

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ



دانشگاه شاهرود

رساله کارشناسی ارشد

عنوان:

مدلسازی واکنش تولید فلز مولیبدن از طریق احیاء  
هیدروژنی سولفید مولیبدن در مجاورت آهک

استاد راهنما:

دکتر محمد مهدی افصحی

نگارنده:

بهادر ابول پور

شهریورماه ۱۳۹۰



این رساله را به صاحب اصلی آن استاد بزرگوار جناب دکتر محمد مهدی افصحی تقدیم می دارم.

باشد تا جبرانی ناچیز از محبت‌های بی کران ایشان باشد.

## سپاسگزاری

شکر و سپاس پروردگار بزرگی که به من قدرت تأمل و تفکر را عطا فرمود تا بتوانم گوشه ای از بیکرانه ی خلقتش را دریابم.

جا دارد هنگام رسیدن به این جایگاه مراتب ادب و سپاسم را از جناب آقای دکتر محمد مهدی افصحی، استاد راهنمایم که علیرغم مشغله های فراوان مرا یاری فرمودند بجا آورده همچنین، از اساتید ارجمندم دکتر حسن هاشمی پور و دکتر عطاالله سلطانی گوهرریزی به عنوان داوران این پایان نامه سپاسگزارم.

بعلاوه جا دارد از همه ی اعضای محترم هیأت علمی دانشگاه شهید باهنر کرمان که مرا مدد رساندند تشکر و قدردانی کنم.

## چکیده:

احیاء مستقیم دی سولفید مولیبدن به وسیله هیدروژن در حضور آهک جایگزین مناسبی برای فرایند متداول تولید فلز مولیبدن است. از مزایای این روش نسبت به روش متداول می توان کاهش تعداد مراحل عملیاتی و عدم آلوده سازی محیط را نام برد. در این رساله یک مدل ریاضی جهت پیشبینی رفتار این واکنش پیچیده ارائه شده است. این مدل از ترکیب کردن سینتیک واکنش های رخ داده و پارامترهای آنها، که به وسیله آزمایشهای جداگانه بدست آمده اند، شکل گرفته است. معادلات موازنه مول و انرژی جهت تعیین توزیع غلظت گونه های گازی و دما، در هر گام زمانی و مکانی حل شده اند. نتایج این مدلسازی نشان می دهد که فرض کردن دمای ثابت برای این واکنش و یا فرض ساختار ثابت برای قرص در طی واکنش تأثیر عمده ای در رفتار واکنش ندارد و دلیل اصلی انحراف موجود میان پیشبینی های مدل ریاضی و داده های تجربی مربوط به اثر واکنش جانبی رخ داده در درون قرص است. اثر واکنش فرعی، از طریق محاسبه مقادیر جدید برای ضریب برخورد سرعت واکنشها و به کمک تطابق نتایج مدل با داده های تجربی، لحاظ و در نهایت مدل توانست رفتار واکنش را بخوبی پیشبینی نماید. در این رساله واکنش احیاء هیدروژنی دی سولفید مولیبدن در مجاورت آهک توسط مدلسازی بروش منطق فازی نیز شبیه سازی شده است. هدف از این کار بررسی بهینه اثر پارامترهای مؤثر شامل دمای توده گاز، نسبت مولی جامدهای واکنش دهنده، ضخامت قرص، غلظت هیدروژن در توده گاز بر پیشرفت واکنش و میزان تثبیت گوگرد در قرص بوده است. در نهایت نتایج حاصل از مدل منطق فازی با داده های تجربی و همچنین نتایج مدل ریاضی مقایسه شده است.

