

Aspen Plus를 리용한 BF_3 저온정류공정의 모의

양평혁, 김성민, 리경화

화학공업과 반도체공업에서 널리 쓰이는 BF_3 기체에서 기본불순물인 SiF_4 을 제거하기 위한 실용적인 방법은 저온정류법이다.[1-4] 그러나 저온정류장치와 공정에 대한 구체적인 자료는 발표된것이 거의나 없다.

우리는 화학공정모의프로그램 Aspen Plus를 리용하여 BF_3 기체에서 SiF_4 을 제거하기 위한 연속식저온정류공정을 모의하고 BF_3 기체의 농도(물질량분률)를 0.970으로부터 0.995로 높이는데 필요한 공정지표들을 결정하였으며 제품과 관액에서의 BF_3 농도에 미치는 몇가지 인자들의 영향을 고찰하였다.

모의조건설정

Aspen Plus에서의 물성계산은 BF_3 - SiF_4 계에 적합한 NTRL 물성계산방법을 리용하였다.

BF_3 기체의 저온정류공정은 1개의 채식정류탑을 리용하여 연속식으로 구성하였으며 이 공정에서의 물질흐름은 그림 1과 같이 설정하였다.

채식정류탑은 DSTWU단위조작모형을 리용하여 모의하였으며 BF_3 의 농도는 물질량분률로 평가하였다.

원료로 공급되는 BF_3 기체의 온도는 -80°C 로, 농도는 0.970으로, 제품과 관액에서의 BF_3 농도는 각각 0.995, 0.500으로, 응축기와 비등기의 압력은 대기압으로 설정하였다.

제품과 관액에서의 BF_3 농도에 미치는 인자들의 영향은 RadFrac모형의 감도분석기능을 리용하여 모의하였다.

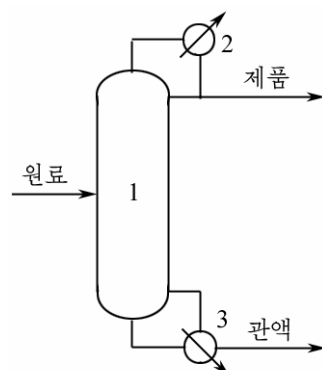


그림 1. 연속식저온정류공정에서의 물질흐름도

1-정류탑, 2-응축기, 3-비등기

모의결과 및 고찰

공정지표들 모의에 의하여 결정된 BF_3 저온정류공정의 몇가지 지표들은 표 1과 같다.

표 1. BF_3 저온정류공정의 몇가지 지표들

최소환류비	최소리론단수	원료공급단번호	제품온도/ $^\circ\text{C}$	관액온도/ $^\circ\text{C}$
4.91	47.7	18	-99.9	-97.8

표 1에서 보는바와 같이 최소환류비는 4.91, 최소리론단수는 47.7이므로 환류결수를 1.5로 설정할 때 환류비는 $4.91 \cdot 1.5 \approx 7.4$, 리론단수는 $47.7 \cdot 1.5 \approx 72$ 이다. 그리고 원료공급단번호가 18이므로 정류탑에서 농축부와 회수부의 리론단수는 각각 55, 17이다.

리론단수의 영향 리론단수에 따르는 제품과 관액에서 BF_3 농도의 변화는 그림 2와 같다.

그림 2에서 보는바와 같이 리론단수가 60이상일 때에는 제품과 관액에서의 BF_3 농도 변화가 크지 않다.

환류비의 영향 환류비에 따르는 제품과 관액에서 BF_3 농도의 변화는 그림 3과 같다.

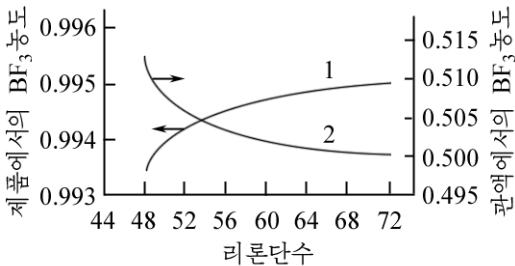


그림 2. 리론단수에 따르는 제품과 관액에서 BF_3 농도의 변화
환류비 7.4, 1-제품, 2-관액

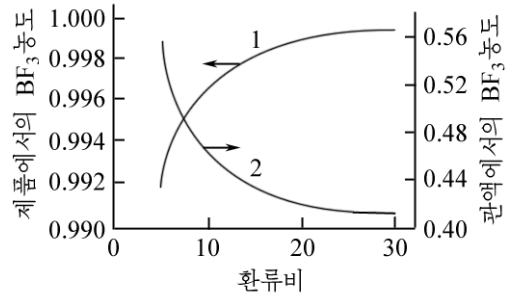


그림 3. 환류비에 따르는 제품과 관액에서 BF_3 농도의 변화
리론단수 72, 1과 2는 그림 2와 같음

그림 3으로부터 환류비가 20이하일 때에는 제품과 관액에서의 BF_3 농도가 환류비에 크게 의존하지만 환류비가 20이상일 때에는 제품과 관액에서의 BF_3 농도가 거의나 일정하다는것을 알수 있다.

원료에서 BF_3 농도의 영향 원료에서의 BF_3 농도에 따르는 제품에서의 BF_3 농도변화는 표 2와 같다.

표 2. 원료에서의 BF_3 농도에 따르는 제품에서의 BF_3 농도변화(환류비 7.4, 리론단수 72)

원료에서의 BF_3 농도	0.820	0.860	0.900	0.940	0.960	0.970
제품에서의 BF_3 농도	0.863	0.905	0.947	0.988	0.993	0.995

표 2에서 보는바와 같이 환류비가 7.4이고 리론단수가 72일 때 원료에서의 BF_3 농도가 0.970보다 낮으면 제품에서의 BF_3 농도는 목적하는 값(0.995)에 도달할수 없다. 그러므로 이 경우에는 환류비와 리론단수를 증가시켜야 한다.

맺 는 말

1) 화학공정 모의프로그램 Aspen Plus를 리용하여 BF_3 저온정류공정을 모의하고 BF_3 의 농도(물질량분률)를 0.970으로부터 0.995로 높이는데 필요한 몇가지 공정지표들을 결정하였다.

2) 제품과 관액에서의 BF_3 농도에 미치는 리론단수와 환류비, 원료에서 BF_3 농도의 영향을 고찰하였다.

참 고 문 헌

- [1] 김일성종합대학학보 화학, 64, 1, 120, 주체107(2018).
- [2] 김일성종합대학학보(자연과학), 54, 7, 86, 주체97(2008).
- [3] 韩瑞雄; 舰船科学技术, 32, 5, 100, 2010.
- [4] 宇野昭; 公開特許公報, 昭59-50018, 1984.

Simulation of the Process for the Low Temperature Rectification of BF_3 Using Aspen Plus

Yang Phyong Hyok, Kim Song Min and Ri Kyong Hak

We simulated the process for the low temperature rectification of BF_3 by using Aspen Plus and determined the process indexes. And we considered the influences of some factors on BF_3 concentrations of the product and the pipe liquid.

Keywords: rectification, simulation