# ФАЗОВЫЕ РАВНОВЕСИЯ В ДВУХКОМПОНЕНТНЫХ СИСТЕМАХ: ДИФЕНИЛ – *Н*-ГЕНЭЙКОЗАН И ДИФЕНИЛ – *Н*-ТРИКОЗАН

# А.И. Казакова, И.Г. Яковлев, И.К. Гаркушин

Анна Игоревна Казакова (ORCID 0000-0001-5983-4673)\*, Иван Геннадиевич Яковлев (ORCID 0000-0002-6360-7307), Иван Кириллович Гаркушин (ORCID 0000-0001-6038-8519)

Кафедра общей и неорганической химии, Самарский государственный технический университет, ул. Молодогвардейская, 244, Самара, Российская Федерация, 443100 E-mail: appe kazakova96@vanday.mv\*\_vakovlav.jvan.g@gmail.aom\_cik40@vanday.mv

E-mail: anna.kazakova96@yandex.ru\*, yakovlev.ivan.g@gmail.com, gik49@yandex.ru

Рассчитаны диаграммы плавкости систем дифенил – н-генэйкозан и дифенил – нтрикозан с помощью уравнения Шредера и с применением методов UNIFAC и UNIFAC Dortmund. Результаты, полученные расчетными методами, показали, что обе системы являются эвтектическими. Применение дифференциального сканирующего микрокалориметра позволило экспериментально подтвердить наличие фазового равновесия в данных сплавах. Экспериментально для каждой системы исследованы индивидуальные вещества и составы внутри каждой из исследуемых систем. По полученным данным построены фазовые диаграммы для двух систем дифенил – н-генэйкозан и дифенил – н-трикозан. В каждой системе при температурах 29,94 °C и 40,6 °C отмечаются полиморфные превращения для н-генэйкозан и н-трикозана соответственно, которые совпадают с литературными данными. Метод UNIFAC Dortmund для обеих систем показал наименьшее отклонение состава эвтектического сплава от экспериментальных данных при сравнительно близких расчетных значениях температуры плавления эвтектики с методом UNIFAC. Эти методы могут использоваться для предварительной оценки координат эвтектик в системах из органических веществ перед планированием эксперимента. Произведены расчеты удельной энтальпии плавления, молярных значений энтропии и энтальпии плавления, объемной удельной энтальпии плавления и плотность при стандартных условиях, для каждого эвтектического состава. Исследование плавкости систем дифенил – н-генэйкозан и дифенил – н-трикозан является важным для понимания ее физических свойств и возможностей применения в различных технологических процессах. Эвтектические смеси могут быть использованы в качестве теплоносителей и теплоаккумулирующих веществ. Эвтектические расплавы систем дифенил – н-генэйкозан и дифенил – нтрикозан безопасны при эксплуатации.

Ключевые слова: дифенил, н-генэйкозан, н-трикозан, фазовые равновесия, эвтектика

# PHASE EQUILIBRIUM IN TWO-COMPONENT SYSTEMS: DIPHENYL – N-GENEICOSAN AND DIPHENYL – N-TRICOSAN

# A.I. Kazakova, I.G. Yakovlev, I.K. Garkushin

Anna I. Kazakova (ORCID 0000-0001-5983-4673)\*, Ivan G. Yakovlev (ORCID 0000-0002-6360-7307), Ivan K. Garkushin (ORCID 0000-0001-6038-8519)

Department of General and Inorganic Chemistry, Samara State Technical University, Molodogvardeiskaya st., 244, Samara, 443100, Russia

E-mail: anna.kazakova96@yandex.ru\*, yakovlev.ivan.g@gmail.com, gik49@yandex.ru

The melting curves of the diphenyl - n-geneucosane and diphenyl - n-tricosane systems were calculated using the Schroeder equation and using the UNIFAC and UNIFAC Dortmund methods. The results obtained by calculation methods showed that both systems are eutectic. The

А.И. Казакова, И.Г. Яковлев, И.К. Гаркушин

use of a differential scanning microcalorimeter made it possible to experimentally confirm the presence of phase equilibrium in these alloys. Experimentally, for each system, individual substances and compositions within each of the studied systems were studied. Based on the data obtained, phase diagrams were constructed for two systems diphenyl -n-geneucosane and diphenyl -ntricosane. In each system, at temperatures of 29.94 °C and 40.6 °C, polymorphic transformations are observed for n-geneicosane and n-tricosane, respectively, which coincide with the literature data. The UNIFAC Dortmund method for both systems showed the smallest deviation of the composition of the eutectic alloy from the experimental data at relatively close calculated values of the melting temperature of the eutectic with the UNIFAC method. These methods can be used to preliminary estimate the coordinates of eutectics in organic systems before planning an experiment. Calculations were made of the specific enthalpy of melting, molar values of entropy and enthalpy of melting, volumetric specific enthalpy of melting and density under standard conditions for each eutectic composition. The study of the fusibility of diphenyl - n-heneicosane and diphenyl - ntricosane systems is important for understanding its physical properties and possibilities of application in various technological processes. Eutectic mixtures can be used as coolants and heat-storing substances. Eutectic melts of diphenyl – n-heneicosane and diphenyl – n-tricosane systems are safe to use.

