



Оригинальные статьи

Научная статья

УДК 541.123.3

<https://doi.org/10.17308/kcmf.2022.24/9268>**Фазовые равновесия жидкость–пар трёхкомпонентных систем, образованных *n*-пропанолом, *n*-бутанолом и *n*-алкилэтаноатами РФЭС**Ю. К. Сунцов¹ ✉, Г. Ю. Харченко², Н. С. Сунцова¹¹Воронежский государственный университет,
Университетская пл., 1, Воронеж 394018, Российская Федерация²Воронежский государственный педагогический университет,
Воронеж, ул. Ленина, 86, Воронеж 394043, Российская Федерация**Аннотация**

При производстве *n*-спиртов и сложных эфиров этановой кислоты необходимо решать задачи по ректификации растворов многокомпонентных систем. Основные достижения в методах расчёта фазовых равновесий многокомпонентных систем связаны с появлением уравнений локального состава. Равновесие в многокомпонентных системах предсказывается по данным о бинарных составляющих эти системы. Наиболее распространёнными моделями локального состава являются уравнения Вильсона и NRTL. Ранее были изучены равновесия жидкость–пар бинарных систем, образованных алифатическими спиртами и сложными эфирами органических кислот. Равновесие жидкость – пар изученных бинарных систем описаны уравнениями Вильсона и NRTL.

Эбулиометрическим методом при различных давлениях были измерены температуры кипения (давления насыщенного пара) растворов трёхкомпонентных систем, образованных *n*-пропанолом, *n*-бутанолом с *n*-пропилэтаноатом и *n*-бутилэтаноатом. Коэффициенты активности компонентов растворов трёхкомпонентных систем были рассчитаны с использованием уравнений Вильсона и NRTL. Значения параметров в уравнениях Вильсона и NRTL для бинарных систем рассчитывались методами нелинейной регрессии. Результаты расчетов проверены экспериментально.

Установлено, что значения коэффициента активности *n*-пропанола и *n*-бутанола возрастают с уменьшением его концентрации в растворах систем. Аналогичные изменения значений коэффициентов активности компонентов в растворах систем наблюдаются для молекул *n*-пропилэтаноата и *n*-бутилэтаноата. В случае растворов системы *n*-бутанол – *n*-пропилэтаноат – *n*-бутилэтаноат преобладают значения коэффициента активности *n*-пропилэтаноата. При увеличении молярной массы (размеров молекул) *n*-спирта значения его коэффициента активности в растворах систем уменьшаются. Модель Вильсона более точно описывает парожидкостное равновесие растворов изученных трёхкомпонентных систем. Полученные данные необходимы для технологических расчётов и могут быть использованы для дальнейшего совершенствования методов расчета равновесия жидкость–пар многокомпонентных систем.

Ключевые слова: фазовые равновесия жидкость–пар трёхкомпонентных систем, уравнения Вильсона и NRTL

Для цитирования: Сунцов Ю. К., Харченко Г. Ю., Сунцова Н. С. Фазовые равновесия жидкость–пар трёхкомпонентных систем, образованных *n*-пропанолом, *n*-бутанолом и *n*-алкилэтаноатами. *Конденсированные среды и межфазные границы*. 2022;24(2): 273–278. <https://doi.org/10.17308/kcmf.2022.24/9268>

For citation: Yu. K. Suntsov, G. Yu. Kharchenko, N. S. Suntsova Liquid-vapour phase equilibria of three-component systems formed by *n*-propanol, *n*-butanol, and *n*-alkylethanoates. *Condensed Matter and Interphases*. 2022;24(2): 273–278. <https://doi.org/10.17308/kcmf.2022.24/9268>

✉ Сунцов Юрий Константинович, e-mail: jsyntsov@mail.ru

© Сунцов Ю. К., Харченко Г. Ю., Сунцова Н. С., 2022



Контент доступен под лицензией Creative Commons Attribution 4.0 License.

