

БАЛАНСОВАЯ СХЕМА ПРОЦЕССА ПРОИЗВОДСТВА ТРИХЛОРСИЛАНА, СОСТАВЛЕННАЯ В «EXCEL»

В.В. Апанасенко, ведущий научный сотрудник

ОАО «Гиредмет»

e-mail: asla_new@rambler.ru

В среде Excel из пакета Microsoft Office составлена балансовая схема производства трихлорсилана, основанного на гидрохлорировании элементарного кремния. Схема включает стадии синтеза хлороводорода, синтеза трихлорсилана, разделения парогазовой смеси и очистки трихлорсилана. При изменении пользователем условий расчета схема позволяет автоматически пересчитывать материальные потоки, удельные расходные коэффициенты и т.д., а также контролировать соответствие полученных в процессе расчета балансовых данных заданным показателям производства.

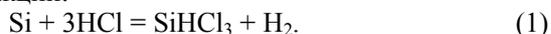
The balance scheme of trichlorosilane production based on hydrochlorination of elemental silicon was worked out with the use of Microsoft Excel. The scheme includes the following steps: synthesis of hydrogen chloride, synthesis of trichlorosilane, separation of vapor-gas mixture and purification of trichlorosilane. If the user modifies the calculation conditions, the scheme allows to re-count automatically the material flows, specific consumption coefficients etc., and also to check the correspondence between the balance data obtained in the calculation process and required indices of production.

Ключевые слова: трихлорсилан, балансовая схема, Excel, расчет, материальный баланс.

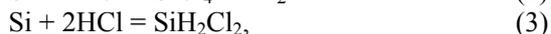
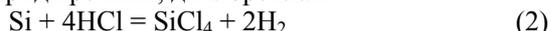
Key words: trichlorosilane, balance scheme, Excel, calculation, material balance.

Трихлорсилан (ТХС) является крупнотоннажным продуктом химической промышленности и сырьем для получения поликристаллического кремния, применяемого для производства полупроводников. ТХС используют также для производства кремнийорганических соединений.

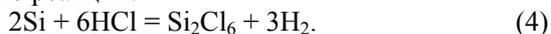
В настоящее время основным промышленным способом получения трихлорсилана является гидрохлорирование кремния, согласно реакции:



В процессе синтеза трихлорсилана, наряду с целевым продуктом в небольших количествах образуется и ряд побочных продуктов: тетрагидрид кремния, дихлорсилан

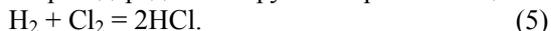


а также полисиланхлориды и их производные (Si_2Cl_6 , Si_3Cl_8 , Si_2HCl_5 и другие). Полисиланхлориды вместе с производными (ПСХ) в балансовых расчетах допустимо представлять в виде одного компонента – Si_2Cl_6 , образующегося по реакции:



В парогазовой смеси (ПГС) после синтеза ТХС присутствуют также водород, непрореагировавшие хлороводород и кремний, и примеси, содержащиеся в реагентах.

Необходимый для гидрохлорирования кремния хлороводород синтезируют из простых веществ:



Получаемую на стадии синтеза ТХС парогазовую смесь сначала очищают от кремниевой пыли и основного количества примесей посредством сухой и мокрой очистки [1], затем адсорбционным или криогенным методом [2] разделяют на три основных компонента: газообразные водород и хлороводород, а также

жидкий конденсат хлорсиланов (ХС). Хлороводород возвращают на стадию синтеза ТХС, а водород – на синтез HCl. Таким образом, для синтеза хлороводорода частично используют оборотный водород, частично – свежий. Соответственно, на стадию синтеза ТХС подают и оборотный HCl, и синтетический. Конденсат ХС разделяют методом ректификации [1]. Основным товарным продуктом данного производства является «очищенный ТХС», по своему составу пригодный для получения поликристаллического кремния. Помимо очищенного трихлорсилана, некоторую часть SiHCl_3 со стадии ректификации выводят в виде «технического ТХС», в котором содержание дихлорсилана, тетрагидрида кремния и примесей выше, чем в очищенном трихлорсилане, и который используют в кремнийорганическом производстве. Еще одним попутным продуктом являются тетрагидрид кремния, применяемый для производства кремнийорганических соединений и высокодисперсного диоксида кремния. ПСХ в виде раствора в тетрагидриде кремния либо реализуют как попутную продукцию, либо нейтрализуют щелочным агентом (водным раствором соды или «известковым молоком»). В процессе разделения парогазовой смеси после синтеза ТХС и ректификационной очистки трихлорсилана небольшая часть хлорсиланов переходит в абгазы, которые также направляют на нейтрализацию [3].

