [۴]. در طی مراحل پایدارسازی و کربنیزاسیون، مجموعه‌ای از واکنش‌های

شیمیایی در فاز گاز-جامد رخ می‌دهند. در پایدارسازی، ابتدا سیکل‌شدن اتفاق می‌افتد که در اصل تبدیل گروه‌های نیتریل به پیوندهای دوگانه بین کربن و نیتروژن است. پس از آن در هیدروژن‌زدایی، پیوند بین دو اتم کربن تشکیل می‌شود و در اکسیداسیون گروه‌های کربونیل به‌وجود می‌آیند. این سه نوع واکنش (شکل ۳) در نهایت باعث تشکیل یک ماکرومولکول نردبانی شکل، مقاوم به حرارت و غیرقابل ذوب می‌شوند [۵،۴]. سپس، در دو مرحله کربونیزاسیون، عناصر غیرکربنی موجود در ماکرومولکول اولیه الیاف پلی‌اکریلونیتریل به شکل مواد گازی شکل می‌شوند.



شکل ۲- طرحواره تبدیل پلی‌اکریلونیتریل به الیاف کربن [۴]



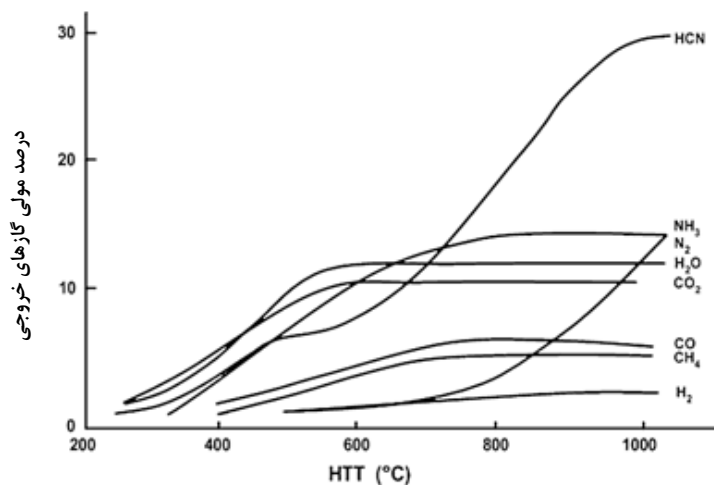
شکل ۳- واکنش‌های بنیادین مرحله پایدارسازی الیاف پلی‌اکریلونیتریل، (a) سیکل‌شدن (b) هیدروژن‌زدایی (c) اکسیداسیون [۵]

در یکی از جدیدترین و کامل‌ترین مطالعات، با استفاده از آنالیز FTIR<sup>1</sup> مشاهده شد که سه واکنش ذکر شده در مرحله پایدارسازی لزوماً به صورت متوالی رخ نمی‌دهند و مکانیزم‌های مختلفی برای سینتیک مرحله پایدارسازی پیشنهاد شدند. به طور نمونه، پیشنهاد شده است که اگر هیدروژن‌زدایی قبل از سیکل‌شدن اتفاق بیفتد، ابتدا، یک گروه هیدروکسیل به گروه‌های کربن-کربن با پیوند دوگانه متصل می‌شود که به دلیل ناپایداری هیدروژن موجود در گروه هیدروکسیل، این گروه عاملی جدید معروف به هیدروکسیل پیریدین در واکنش با سایر کربن‌ها با پیوند دوگانه، در نهایت گروه کربونیل را تشکیل می‌دهد [۴، ۵]. آنها نشان دادند که واکنش سیکل‌شدن از نوع مرتبه اول و دو واکنش هیدروژن‌زدایی و اکسیداسون از نوع شبه مرتبه دوم‌اند. همچنین بیان کردند که تأثیر دما بر سرعت واکنش اکسیداسیون از همه بیشتر است و پس از آن به ترتیب واکنش‌های هیدروژن‌زدایی و سیکل‌شدن. پس، محدوده دمای پایین برای واکنش سیکل‌شدن مناسب است، در حالی که برای واکنش اکسیداسیون محدوده دمای بالا بهتر است. به همین دلیل، توصیه می‌شود در مرحله پایدارسازی دما به تدریج افزایش یابد [۵]. با این حال، عمده هیدروژن سیانید تولیدی در مرحله دوم یعنی در کربنیزاسیون تولید می‌شود. پس، نوع عملیات حرارتی و دما در کربنیزاسیون بسیار تعیین‌کننده است [۴]. در تأیید این موضوع، واتانابه و همکاران ثابت کردند که تشکیل هیدروژن سیانید در طی پیرولیز پلی‌اکریلونیتریل از دمای ۳۰۰ درجه سانتی‌گراد به بعد شروع می‌شود [۷]. سرعت گرم‌کردن در مراحل اولیه کربنیزاسیون عموماً کم است (چند درجه سانتی‌گراد بر دقیقه) تا آزاد شدن مواد تبخیرشونده به الیاف صدمه نهد. بیشتر مواد فرار در زیر ۱۰۰۰ درجه سانتی‌گراد از الیاف خارج می‌شوند و تنها کربن و مقدار کمی نیتروژن (تقریباً ۶ درصد) باقی می‌مانند. در طی مراحل اولیه کربنیزه شدن (محدوده ۵۰۰-۴۰۰ درجه سانتی‌گراد)، گروه‌های هیدروکسیل موجود در الیاف پلی‌اکریلونیتریل اکسید شده، شروع به واکنش و ایجاد اتصالات عرضی می‌کنند که این امر به آرایش مجدد و اتصال بخش‌های حلقوی شده کمک می‌کند. این اتصال عرضی احتمالاً ساختار پلیمر را تثبیت می‌کند، در حالی که باقی‌مانده اجزای خطی و موادی که از اجزای حلقوی یا از زنجیره‌ها جدا شدند، به صورت مواد گازی جدا می‌شوند. این ساختارهای حلقوی شده در حین جدایش هیدروژن شروع به اتصال در مناطق پیرامونی می‌کنند و ساختاری شبه گرافیتی را به وجود می‌آورند که شامل سه شش‌ضلعی در جهت پیرامونی است که به وسیله اتم‌های نیتروژن به هم اتصال یافته‌اند. چنانچه ثابت کرد که از طریق کربنیزاسیون در حضور اتمسفر دارای بخارات هیدروژن کلرید می‌توان در عین افزایش درصد کربن نهایی، مقدار هیدروژن سیانید تولیدی را هم کاهش داد، اما هیدروژن کلرید هم باعث ایجاد خوردگی می‌شود و هم گران‌تر از گاز بی‌اثر است [۸]. در تحقیقی دیگر ساها و همکاران نشان دادند که در صورتی که افزایش دما در طی کربنیزاسیون به آرامی صورت گیرد، هیدروژن سیانید کمتری تولید می‌شود. همچنین آن‌ها ثابت کردند هرچه دانسیته الیاف کربن نهایی کمتر باشد، هیدروژن سیانید کمتری در طی مرحله کربنیزاسیون تشکیل خواهد شد [۹].

