

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

زینب حاج علی فرد^۱، فربیز رشیدی^۲ و رامین بدرnezad^۳

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 گازهایست، آلاینده خروجی از فرایند حرارتی پلیمرهای دارای گروه‌های نیتریل مانند پلی اکریلونیتریل است. در این مقاله، مکانیزم تولید هیدروژن سیانید از پیپولیز پلی اکریلونیتریل بیان شده و مقدار هیدروژن سیانید خروجی از کوره‌های تولید الیاف 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 کوره‌هایست که مسئله حائز اهمیتی در حوزه کوره و احتراق محسوب می‌شود. بدین منظور سیستم‌های مختلف برای کاهش مقدار هیدروژن سیانید خروجی برسی شدند و با توجه به آنکه جذب سیستمی مناسب برای حذف آلاینده‌ها در دبی‌ها و غلظت‌های متفاوت است و همچنین روشی با هزینه کمتر نسبت به سایر روش‌های 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 نظری غلظت سود، دبی مایع و دمای مایع و پارامترهای تجهیزات نظری ارتفاع برج‌ها پیشنهاد شدند.

کلیدواژه‌گان: الیاف کربن، پلی اکریلونیتریل، هیدروژن سیانید، کوره، جذب

مقدمه

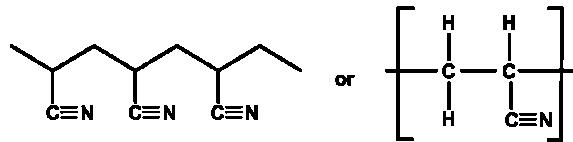
با صنعتی شدن دنیا، پیشرفت فناوری‌ها، افزایش جمعیت و ازدیاد مصرف منابع انرژی کیفیت هوای شهرها کاهش یافت. پایین آمدن کیفیت هوای محلی معمولاً ناشی از تولید و انتشار برخی از آلاینده‌ها مانند ترکیبات پیچیده اسیدی، ازن و سایر آلاینده‌های فتوشیمیایی و همچنین ذرات آلاینده و منوکسیدکربن و ذرات سمی و سرطان‌زاگ 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 بهشدت مورد توجه قرار گرفته است، صنعت تولید الیاف کربن است. الیاف کربن-الیافی که دارای ۹۰ درصد کربن هستند- بهدلیل داشتن خصوصیاتی نظری غلظت سود، دمول الاستیکی بالا و وزن مخصوص کم بسیار مورد توجه قرار گرفته‌اند و کاربردهای چشمگیر آن‌ها در تمام عرصه‌ها نظری صنایع هواضما، حمل و نقل، پزشکی، ساختمانی و ورزشی مشاهده می‌شود [۲]. با کمک مهندسان و متخصصان کشور، ایران یازدهمین

کشور در دنیاست که الیاف کربن تولید می‌کند. با این حال، این فناوری نوین، که به تازگی 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: پلی اکریلونیتریل، الیاف سلولزی و قیر حاصل از قطران زغال سنگ، که حدود ۹۰ درصد الیاف کربن تولیدی در سطح تجاری در دنیا از الیاف پلی اکریلونیتریل به دست می‌آیند^[۲]. در واقع انجام عملیات حرارتی موجب حذف عنصری مانند اکسیژن، نیتروژن و هیدروژن می‌شود و در نهایت فقط کربن به شکل الیاف باقی می‌مانند.

مطالعه رفتار پلیمرهای دارای نیتروژن در هنگام حرارت دیدن، برای به دست 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 پلی اکریلونیتریل در شکل ۱ آمده است^[۴]. مهم‌ترین این آلاینده‌ها هیدروژن سیانید است که ترکیبی بسیار خطرناک و سمی با بوی بادام تلخ است که به راحتی در آب و الکل حل می‌شود و میزان ۲۰۰ میلی گرم از آن در هوا باعث کشته شدن 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 آسودگی هوا مصوب ۱۳۷۴/۲/۳ مجلس شورای اسلامی مقدار حد مجاز خروجی به هوا برای هیدروژن سیانید را ۸ پی‌پی ام اعلام کرده است. با توجه به مسائل گفته شده لازم است مکانیزم تولید این آلاینده در فرایند تولید الیاف کربن و میزان آن بررسی شود.