Для анализа эффективности производства ТХС, оценки влияния различных параметров на количественные показатели процесса (такие, как удельные нормы расхода реагентов и производства получающихся продуктов и т.п.), целесообразно составить расчетную балансовую схему технологического процесса в табличном процессоре Excel из пакета Microsoft Office.

Такая балансовая схема трихлорсиланового производства способна выполнять оперативный расчет материального баланса данного процесса и всех величин, вычисляемых на его основе. При изменении пользователем заданных значений «Excel» осуществит автоматический пересчет всех связанных с этими значениями частей расчетной схемы: материальных потоков, удельных расходных показателей и т.д. Это позволит без труда просчитать большое количество вариантов, провести их сравнительный анализ и выбрать оптимальный вариант для реализации производственного процесса. Необходимо отметить, что балансовая схема пред-

ставляет интерес не только для целей анализа действующего производства трихлорсилана, но и при его проектировании.

Общие принципы использования «Excel» для расчета материального баланса технологического процесса и составления на его основе балансовых схем были сформулированы в работе [4]. Теперь же рассмотрим, как строится и функционирует балансовая схема конкретного производства в целом. Из-за ограниченности объема данной публикации балансовая схема производства трихлорсилана сведена к трем балансовым операциям, каждая из которых занимает свой лист «Excel» (рис. 1–3).

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K
1	Заданные значения:										
2	Количество одновременно работающих установок синтеза HCl: <input type="text" value="2"/>										
3	Избыток H ₂ сверх стехиометрии на стадии синтеза HCl, %: <input type="text" value="5.0"/>										
4											
5	Наименование операций	ПРИХОД на операцию					РАСХОД на операции				
6		Наименование продукта	Молярная масса	т/год	тыс. нм ³ /год	% масс.	Наименование продукта	Молярная масса	т/год	тыс. нм ³ /год	% масс.
7	Синтез хлористого водорода	Хлор	70.9060	12 346.80	3 900.49	97.10	Газ с синтеза				
8		в том числе:					хлороводорода	35.6208	12 715.36	7 996.01	100.00
9		Cl ₂					в том числе:				
10							HCl	36.4609	12 697.81	7 800.98	99.86
11		Свежий водород					H ₂	2.0158	17.55	195.02	0.14
12		в том числе:					сумма: 100.00				
13		H ₂									
14											
15		Оборотный									
16		водород									
17	в том числе:										
18	H ₂										
19											
20	Всего:					12 715.36	100.00	Всего:	12 715.36	100.00	

Рис. 1. Первая балансовая операция «Синтез хлороводорода». Лист «Synthesis of HCl».