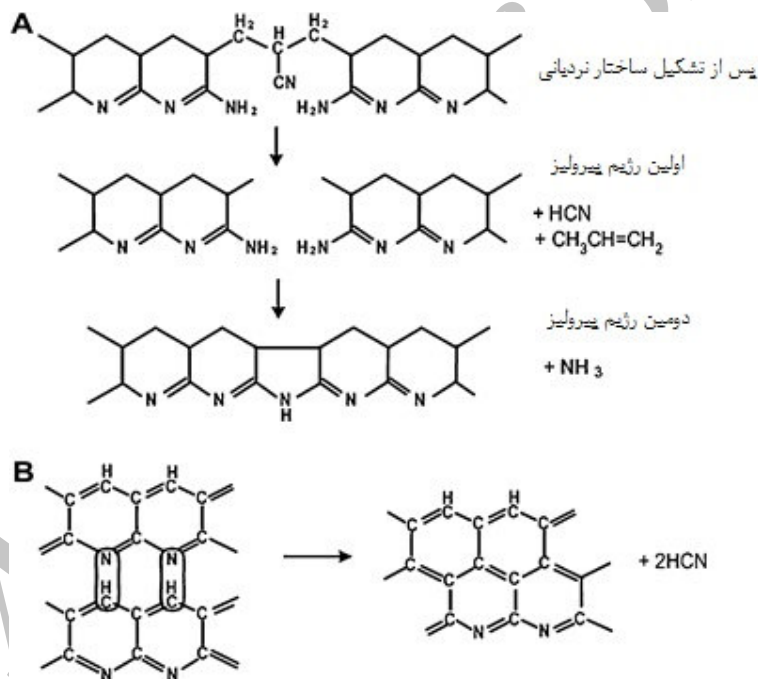
نیلسن و همکاران پودر پلی‌اکریلونیتریل را در دماهای مختلف در یک راکتور بستر ثابت از کوارتز تحت عملیات حرارتی قرار دادند و گازهای آلاینده خروجی را با روش FTIR ارزیابی کردند و مشاهده کردند که در پیرولیز پلی‌اکریلونیتریل، گازهای هیدروژن سیانید، آمونیاک، نیتروژن، کربن دی‌اکسید، کربن مونوکسید، هیدروژن و آب تولید می‌شوند. آنها همچنین مشاهده کردند که اگر فرایند حرارت‌دهی به آرامی صورت گیرد، قسمتی از هیدروژن سیانید به آمونیاک تبدیل می‌شود [۱۰]. همچنین مشاهده کردند که در دماهای بالاتر از ۵۰۰ درجه سانتی‌گراد تولید هیدروژن سیانید بیشتر از آمونیاک است. آن‌ها ثابت کردند که تولید هیدروژن سیانید در پیرولیز پلی‌اکریلونیتریل ۱۰۰ مرتبه بیشتر از پیرولیز نایلون ۶ است [۱۰].

باهل و دونت در آزمایش‌های خود نشان دادند که عمده گازهای آلاینده تولیدی هیدروژن سیانید و آمونیاک‌اند که نتایج گازهای خروجی از مرحله کربنیزاسیون در آزمایش آن‌ها در شکل ۴ آمده است [۱۱]. وات سازوکار تولید هیدروژن سیانید و آمونیاک در طی پیرولیز پلی‌اکریلونیتریل را به صورت واکنش‌های داده شده در شکل ۵ پیشنهاد کرده که در مطالعات دیگران هم اکثراً این مکانیزم مورد استناد قرار گرفته است [۱۲].

1. Fourier transform infrared spectroscopy



شکل ۴- درصد مولی گازهای تولیدی در طی کربنیزاسیون نسبت به دما [۱۱]



شکل ۵- (آ) آزاد شدن هیدروژن سیانید و آمونیاک در طی کربنیزاسیون دما پایین، (ب) آزاد شدن هیدروژن سیانید در طی کربنیزاسیون دما بالا [۱۲]

آزاد شدن گازهای آلاینده باعث ۵۵ تا ۶۰ درصد کاهش در وزن الیاف و همچنین ایجاد تخلخل‌هایی در آن‌ها می‌شود [۱۳]. در تحقیق دیگری، در دمای ۳۵۰ تا ۸۰۰ درجه سانتی‌گراد ۳۲ درصد کاهش در وزن الیاف و در دمای ۹۰۰ تا ۱۰۰۰ درجه سانتی‌گراد ۱۳ درصد کاهش در وزن الیاف دیده شد [۱۴]. در حالی که هیچ کاهش وزنی در دمای بالای ۱۹۰۰ درجه سانتی‌گراد مشاهده نشد که نشان می‌دهد بالاتر از این دما دیگر گازی آزاد نمی‌شود [۱۵]. تحلیل تحقیقات بررسی شده نشان

می‌دهد که برای کاهش مقدار هیدروژن سیانید تولیدی باید احتراق را در دماهای بالا (۹۵۰ تا ۱۰۰۰ درجه سانتی‌گراد) انجام داد. همچنین پیشنهاد می‌شود که عملیات حرارتی آرام انجام شود، زیرا مشاهده شده است که در صورت انجام دادن حرارت‌دهی سریع، قسمت آلی پلی‌اکریلونیتریل به طور عمده به هیدروژن سیانید تبدیل می‌شود [۸]. اما به هر حال، طبق آزمایش‌ها و شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی انجام شده تا به امروز، تشکیل هیدروژن سیانید، آمونیاک و سایر گازهای فرار و سبک در طی مراحل پایدارسازی و به‌ویژه کربنیزاسیون الیاف پلی‌اکریلونیتریل امری اجتناب‌ناپذیر است [۹].