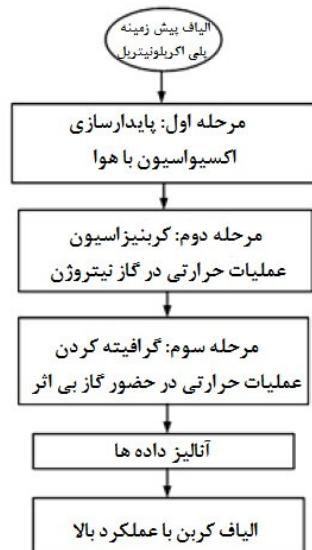


شکل ۱- ساختار پلیمر پلی اکریلونیتریل^[۴]

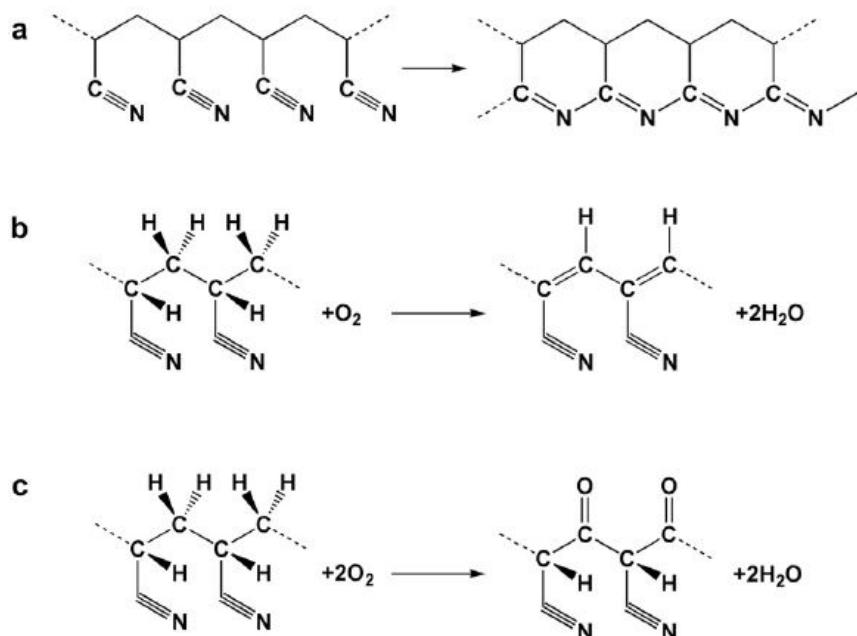
مکانیزم تولید گازهای آلاینده در طی فرایند تولید الیاف کربن

تولید الیاف کربن از الیاف پیش‌زمینه پلی اکریلونیتریل به ترتیب 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 دست یافتن به الیافی با مقاومت کششی بالا و در عین حال رسیدن به حداقل میزان گازهای انتشاریافته است، هرچند که این دو موضوع معمولاً در جهت عکس یکدیگر تغییر می‌کنند. بدلیل جدیدبودن فناوری الیاف کربن در دنیا مطالعات کمی روی این موضوع صورت گرفته است. الیاف پلی اکریلونیتریل ابتدا تحت عملیات کششی قرار می‌گیرند و به طور 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 سیکل شدن 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 به وجود می‌آیند. این سه نوع واکنش (شکل ۳) در نهایت باعث تشکیل یک ماکромولکول نزدیکی شکل، مقاوم به حرارت و غیرقابل ذوب می‌شوند.^[۴,۵] سپس، در دو مرحله کربونیزاسیون، عناصر غیرکربنی موجود در ماکرومولکول اولیه الیاف پلی اکریلونیتریل به شکل مواد گازی شکل می‌شوند.



شکل ۲- طرحواره تبدیل پلی اکریلونیتریل به الیاف کربن [۴]

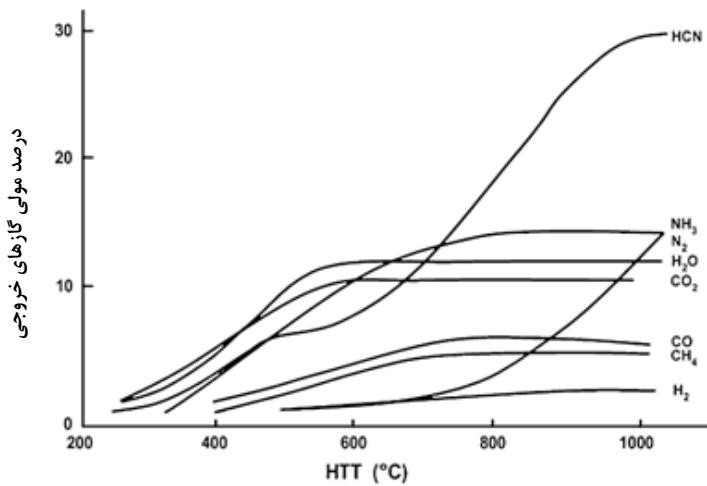


شکل ۳- واکنش های بنیادین مرحله پایدار سازی الیاف پلی اکریلونیتریل، (a) سیکل شدن (b) هیدروژن زدایی (c) اکسیداسیون [۵]