## فهرست مطالب

صفحه	عنوان
۱	فصل اول مقدمه
۴	۱-۱ معرفی موضوع
۵	۲-۱ اهداف
۵	۳-۱ تاریخچه پیدایش
۷	فصل دوم مروری بر کارهای گذشته
۱۷	فصل سوم تئوری
۱۸	۱-۳ انواع مدل برای واکنشهای گاز - جامد غیر کاتالیزوری
۱۸	۱-۱-۳ مدل هسته واکنش نداده
۱۹	۲-۱-۳ مدل واکنش حجمی
۱۹	۳-۱-۳ مدل دانه ای
۲۰	۴-۱-۳ مدل‌های حفره ای
۲۰	۵-۱-۳ مدل‌های هسته زایی
۲۲	۲-۳ شرح مسئله
۲۳	۳-۳ معادلات
۲۳	۱-۳-۳ موازنه مول
۲۴	۲-۳-۳ معادلات سرعت واکنش
۲۶	۳-۳-۳ معادلات بدون بعد
۲۹	۴-۳-۳ سایر معادلات
۳۰	۵-۳-۳ شرایط مرزی و اولیه
۳۲	۶-۳-۳ محاسبه ضریب نفوذ مؤثر
۳۶	۴-۳ تغییر ساختار قرص در اثر پیشرفت واکنش

۳۹	۳-۵ توزیع دما درون قرص
۴۲	۳-۶ کلیات منطق فازی
۴۴	فصل چهارم روش تحقیق
۴۵	۴-۱ آزمایش
۴۷	۴-۲ مدلسازی ریاضی
۵۸	۴-۳ مدلسازی منطق فازی
۶۱	فصل پنجم ارائه نتایج و بحث
۶۲	۵-۱ دست آوردهای مدل در احیاء هیدروژنی سولفید مس در مجاورت آهک
۶۴	۵-۲ اثر ریز ساختار آهک
۶۸	۵-۳ اثر دما، ضخامت قرص، مقدار آهک و غلظت هیدروژن در جریان توده گاز
۷۳	۵-۴ بررسی توزیع دمایی حاصل از واکنشهای غیرهمدمای درون قرص
۷۳	۵-۵ بررسی تغییرات ساختاری درون قرص در اثر واکنش
۷۷	۵-۶ اثر واکنش جانبی
۸۵	۵-۷ پیشبینی رفتار واکنش در شرایط خاص
۹۲	فصل ششم نتیجه گیری نهایی
۹۵	فهرست نمادها
۱۰۰	فهرست منابع



## فهرست جداول

صفحه	عنوان
۳	جدول ۱-۱ خواص فلز مولیبدن
۴۹	جدول ۱-۴ شرح پارامترهای اولیه، مذکور در شکل ۲-۴
۵۹	جدول ۲-۴ قوانین فازی: تمامی توابع عضویت موجود در شکل ۵-۴
۶۶	جدول ۱-۵ مدولهای واکنش گاز-جامد تعمیم یافته و مقایسه مقادیر تخمینی و تطبیق یافته ضرایب نفوذ موثر
۶۷	جدول ۲-۵ مقادیر ضریب نفوذ در واکنش احیاء هیدروژنی سولفید مس در مجاورت آهک
۸۲	جدول ۳-۵ پارامترهای تصحیح شده در شرایط مختلف

## فهرست نمودارها

صفحه	عنوان
۲۵	شکل ۳-۱ ثابت سرعت انسداد حفره ( $1/l$ ) بصورت تابعی از دما [۹۷].
۴۶	شکل ۴-۱ نمای کلی سیستم آزمایشگاهی [۱۱۲].
۴۸	شکل ۴-۲ رویه حل عددی معادلات مدل ریاضی توسط برنامه کامپیوتری
۵۱	شکل ۴-۳ ذرات $MoS_2$ قبل از واکنش
۵۲	شکل ۴-۴ ذرات $Ca(OH)_2$ قبل از کلسینه شدن
۵۸	شکل ۴-۵ نمای کلی سیستم استنباط فازی
۶۴	شکل ۵-۱ مقایسه پیشبینی مدل ریاضی و منطق فازی با داده های تجربی از کاهش وزن نسبی قرص و تثبیت گوگرد در احیاء هیدروژنی سولفید مس در مجاورت آهک در دمای $973\text{ K}$ ، قرص کروی با قطر $0.816\text{ cm}$ ، تخلخل $0.345$ ، $\gamma = 3$ و متوسط اندازه ذرات سولفور $90$ میکرون.
۶۵	شکل ۵-۲ نمای مفهومی از قرص متشکل از دانه های جامد B ( $MoS_2$ ) و ریز دانه های جامد D ( $CaO$ )
۶۸	شکل ۵-۳ پیشبینی مدل ریاضی و داده های تجربی در دمای $1173\text{ K}$ ، قرص با ضخامت $4\text{ mm}$ ، غلظت گاز هیدروژن در توده گاز معادل $100\%$ و نسبت اختلاط مولی مواد جامد معادل ۳
۶۹	شکل ۵-۴ پیشبینی مدل ریاضی و داده های تجربی در دمای $1273\text{ K}$ ، قرص با ضخامت $4\text{ mm}$ ، غلظت گاز هیدروژن در توده گاز معادل $100\%$ و نسبت اختلاط مولی مواد جامد معادل ۳
۶۹	شکل ۵-۵ پیشبینی مدل ریاضی و داده های تجربی در دمای $1173\text{ K}$ ، قرص با ضخامت $4\text{ mm}$ ، غلظت گاز هیدروژن در توده گاز معادل $100\%$ و نسبت اختلاط مولی مواد جامد معادل ۳
۷۰	شکل ۶-۵ پیشبینی مدل ریاضی و داده های تجربی برای قرص با ضخامت $2\text{ mm}$