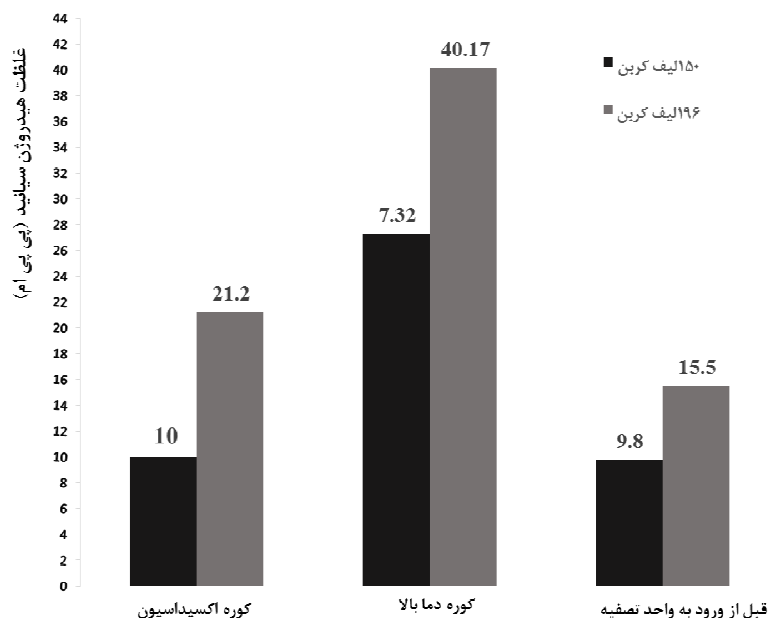
کوره‌های تولید الیاف کربن به کوره‌های دما پایین، کوره‌های دمابالا و کوره‌های دماهای فوق بالا تقسیم می‌شوند. کوره‌های دمابالین برای پیش‌کربونیزاسیون در اتمسفر خنثی و کوره‌های دمابالا برای کربونیزاسیون الیاف استفاده می‌شوند. همچنین، کوره‌های فوق دمابالا برای عملیات سطحی و خشک‌کردن جهت ایجاد خواص مورد نظر در الیاف نهایی به کار می‌روند. خصوصیت کلی این گونه کوره‌ها این است که الیاف وارد شده در داخل کوره تغییر وضع شیمیایی و مکانیکی می‌دهد. مورگان [۱۶] بیان می‌کند که تولید هیدروژن سیانید از دمای حدود ۲۲۰ درجه سانتی‌گراد شروع می‌شود. همچنین، در دمای ۳۰۰ درجه سانتی‌گراد مقدار زیادی کربن دی‌اکسید تولید می‌شود که پیش‌بینی کرده است که از گروه‌های COOH- موجود در پلیمر اکسید شده حاصل می‌شود. طبق گفته مورگان، در دمای ۴۰۰ درجه سانتی‌گراد، علاوه بر کربن دی‌اکسید و هیدروژن سیانید تولید آمونیاک هم شروع می‌شود و در دمای ۶۰۰ تا ۷۰۰ درجه سانتی‌گراد تولید هیدروژن سیانید و آمونیاک به شدت افزایش یافته و در دمای ۹۰۰ درجه سانتی‌گراد، به دلیل واکنش‌های هیدروژن‌زدایی، آزاد شدن هیدروژن سیانید به بیشینه خود می‌رسد. این در حالی است که تولید آمونیاک در دمای ۶۰۰ تا ۷۰۰ درجه سانتی‌گراد به اوج خود می‌رسد و پس از آن کاهش می‌یابد.

### مطالعه موردی گاز سیانید خروجی از کوره‌های سوزاندن پلی‌اکریلونیتریل

در مطالعه موردی ما از کوره دمابالین برای پیش‌کربنیزاسیون و از کوره دمابالا برای کربنیزاسیون استفاده می‌شود. کوره دمابالین در راستای کوره اکسیداسیون قرار دارد و پیوسته الیاف پلی‌اکریلونیتریل اکسید شده را از خود عبور می‌دهد. به کار بردن یک مرحله کربنیزاسیون دمابالین اولیه به منظور جلوگیری از شکستن ساختار الیاف و آزاد شدن گازهای آلاینده بیشتر سودمند است. معمولاً زمان کافی جهت انجام فرایند در حدود سی ثانیه تا پنج دقیقه است. عملیات مناسب تقریباً در مدت زمان نیم‌دقیقه در درجه حرارت ۷۰۰ درجه سانتی‌گراد و پس از آن، نیم دقیقه در درجه حرارت ۹۰۰ درجه سانتی‌گراد در محیط اتمسفریک ازت است. در مطالعه ما کوره کربنیزاسیون دمابالین در دمای ۴۰۰ تا ۶۰۰ درجه سانتی‌گراد و کوره دمابالا در دمای ۶۰۰ تا ۱۵۰۰ درجه سانتی‌گراد کار می‌کنند. سیستم موجود برای کوره‌های مطالعه شده براساس سیستم پیشنهاد شده توسط مورگان است.

برای کاهش میزان هیدروژن سیانید ورودی به واحد تصفیه گازهای آلاینده، یک سوزاننده کوچک بر روی کوره دمابالین نصب شده است. مقدار سیانید خروجی در سه نقطه کوره اکسیداسیون، کوره دمابالا و قبل از ورود به واحد تصفیه در دو حالت تولید ۱۵۰ و ۱۹۶ لیف توسط روش ارائه شده از سوی انجمن ایمنی و بهداشت صنعتی (NIOSH) [۱۷] توسط نویسندگان این مقاله پایش و سنجش شد. نتایج سنجش مقدار سیانید خروجی در شکل ۶ نمایش داده شده است. همان‌طور که انتظار می‌رفت، بیشترین مقدار سیانید خروجی در کوره دمابالا مشاهده شد و کاهش مقدار سیانید خروجی قبل از ورود به واحد تصفیه به دلیل وجود سوزاننده نصب شده بر روی کوره دمابالین است که به طور چشمگیری مقدار هیدروژن سیانید را قبل از ورود به واحد تصفیه کاهش داده است. در حالت تولید ۱۹۶ لیف کربن نسبت به تولید ۱۵۰ لیف کربن، مقدار هیدروژن سیانید خروجی به دو برابر افزایش یافت.

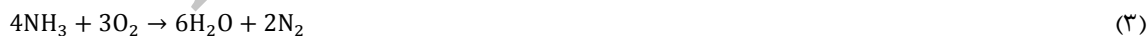
1. The National Institute for Occupational Safety and Health



شکل ۶- نتایج سنجش هیدروژن سیانید خروجی برحسب پی پی ام در دو حالت تولید ۱۵۰ و ۱۹۶ لیف کربن

### راه‌های حذف گاز هیدروژن سیانید در صنایع

از آنجایی که هیدروژن سیانید آلاینده مرسوم در صنایع نیست و صنایع معدودی وجود دارند که در آن‌ها تولید سیانید بیش از حد مجاز است، مطالعات کمی در زمینه حذف این گاز صورت گرفته است که عمده این مطالعات مربوط به حذف سیانید از کوره‌های کک‌سوز است که در این کوره‌ها میزان هیدروژن سیانید خروجی به مراتب کمتر از کوره‌های تولید لیاف کربن است. به طور کلی روش‌های ارائه شده در مطالعات برای حذف گاز هیدروژن سیانید شامل روش سوزاندن، جذب توسط حلال مایع، روش‌های بیولوژیکی و استفاده از کاتالیست‌هاست. بررسی مزایا و معایب هر یک از روش‌ها یک دید اولیه برای انتخاب روش مناسب ارائه می‌کند. در روش کاتالیستی گاز حاوی هیدروژن سیانید از یک راکتور بستر ثابت مجهز به کاتالیست عبور داده می‌شود. معمولاً روش‌های بیولوژیکی با روش‌های شیمیایی یا روش‌های کاتالیستی برای افزایش بازدهی و ظرفیت تصفیه آلاینده‌های سیانیدی به کار می‌روند. در روش سوزاندن مواد آلی و سیانیدی در تماس با حرارت بالا و اکسیژن، اکسید شده و به گازهای کم‌خطر تبدیل می‌شوند. واکنش‌هایی که ممکن است رخ دهد به صورت واکنش‌های (۱) تا (۴) خواهد بود [۱۹، ۱۸].