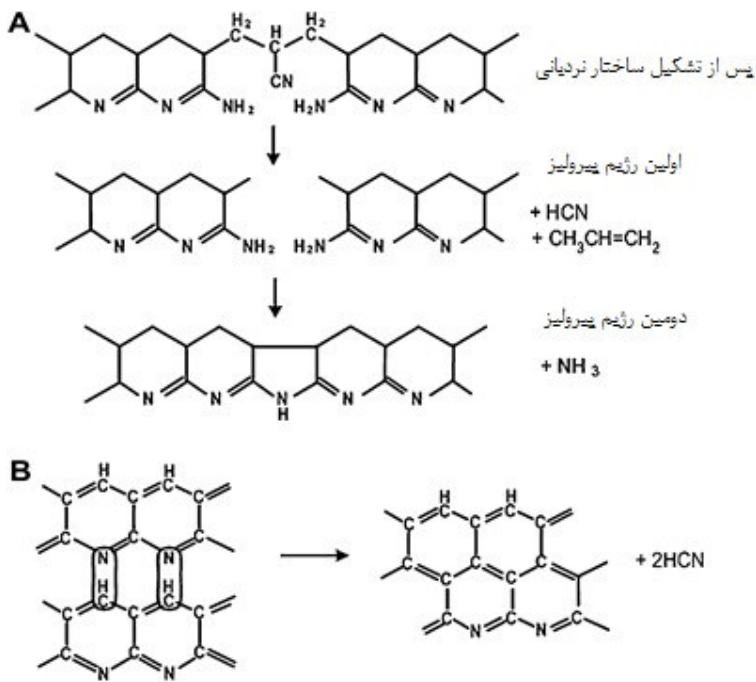
در یکی از جدیدترین و کامل‌ترین مطالعات، با استفاده از آنالیز FTIR¹ مشاهده شد که سه واکنش ذکرشده در مرحله پایدارسازی لزوماً به صورت متوالی رخ نمی‌دهند و مکانیزم‌های مختلفی برای سینتیک مرحله پایدارسازی پیشنهاد شدند. به طور نمونه، پیشنهاد شده است که اگر هیدروژن‌زادایی قبل از سیکل‌شدن اتفاق بیفتد، ابتدا، یک گروه هیدروکسیل به گروه‌های کربن-کربن با پیوند دوگانه متصل می‌شود که بدلیل 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 هیدروژن‌زادایی و اکسیداسیون 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 هیدروژن‌زادایی 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، عده 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 پلی اکریلونیتریل از دمای ۳۰۰ درجه سانتی‌گراد به بعد شروع می‌شود [۷]. سرعت گرم کردن در مراحل اولیه کربونیزاسیون عموماً کم است (چند درجه سانتی‌گراد بر دقیقه) تا آزادشدن مواد تبخیرشونده به الیاف صدمه نزد. بیشتر مواد فرار در زیر ۱۰۰۰ درجه سانتی‌گراد از الیاف خارج می‌شوند و تنها کربن و مقدار کمی نیتروژن (تقرباً ۶ درصد) باقی می‌مانند. در طی مراحل اولیه کربونیزه شدن (محدوده ۵۰۰-۴۰۰ درجه سانتی‌گراد)، گروه‌های هیدروکسیل موجود در الیاف پلی اکریلونیتریل 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 ثابت 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 جداسدن هیدروژن شروع به اتصال در مناطق پیرامونی می‌کنند و ساختاری شبه گرافیتی را به وجود می‌آورند که شامل سه شش ضلعی در جهت پیرامونی است که به سیله اتم‌های نیتروژن به هم اتصال یافته‌اند. چنان 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 خورندگی 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 دانسته الیاف کربن نهایی کمتر باشد، هیدروژن سیانید کمتری در طی مرحله کربنیزاسیون تشکیل خواهد شد [۹].