1. Введение

Данные о фазовых равновесиях жидкость – пар необходимы для расчетов показателей, определяющих направление и скорость протекания технологических процессов [1]. Растворы трёхкомпонентных систем *n*-пропанол – *n*-пропилэтанолат – *n*-бутилэтанолат и *n*-бутанол-*n*-пропилэтанолат-*n*-бутилэтанолат часто встречаются в производствах *n*-спиртов и сложных эфиров этановой кислоты [2]. Исследования о фазовых равновесиях этих систем носят фрагментарный характер так как проводились сугубо в технологических целях [3]. С увеличением числа компонентов резко возрастает объём и сложность исследований равновесия жидкость-пар. Это обстоятельство стимулировало разработку методов расчёта фазовых равновесий в многокомпонентных системах по данным о бинарных системах. Основные достижения в методах расчёта фазовых равновесий связаны с появлением уравнений локального состава. Эти уравнения опираются на молекулярные модели растворов, что обеспечивает им преимущества перед полиномиальными уравнениями Маргулеса, Редлиха-Кистера, Ван-Лаара, Вооля. Преимущества моделей локального состава наиболее отчётливо проявляются в случае предсказания свойств многокомпонентных систем по данным об их бинарных составляющих. Наибольшее применение для расчёта парожидкостного равновесия многокомпонентных систем получили уравнения Вильсона (1) и NRTL (2), (Non Random Two Liquid equation) [1]:

$$\ln \gamma_i = 1 - \ln \left(\sum_{j=1}^n x_j \lambda_{ij} \right) - \sum_{k=1}^n \left[x_k \lambda_{ki} / \sum_{j=1}^n x_j \lambda_{kj} \right], \quad (1)$$

где λ_{ij} и др. – параметры парных взаимодействий.

$$\ln \gamma_i = \sum_{j=1}^n \tau_{ji} G_{ji} x_j / \sum_{k=1}^n x_k G_{ki} + \sum_{j=1}^n \left(x_j G_{ij} / \sum_{k=1}^n x_k G_{kj} \right) \left(\tau_{ij} - \sum_{l=1}^n x_l \tau_{il} G_{il} / \sum_{k=1}^n G_{kl} x_k \right), \quad (2)$$

где: $\tau_{ij} = C_{ij} / RT$; $G_{ij} = \exp(-\alpha_{ij} \tau_{ij})$; $G_{ii} = G_{jj} = 1$; $g_{ij} = g_{ji}$; $\alpha_{ij} = \alpha_{ji}$ и для всех i справедливо $a_{ii} = \tau_{ii} = C_{ii} = 0$; g_{ij} – переменные, характеризующие энергию взаимодействия пар $i-j$; g_{ji} – взаимодействие пар $j-j$; α_{ij} – параметр, характеризующий степень упорядоченности распределения молекул в растворе. Для растворов многокомпонентной системы необходимо рассчитать только параметры парных взаимодействий, определяемых по экспериментальным данным для бинарных систем.

2. Методика эксперимента

При исследованиях фазовых равновесий жидкость–пар на результаты эксперимента заметное влияние оказывает примесь воды в несколько сотых долей процента. Спирты и сложные эфиры органических кислот марки «х.ч.» обезвоживались по методикам [4] и перегонялись без доступа воздуха на ректификационной колонне. Контроль воды в очищенных реактивах осуществлялся потенциометрическим титрованием с использованием реактива Фишера [5]. Содержание воды в реактивах не превышало 0.1 %. Критериями чистоты очищенных веществ служили температура кипения, плотность и показатель преломления. Температура кипения очищенных веществ измерялась в эбуллиометрах Свентославского [1] с точностью ± 0.05 К. Плотность веществ определялась пикнометрами Оствальда с точностью ± 0.1 кг/м³, а показатель преломления n_D измерялся рефрактометром ИРФ-25 с точностью ± 0.0001 . Константы очищенных веществ совпадали с данными [6] и приведены в табл. 1. Давление насыщенного пара и температура кипения растворов являются наиболее чувствительными критериями точности расчётов парожидкостного равновесия систем [1]. Температуры кипения растворов (T) при различных давлениях (P) измерялись платиновым термометром сопротивления эбуллиометрическим методом с точностью ± 0.05 К. Давление насыщенного пара растворов измерялось ртутным манометром, с использованием катетометра В-630, с точностью ± 6.66 Па. Постоянство давления в эбуллиометрах поддерживалось изодромным регулятором с отрицательной обратной связью с точностью ± 6.66 Па [7]. Полученные экспериментальные данные приведены в табл. 3, 4. Ранее были изучены равновесия жидкость–пар бинарных систем, образованных алифатическими спиртами и сложными эфирами органических кислот [8–24]. Значения параметров в уравнениях Вильсона и NRTL для бинарных систем рассчитывались методом нелинейной регрессии [25] и представлены в табл. 2.