همان‌گونه که از واکنش‌های بالا قابل بیان است، خروجی از سیستم با طراحی دقیق و مهندسی یک مخلوط گازی مناسب برای محیط زیست بدون هیچ‌گونه پسماند جامد است که این از مزایای اکسیداسیون است. از میان انواع مختلف اکسیدکننده‌ها، اکسیدکننده حرارتی بازایستی محبوب‌تر و پرکاربردتر است. در این سیستم معمولاً حرارت بین حداقل دو بستر در یک سیکل مشخص جریان ورودی و خروجی تعویض می‌شود تا دمای بستر از یک حد مشخص افت نکند [۲۱-۱۸]. مشکل عمده این روش، به جز هزینه اولیه بسیار بالا، تبدیل هیدروژن سیانید به ترکیبات ناکس است. برای رفع این مشکل، پس از عبور گاز آلاینده از اکسیدکننده باید برای حذف ترکیبات ناکس، گاز خروجی را از سیستم احیای کاتالیستی انتخابی عبور داد که در

نهایت گازهای نیتروژن و بخار آب خارج می‌شوند [۲۲]. به طور کلی، برای واحدهای صنعتی خیلی بزرگ با حجم گاز آلاینده بالا روش اکسیداسیون توصیه می‌شود.

در بین این روش‌ها، جذب با و بدون واکنش شیمیایی تنها روشی است که می‌توان آن را در دمای اتاق انجام داد و در مقایسه با سایر روش‌ها مسائل و مشکلات افت فشار را دربر ندارد. به‌علاوه، هزینه بالای سردسازی برای خنک کردن و میعان گازها و هزینه بالای بازیابی کاتالیست در جذب سطحی و اکسیداسیون، غالباً، روش جذب را برای حذف گازهای آلاینده جذاب‌تر مطرح می‌کند. اما، بزرگ‌ترین مشکل این روش نیاز به تصفیه فاضلاب خروجی است.

### شبیه‌سازی برج آکنده برای جذب هیدروژن سیانید

استفاده از آکنده<sup>۱</sup> از سال ۱۹۶۰ در صنایع مختلف به منظور جداسازی مواد در تقطیر، جذب و دفع آغاز شد و تاکنون استفاده از آن‌ها در موارد مختلف افزایش یافته است. این نوع آکنده‌ها از تیغه‌هایی تشکیل شده‌اند که سطح تماس زیادی ایجاد کرده و به این ترتیب بازده زیادتری نسبت به سینی‌های متداول در صنعت دارند. از این نوع آکنده‌ها در فرایندهایی که افت فشار کم نیاز بوده یا جداسازی مشکل است و نیاز به مراحل تئوری زیادی است، استفاده می‌شود و به‌ویژه در برج‌هایی که در شرایط فشار پایین کار می‌کنند کارایی بیشتری دارند. به طور کلی در سه مورد از آکنده‌ها استفاده می‌شود که عبارت‌اند از:

۱- برج‌های با قطر کم که امکان استفاده از سینی در آنها تقریباً ممکن نیست.

۲- افت فشار کم در طول برج مورد نیاز است.

۳- در فرایندهایی که احتمال خوردگی وجود دارد که در این صورت از آکنده‌های پلاستیکی استفاده می‌شود.

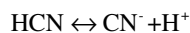
شبیه‌سازی یک واحد روش ارزانی است که می‌توان به کمک آن تخمینی از کارایی را به‌دست آورد. در شبیه‌سازی حاضر، دو برج آکنده متوالی برای حذف هیدروژن سیانید به‌وسیله نرم‌افزار Aspen Plus و روش انتقال جرم و حرارت که از قابلیت‌های این نرم‌افزار است و با استفاده از بسته ترمودینامیکی Electrolyte NRTL-RK (بسته ترمودینامیکی مخصوص مواد الکترولیت که با روش ردلیش-کوانگ تصحیح شده است) شبیه‌سازی شده است. بدین ترتیب پس از بررسی انواع آکنده‌ها و انتخاب مناسب‌ترین آن‌ها از نظر بازده و افت فشار، اثر پارامترهای موثر بر عملکرد آن از قبیل غلظت، شدت جریان و دمای گاز و حلال ورودی بررسی شده است. حلال مورد استفاده در این سیستم محلول آبی سدیم هیدروکسید با غلظت ۵ درصد جرم است که محلول پیشنهادی برای جذب هیدروژن سیانید در مراجع است. آکنه مورد نظر حلقه پال انتخاب شد، زیرا نسبت به آکنه‌های نامنظم دیگر بازده بالاتر و افت فشار کمتری ایجاد می‌کند. همچنین به دلیل احتمال خوردگی در سیستم، جنس آکنه پلاستیکی انتخاب شد.

در این تحقیق از مدل Rad Frac در نرم‌افزار کمک گرفته شده که علاوه بر موارد بیان‌شده، قابلیت محاسبه افت فشار را نیز دارد. اکثر شبیه‌سازی‌های انجام‌شده برای جذب گاز با استفاده از نرم‌افزار Aspen Plus معطوف به جذب کربن دی‌اکسید با حلال‌ها، فرایندها و سیکل‌های مختلف بوده است و متأسفانه شبیه‌سازی و مدل‌سازی برای جذب گاز هیدروژن سیانید با حلال‌های سدیم هیدروکسید، سدیم هیپوکلریت و دیگر حلال‌ها وجود ندارد. اما ماژول قدرتمند Rad Frac و بسته ترمودینامیکی کامل Electrolyte-NRTL در Aspen Plus در بسیاری از موارد جذب گاز اسیدی بسیار موفق عمل کرده است و نتایج آن تطابق بسیار خوبی با داده‌های آزمایشگاهی داشته است. مهم‌ترین آن‌ها کار ژانگ و چن [۲۳] بوده است که نوزده داده آزمایشگاهی جذب دی‌اکسید کربن با محلول آبی مونواتانول آمین به‌دست آمده از واحد پایلوت را با روش براساس نرخ<sup>۲</sup> با بسته ترمودینامیکی Electrolyte-NRTL در Aspen Plus شبیه‌سازی کردند و نتایج بسیار خوبی به‌دست آوردند.