نیلسن و همکاران پودر پلی اکریلونیتریل 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 پلی اکریلونیتریل، گازهای هیدروژن سیانید، آمونیاک، نیتروژن، کربن دی اکسید، 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 پلی اکریلونیتریل ۱۰۰ مرتبه بیشتر از پیرولیز نایلوون ۶ است [۱۰]. باهله و دونت در آزمایش‌های خود نشان دادند که عده 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 پلی اکریلونیتریل را به صورت واکنش‌های داده شده در شکل ۵ پیشنهاد کرده که در مطالعات دیگران هم اکثرا 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) آزادشدن هیدروژن سیانید و آمونیاک در طی کربنیزاسیون دمابایین، ب) آزادشدن هیدروژن سیانید در طی کربنیزاسیون دمابالا [۱۲]

آزادشدن 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 احرارت‌دهی سریع، قسمت آلتی پلی اکریلونیتریل 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 سیک در طی مراحل پایدارسازی و بهویژه کربنیزاسیون الیاف پلی اکریلونیتریل امری اجتناب‌ناپذیر است^[۹].

کوره‌های تولید الیاف کربن به کوره‌های دمای‌پایین، کوره‌های دمابالا و کوره‌های دماهای فوق بالا تقسیم می‌شوند. کوره‌های دمای‌پایین برای پیش کربنیزاسیون در اتمسفر خنثی و کوره‌های دمابالا برای کربنیزاسیون 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.

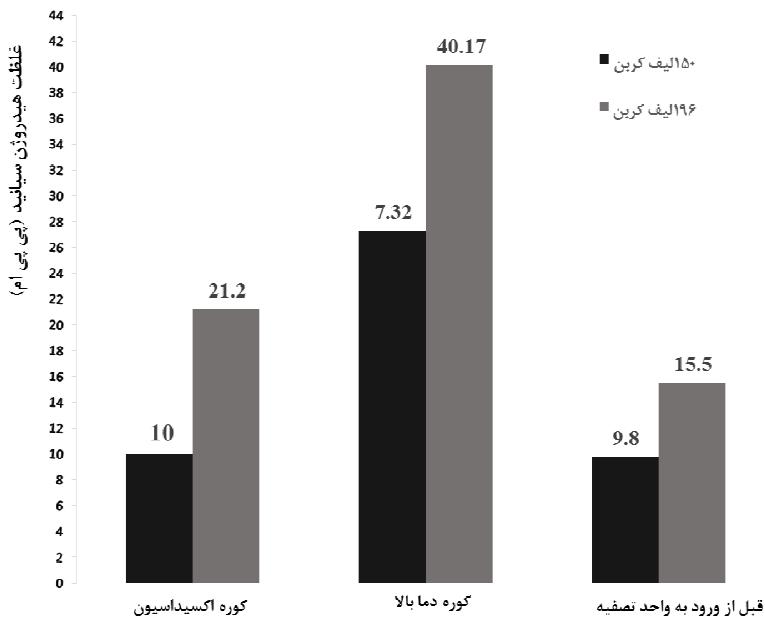
مورگان^[۱۶] بیان می‌کند که تولید هیدروژن سیانید از دمای حدود ۲۲۰ درجه سانتی‌گراد شروع می‌شود. همچنین، در دمای ۳۰۰ درجه سانتی‌گراد مقدار زیادی کربن دی اکسید تولید می‌شود که پیش‌بینی کرده است که از گروه‌های COOH- موجود در پلیمر اکسیدشده حاصل می‌شود. طبق گفته مورگان، در دمای ۴۰۰ درجه سانتی‌گراد، علاوه‌بر کربن دی اکسید 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 هیدروژن‌زادایی، آزادشدن 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 موردنی گاز سیانید خروجی از کوره‌های سوزاندن پلی اکریلونیتریل

در مطالعه موردنی ما از کوره دمای‌پایین برای پیش کربنیزاسیون و از کوره دمابالا برای کربنیزاسیون استفاده می‌شود. کوره دمای‌پایین در راستای کوره اکسیداسیون قرار دارد و پیوسته الیاف پلی اکریلونیتریل اکسیدشده را از خود عبور می‌دهد. به کار بردن یک مرحله کربنیزاسیون دمای‌پایین اولیه به منظور جلوگیری از شکستن ساختار الیاف و آزادشدن 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 نیم دقیقه 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 دمای‌پایین در دمای ۴۰۰ تا ۶۰۰ درجه سانتی‌گراد و کوره دما بالا 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 دمای‌پایین 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 نویسندهان 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 دمای‌پایین 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.