3. Результаты и их обсуждение

На основе данных табл. 2 по уравнениям (1, 2) рассчитаны коэффициенты активности компонентов в растворах систем: *n*-пропанол – *n*-пропилэтанолат – *n*-бутилэтанолат и *n*-бутанол-*n*-пропилэтанолат-*n*-бутилэтанолат (табл. 3, 4). Растворы этих систем часто встречаются при производстве спиртов и сложных эфиров органиче-

Таблица 1. Свойства очищенных веществ

Экспериментальные данные				Литературные данные		
Вещества	ρ_4^{20}	T, K	n_D^{20}	ρ_4^{20}	T, K	n_D^{20}
<i>n</i> -пропанол	0.8044	370.3	1.3854	0.8044	370.30	1.3854
<i>n</i> -бутанол	0.8098	391.1	1.3993	0.8098	390.69	1.3993
<i>n</i> -пропилэтанол	0.8870	374.7	1.3842	0.8870	374.75	1.3844
<i>n</i> -бутилэтанол	0.8825	399.6	1.3940	0.8825	399.65	1.3941

Обозначения: T – температура кипения при нормальном давлении; ρ – плотность при 293.15 К; n_D – показатель преломления при 293.15 К

Таблица 2. Коэффициенты бинарного взаимодействия в уравнениях Вильсона и NRTL, рассчитанные на основе данных о равновесиях жидкость–пар, $T = 333 K$

№	Название системы	Вильсона		NRTL		
		λ_{12}	λ_{21}	τ_{12}	τ_{21}	τ_{12}
1	<i>n</i> -пропанол – <i>n</i> -пропилэтанол	0.8129	0.7116	0.2811	0.3162	0.3236
2	<i>n</i> -пропанол – <i>n</i> -бутилэтанол	0.554	0.6619	0.6309	0.2099	0.1843
3	<i>n</i> -бутанол – <i>n</i> -пропилэтанол	0.3838	1.0749	0.0313	0.5025	1.0399
4	<i>n</i> -бутанол – <i>n</i> -бутилэтанол	0.8417	0.7853	1.2273	0.0995	0.6437
5	<i>n</i> -пропанол – <i>n</i> -бутанол	1.1432	0.5018	0.2366	–0.5554	0.3835
6	<i>n</i> -пропилэтанол – <i>n</i> -бутилэтанол	2.3212	0.1319	–1.6022	1.5306	0.9113

Коэффициенты ориентированы на первый компонент бинарной системы

Таблица 3. Коэффициенты активности и давление насыщенного пара растворов *n*-пропанол (I) – *n*-пропилэтанол (II) – *n*-бутилэтанол (III), рассчитанные по модели Вильсона (1) и NRTL (2); $T = 333 K$