- دمای  $1273\text{ K}$  کلونین، غلظت گاز هیدروژن در توده گاز معادل  $100\%$  و نسبت اختلاط مولی مواد جامد معادل ۳
- ۷۱ شکل ۷-۵ پیشبینی مدل ریاضی و داده های تجربی برای قرص با ضخامت  $8\text{ mm}$ ، دمای  $1273\text{ K}$  کلونین، غلظت گاز هیدروژن در توده گاز معادل  $100\%$  و نسبت اختلاط مولی مواد جامد معادل ۳
- ۷۱ شکل ۸-۵ پیشبینی مدل ریاضی و داده های تجربی برای قرص با ضخامت  $11\text{ mm}$ ، دمای  $1273\text{ K}$  کلونین، غلظت گاز هیدروژن در توده گاز معادل  $100\%$  و نسبت اختلاط مولی مواد جامد معادل ۳
- ۷۲ شکل ۹-۵ پیشبینی مدل ریاضی و داده های تجربی برای نسبت اختلاط مولی مواد جامد معادل ۵، دمای  $1273\text{ K}$  کلونین، قرص با ضخامت  $4\text{ mm}$  و غلظت گاز هیدروژن در توده گاز معادل  $100\%$
- ۷۲ شکل ۱۰-۵ پیشبینی مدل ریاضی و داده های تجربی در غلظت گاز هیدروژن در توده گاز معادل  $50\%$ ، دمای  $1273\text{ K}$  کلونین، قرص با ضخامت  $4\text{ mm}$  و نسبت اختلاط مولی مواد جامد معادل ۳
- ۷۳ شکل ۱۱-۵ توزیع دمایی حاصل از حل عددی (سطح) و حل تحلیلی (نقاط) موازنه انرژی درون قرص
- ۷۵ شکل ۱۲-۵ تغییرات شعاع هسته واکنش نداده دانه های جامد B برای قرص با ضخامت  $4\text{ mm}$ ،  $100\%$  غلظت هیدروژن در توده گاز و  $\gamma=3$  در دمای  $1273\text{ K}$ .
- ۷۵ شکل ۱۳-۵ تغییرات شعاع هسته واکنش نداده ریزدانه های جامد D برای قرص با ضخامت  $4\text{ mm}$ ،  $100\%$  غلظت هیدروژن در توده گاز و  $\gamma=3$  در دمای  $1273\text{ K}$ .
- ۷۶ شکل ۱۴-۵ تغییرات شعاع دانه های جامد B برای قرص با ضخامت  $4\text{ mm}$ ،  $100\%$  غلظت هیدروژن در توده گاز و  $\gamma=3$  در دمای  $1273\text{ K}$
- ۷۶ شکل ۱۵-۵ تغییرات شعاع ریزدانه های جامد D برای قرص با ضخامت  $4\text{ mm}$ ،  $100\%$  غلظت هیدروژن در توده گاز و  $\gamma=3$  در دمای  $1273\text{ K}$
- ۷۷ شکل ۱۶-۵ تغییرات تخلخل قرص با ضخامت  $4\text{ mm}$ ،  $100\%$  غلظت هیدروژن در توده گاز و  $\gamma=3$  در دمای  $1273\text{ K}$ .
- ۷۷ شکل ۱۷-۵ تغییرات ضریب نفوذ مؤثر برای قرص با ضخامت  $4\text{ mm}$ ،  $100\%$  غلظت هیدروژن در توده گاز و  $\gamma=3$  در دمای  $1273\text{ K}$ .