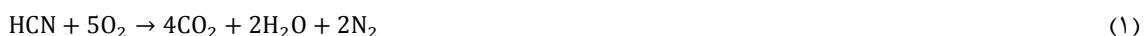
1. The National Institute for Occupational Safety and Health



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

راههای حذف گاز هیدروژن سیانید در صنایع

از آنجایی که هیدروژن سیانید آلاینده مرسومی 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 عمدۀ این مطالعات مربوط به حذف سیانید از کوره‌های ککسوز است که در این کوره‌ها میزان هیدروژن سیانید خروجی به مراتب کمتر از کوره‌های تولید الیاف کربن است. به طور کلی روش‌های ارائه شده در مطالعات برای حذف گاز هیدروژن سیانید شامل روش سوزاندن، جذب توسط حلal مایع، روش‌های بیولوژیکی و استفاده از کاتالیست‌هاست. بررسی مزايا و معایب هر یک از روش‌ها یک دید اوایله 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 کم خطر تبدیل می‌شوند. واکنش‌هایی که ممکن است رخدده به صورت واکنش‌های (۱) تا (۴) خواهد بود [۱۸، ۱۹].



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 مزايا اکسیداسیون است. از میان انواع مختلف اکسیدکننده‌ها، اکسیدکننده حرارتی بازیافتی محبوب‌تر و پرکاربردتر است. در این سیستم معمولاً حرارت بین حداقل دو بستره در یک سیکل مشخص جریان ورودی و خروجی تعویض می‌شود تا دمای بستر از یک حد مشخص افت نکند [۱۸-۲۱]. مشکل عمده این روش، به جز هزینه اولیه سیار 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. به علاوه، هزینه بالای سردازی برای خنک کردن و میان 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 آکنده‌ها^۱ 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 مرحله ثوری 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 خورندگی 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 به دست آورد. در شبیه‌سازی حاضر، دو برج آکنده متوالی برای حذف هیدروژن سیانید به وسیله 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 الکتروولیت که با روش ردیلیش-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 حلal ورودی بررسی شده است. حلal 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. آکنده مورد نظر حلقه پال انتخاب شد، زیرا نسبت به آکنده‌های نامنظم دیگر بازده بالاتر و افت فشار کمتری ایجاد می‌کند. همچنین بهدلیل احتمال خورندگی در سیستم، جنس آکنده پلاستیکی انتخاب شد.

در این تحقیق از مدل Rad Frac در نرم‌افزار کمک گرفته شده که علاوه‌بر موارد بیان شده، قابلیت محاسبه افت فشار را نیز دارد. اکثر شبیه‌سازی‌های انجام‌شده برای جذب گاز با استفاده از نرم‌افزار Aspen Plus معطوف به جذب کربن دی اکسید با حلal‌ها، فرایندها و سیکل‌های مختلف بوده است و متأسفانه شبیه‌سازی و مدل سازی برای جذب گاز هیدروژن سیانید با حلal‌های سدیم هیدروکسید، سدیم هیپوکلریت و دیگر حلal‌ها وجود ندارد. اما مازوں قدرتمند Rad Frac و بسته ترمودینامیکی کامل Electrolyte-NRTL در Aspen Plus در سیاری 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 دی اکسید کربن با محلول آبی مونواتانول آمین به دست آمده از واحد پایلوت را با روش براساس نرخ^۲ با بسته ترمودینامیکی Electrolyte-NRTL در Aspen Plus شبیه‌سازی کرددند و نتایج بسیار خوبی به دست آورده‌اند.

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 آنکه

به طور کلی روش مراحل تعادلی دقیق‌تر است و همچنین در این روش اثر واکنش‌های شیمیایی بر انتقال جرم و

حرارت درنظر گرفته نمی‌شود. مدل سرعت انتقال جرم دارای ویژگی‌هایی است که ارزش دقیق‌تر را دارند:

۱- محاسبه مستقیم سرعت انتقال جرم و حرارت از یک فاز به فاز دیگر

۲- واردشدن جزئیات طراحی و پارامترهای دستگاه در سرعت‌های انتقال جرم و حرارت

۳- واکنش‌های شیمیایی، سرعت انتقال جرم را بهبود می‌بخشدند.

۴- اهمیت تعادل فازی درنظر گرفته می‌شود.

۵- موازنۀ اجزاء، علاوه بر قطعه آنکه، در هر فاز نیز باید برقرار باشد.