1. Packing  
2. Rate-based



- دو رویکرد اساسی در شبیه‌سازی برج‌های جذب به شرح زیر وجود دارند:
- ۱- شبیه‌سازی به روش مراحل تعادلی و محاسبه ارتفاع معادل مرحله تئوری
  - ۲- شبیه‌سازی به روش انتقال جرم و حرارت و به‌دست آوردن ارتفاع واقعی آکنه
- به طور کلی روش مراحل تعادلی دقت کمی دارد و همچنین در این روش اثر واکنش‌های شیمیایی بر انتقال جرم و حرارت در نظر گرفته نمی‌شود. مدل سرعت انتقال جرم دارای ویژگی‌هایی است که ارزش دقت بیشتر را دارند:
- ۱- محاسبه مستقیم سرعت انتقال جرم و حرارت از یک فاز به فاز دیگر
  - ۲- وارد شدن جزئیات طراحی و پارامترهای دستگاه در سرعت‌های انتقال جرم و حرارت
  - ۳- واکنش‌های شیمیایی، سرعت انتقال جرم را بهبود می‌بخشند.
  - ۴- اهمیت تعادل فازی در نظر گرفته می‌شود.
  - ۵- موازنه اجزا، علاوه بر قطعه آکنه، در هر فاز نیز باید برقرار باشد.
- فرضیاتی که در این تحقیق برای سیستم جهت شبیه‌سازی در نظر گرفته شده عبارت‌اند از:
- ۱- سیستم به‌صورت پایدار فرض شده و از هر گونه رفتار دینامیکی صرف‌نظر شده است.
  - ۲- گاز ورودی عاری از اکسیدهای نیتروژن و آمونیاک و سایر آلاینده‌ها که می‌توانند با محلول آبی سدیم هیدروکسید واکنش دهند، است.
  - ۳- سیستم کاملاً بی‌دررو است.
  - ۴- انتقال جرم در داخل برج هم به‌صورت نفوذ مولکولی گاز هیدروژن سیانید از داخل گاز به طرف مایع و هم به‌صورت جابه‌جایی به‌خاطر ایجاد حباب در بستر آکنه انجام می‌گیرد. در شبیه‌سازی فرض شد که واکنش بین سدیم هیدروکسید و هیدروژن سیانید در تمام سینی‌ها اتفاق می‌افتد.
- شبیه‌سازی با روش انتقال جرم انجام شد و در قسمت طراحی مربوط به آکنه‌ها گزینه محاسبه قطر برج با توجه به معادلات حالت روش براساس نرخ فعال شد تا نرم‌افزار قطر ورودی را براساس مقدار طغیان تصحیح کند. در این قسمت برای اطمینان از آنکه برج در حالت طغیان نباشد و با توجه به آنکه بیشتر برج‌ها در صنایع در حالت ۷۰ درصد سرعت گاز در هنگام طغیان عمل می‌کنند، مقدار ۰/۷ برای ضریب طغیان در نظر گرفته شد تا بر این اساس نرم‌افزار قطر برج را محاسبه کند. در بخش روابط مربوط به روش براساس نرخ از روابط بیلت و شولتز [۲۴] برای پرکن‌ها و برای محاسبه افت فشار از رابطه اکرت [۲۵] استفاده شد. همچنین روش محاسبه ضریب انتقال حرارت چیلتون و کالبرن [۲۶] انتخاب شد. هیدروژن سیانید نیز مانند تمام اسیدهای دیگر با بازها بدون شرکت آب واکنش می‌دهد. واکنش‌های مربوط به سیستم تحقیق حاضر به همراه ثوابت ترمودینامیکی آن‌ها در روابط (۵) تا (۱۰) آمده‌اند. به‌دلیل آنکه محلول تجاری سدیم هیدروکسید به‌صورت محلول ۵۰ درصد جرمی است، در نظر گرفته شده که این محلول به‌صورت جداگانه وارد مخزنی شده و در مخزن قبل از ورود به برج با جریان آب خالص مخلوط می‌شود. برای هر برج یک مخزن جداگانه در نظر گرفته شد و آنالیز حساسیت برای جریان‌های آب خالص و محلول ۵۰ درصد جرمی سود انجام شد. شکل‌های ۷ تا ۱۱ نتایج آنالیز حساسیت مربوط به ارتفاع برج‌های جذب، دمای جریان‌های سود، دمای جریان‌های آب، دبی حجمی آب ورودی به هر برج و دبی حجمی سود ۵۰ درصد ورودی به هر برج است. واحد محوری عمودی در تمام این شکل‌ها، غلظت هیدروژن سیانید خروجی از برج دوم بر حسب پی‌پی‌ام است. در جدول ۱ مقدار پارامترهای بهینه برج‌ها و پارامترهای عملیاتی نهایی به‌دست آمده از آنالیز حساسیت که حالت بهینه فرایند را در حالت رسیدن سیانید به مقدار مطلوب ذکر شده فراهم می‌کنند، آورده شده است. شایان ذکر است آنالیز حساسیت در نرم‌افزار Aspen plus امکان بررسی هم‌زمان پارامترها را به‌دست می‌دهد.



(۵)

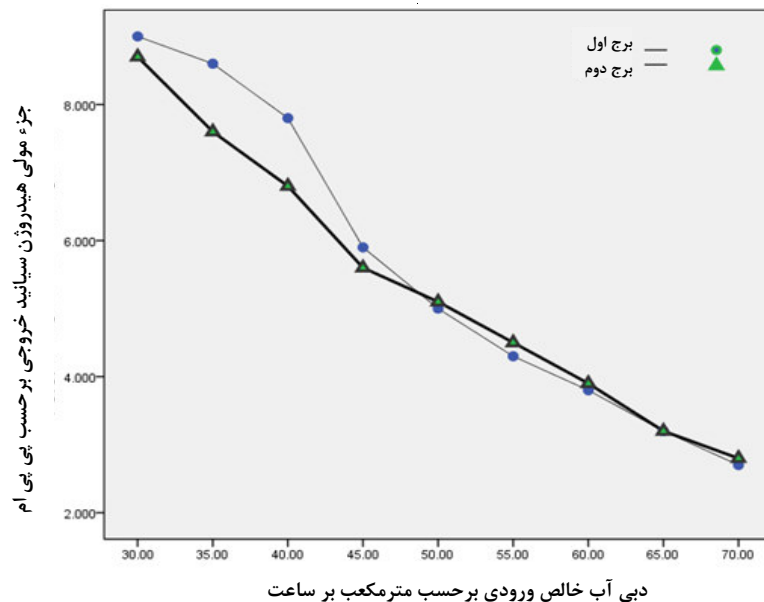
$$\ln(K_{eq}) = 22.90536 - \frac{9945.5303}{T} - 0.049579 * T \quad (6)$$



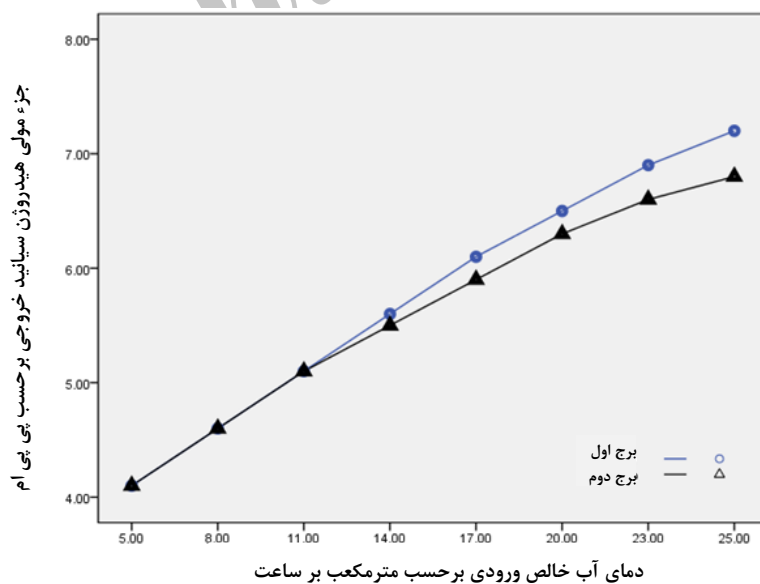
$$\ln(K_{eq}) = 132.89888 - \frac{133445.9}{T} - 22.477301 * \ln(T) \quad (8)$$