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K
1	Заданные и рассчитанные значения:										
2	Материальные потоки, т/год:										
3	Отработанный кремний (включая примеси) из одной установки синтеза SiHCl ₃ : <input type="text" value="40.00"/>										
4	Другие условия:										
5	Количество одновременно работающих установок синтеза SiHCl ₃ : <input type="text" value="1"/>										
6	Содержание примесей в свежем кремнии, % (масс.): <input type="text" value="1.00"/>										
7	Степень использования HCl в процессе синтеза SiHCl ₃ , %: <input type="text" value="98.80"/>										
8	Доля SiHCl ₃ в хлорсиланах, уходящих в составе ПГС из установок синтеза SiHCl ₃ , % (масс.): <input type="text" value="86.00"/>										
9	Доля SiCl ₄ в хлорсиланах, уходящих в составе ПГС из установок синтеза SiHCl ₃ , % (масс.): <input type="text" value="13.70"/>										
10	Доля SiH ₂ Cl ₂ в хлорсиланах, уходящих в составе ПГС из установок синтеза SiHCl ₃ , % (масс.): <input type="text" value="0.07"/>										
11	Доля Si ₂ Cl ₆ в хлорсиланах, уходящих в составе ПГС из установок синтеза SiHCl ₃ , % (масс.): <input type="text" value="0.23"/>										
12	Степень гидрохлорирования кремния (т.е. суммарная доля Si, перешедшего в хлорсиланы), %: <input type="text" value="95.00"/>										
13	Содержание примесей в отработанном кремнии из установки синтеза SiHCl ₃ , % (масс.): <input type="text" value="14.59"/>										
14											
15	Наименование операций	ПРИХОД на операцию					РАСХОД на операции				
16		Наименование продукта	Молярная масса	т/год	тыс. нм ³ /год	% масс.	Наименование продукта	Молярная масса	т/год	тыс. нм ³ /год	% масс.
17	Синтез трихлорсилана	Свежий кремний	28.0860	3 342.59		20.62	Парогазовая смесь	63.5770	16 172.17	5 583.49	99.75
18		в том числе:					в том числе:				
19		Si					SiHCl ₃	135.4529	13 407.82	2 217.27	82.91
20		примеси					SiCl ₄	169.898	2 135.90	281.60	13.21
21							SiH ₂ Cl ₂	101.0078	10.91	2.42	0.07
22		Синтетический					Si ₂ Cl ₆	268.89	35.86	2.99	0.22
23		хлороводород					H ₂	2.0158	268.57	2 984.46	1.66
24		в том числе:					HCl	36.4609	154.22	94.75	0.95
25		HCl					Si	28.086	131.29		0.81
26		H ₂					примеси	-	27.59		0.17
27						сумма: 100.00					
28	Оборотный					Отработанный					
29	хлороводород					кремний	28.0860	40.00		0.25	
30	в том числе:					в том числе:					
31	HCl					Si	28.086	34.16		85.41	
32						примеси	-	5.84		14.59	
33						сумма: 100.00					
34											
35	Всего:					16 212.17	100.00	Всего:	16 212.17	100.00	

Рис. 2. Вторая балансовая операция «Синтез трихлорсилана». Лист «Synthesis of SiHCl₃».

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	
1	Заданные значения:											
2	Материальные потоки, т/год:											
3											Очищенный трихлорсилан:	12 000
4	Другие условия:											
5											Извлечение SiHCl ₃ в технический ТХС, %:	10.0
6											Содержание полисиланхлоридов (Si ₂ Cl ₆) в концентрате ПСХ, % (масс.):	25.0
7											Степень улавливания элементарного кремния на стадии сухой очистки, %:	95.0
8											Содержание примесей в отработанном кремнии со стадии сухой очистки, % (масс.):	16.27
9											Потери SiHCl ₃ с абгазами, %:	0.50
10												
11	Наименование операций	ПРИХОД на операцию					РАСХОД на операции					
12		Наименование продукта	Молярная масса	т/год	тыс. м ³ /год	% масс.	Наименование продукта	Молярная масса	т/год	тыс. м ³ /год	% масс.	
13	Разделение парогазовой смеси и очистка трихлорсилана	Парогазовая смесь	63.5770	16 172.17	5 583.49	100.00	Очищенный ТХС	135.4529	12 000.00		74.20	
14		в том числе:					в том числе:					
15		SiHCl ₃	135.4529	13 407.82	2 217.27	82.91	SiHCl ₃	135.4529	12 000.00			
16		SiCl ₄	169.898	2 135.90	281.60	13.21						
17		SiH ₂ Cl ₂	101.0078	10.91	2.42	0.07	Технический ТХС	135.4529	1 340.78		8.29	
18		Si ₂ Cl ₆	268.89	35.86	2.99	0.22	в том числе:					
19		H ₂	2.0158	268.57	2 984.46	1.66	SiHCl ₃	135.4529	1 340.78			
20		HCl	36.4609	154.22	94.75	0.95						
21		Si	28.086	131.29		0.81	Товарный SiCl ₄	169.8980	2 038.24		12.60	
22		примеси	-	27.59		0.17	в том числе:					
23					сумма:	100.00	SiCl ₄	169.898	2 038.24			
24												
25							Концентрат ПСХ	148.7220	143.43		0.89	
26							в том числе:					
27							SiCl ₄	169.898	97.66		68.09	
28							Si ₂ Cl ₆	268.89	35.86		25.00	
29							Si	28.086	6.56		4.58	
30							примеси	-	3.35		2.34	
31										сумма:	100.00	
32							Отработанный кремний	28.0860	148.97		0.92	
33							в том числе:					
34							Si	28.086	124.73		83.73	
35							примеси	-	24.24		16.27	
36										сумма:	100.00	
37							HCl на синтез ТХС	36.4609	154.22	94.75	0.95	
38							в том числе:					
39							HCl	36.4609	154.22	94.75		
40												
41							H ₂ на синтез HCl	2.0158	268.57	2 984.46	1.66	
42							в том числе:					
43							H ₂	2.0158	268.57	2 984.46		
44												
45						Абгазы	129.2808	77.95	13.51	0.48		
46						в том числе:						
47						SiHCl ₃	135.4529	67.04	11.09	86.00		
48						SiH ₂ Cl ₂	101.0078	10.91	2.42	14.00		
49									сумма:	100.00		
50												
51		Всего:		16 172.17		100.00	Всего:	16 172.17		100.00		