Key words: diphenyl, n-geneicosan, n-tricosane, phase equilibria, eutectic

## Для цитирования:

Казакова А.И., Яковлев И.Г., Гаркушин И.К. Фазовые равновесия в двухкомпонентных системах: дифенил – *н*-генэйкозан и дифенил – *н*-трикозан. *Изв. вузов. Химия и хим. технология.* 2024. Т. 67. Вып. 3. С. 45–52. DOI: 10.6060/ivkkt.20246703.6936.

## For citation:

Kazakova A.I., Yakovlev I.G., Garkushin I.K. Phase equilibrium in two-component systems: diphenyl – *n*-geneicosan and diphenyl – *n*-tricosan. *ChemChemTech [Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved. Khim. Khim. Tekhnol.]*. 2024. V. 67. N 3. P. 45–52. DOI: 10.6060/ivkkt.20246703.6936.

## введение

Исследование органических систем и установление взаимодействия между веществами позволяет определить связь компонентов в смесях и свойства смесей. Большую заинтересованность представляют исследования низкоплавких систем, обладающих хорошей теплопроводностью и теплоемкостью, низкой летучестью, малым коэффициентом объемного расширения при фазовом переходе. Поэтому широкое применение в качестве теплоносителей [1-14] или теплоаккумулирующих веществ [15-19] находят смеси, включающие *н*-алканы, дифенил и дифенилоксид.

Целью данной работы является теоретическое и экспериментальное изучение фазовых равновесий в системах дифенил – *н*-генэйкозан и дифенил – *н*-трикозан и определение свойств эвтектических сплавов для возможного применения в качестве теплоносителей и теплоаккумулирующих веществ.

## ОБЪЕКТЫ И МЕТОДЫ

Объектами исследования являются двухкомпонентные системы дифенил – *н*-генэйкозан и дифенил – *н*-трикозан. Предварительный прогноз фазовой диаграммы данной двухкомпонентной системы рассчитан различными методами: с применением уравнения Шредера [20], UNIFAC и UNIFAC Dortmund [21-24]. Указанные методы широко используются при планировании эксперимента и оценивании фазового равновесия в многокомпонентных органических системах, в том числе в работах [21-25].

Экспериментальные исследования осуществляли с использованием дифференциального сканирующего калориметра теплового потока (микрокалориметр DSC-500) [26], термостатирование холодных спаев осуществляли с помощью ультратермостата U-10. Точность измерения температуры составляла ±0,25 °C. С помощью ПЭВМ с программным обеспечением DSC Tools 2.0. осуществляли регистрацию тепловых эффектов. Исследования проводили в диапазоне температур от 10 до 80 °C, используя в качестве охлаждающего агента лед. Вещества нагревали со скоростью 4 К/мин. Скорость нагрева сплавов обеспечивалась с помощью программатора, встроенного в микрокалориметр. Скорость нагрева подбирали экспериментально. Точность калибровки проверяли по реперным веществам в начале работы. В качестве эталона использовали пустой алюминиевый тигель. Температуру плавления образца определяли с помощью минимума на графике первой производной, взятой от экспериментального пика на кривой ДТА. Максимум на первой производной соответствует точке на экзотермическом пике, через которую в программе DSC Tools 2.0 проводится касательная к стороне экспериментального пика. Данная функция реализована в соответствии с рекомендациями ІСТАС. Экспериментальные смеси готовили на основании данных Т-х-диаграммы, полученной по методу UNIFAC. Для исследования использовали образцы массой от 13 до 20 мг, которые взвешивали на весах AND HR-300, (Japan). Стандартное отклонения взвешивания составляло 0,0002 г. Точность определения энтальпии плавления составляет ±5%.

## ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ

Исходные вещества в системах различаются не только температурами плавления, но и строением молекул в твердом состоянии. Поэтому можно предположить полную взаимную растворимость в жидком состоянии компонентов и полную нерастворимость в твердом состоянии, т.е. в каждой системе образуется эвтектика. Для расчета диаграммы плавкости можно применить уравнение Шредера (1):

$$\ln x_i = \frac{\Delta_{\pi\pi} H_i (T - T_{\pi\pi,i})}{R T_{\pi\pi,i} T} \tag{1}$$

где  $x_i$  – мольная доля компонента,  $\Delta_{n,i}H_i$  – энтальпия плавления компонента, Дж/моль, Тпл.i-температура плавления чистого компонента, K; R – универсальная газовая постоянная.