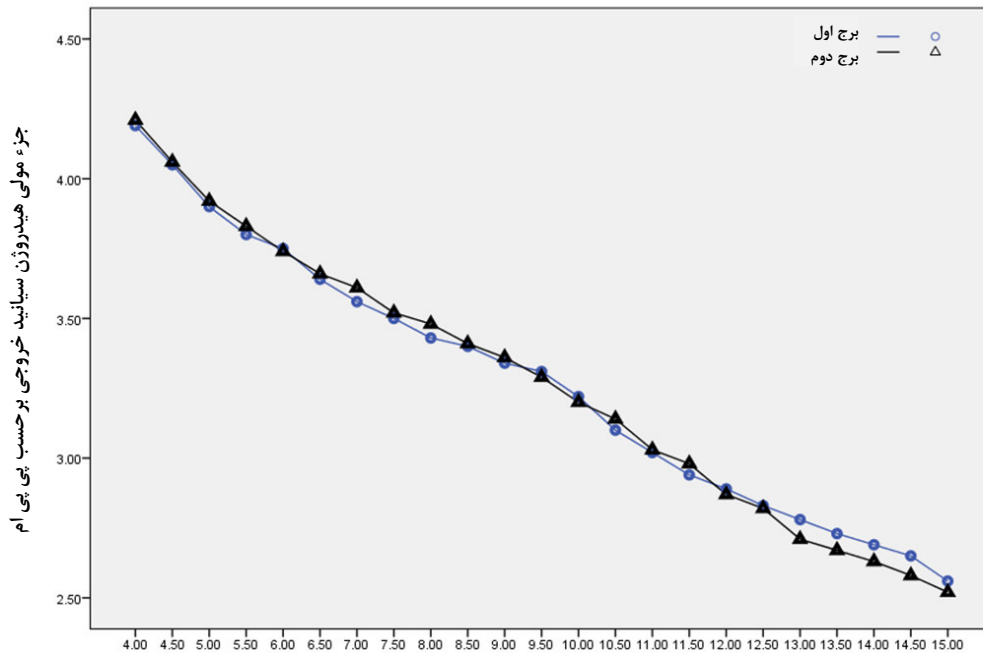
$$\ln(K_{eq}) = 10167.8511 - \frac{23391.43}{T} - 22.477 * \ln(T) - 0.0495786 * T \quad (10)$$



شکل ۷- تغییر سیانید خروجی بر حسب دبی آب خالص ورودی

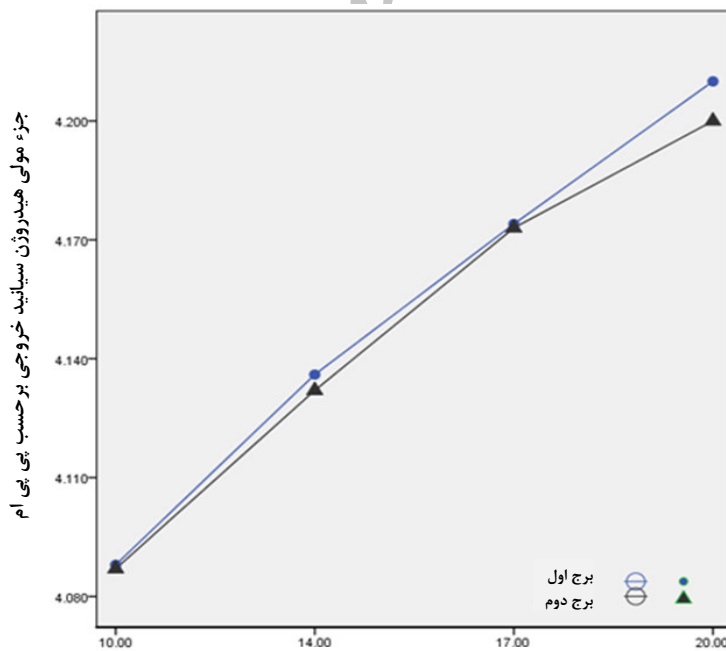


شکل ۸- تغییر سیانید خروجی بر حسب دمای آب خالص ورودی



دبی محلول ۵۰٪ جرمی سود ورودی بر حسب مترمکعب بر ساعت

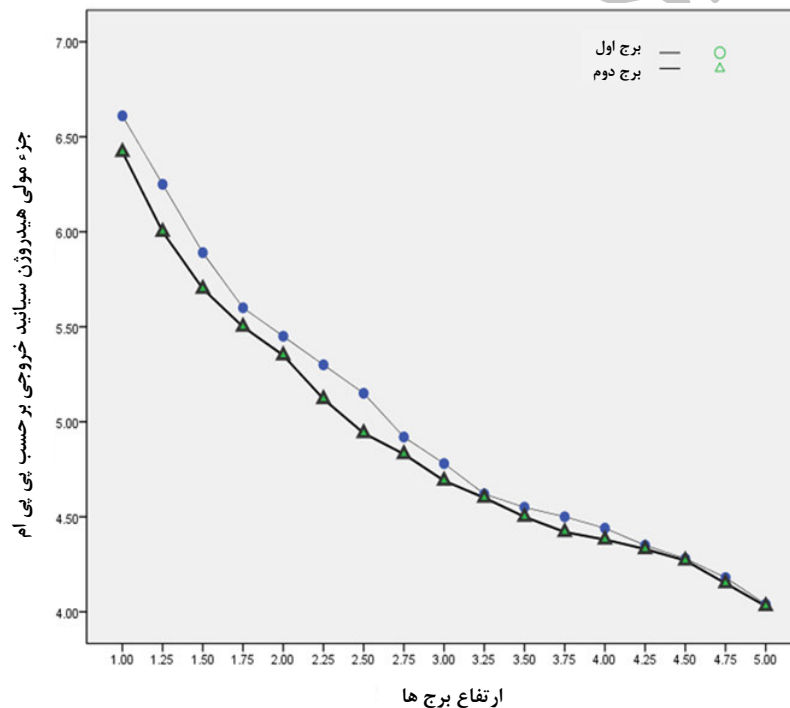
شکل ۹- تغییر سیانید خروجی بر حسب دبی محلول ۵۰ درصد جرمی سود ورودی