№	x , мол. доли			γ			P , мм. Hg, (Опыт)	P , мм. Hg, (Расчет)	Уравнение
	I	II	III	I	II	III			
1	0.9045	0.0473	0.0482	1.0073	1.4810	2.0110	165.2	157.2	(1)
				0.9973	0.8845	1.1877		148.2	(2)
2	0.8041	0.1025	0.0934	1.0284	1.3292	1.7512	156.7	160.3	(1)
				1.0159	0.7511	1.1955		145.1	(2)
3	0.7034	0.1266	0.1700	1.0650	1.2035	1.5625	153.4	158.4	(1)
				1.0586	0.5662	1.2068		139.7	(2)
4	0.6054	0.0795	0.3151	1.1268	1.0828	1.4053	150.8	149.2	(1)
				1.1315	0.2153	1.1618		132.5	(2)
5	0.5104	0.2506	0.2390	1.1638	1.0919	1.3110	156.4	158.9	(1)
				1.1125	0.6323	1.2880		134.8	(2)
6	0.4072	0.3122	0.2806	1.2370	1.0588	1.2170	159.8	156.8	(1)
				1.1467	0.6452	1.3349		131.4	(2)
7	0.3075	0.1100	0.5825	1.4529	0.9723	1.1121	133.3	131.2	(1)
				1.3723	0.1044	1.2964		118.6	(2)
8	0.1830	0.4115	0.4055	1.4801	1.0366	1.0665	146.2	144.2	(1)
				1.2569	0.6164	1.4738		119.9	(2)
9	0.1027	0.1857	0.7116	1.8600	1.0099	1.0198	114.1	111.5	(1)
				1.4795	0.1560	1.5346		108.9	(2)
10	0.1092	0.7231	0.1677	1.3969	1.0409	1.1113	163.7	164.9	(1)
				1.2156	0.8927	1.4363		147.4	(2)

Обозначения: x – состав раствора, γ – коэффициент активности, P – давление насыщенного пара жидкости, остальные обозначения см. в табл. 2.

Таблица 4. Коэффициенты активности и давление насыщенного пара растворов системы *n*-бутанол (I) – *n*-пропилэтаноеат (II) – *n*-бутилэтаноеат (III), рассчитанные по модели Вильсона (1) и NRTL (2); $T = 333$ К

№	x , мол. доли			γ			P , мм.Нг, (Опыт)	P , мм.Нг, (Расчет)	Уравне- ние
	I	II	III	I	II	III			
1	0.9079	0.0454	0.0467	1.0037	1.5977	1.3779	73.8	70.5	(1)
				1.0126	0.7270	1.0698		63.2	(2)
2	0.8076	0.1080	0.0844	1.0162	1.4875	1.2750	84.9	83.3	(1)
				1.0258	0.7533	1.1259		69.3	(2)
3	0.6929	0.1321	0.1750	1.0414	1.3743	1.1907	90.7	88.0	(1)
				1.0772	0.5440	1.1795		70.5	(2)
4	0.5934	0.0759	0.3307	1.0711	1.2826	1.1405	82.5	80.3	(1)
				1.1981	0.1358	1.1433		69.9	(2)
5	0.5021	0.2547	0.2432	1.1133	1.2443	1.0791	104.3	105.4	(1)
				1.0590	0.7037	1.2835		83.6	(2)
6	0.4003	0.3138	0.2859	1.1704	1.1907	1.0389	113.8	112.1	(1)
				1.0499	0.7227	1.3340		90.1	(2)
7	0.3081	0.1047	0.5872	1.2166	1.1302	1.0318	84.6	84.4	(1)
				1.3229	0.0876	1.3330		79.9	(2)
8	0.2112	0.4115	0.3773	1.3235	1.1185	0.994	124.2	121.3	(1)
				1.0350	0.6998	1.4478		100.1	(2)
9	0.1106	0.1114	0.7780	1.3808	1.0672	1.0016	82.3	83.5	(1)
				1.3244	0.0557	1.4530		88.2	(2)
10	0.1025	0.7571	0.1404	1.5599	1.0557	1.0594	155.4	156.5	(1)
				0.9721	0.9434	1.3978		141.7	(2)

Обозначения: x – состав раствора, γ – коэффициент активности, P – давление насыщенного пара жидкости, остальные обозначения см. в табл. 2.