فرضیاتی که در این تحقیق برای سیستم جهت شبیه‌سازی درنظر گرفته شده عبارت‌اند از:

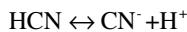
۱- سیستم به صورت پایدار فرض شده و از هر گونه رفتار دینامیکی صرف‌نظر شده است.

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 به صورت نفوذ مولکولی گاز هیدروژن سیانید از داخل گاز به طرف مایع و هم به صورت جابه‌جایی به خاطر ایجاد حباب در بستر آنکه انجام می‌گیرد. در شبیه‌سازی فرض شد که واکنش بین سدیم هیدروکسید و هیدروژن سیانید در تمام سینی‌ها اتفاق نماید.

شبیه‌سازی با روش انتقال جرم انجام شد و در قسمت طراحی مربوط به آنکه‌ها 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 ۷/۰ برای ضریب طغیان درنظر 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) آمدۀ‌اند. به دلیل آنکه محلول تجاری سدیم هیدروکسید به صورت محلول ۵۰ درصد جرمی است، درنظر گرفته شده که این محلول به صورت جدآگانه وارد مخزنی شده و در مخزن قبل از ورود به برج با جریان آب خالص مخلوط می‌شود. برای هر برج یک مخزن جدآگانه درنظر 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 به دست 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 به دست می‌دهد.



(۵)

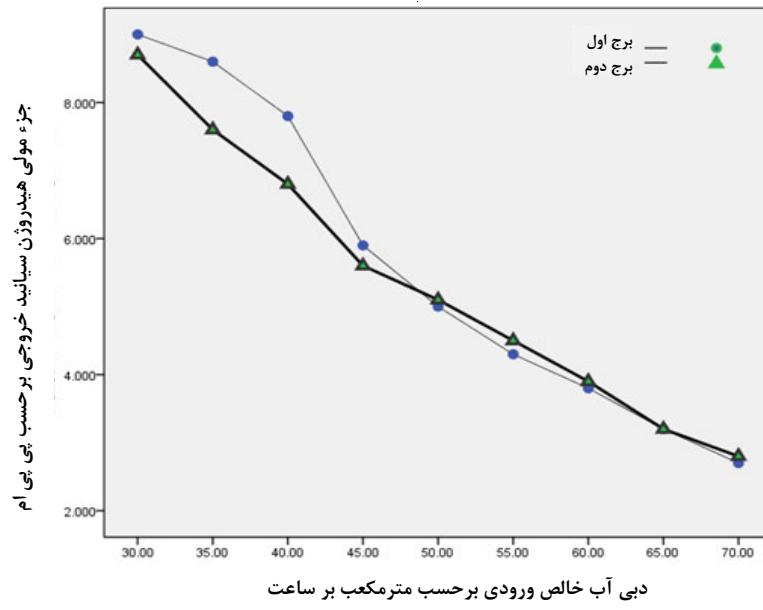
$$\ln(K_{eq}) = 22.90536 - \frac{9945.5303}{T} - 0.049579 * T \quad (6)$$



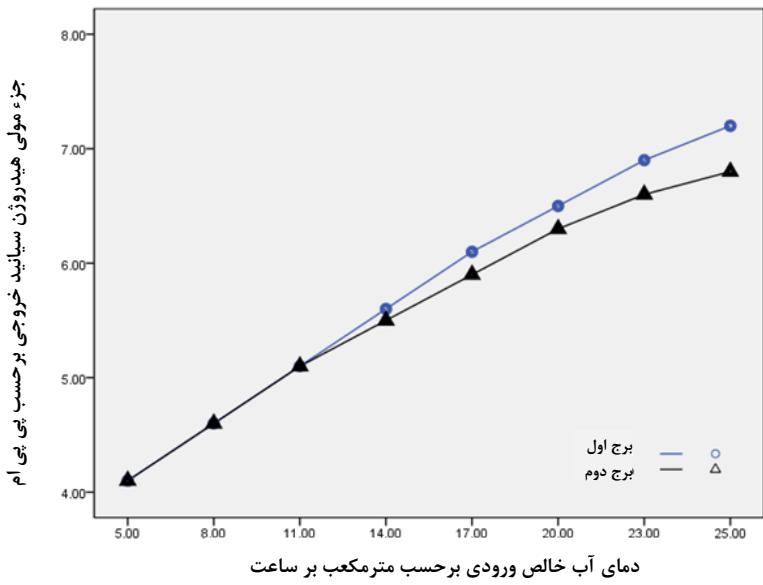
$$\ln(K_{eq}) = 132.89888 - \frac{133445.9}{T} - 22.477301 * \ln(T) \quad (8)$$