- شکل ۵-۱۸ آنالیز پراش اشعه ایکس از قرص پس از اتمام واکنش. ۷۸
- شکل ۵-۱۹ محاسبه شده در مقادیر مختلف از ضرایب تصحیح  $K_1$  و  $K_2$  برای قرص با ضخامت  $4\text{mm}$ ، ضخامت،  $1273\text{K}$  دما، غلظت  $100\%$  هیدروژن در توده گاز و  $\eta=3$ . ۸۱
- شکل ۵-۲۰ پیشبینی مدل ریاضی همراه با اثر واکنش جانبی و داده های تجربی در دمای  $1173\text{K}$ ، قرص با ضخامت  $4\text{mm}$ ، غلظت گاز هیدروژن در توده گاز معادل  $100\%$  و نسبت اختلاط مولی مواد جامد معادل ۳. ۸۲
- شکل ۵-۲۱ پیشبینی مدل ریاضی همراه با اثر واکنش جانبی و داده های تجربی در دمای  $1273\text{K}$ ، قرص با ضخامت  $4\text{mm}$ ، غلظت گاز هیدروژن در توده گاز معادل  $100\%$  و نسبت اختلاط مولی مواد جامد معادل ۳. ۸۳
- شکل ۵-۲۲ پیشبینی مدل ریاضی همراه با اثر واکنش جانبی و داده های تجربی در دمای  $1373\text{K}$ ، قرص با ضخامت  $4\text{mm}$ ، غلظت گاز هیدروژن در توده گاز معادل  $100\%$  و نسبت اختلاط مولی مواد جامد معادل ۳. ۸۳
- شکل ۵-۲۳ پیشبینی مدل ریاضی همراه با اثر واکنش جانبی و داده های تجربی در دمای  $1273\text{K}$ ، قرص با ضخامت  $2\text{mm}$ ، غلظت گاز هیدروژن در توده گاز معادل  $100\%$  و نسبت اختلاط مولی مواد جامد معادل ۳. ۸۴
- شکل ۵-۲۴ پیشبینی مدل ریاضی همراه با اثر واکنش جانبی و داده های تجربی در دمای  $1273\text{K}$ ، قرص با ضخامت  $8\text{mm}$ ، غلظت گاز هیدروژن در توده گاز معادل  $100\%$  و نسبت اختلاط مولی مواد جامد معادل ۳. ۸۴
- شکل ۵-۲۵ پیشبینی مدل ریاضی همراه با اثر واکنش جانبی و داده های تجربی در دمای  $1273\text{K}$ ، قرص با ضخامت  $4\text{mm}$ ، غلظت گاز هیدروژن در توده گاز معادل  $100\%$  و نسبت اختلاط مولی مواد جامد معادل ۵. ۸۵
- شکل ۵-۲۶ پیشبینی مدل ریاضی همراه با اثر واکنش جانبی و داده های تجربی در دمای  $1273\text{K}$ ، قرص با ضخامت  $4\text{mm}$ ، غلظت گاز هیدروژن در توده گاز معادل  $50\%$  و نسبت اختلاط مولی مواد جامد معادل ۳. ۸۵
- شکل ۵-۲۷ اثر دما بر روی توزیع غلظت گونه های گازی  $\text{H}_2$ ،  $\text{H}_2\text{S}$  و  $\text{H}_2\text{O}$  در درون قرص با ضخامت  $4\text{mm}$ ، غلظت گاز هیدروژن در توده گاز معادل  $100\%$ ، نسبت اختلاط مولی مواد جامد معادل ۳، تخلخل قرص  $0/5$  و زمان  $1000$  ثانیه حاصل از مدلسازی ریاضی. ۸۶