Рис. 3. Третья балансовая операция «Разделение парогазовой смеси и очистка трихлорсилана». Лист «Separation and purification».

Наиболее важной технологической стадией производства трихлорсилана, в значительной мере определяющей эффективность всего производства, является стадия синтеза ТХС, поэтому она выделена в отдельную (вторую) балансовую операцию. При необходимости расчетную схему можно сделать более подробной, разделив третью балансовую операцию на несколько отдельных операций, соответствующих технологическим переделам. Приведенные на верхних строках листов на рис. 1–3 заданные значения (состав продуктов, степень использования реагентов и т.п.) заимствованы, в основном, из [1]. Расчет выполнен для производительности производства по очищенному трихлорсилану – 12000 т в год.

«Excel» является удобной средой для построения балансовой схемы технологического процесса по ряду причин:

1) табличная структура «Excel» удачно соответствует табличной форме материального баланса;

2) программа «Excel» располагает мощным математическим аппаратом, позволяющим быстро и с достаточной точностью выполнять балансовые расчеты разной сложности, причем – в зависимости от квалификации разработчика в методах балансовых расчетов и в уровне владения «Excel» –, для успешного решения одной и той же балансовой задачи может быть выбрана различная расчетная «начинка» схемы. Например, можно составить систему уравнений, включающую заданные условия и материальные потоки и решить ее, что, правда, потребует знания методов матричных вычислений в «Excel»;

3) возможно, однако, использовать и более понятный для инженеров-технологов алгоритм расчета, основанный на последовательном использовании привычных формул, отражающих расчеты по уравнениям реакций, распределение компонентов по продуктам и т.п. Такой алгоритм может быть легко освоен и использован разработчиком без специального обучения решению специфических вычислительных

задач в «Excel». Для составления балансовых схем вполне можно ограничиться скромной частью интуитивно-понятного математического аппарата, имеющегося в данной вычислительной среде.

Последний вариант и выберем для составления балансовой схемы производства трихлорсилана.

Начинаем составление алгоритма схемы с ее «хвоста», т.е. с третьей по счету балансовой операции «Разделение парогазовой смеси и очистка трихлорсилана», отталкиваясь от заданного количества очищенного ТХС (12000 т/год), ячейка Н3 – рис. 3. Взяв за основу данную величину, определяем материальные потоки трихлорсилана в остальных продуктах данной балансовой операции, куда распределяется ТХС, т.е. потоки SiHCl_3 в техническом ТХС и абгазах. Поток технического ТХС (I19) вычисляем, исходя из заданных значений потока очищенного ТХС (Н3) и извлечения SiHCl_3 в технический ТХС (Н5), а также потерь SiHCl_3 с абгазами (Н9) по формуле: $= \text{H3}/(100 - \text{H5} - \text{H9}) * \text{H5}$ (1340.78 т/год). Аналогичным образом определяем количество трихлорсилана в абгазах (I48): $= \text{H3}/(100 - \text{H5} - \text{H9}) * \text{H9}$ (67.04 т/год). Общее количество SiHCl_3 в ПГС, приходящей на третью балансовую операцию (D15), вычисляем по сумме ТХС в продуктах этой операции: $= \text{I15} + \text{I19} + \text{I48}$ (13407.82 т/год).