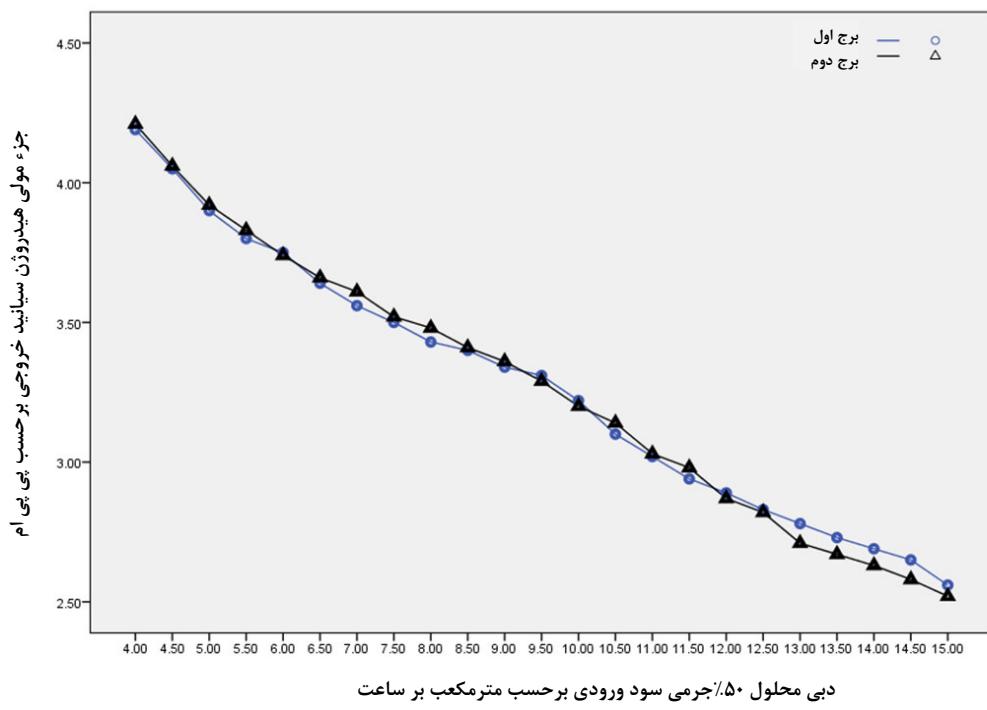
$$\ln(K_{eq}) = 10167.8511 - \frac{23391.43}{T} - 22.477 * \ln(T) - 0.0495786 * T \quad (10)$$



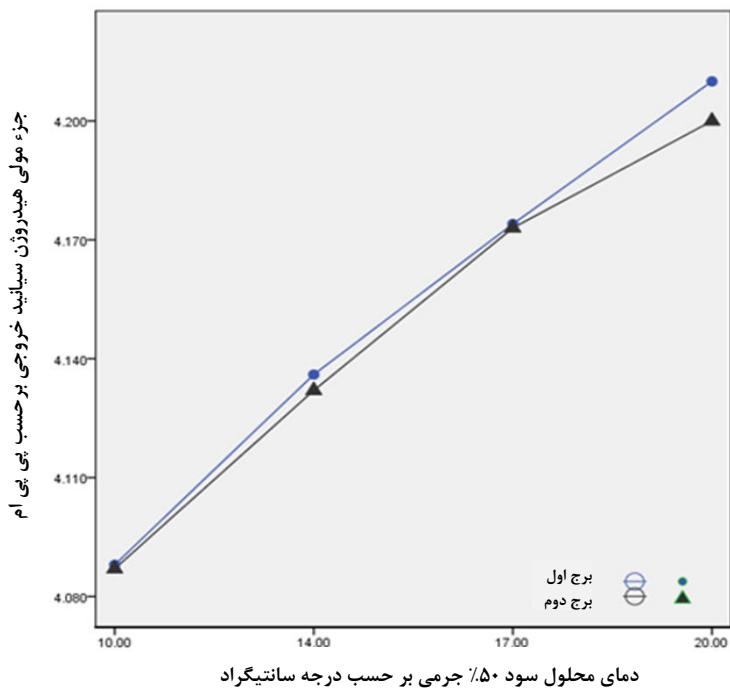
شکل ۷- تغییر سیانید خروجی بر حسب دبی آب خالص ورودی