- شکل ۵-۲۸ اثر نسبت اختلاط مواد جامد بر روی پیشبینی مدل برای قرص با ضخامت ۴mm، دمای ۱۲۷۳ کلوین، غلظت گاز هیدروژن در توده گاز معادل ۱۰۰٪، تخلخل قرص ۰/۵ و زمان ۱۰۰۰ ثانیه حاصل از مدلسازی ریاضی
- شکل ۵-۲۹ اثر ضخامت قرص بر روی پیشبینی مدل برای دمای ۱۲۷۳ کلوین، غلظت گاز هیدروژن در توده گاز معادل ۱۰۰٪، نسبت اختلاط مولی مواد جامد معادل ۳، تخلخل قرص ۰/۵ و زمان ۱۰۰۰ ثانیه حاصل از مدلسازی ریاضی
- شکل ۵-۳۰ اثر دما بر روی پیشبینی منطق فازی از زمان لازم برای انجام واکنش در قرص با ضخامت ۴mm، ۱۰۰٪ غلظت هیدروژن در توده گاز و  $\gamma=3$
- شکل ۵-۳۱ اثر دما بر روی پیشبینی منطق فازی از تثبیت گوگرد در قرص با ضخامت ۴mm، ۱۰۰٪ غلظت هیدروژن در توده گاز و  $\gamma=3$ .
- شکل ۵-۳۲ اثر ضخامت قرص بر روی پیشبینی منطق فازی از زمان لازم برای انجام واکنش در دمای ۱۲۷۳ K، ۱۰۰٪ غلظت هیدروژن در توده گاز و  $\gamma=3$ .
- شکل ۵-۳۳ اثر نسبت اختلاط مواد جامد بر روی پیشبینی منطق فازی از زمان لازم برای انجام واکنش در قرص با ضخامت ۴mm، دمای ۱۲۷۳ K و ۱۰۰٪ غلظت هیدروژن در توده گاز
- شکل ۵-۳۴ اثر نسبت اختلاط مواد جامد بر روی پیشبینی منطق فازی از تثبیت گوگرد در قرص با ضخامت ۴mm، دمای ۱۲۷۳ K و ۱۰۰٪ غلظت هیدروژن در توده گاز
- شکل ۵-۳۵ اثر غلظت هیدروژن در توده گاز بر روی پیشبینی منطق فازی از زمان لازم برای انجام واکنش در قرص با ضخامت ۴mm، دمای ۱۲۷۳ K و  $\gamma=3$ .
- شکل ۵-۳۶ اثر غلظت هیدروژن در توده گاز بر روی پیشبینی منطق فازی از تثبیت گوگرد در قرص با ضخامت ۴mm، دمای ۱۲۷۳ K و  $\gamma=3$
- شکل ۶-۱ پیشبینی منطق فازی و همچنین مدلسازی ریاضی همراه با اثرات حرارتی، تغییرات ساختاری و واکنش جانبی در مقایسه با داده های تجربی برای تثبیت گوگرد و همچنین کاهش وزن نسبی در قرص با ضخامت ۸mm، ۱۰۰٪ غلظت هیدروژن در توده گاز و  $\gamma=3$  در دمای ۱۲۷۳ K

# فصل اول

## مقدمه

مهمترین مینرال مولیبدن، مولیبدنیت با فرمول  $\text{MoS}_2$  است. این کانی که ماده اولیه اصلی برای تولید فلز مولیبدن است، به میزان ۰/۲ تا ۰/۵ درصد بصورت پراکنده در سنگهای آتشفشانی یافت می شود. مولیبدنیت همچنین بمیزان ۸۰ درصد در ذخایر فقیر مس موجود بوده و بصورت محصول جانبی در عملیات کانی آرای می تواند بازیابی شود [۱]. بزرگترین تولید کننده گان مولیبدن بترتیب آمریکا، شیلی، کانادا و روسیه می باشند. در سال ۲۰۰۵ آمریکا بعنوان بزرگترین استخراج کننده، ۵۶۹۰۰ تن از این فلز را استخراج کرد. عیار سنگ معدن مس سرچشمه کرمان ۰/۳۵ درصد بصورت سولفید مولیبدن است که فقط ۶۵ درصد آن قابل بازیابی است [۲].