Объемные газовые потоки индивидуальных веществ (столбцы Е и J в балансовых таблицах) рассчитываем на основе их массовых потоков. Так, формула в ячейке E15: $= \text{D15}/\text{C15} * 22.4$ пересчитывает значения количества SiHCl_3 из «т/год» в «тыс. $\text{нм}^3/\text{год}$ » с использованием молярной массы трихлорсилана (ячейка C15) и молярного объема идеального газа (22.4 тыс. $\text{нм}^3/\text{Ммоль}$). Среднюю молярную массу потока рассчитываем, используя данные балансового столбца «т/год» и столбца молярных масс (С или Н) в таблицах, по общеизвестным формулам.

Определенное на третьей балансовой операции количество SiHCl_3 в ПГС переносим на вторую операцию «Синтез трихлорсилана» (ячейка I19, рис. 2), т.е. вводим в эту ячейку формулу: $= \text{'Separation and purification'}!D15$, где Separation and purification – название третьего листа книги «Excel» (рис. 3). Таким образом, по трихлорсилану мы ведем расчет «снизу вверх», т.е. от последней операции к предыдущей.

Доля трихлорсилана (ячейка Н8, рис. 2), дихлорсилана (Н10) и гексахлордисилана (Н11) в смеси хлорсиланов, входящей в состав ПГС после синтеза ТХС, относится к заданным значениям, поэтому задаемся ими независимо от других значений, ориентируясь на опытные данные [1]. Долю оставшегося хлорсилана – тетраоксида кремния (Н9) – вычисляем по

остатку, т.е. $= 100 - \text{H8} - \text{H10} - \text{H11}$ (13.70 %). По количеству SiHCl_3 , содержащемуся в ПГС после синтеза трихлорсилана, и составу смеси хлорсиланов (Н8:Н11) определяем потоки остальных ХС. Так, поток SiCl_4 в ПГС (I20) определяем по формуле: $= \text{I19}/\text{H8} * \text{H9}$ (2135.90 т/год). Аналогично рассчитываем потоки SiH_2Cl_2 и Si_2Cl_6 (ячейки I21, I22).

Вычисленные на второй балансовой операции потоки тетраоксида кремния, дихлорсилана и гексахлордисилана в парогазовой смеси переносим на третью балансовую операцию (ячейки D16:D18, рис. 3), т.е. по этим хлорсиланам расчет ведем «сверху вниз» до последней операции схемы. На третьей балансовой операции высококипящие полисиланхлориды и их производные направляются исключительно в концентрат ПСХ (ячейка I28, рис. 3) – 35.86 т/год. Принимаем, что летучий дихлорсилан полностью уходит в абгазы (I49) – 10.91 т/год. Пренебрегая содержанием тетраоксида кремния в техническом ТХС и абгазах, распределяем его по двум продуктам – товарному SiCl_4 и концентрату полисиланхлоридов. Пожаровзрывоопасные свойства концентрата ПСХ связаны с содержанием в нем полисиланхлоридов и их производных и возрастают с увеличением концентрации Si_2Cl_6 [3]. Поэтому количество SiCl_4 в концентрате ПСХ (I27) вычисляем по разности между количеством самого концентрата, определяемым по массе ПСХ (I28) и содержанию Si_2Cl_6 в концентрате (Н6 – в нашем случае это 25.0 %), и количеством остальных его компонентов (кремния и примесей), по формуле: $= \text{I28} * ((100 - \text{H6})/\text{H6}) - \text{I29} - \text{I30}$ (97.66 т/год). Поток товарного тетраоксида кремния (I23) рассчитываем по разности между общим количеством SiCl_4 , поступающим на третью балансовую операцию (D16), и его количеством в концентрате ПСХ (I27) и получаем 2038.24 т/год.

Количество хлороводорода в ПГС, уходящей со стадии синтеза ТХС (ячейка I24, рис. 2), определяем по уравнениям реакций 1 – 4, исходя из количества хлорсиланов в ПГС (I19:I22) и степени использования HCl в процессе синтеза SiHCl_3 (Н7), формула: $= (\text{I19}/\text{H19} * 3 + \text{I20}/\text{H20} * 4 + \text{I21}/\text{H21} * 2 + \text{I22}/\text{H22} * 6) * \text{H24}/\text{H7} * (100 - \text{H7})$, откуда получаем 154.22 т/год. После разделения парогазовой смеси на третьей балансовой операции весь хлороводород возвращают на синтез ТХС (D31, рис. 2). Поэтому в ячейку D31 помещаем формулу: $= \text{I24}$. Количество же HCl в синтетическом хлороводороде (D25) равно количеству HCl , участвующему в реакциях 1 – 4, формула: $= (\text{I19}/\text{H19} * 3 + \text{I20}/\text{H20} * 4 + \text{I21}/\text{H21} * 2 + \text{I22}/\text{H22} * 6) * \text{C25}$ (12697.81 т/год).