دمای محلول سود ۵۰٪ جرمی بر حسب درجه سانتیگراد

شکل ۱۰- تغییر سیانید خروجی بر حسب دمای محلول ۵۰ درصد جرمی سود ورودی

در شکل ۷ روند تغییرات سیانید خروجی برحسب تغییر دبی آب آورده شده است که نشان می‌دهد در هر برج با تغییر دبی آب از ۳۰ مترمکعب بر ساعت تا ۷۰ مترمکعب بر ساعت، سیانید خروجی از ۹ پی‌پی‌ام تا ۳ پی‌پی‌ام کاهش می‌یابد. این مورد نیز کاملاً قابل انتظار بود، زیرا افزایش شدت جریان گاز و شدت جریان مایع هر دو منجر به افزایش بازدهی می‌شود (در این تحقیق شدت جریان گاز ورودی ثابت است)، ولی این افزایش پس از رسیدن به بازدهی نهایی (حدود ۹۷ درصد) تقریباً متوقف می‌شود و پس از آن افزایش شدت جریان‌ها تنها بر عملکرد برج تأثیر منفی داشته و منجر به افزایش افت فشار و همراه شدن قطرات مایع با جریان گاز و در نهایت طغیان برج می‌شود که خود عامل انتشار آلودگی در محیط‌زیست خواهد بود. همین مورد در شکل ۹، که تغییرات سیانید خروجی برحسب تغییر دبی محلول سود ۵۰ درصد ورودی به هر برج است، نیز صادق است، با این تفاوت که شیب این دو نمودار کمتر از شیب نمودارهای قبلی است، زیرا دبی حجمی سود در مقایسه با دبی حجمی آب بسیار کمتر است. دلیل دیگر این موضوع غالب بودن انتقال جرم بر واکنش شیمیایی در بازده جذب سیانید است. این موضوع به دلیل حلالیت بسیار زیاد سیانید در آب و محلول‌های آبی است که باعث می‌شود در فرایند جذب به سرعت وارد فاز مایع شود و تغییر در غلظت سود ورودی به هر برج از ۲/۲ درصد جرمی تا ۸/۳ درصد جرمی، میزان سیانید خروجی را تنها از ۴ پی‌پی‌ام به ۲/۵ پی‌پی‌ام کاهش می‌دهد.



شکل ۱۱- تغییر سیانید خروجی برحسب ارتفاع برج‌ها

پارامتر دیگر بررسی‌شده، تغییرات دمای مایع ورودی به برج است که پارامتری تعیین‌کننده در جذب گاز است. تغییرات سیانید خروجی برحسب دمای آب در شکل ۸ و تغییرات سیانید خروجی برحسب دمای محلول ۵۰ درصد سود در شکل ۱۰ نشان داده شده‌اند. باز هم روند تغییرات در هر دو برج تقریباً یکسان است، اما به دلیل اینکه حجم سود در مقایسه با حجم آب کمتر است و قسمت اعظم محلول ورودی به برج را آب تشکیل می‌دهد، دمای آب بسیار تأثیرگذارتر از دمای محلول سود ۵۰

درصد جرمی است. اما به طور کلی در هر چهار نمودار مشاهده می‌شود که با کاهش دما جذب سیانید بهتر انجام می‌شود. این موضوع به این دلیل است که جذب کاملاً متأثر از ثابت هنری است و ثابت هنری نیز مستقیماً وابسته به دماست. همان‌طور که در شکل ۱۱ مشاهده می‌شود، مقدار هیدروژن سیانید خروجی از بالای برج دوم با افزایش ارتفاع در هر دو برج روند نزولی را طی می‌کند. شیب این تغییرات برای هر دو برج یکسان است و این بدان معناست که تغییر ارتفاع هر دو برج به یک میزان روی سیانید خروجی موثر است. تغییرات ارتفاع در هر برج از یک متر تا پنج متر به فاصله ۰/۲ متر در نظر گرفته شده است و بر این اساس سیانید خروجی از هر برج از ۶/۵ پی‌پی‌ام تا ۴ پی‌پی‌ام تغییر می‌کند. همان‌طور که انتظار می‌رفت، هر چه قدر که طول برج‌ها افزایش یابد، هیدروژن سیانید خروجی از برج دوم بیشتر کاهش می‌یابد، زیرا طول بیشتری در اختیار گاز قرار داده می‌شود تا در تماس با مایع قرار گیرد.

جدول ۱- پارامترهای عملیاتی و تجهیزاتی بهینه به‌دست آمده از شبیه‌سازی

پارامتر طراحی	مقدار
تعداد مراحل تئوری برج <sup>۶</sup>	۱۲
قطر برج (متر)	۲/۵
نوع و جنس آکنه	حلقه پال پلاستیکی <sup>۷</sup>
قطر آکنه	۱ اینچ
فشار در بالای برج (بار)	۱/۰۱۳۵
ارتفاع قسمت پرشده برج (متر)	۵
دبی حجمی آب خالص ورودی به هر برج (مترمکعب بر ساعت)	۵۶
دبی حجمی محلول ۵۰ درصد جرمی سود ورودی به هر برج (مترمکعب بر ساعت)	۹
دمای آب خالص ورودی به هر برج (سانتی‌گراد)	۵
دمای محلول ۵۰ درصد جرمی سود ورودی به هر برج (سانتی‌گراد)	۱۰
افت فشار در برج اول (کیلو پاسکال)	۴/۰۳۳۴
افت فشار در برج دوم (کیلو پاسکال)	۴/۰۶۶۹

افزایش فشار در برج نیاز به انرژی زیاد دارد. در این تحقیق، برای به‌صرفه بودن از لحاظ انرژی، تغییر فشار برج اصلاً در نظر گرفته نشد و فشار برج‌ها در تمام شبیه‌سازی‌ها برابر با فشار اتمسفر در نظر گرفته شد. بر این اساس، افت فشار در هر برج حدود ۴۰۰۰ پاسکال بوده است که در اصل افت فشار به‌ازای ارتفاع برابر با ۲۰۰ پاسکال در هر متر است که افت فشار بسیار مطلوبی برای برج‌ها در صنایع است.

## نتیجه‌گیری

در این تحقیق میزان تولید هیدروژن سیانید و سایر آلاینده‌ها در مطالعات بررسی و میزان تولید هیدروژن سیانید اندازه‌گیری شده در واحد پایلوت فعلی تولید الیاف کربن ارائه شد. سپس، روش جذب برای حذف سیانید خروجی انتخاب و شبیه‌سازی‌ها با استفاده از مدل Rad Frac در نرم‌افزار قدرتمند Aspen Plus و با بسته ترمودینامیکی Electrolyte NRTL-RK انجام شدند. نتیجه حاصل به‌دست آوردن شرایط بهینه بود و نتایج شبیه‌سازی نشان داد که با اطمینان، مقدار هیدروژن سیانید به ۴ پی‌پی‌ام رسید. افت فشار برج‌ها و تغییرات دمای خروجی مایع از برج‌ها در حد مطلوب بودند. با توجه به نتایج به‌دست آمده

۶. دو برج به‌صورت سری هستند و پارامترهای ذکرشده در جدول برای هر دو یکسان است.

7. Plastic Pall Ring

واحد تصفیه شامل دو برج جذب آکنده متوالی پیشنهاد شد و مشاهده شد که جذب، روشی قابل اطمینان برای حذف آلاینده‌های حاصل از کوره‌های تولید الیاف کربن است. روش جذب در کمپانی‌های تولید الیاف کربن بزرگ دنیا در حال حاضر در حال اجراست.