ских кислот. Результаты расчётов были проверены экспериментально и также приведены в табл. 3, 4. Анализом данных табл. 3, 4 установлено, что уравнение Вильсона более точно описывает парожидкостное равновесие трёхкомпонентных растворов систем. Величина отклонения рассчитанных значений давления насыщенного пара ($P_{\text{расч}}$) от соответственных экспериментальных величин ($P_{\text{экспер}}$) для трёхкомпонентных систем составила: по уравнению Вильсона ≈ 1.8 %; по уравнению NRTL ≈ 12 % относительных. Значения коэффициента активности *n*-пропанола и *n*-бутанола, рассчитанных по моделям Вильсона (1) и NRTL (2), возрастают с уменьшением его концентрации в растворах систем. Например,

1) для растворов системы *n*-пропанол (I) – *n*-пропилэтаноеат (II) – *n*-бутилэтаноеат (III) рассчитанных по уравнению Вильсона (1) имеем: при $x_1 = 0.9045$, $\gamma_1 = 1.0073$ – возрастает до $\gamma_1 = 1.8600$ при $x_1 = 0.1027$;

2) для растворов этой же системы, рассчитанных по уравнению NRTL (2), имеем: при $x_1 = 0.9045$, $\gamma_1 = 0.9973$ – возрастает до $\gamma_1 = 1.4795$ при $x_1 = 0.1027$;

3) для растворов системы *n*-бутанол (I) – *n*-пропилэтаноеат (II) – *n*-бутилэтаноеат (III), рассчитанных по уравнению Вильсона (1) имеем: при $x_1 = 0.9079$, $\gamma_1 = 1.0037$ – возрастает до $\gamma_1 = 1.3808$ при $x_1 = 0.1106$;

4) для растворов этой же системы, рассчитанных по уравнению NRTL (2), имеем: при $x_1 = 0.9079$, $\gamma_1 = 1.0126$ – возрастает до $\gamma_1 = 1.3244$ при $x_1 = 0.1106$.

Аналогичные изменения значений коэффициентов активности компонентов в растворах систем наблюдаются для *n*-пропилэтаноеата и *n*-бутилэтаноеата. При уменьшении концентрации сложного эфира в растворах систем значения их коэффициентов активности возрастают (табл. 3, 4). Отметим, что для растворов *n*-пропанол (I) – *n*-пропилэтаноеат (II) – *n*-бутилэтаноеат (III), содержащих *n*-пропилэтаноеат (II) и *n*-бутилэтаноеат (III) в близких концентрациях, наблюдается превалирование значений коэффициента активности *n*-бутилэтаноеата (табл. 3). В случае растворов системы *n*-бутанол (I)–*n*-пропилэтаноеат (II)–*n*-бутилэтаноеат (III) доминируют значения коэффициента активности *n*-пропилэта-

ноата (табл. 4). С увеличением молярной массы (размеров молекул) *n*-спирта значения его коэффициента активности в растворах систем уменьшаются:

1) для системы *n*-пропанол (I) – *n*-пропилэтанол (II) – *n*-бутилэтанол (III) при $x_1 = 0.5104$, $\gamma_1 = 1.1638$;

2) для системы *n*-бутанол (I) – *n*-бутилэтанол (II) – *n*-пентилэтанол (III) имеем при $x_1 = 0.5021$, $\gamma_1 = 1.1133$.

Спектральными и рентгенографическими исследованиями было установлено наличие водородных связей у молекул *n*-спиртов с энергией ≈ 30 кДж/моль [26]. Введение в *n*-пропанол и *n*-бутанол молекул сложного эфира приводит к разрушению *H*-связанной структуры спирта. Эффект разупорядочения по понятным причинам возрастает с увеличением размеров молекул эфира, что связано с уменьшением вклада молекул *n*-спирта в структурировании растворов систем.

4. Выводы

Модель Вильсона более точно описывает парожидкостное равновесие трёхкомпонентных растворов систем. Значения коэффициента активности *n*-пропанола и *n*-бутанола, рассчитанных по моделям Вильсона и NRTL, возрастают с уменьшением его концентрации в растворах систем. Аналогичные изменения значений коэффициентов активности компонентов в растворах систем наблюдаются для *n*-пропилэтанолата и *n*-бутилэтанолата. С увеличением молярной массы (размеров молекул) *n*-спирта значения его коэффициента активности в растворах систем уменьшаются. Полученные данные необходимы для технологических расчётов процессов ректификации и совершенствования методов расчета равновесия жидкость–пар многокомпонентных систем.

Заявленный вклад авторов

Все авторы сделали эквивалентный вклад в подготовку публикации.

конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет известных финансовых конфликтов интересов или личных отношений, которые могли бы повлиять на работу, представленную в этой статье.

Список литературы

1. Уэйлес С. *Фазовые равновесия в химической технологии*. В 2-х частях. М.: Мир, 1989. 304 с.

2. Потехин В. М., Потехин В. В. *Основы теории химических процессов технологии органических веществ и нефтепереработки*. Изд. 3-е. исп. и доп. СПб.: Издательство Лань; 2014. 896 с.

3. *DDBST - Dortmund Data Bank Software & Separation Technology GmbH*. 2020. Available at: www.ddbst.com

4. Теренин В. И. и др. *Практикум по органической химии* / Под ред. акад. Зефирова Н. С. М.: БИНОМ. Лаборатория знаний; 2010. 568 с

5. ГОСТ Р 57824-2017. *Растворители органические. Определение содержания воды методом кулонометрического титрования Карла Фишера*. 2018. Режим доступа: <https://docs.cntd.ru/document/555729803?marker=7D20K3>

6. *National institute of standards and technology (NIST), search for species data by chemical formula*. Режим доступа: <http://webbook.nist.gov/chemistry/form-ser.html>

7. Сунцов Ю. К. Фазовые равновесия жидкость–пар и термодинамические свойства бинарных растворов *n*-алкил бензолов. *Журнал физической химии*. 2008;82(4): 625–630. Режим доступа: <https://www.elibrary.ru/item.asp?id=9935069>

8. Сунцов Ю. К. Фазовые равновесия жидкость–пар некоторых многокомпонентных систем, образованных алифатическими спиртами и сложными эфирами органических кислот. *Журнал физической химии*. 2008;82(2): 390–394. Режим доступа: <https://www.elibrary.ru/item.asp?id=9603910>

9. Сунцов Ю. К., Горюнов В. А. *Закономерности изменения термодинамических свойств бинарных растворов *n*-алкилпропаноатов*. *Журнал Вестник ВГУ. Серия: Химия. Биология. Фармация*. 2009;1: 42–47. Режим доступа: <https://www.elibrary.ru/item.asp?id=12610284>

10. Сунцов Ю. К. Закономерности изменения термодинамических свойств бинарных систем, образованных общим растворителем и представителями гомологических рядов органических веществ. *Вестник Казанского технологического университета*. 2010;2: 126–129. Режим доступа: <https://www.elibrary.ru/item.asp?id=13085794>

11. Сунцов Ю. К., Власов М. В. Фазовые равновесия жидкость пар и термодинамические свойства растворов *n*-пропанол – диметилкетон, *n*-пропанол – метилэтилкетон. *Журнал Вестник ВГУ. Серия: Химия. Биология. Фармация*. 2010;2: 41–47. Режим доступа: <https://www.elibrary.ru/item.asp?id=15608641>

12. Власов М. В., Сунцов Ю. К. Исследование фазовых равновесий жидкость - пар и термодинамических свойств растворов изобутанол- диметилкетон, изобутанол -метилэтилкетон. *Конденсированные среды и межфазные границы*. 2011;13(1): 29–37. Режим доступа: <https://www.elibrary.ru/item.asp?id=16441621>