Наконец, исходя из вычисленного количества синтетического хлороводорода

(D25, рис. 2 или I10, рис. 1) рассчитываем первую балансовую операцию «Синтез хлороводорода» (рис. 1).

Поток газообразного хлора, направляемого на синтез HCl (ячейка D9, рис. 1) определяем по уравнению 5: 12346.80 т/год. Так как синтез хлороводорода по соображениям безопасности ведут с небольшим избытком водорода сверх стехиометрии [1] (ячейка H3 – заданное значение – 5.0 %), то синтетический HCl всегда содержит избыточный H₂ (I11), количество которого вычисляем по формуле: $= I10/H10/2 * H11 * (100 + H3)/100 - D9/C9 * H11$ (17.55 т/год).

Согласно данной схеме процесса производства ТХС, количество оборотного водорода, направляемого на первую балансовую операцию с третьей, равно количеству H₂ в парогазовой смеси на стадии синтеза ТХС (ячейка I23, рис. 2) и складывается из массы водорода, содержащегося в синтетическом хлороводороде, и массы реакционного H₂, образующегося по реакциям 1, 2, 4. Таким образом, количество оборотного водорода (ячейка D18, рис. 1) вычисляем по формуле: $= I11 + ('Synthesis\ of\ SiHCl_3'!I19/'Synthesis\ of\ SiHCl_3'!H19 + 'Synthesis\ of\ SiHCl_3'!I20/'Synthesis\ of\ SiHCl_3'!H20*2 + 'Synthesis\ of\ SiHCl_3'!I22/'Synthesis\ of\ SiHCl_3'!H22*3)*C18$, где Synthesis of SiHCl₃ – название листа «Excel», на котором размещен расчет второй балансовой операции. Количество оборотного H₂ равно 268.57 т/год.

Количество свежего водорода, подаваемого на синтез HCl (D13), вычисляем по разности между общим количеством H₂ на синтез и его количеством в оборотном водороде: $= I10/H10/2 * C13 * (100 + H3)/100 - D18$ (99.98 т/год).

В соответствии с применяемой технологией реакторы синтеза ТХС периодически останавливают, оставшийся в реакторах кремний выгружают из аппаратов и в дальнейшем для синтеза трихлорсилана не используют [1]. Задавшись годовой производительностью отработанного кремния с примесями из одной установки синтеза ТХС (H3, рис. 2), числом одновременно работающих установок (H5) и содержанием примесей в этом продукте (H13), вычисляем общее количество выгружаемого из установок кремния и примесей (ячейки I29, I32 и I31). Количество элементарного кремния в ПГС (I25) рассчитываем, задавшись степенью его гидрохлорирования в процессе синтеза SiHCl₃ (H12), по формуле: $= (I19/H19 + I20/H20 + I21/H21 + I22/H22*2) * H25 * (100 - H12)/H12 - I31$ (131.29 т/год).

Поток элементарного кремния в составе свежего кремния, загружаемого в установку синтеза трихлорсилана (D19), вычисляем как сумму массы атомов кремния в продуктах второй балансовой операции: $= I25 + I31 +$

$(I19/H19 + I20/H20 + I21/H21 + I22/H22*2) * C19$ (3309.17 т/год). Количество примесей, вводимое со свежим кремнием в процесс (D20) определяем по массе кремния (D19) и заданному содержанию примесей в свежем кремнии (H6): $= D19/(100 - H6) * H6$ (33.43 т/год).

Остальные формулы в ячейках рассматриваемой балансовой схемы, на наш взгляд, очевидны и в комментариях не нуждаются.

Удобным дополнением к таблицам балансовых операций служат итоговые таблицы «Приход» и «Расход» (рис. 4), в которых собраны потоки всех реагентов и получаемых продуктов производства, соответственно. Итоговые таблицы располагаем на отдельном листе «Excel», значения потоков для итоговых таблиц берем из таблиц отдельных балансовых операций схемы. Нулевое значение ячейки F42 (рис. 4), в которой вычисляется разность суммарных материальных потоков реагентов и получаемых продуктов, $= B40 - G40$, является дополнительным подтверждением правильности расчетных формул, заложенных в балансовой схеме. Кроме того, итоговые балансовые таблицы дают возможность проанализировать долевого вклад реагентов или получающихся в процессе производства продуктов, в том числе, и с использованием графических диаграмм.