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

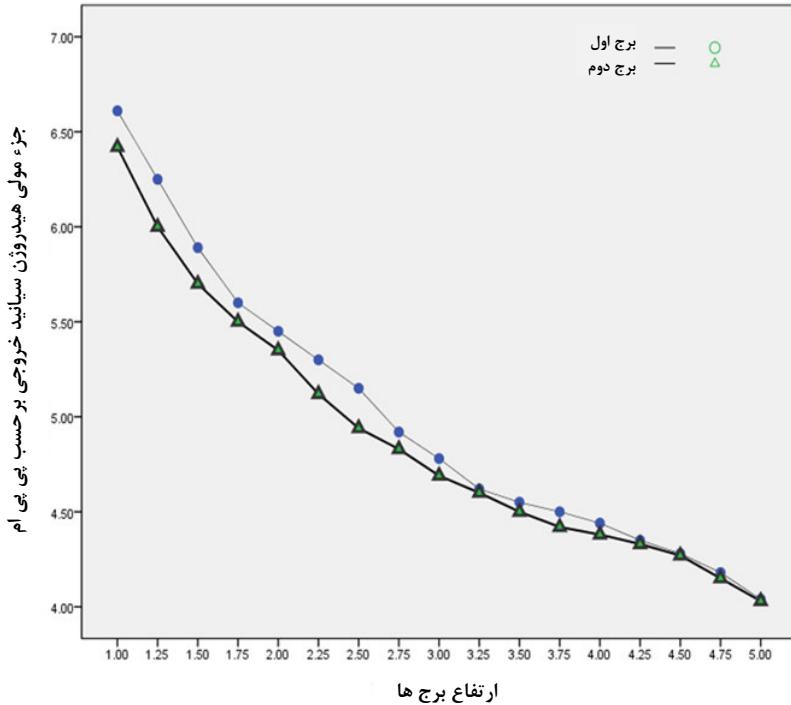


شکل ۹- تغییر سیانید خروجی بر حسب دبی محلول ۵۰ درصد جرمی سود ورودی



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

در شکل ۷ روند تغییرات سیانید خروجی بر حسب 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 همراهشدن 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 بر حسب تغییر دبی محلول سود ۵۰ درصد ورودی به هر برج است، نیز صادق است، با این تفاوت که شبیه این دو نمودار کمتر از شبیه 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 بدلیل 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 بر حسب ارتفاع برج‌ها

پارامتر دیگر بررسی شده، تغییرات دمای مایع ورودی به برج است که پارامتری تعیین‌کننده در جذب گاز است. تغییرات سیانید خروجی بر حسب دمای آب در شکل ۸ و تغییرات سیانید خروجی بر حسب دمای محلول ۵۰ درصد سود در شکل ۱۰ نشان داده شده‌اند. باز هم روند تغییرات در هر دو برج تقریباً یکسان است، اما بدلیل 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. شبیه 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 $2/0$ متر در نظر گرفته شده است و بر این اساس سیانید خروجی از هر برج از $6/5$ پی‌پی ام تا 4 پی‌پی ام 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 به دست آمده از شبیه‌سازی

پارامتر طراحی	مقدار
تعداد مراحل تئوری برج ^۶	۱۲
قطر برج (متر)	۲/۵
نوع و جنس آکنه	حلقه پال پلاستیکی ^۷
قطر آکنه	۱ اینچ
فشار در بالای برج (بار)	۱/۰ ۱۳۵
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)	۴/۰ ۳۳۴
افت فشار در برج دوم (کیلو پاسکال)	۴/۰ ۶۶۹

افزایش فشار در برج نیاز به انرژی زیاد دارد. در این تحقیق، برای به صرفه 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 4000 پاسکال بوده است که در اصل افت فشار به‌ازای ارتفاع برابر با 200 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 استه تورمودینامیکی NRTL-RK Electrolyte انجام شدند. نتیجه حاصل به دست آوردن شرایط بهینه بود و نتایج شبیه‌سازی نشان داد که با اطمینان، مقدار هیدروژن سیانید به 4 پی‌پی ام رسید. افت فشار برج‌ها و تغییرات دمای خروجی مایع از برج‌ها در حد مطلوب بودند. با توجه به نتایج به دست آمده

۶. دو برج به صورت سری هستند و پارامترهای ذکر شده 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، روشهای 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, Academic Press Inc., 1987.
12. W. Watt, B. Perov, *Chemistry and Physics of Conversion of PAN Fibers into High-Modulus Carbon Fibre* 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 N₂ 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, 4th 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 CO₂ 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 Edion, 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