13. Сунцов Ю. К., Горюнов В.А. Температура кипения и избыточные термодинамические функции растворов пропанол-2 – *n*- алкилпропаноаты. *Журнал физической химии*. 2012;85;7: 1173. Режим доступа: <https://www.elibrary.ru/item.asp?id=17745696>
14. Сунцов Ю. К., Власов М. В. Изобары температур кипения и изотермы избыточных термодинамических функций растворов изобутанол–алкилкетоны. *Журнал физической химии*. 2013;87;7: 1186–1190. <https://doi.org/10.7868/S0044453713070315>
15. Сунцов Ю. К., Горюнов В. А. Фазовые равновесия и термодинамические свойства растворов систем *n*-пропанол – *n*-алкил-2-метилпропаноаты. *Журнал Вестник ВГУ. Серия: Химия. Биология. Фармация*. 2013;2: 57–63. Режим доступа: <https://www.elibrary.ru/item.asp?id=20400922>
16. Сунцов Ю. К., Власов М. В. Объёмные и рефрактометрические свойства бинарных растворов бутанол – алифатические кетоны. *Известия высших учебных заведений. Серия: Химия и химическая технология*. 2013;56:(9): 54–56. Режим доступа: <https://www.elibrary.ru/item.asp?id=20207137>
17. Suntsov Yu. K. New method of predicting the thermodynamic properties of solutions. *Journal of Chemistry and Chemical Engineering*. 2014;8(3): 306–314. <https://doi.org/10.17265/1934-7375/2014.03.013>
18. Сунцов Ю. К., Власов М. В., Чуйков А. М. Фазовые равновесия жидкость–пар и термодинамические свойства растворов *n*-пропанол – алифатические кетоны. *Журнал физической химии*. 2015;89(6): 900–904. <https://doi.org/10.7868/S0044453715060291>
19. Сунцов Ю. К., Горюнов В. А., Чуйков А. М. Температуры кипения и избыточные термодинамические функции растворов *n*-бутанол – *n*-алкил-2-метилпропаноаты. *Известия высших учебных заведений. Серия: Химия и химическая технология*. 2015;58(4): 10–14. Режим доступа: <https://www.elibrary.ru/item.asp?id=23399307>
20. Сунцов Ю. К., Горюнов В. А., Чуйков А. М., Мещеряков А.В. Фазовые равновесия жидкость–пар и термодинамические свойства растворов 2-метилпропанол – *n*- алкилпропаноаты. *Журнал физической химии*. 2016;90(8): 1209–1215. <https://doi.org/10.7868/s0044453716080288>
21. Сунцов Ю. К., Горюнов В. А., Чуйков А. М. Фазовые равновесия жидкость–пар трёхкомпонентных систем пропанол-2 – сложные эфиры пропановой кислоты. *Журнал физической химии*. 2017;91(12): 2159–2162. <https://doi.org/10.1134/S0036024417120299>
22. Сунцов Ю. К., Харченко Г. Ю., Алфёрова С. И. Фазовые равновесия жидкость–пар трёхкомпонентных систем, образованных *n*-спиртами и *n*-алкилэтаноеатами. *Журнал физической химии*. 2019;93(3): 2159–2162. <https://doi.org/10.1134/S0044453719030208>
23. Сунцов Ю. К., Сунцова Н. С. Фазовые равновесия жидкость–пар и термодинамические свойства растворов бинарных систем толуол- *n*-алкилбензолы. *Журнал физической химии*. 2021;95(6): 838–845. <https://doi.org/10.31857/S004445372106025X>
24. Сунцов Ю. К., Сунцова Н. С. Фазовые равновесия жидкость–пар и термодинамические свойства растворов бинарных систем этилбензол – *n*-алкилбензолы. *Конденсированные среды и межфазные границы*. 2021;23(1): 81–92. <https://doi.org/10.17308/kcmf.2021.23/3307>
25. Nocedal J., Wright S. J. *Numerical optimization*. 2006. New York: Springer Series in Operations Research and Financial Engineering; 2006. <http://dx.doi.org/10.1007/978-0-387-40065-5>
26. Дуров В. А., Агеев Е. П. *Термодинамическая теория растворов*. М.: Либроком; 2010. 248 с.

Информация об авторах статьи

Сунцов Юрий Константинович, д. х. н., профессор кафедры физической химии, Воронежский государственный университет (Воронеж, Российская Федерация).

<https://orcid.org/0000-0001-6408-8919>
jsyntsov@mail.ru

Харченко Галина Юрьевна, к. х. н., доцент кафедры химии, Воронежский государственный педагогический университет (Воронеж, Российская Федерация).

harchenko.g.u@mail.ru

Сунцова Нина Семёновна, инженер кафедры физической химии, Воронежский государственный университет (Воронеж, Российская Федерация).

<https://orcid.org/0000-0002-1421-4830>
suntsova.nina@bk.ru

Поступила в редакцию 26.10.2021; одобрена после рецензирования 15.03.2022; принята к публикации 15.04.2022; опубликована онлайн 25.06.2022.