بیش از ۷۰ درصد از کل مولیبدن جهان در آلیاژها بکار می رود. آلیاژهای خاص حاوی مولیبدن مانند هاستلوی<sup>۱</sup> بطور چشمگیری در برابر حرارت و فرسایش مقاوم هستند. از این عنصر در ساخت قسمتهای مختلف هواپیما و موشک و افروزه های لامپ استفاده می شود. در صنعت بنزین، بخصوص در جدا کردن گوگردهای آلی از محصولات بنزینی این ماده بعنوان کاتالیزور کاربرد دارد. ایزوتوپ  $\text{Mo-99}$  نیز در صنایع اتمی کاربرد دارد.

طیف رنگدانه های نارنجی مولیبدن بین قرمز، زرد تا نارنجی قرمز درخشان قرار دارد که در پلاستیک، جوهر، رنگ و ترکیبات لاستیکی بکار می روند. دی سولفید مولیبدن یا همان مولیبدنیت ماده روان کننده<sup>۲</sup> خوبی مخصوصاً در دماهای بالا بحساب می آید. مولیبدن در بعضی وسایل الکترونیکی مانند پوشش فلزات رسانا در غشای نازک ترانزیستورها مورد استفاده قرار می گیرد.

باتوجه به اهمیت مولیبدن بعنوان یکی از مواد اولیه قابل مصرف در صنایع مختلف مانند تولید فولاد و چدن، رنگ، کود، وسایل حمل و نقل، ابزار و ماشین آلات صنعتی، تجهیزات کشاورزی و معدنی،

---

<sup>1</sup> Hastelloy

<sup>2</sup> Lubricant

نیروگاهها، صنایع غذایی و شیمیایی، تولید نفت و گاز، لوله ها، تجهیزات لوله ای دیگهای بخار، گرمکن ها، مبدل‌های حرارتی، کندانسورها، تقطیر کننده ها و وسایل تصفیه نفت و آب، انجام مطالعات اولیه برای بهبود بازیابی و نیز مصرف این ماده در داخل کشور ضروری است. مولیبدنیت خود مصرف فراوانی دارد و همچنین می تواند برای تولید فلز مولیبدن یا ترکیبات آن مورد استفاده قرار گیرد. برای تولید این ماده از روش فلوتاسیون<sup>۱</sup> یا روش تقلی<sup>۲</sup> استفاده می شود.

ویژگیهای مهم مولیبدن عبارتند از: نقطه ذوب بالا، مدول الاستیسیته<sup>۳</sup> بالا، مقاومت بالا در برابر حرارت، هدایت حرارتی بالا، مقاومت خمشی بالا، گرمای ویژه پایین و ضریب انبساط پایین. در جدول ۱-۱ برخی از این خواص آورده شده است:

جدول ۱-۱ خواص فلز مولیبدن

Molybdenum, Mo, 42	نام، علامت اختصاری، عدد اتمی
فلز واسطه	گروه شیمیایی
$10280 \text{ Kg.m}^{-3}$	چگالی
خاکستری فلزی	رنگ
2896 K	نقطه ذوب
4912 K	نقطه جوش
$250 \text{ J.Kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$	ظرفیت گرمایی ویژه

<sup>1</sup> Flotation

<sup>2</sup> Gravity

<sup>3</sup> Elasticity



$1/38 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$	رسانایی گرمایی
$18/7 \times 10^6 \Omega.\text{m}^{-1}$	رسانایی الکتریکی

مشکلات جدی در رابطه با روشهای سنتی تولید فلز مولیبدن موجب نیاز به یافتن و گسترش روشهای جدید استخراج این فلز مهم از مولیبدنیت گردیده است. به این منظور روشهای پیروشیمیایی<sup>۱</sup> [۳]، هیدرومتالوژی<sup>۲</sup>، بیولیچینگ<sup>۳</sup> [۴] و الکترومتالوژی<sup>۴</sup> [۵] یا ترکیبی از این روشها [۶] استفاده گردیده است. احیاء مستقیم دی سولفید مولیبدن به وسیله هیدروژن در حضور آهک جایگزین مناسبی برای فرایند متداول تولید فلز مولیبدن است. از مزایای این روش نسبت به روش متداول می توان کاهش تعداد مراحل عملیاتی و عدم آلوده سازی محیط را نام برد.