Иногда необходимо контролировать соответствие данных, получаемых из балансовых расчетов, заданным показателям, зафиксированным в каких-либо обязательных к исполнению документах (контракт, стандарт и т.д.). Такая проверка может быть выполнена в автоматизированном режиме на отдельном листе «Excel», связанном с балансовой схемой (рис. 5). Так, поток HCl, уходящий в составе газа с синтеза хлороводорода по данным баланса (I10, рис. 1), должен соответствовать производительности установок синтеза хлороводорода, определенной их разработчиком (C4, рис. 5). Количество хлороводорода (кг/ч), получаемое на каждой установке синтеза HCl согласно балансовым расчетам, (E4, рис. 5) определяем, исходя из общего потока этого соединения (I10, т/год, рис. 1) с учетом числа установок (H2, рис. 1) и количества рабочих часов в год, принятого на данном производстве (C10, рис. 5). Формула в ячейке E4 (рис. 5) выглядит следующим образом: $= 'Synthesis\ of\ HCl'!I10 * 1000 / C10 / 'Synthesis\ of\ HCl'!H2$, где Synthesis of HCl – название листа первой балансовой операции. Вычисленное по приведенной формуле количество хлороводорода (881.79 кг/ч) сравниваем в ячейке F4 (рис. 5) с его заданным значением (1000 кг/ч – ячейка C4): $= ЕСЛИ(E4 > C4; «Нет»; «Да»)$. Если в ячейке F4 выводится слово «Да» (как в нашем случае), то это означает, что балансовое значение потока хлороводорода соответствует заданному показателю.

	A	B	C	D	E	F	G	H	I
1	Приход				Расход				
2									
3	Наименование продукта	т/год	% масс.	кг/т очнш. ТХС	Наименование продукта	т/год	% масс.	кг/т очнш. ТХС	
4	Хлор на синтез HCl	12 346.80	100.00	1 028.90	Отработанный кремний				
5	в том числе:				из установки синтеза SiHCl ₃	40.00	100.00	3.33	
6	Хлор (Cl ₂)	12 346.80	100.00	1 028.90	в том числе:				
7					Кремний (Si)	34.16	85.41	2.85	
8	Свежий водород на синтез HCl	99.98	100.00	8.33	Примеси	5.84	14.59	0.49	
9	в том числе:								
10	Водород (H ₂)	99.98	100.00	8.33	Очищенный трихлорсилан	12 000.00	100.00	1 000.00	
11					в том числе:				
12	Свежий кремний	3 342.59	100.00	278.55	Трихлорсилан (SiHCl ₃)	12 000.00	100.00	1 000.00	
13	в том числе:								
14	Кремний (Si)	3 309.17	99.00	275.76	Технический трихлорсилан	1 340.78	100.00	111.73	
15	Примеси	33.43	1.00	2.79	в том числе:				
16					Трихлорсилан (SiHCl ₃)	1 340.78	100.00	111.73	
17									
18					Топарный тетрахлорид кремния	2 038.24	100.00	169.85	
19					в том числе:				
20					Тетрахлорид кремния (SiCl ₄)	2 038.24	100.00	169.85	
21									
22					Концентрат полисиланхлоридов	143.43	100.00	11.95	
23					в том числе:				
24					Тетрахлорид кремния (SiCl ₄)	97.66	68.09	8.14	
25					Полисиланхлориды (Si ₂ Cl ₆)	35.86	25.00	2.99	
26					Кремний (Si)	6.56	4.58	0.55	
27					Примеси	3.35	2.34	0.28	
28									
29					Отработанный кремний				
30					со стадии сухой очистки	148.97	100.00	12.41	
31					в том числе:				
32					Кремний (Si)	124.73	83.73	10.39	
33					Примеси	24.24	16.27	2.02	
34									
35					Абгазы	77.95	100.00	6.50	
36					в том числе:				
37					Трихлорсилан (SiHCl ₃)	67.04	86.00	5.59	
38					Дихлорсилан (SiH ₂ Cl ₂)	10.91	14.00	0.91	
39									
40	Итого:	15 789.37	-	1 315.78	Итого:	15 789.37	-	1 315.78	
41									
42									

Разница: 0.0000

Рис. 4. Итоговые балансовые таблицы «Приход» и «Расход» процесса производства трихлорсилана.