## منابع

1. F. Tahmourian, *Principles of Environment Management*, Tehran, Fadak Isatis Publications, 2007. (in Farsi)
2. Market Report. *Global Carbon Fiber Composite Market*, Germany, Acmite Market Intelligence, 2010.
3. V. A. Bhanu, P. Rangarajan, K. Wiles, M. Bortner, M. Sankarpandian, D. Godshall, "Synthesis and Characterization of Acrylonitrile Methyl Acrylate Statistical Copolymers as Melt Processable Carbon Fiber Precursors," *Journal of Polymer*, 18, 2002, pp. 4841-4850.
4. M. Rahaman, A. Ismail, A. Mustafa, "A Review of Heat Treatment on Polyacrylonitrile Fiber," *Journal of Polymer Degradation and Stability*, 92, 2007, pp 1421-1432.
5. Y. Xue, J. Liu, J. Liang, "Correlative Study of Critical Reactions in Polyacrylonitrile Based Carbon Fiber Precursors during Thermal-Oxidative Stabilization," *Journal of Polymer Degradation and Stability*, 98, 2013, pp 219-229.
6. U. Ivarsson, H. Nilsson, J. Santesson, *A FOA Briefing Book on Chemical Weapons: Threat, Effects and Protection*, Umea, Sweden, Forsvarets Forskningsanstalt, 1992.
7. S. Watanabe, Y. Ohtsuka, Y. Nishiyama, "Nitrogen Removal and Carbonization of Polyacrylonitrile with Ultrafine metal Particles at Low Temperatures," *Journal of Carbon*, 32, 1994, pp 329-334.
8. S. Chand, "Carbon fiber for composites," *Journal of Material Science*, 35, 2000, pp 1303-1313.
9. B. Saha, G. Schatz, "Carbonization in Polyacrylonitrile (PAN) Based Carbon Fibers Studied by Reaxff Molecular Dynamics Simulations," *The Journal of Physical Chemistry B*, 116, 2012, pp 4684-4692.
10. M. Nielsen, P. Jurasek, J. Hayashi, E. Furimsky, "Formation of Toxic Gases during Pyrolysis of Polyacrylonitrile and Nylons," *Journal of Analytical and Applied Pyrolysis*, 35, 1995, pp 43-51.
11. J. B. Donnet, O. P. Bahl, *Encyclopedia of Physical Science and Technology*, New York, Acedamic Press Inc., 1987.
12. W. Watt, B. Perov, *Chemistry and Physics of Conversion of PAN Fibers into High-Modulus Carbon Fibe* North-holland, Amsterdam, Elsevier Science Publishers, 1985.
13. D. Edie, "The Effect of Processing on the Structure and Properties of Carbon Fiber," *Journal of Carbon*, 36, 1998, pp. 345-362.
14. J. Mittal, H. Konno, M. Inagaki, O. Bahl, "Denitrogenation Behavior and Tensile Strength Increase during Carbonization of Stabilized PAN Fibers," *Journal of Carbon*, 36, 1998, pp. 1327-1330.
15. Z. Zhu, Z. Liu, Y. Gu, "Formation of N<sub>2</sub> during Carbonization of Polyacrylonitrile using Iron Catalyst," *Journal of Fuel*, 76, 1997, pp. 155-163.
16. P. Morgan, *Carbon Fiber and Their Composites*, Taylor & Francis, New York, CRC Press, 2005.
17. NIOSH Report, Manual of Analytical Methods, *Cyanides, aerosol and gas: method 7904*, U.S. Department of Health, Education and Welfare, 4<sup>th</sup> ed., 1994.
18. R. Ross, *Utilizing Combustion or Incineration for Gaseous Emission Control*, Springer, Delhi, 1982.
19. D. Lewandowski, *Design of Thermal Oxidation Systems for Volatile Organic Compounds*, New York, Lewis Publishers, 2000.
20. <http://www.banksengineering.com/About%20RTOs%20Banks%20Engineering%2010-8-2007.pdf> accessed in 01/02/2013.
21. T. Centa, G. Hawkins, D. Hayes, H. Lehermeier, "Methods and Systems for HCN Removal," US Patent 20110104041 A1, 2011.
22. G. Knight, *Selective Catalytic Reduction Technology for the Control of Nitrogen Oxide Emissions from Coal-Fired Boilers*, Collingdale, DIANE Publishing, 2008.
23. Y. Zhang, C. Chen, "Modeling CO<sub>2</sub> Absorption and Desorption by Aqueous Monoethanolamine Solution with Aspen Rate-Based Model," *Journal of Energy Procedia*, 37, 2013, pp 1584-1596.
24. R. Billet, M. Schultes, "Prediction of Mass Transfer Columns with Dumped and Arranged Packings," *Trans IChemE*, 77, 1999, pp. 498-504.
25. E. Ludwig, *Applied Process Design for Chemical and Petrochemical Plants*, North-holland, Amsterdam, Gulf Professional Publishing, Vol. 2, 3rd Edition, 1997.
26. R. Bird, W. Stewart, E. Lightfoot, *Transport Phenomena*, United States, Hoboken, John Wiley & Sons, 2007.

## English Abstract

# Mechanism and Rates of Hydrogen Cyanide Production in Polyacrylonitrile Incineration Furnaces and Suggesting a Suitable Method for the Removal of Cyanide Gas

Zeynab Hajalifard, Fariborz Rashidi and Ramin Badrnejad

Department of Chemical Engineering, Amirkabir University of Technology, Tehran, Iran  
(Received: 2014.6.13, Received in revised form: 2014.10.25, Accepted: 2014.12.11)

Today communities have approved of strict laws for the limits of air pollutants produced by industrial units. Hydrogen cyanide, known as one of the most important and toxic gases, is the exhaust gas from heat treatment of polymers containing nitrile groups, such as polyacrylonitrile (PAN). In this paper, the mechanism of hydrogen cyanide production from polyacrylonitrile pyrolysis has been presented and also the amount of hydrogen cyanide emitted by furnaces producing carbon fiber has been evaluated in a research center in Iran. The amount of released Hydrogen cyanide was measured and presented for two production stages of 150 and 196 carbon fiber and at three different locations; the oxidation furnace, high temperature furnace and before entering the gas purification unit. As expected, the maximum amount of cyanide was observed in HT furnace and the production of the cyanide emission was doubled in 196 carbon fiber mode.

The main goal of this paper is to select an appropriate system to eliminate discharged pollutants from the furnaces which is an important issue in the field of combustion and furnace. For this reason, various systems have been surveyed to reduce the amount of hydrogen cyanide. This method has been selected due to the fact that absorption is the appropriate system for removing pollutants with various concentrations in different flows. Furthermore, it is a much less costly method in comparison to the other ones. Moreover, for eliminating hydrogen cyanide by the absorption strategy, a system which consists of two consecutive packed towers is simulated by the aid of powerful Aspen Plus software and Electrolyte NRTL-RK thermodynamic package. The optimum values of operating parameters such as fluid flow, temperature and equipment parameters like the height of the columns were proposed.

**Keywords:** Polyacrylonitrile, Carbon Fiber, Hydrogen Cyanide, Furnace, Absorption