## ۱-۱ معرفی موضوع

احیاء سولفید فلز در حضور یک اکسید فلزی مناسب یک فرآیند قابل توجه برای بازیابی مستقیم فلزات است [۳ و ۷]. نمای کلی احیاء دی سولفید مولیبدن به عنوان سولفید فلزی و آهک به عنوان اکسید فلزی به صورت زیر است:

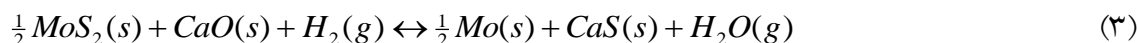


<sup>1</sup> Pyro-chemical

<sup>2</sup> Hydrometallurgical

<sup>3</sup> Bioleaching

<sup>4</sup> Electrometallurgical



در این واکنش آهک به دو منظور اضافه شده :

الف- واکنش سولفید هیدروژن تولید شده با آهک مطابق واکنش (۱) موجب تثبیت گوگرد<sup>۱</sup> در جامد و در نتیجه کاهش آلودگی محیط خواهد شد.

ب- حضور آهک با حذف سولفید هیدروژن از فاز گاز موجب می شود که واکنش (۱) هر چه بیشتر به سمت راست پیشرفت کند. توجه شود که واکنش (۱) دارای ثابت تعادل کوچک در حدود  $10^{-3}$  و واکنش (۲) دارای ثابت تعادلی بنسبت بزرگ در حدود  $10^2$  در رنج دمایی انجام آزمایش می باشد.

## ۲-۱ اهداف

در این پایان نامه بررسی دو هدف عمده زیر از طریق انجام مدلسازی می باشد:

۱. چه عواملی میزان تولید فلز مولیبدن از مولیبدنیت را افزایش می دهد.
۲. بررسی تأثیر عوامل مختلف بر روی میزان جذب  $H_2S$  تولید شده، توسط آهک.

## ۳-۱ تاریخچه پیدایش

مولیبدن از واژه یونانی مولیبدوس<sup>۲</sup> بمعنی "سرب مانند" گرفته شده و بصورت آزاد در طبیعت وجود ندارد. تا اواخر قرن ۱۸ ترکیبات آن را با ترکیبات عناصر دیگر مانند کربن و سرب اشتباه می گرفتند.

---

<sup>1</sup> Sulfur fixation  
<sup>2</sup> Molybdenum

کارل ویلهلم<sup>۱</sup> در سال ۱۷۷۸ اثبات کرد که مولیبدن با گرافیت و سرب ارتباطی ندارد و توانست اکسید این فلز را از مولیبدنیت جدا کند. در سال ۱۷۲۸ هلم<sup>۲</sup> موفق شد تا با احیاء اکسید آن، عناصر ناخالص را از مولیبدن جداسازی کند. تا اواخر قرن ۱۹ مولیبدن کاربرد بسیار کمی داشت تا اینکه شرکت فرانسوی اشنايدر<sup>۳</sup> این فلز را در پوشش زرهی مورد آزمایش قرار داد و به ویژگیهای مفید آن پی برد. استفاده از مولیبدن در طول جنگ جهانی اول افزایش یافت، در این دوران نیاز به تنگستن موجب گرانی این عنصر شد و فولاد محکم هم گران و کمیاب شده بود. آن زمان از مولیبدن در آلیاژهای بادوام و فولادهای مقاوم در برابر حرارت‌های بالا استفاده می شد.

---

<sup>۱</sup> Carl Wilhelm

<sup>۲</sup> Hjelm

<sup>۳</sup> Schneider and Co.

## فصل دوم

### مروری بر کارهای گذشته