	A	B	C	D	E	F
1	Заданные значения:			Рассчитанные значения:		
2		Показатели:				
3		Не менее	Не более	Данные из баланса	Их соответствие показателям	
4	Производительность одной установки синтеза HCl по хлороводороду, кг/ч:		1 000	881.79	Да	
5	Производительность одной установки синтеза SiHCl ₃ по сумме ХС, кг/ч:	1 000	2 800	2 165.35	Да	
6	Расход свежего кремния на тонну конденсата хлорсиланов, кг/т:		230	212	Да	
7	Содержание SiHCl ₃ в парогазовой смеси, направляемой на очистку, % (об.):	35	40	38.98	Да	
8						
9						
10		Другие условия:				
		Количество рабочих часов в году:		7 200		

Рис. 5. Проверка соответствия результатов балансовых расчетов заданным показателям.

Аналогичным образом контролируем соответствие балансовых данных заданному значению производительности установки синтеза трихлорсилана (строка 5). Отличие расчетных формул в этом случае по сравнению с расчетом для установки синтеза хлороводорода связано с тем, что для установки синтеза ТХС балансовое значение необходимо сравнить с двумя заданными показателями – минимальным (1000 кг/ч) и максимальным (2800 кг/ч). Поэтому в ячейку F5 вводим формулу: = ЕСЛИ(E5 < B5; «Нет»; ЕСЛИ(E5 > C5; «Нет»; «Да»)).

Аналогичным образом проводим сравнение других балансовых и заданных показателей (строки 6 и 7).

Как известно, «Excel» может выполнять вычисления методом итераций, что позволяет рассчитывать усложненные виды технологических схем с оборотами и разветвлениями. Однако применение итеративных вычислений иногда заметно замедляет расчет и снижает его точность. Кроме того, в отдельных случаях со сложными видами итерационных расчетов возможны сбои, обусловленные «зацикливанием» работы «Excel», когда программа не может найти решения. Поэтому в качестве общего правила следует стремиться к минимизации использования итераций, по возможности заменяя их формулами, не содержащими циклические ссылки. Несмотря на наличие в тех-

нологической схеме производства ТХС оборотных потоков водорода и хлороводород, нам удалось избежать циклических ссылок, что можно отнести к достоинствам нашей схемы. Следовательно, при выполнении расчетов в данной балансовой схеме нет необходимости активировать опцию итеративных вычислений в «Excel».

Рассмотренная в данной статье балансовая схема производства трихлорсилана может быть модифицирована необходимым пользователю образом. Помимо уже упоминавшегося увеличения количества балансовых операций, можно, например, для увеличения точности расчета

уточнить состав технического ТХС и абгазов, добавив в них не показанные нами хлорсиланы, и т.д. Детализация схемы, перенаправление материальных потоков не являются трудоемкими процедурами, если, конечно, эти изменения не носят глобальный характер.

Таким образом, «Excel» является удобным инструментом для создания балансовых схем в процессе получения трихлорсилана, в других химических производствах, и может быть рекомендован технологом и проектировщикам. Предложенный подход может быть реализован студентами МИТХТ и других вузов при выполнении курсовых и дипломных проектов.

ЛИТЕРАТУРА:

1. Технология полупроводникового кремния / Э. С. Фалькевич [и др.] – М. : Металлургия, 1992. – 408 с.
2. Современное состояние и основные тенденции развития технологии поликристаллического кремния / И. В. Гранков, В. П. Гришин, Л. С. Иванов, Э. П. Бочкарев // Цветные металлы. – 1991. – № 8. – С. 29–31.
3. Кожемякин, В. А. Утилизация отходов в производстве трихлорсилана и поликристаллического кремния / В. А. Кожемякин, А. Н. Почтарев // Цветные металлы. – 2008. – № 10. – С. 65–68.
4. Апанасенко, В. В. Расчет материального баланса металлургического производства с использованием электронных таблиц «Excel» / В. В. Апанасенко // Вестник МИТХТ – 2009. – Т. 4, № 4. – С. 71–77.