При расчете по уравнению Шредера раствор считали идеальным и поэтому коэффициенты активности компонентов принимали равными 1. Данное уравнение можно применить для описания хода ликвидуса системы как со стороны первого, так и со стороны второго компонента каждой системы. Пересечение кривых ликвидуса дает точку эвтектики. В связи с этим для нахождения эвтектики необходимо решить систему уравнений (2) относительно  $x_i$  и T<sub>e</sub>:

$$\begin{cases} \ln x_1 = \frac{\Delta_{\pi\pi} H_1(T_e - T_{\pi\pi,1})}{RT_{\pi\pi,1}T_e} \\ \ln x_2 = \frac{\Delta_{\pi\pi} H_2(T_e - T_{\pi\pi,2})}{RT_{\pi\pi,2}T_e} \\ 1 = x_1 + x_2 \end{cases}$$
(2)

где T<sub>e</sub> – температура плавления эвтектического состава, К.

Методика построения фазовой диаграммы с использованием уравнения Шредера приведена в работе [20]. Диаграммы плавкости систем дифенил - *н*-генэйкозан и дифенил - *н*-трикозан построены по данным расчета с помощью системы уравнений (2). Расчетное значение координат эвтектики по уравнению Шредера для системы дифенил – н-генэйкозан: температура плавления 31,5 °С при содержании компонентов 41,0 мол.% (57,20 мас.%) дифенила и 59,0 мол.% (42,80 мас.%) н-генэйкозана; для системы дифенил – н-трикозан: температура плавления 37,03 °С при содержании компонентов 47,0 мол.% (65,12 мас.%) дифенила и 53,0 мол.% (34,88 мас.%) н-трикозана.

В работе для оценки величины межмолекулярного взаимодействия в системах рассчитывали коэффициенты активности компонентов в эвтектической смеси. Для этого использовали модифицированное уравнение Шредера с введением в него коэффициента активности:

$$\ln x_i \cdot \gamma_i = \frac{\Delta_{\pi\pi} H_i (T_e - T_{\pi\pi,i})}{R \cdot T_{\pi\pi,i} \cdot T_e}$$
(3)

где *у*<sub>i</sub> – коэффициент активности компонента *i*.

Теоретически коэффициент активности компонента определяли с помощью методов UNIFAC [21, 22] и UNIFAC Dortmund [23, 24]. Оба этих метода UNIFAC основываются на уравнении: lr

$$n\gamma_i = \ln\gamma_i^C + \ln\gamma_i^R \tag{4}$$

где  $\gamma_i^C$  – комбинаторная часть коэффициента активности,  $\gamma_i^R$  – остаточная часть коэффициента активности. Подробный расчет комбинаторной части  $\gamma_i^C$  и остаточной части  $\gamma_i^R$  коэффициента активности приведен в [21, 22, 27]. Различия методов довольно существенны и включают в себя разные принципы расчета параметров группового взаимодействия и разные параметры групп, о чем также подробно описано в [21, 22, 27].

В процессе расчета соединения требуется представить как группы атомов, на которые разбивали изучаемые вещества при расчете методами UNIFAC и UNIFAC Dortmund. Группы и их число представлены в табл. 1.

Координаты эвтектики, полученные расчетом по методу UNIFAC для системы дифенил - нгенэйкозан: температура плавления 35,02 °С при содержании компонентов 29,0 мол.% (43,99 мас.%) дифенила и 71,0 мол.% (56,01 мас.%) н-генэйкозана; для системы дифенил – н-трикозан: температура плавления 40,45 °C при содержании компонентов 36,0 мол.% (54,22 мас.%) дифенила и 64,0 мол.% (45,78 мас.%) н-трикозана.

Таблица 1
Группы атомов по методам UNIFAC и UNIFAC
Dortmund
Table 1. Groups of atoms according to the UNIFAC and
UNIFAC Dortmund methods

1/	Metog UNIFAC		Mетод UNIFAC Dortmund		
компонент	Группа	Количество групп	Группа	Количество групп	
Дифенил	ACH	12	ACH	10	
			AC	2	
н-Генэйко-	CH <sub>3</sub>	2	CH <sub>3</sub>	2	
зан	$CH_2$	19	$CH_2$	19	
<i>н</i> -Трико-	CH <sub>3</sub>	2	CH <sub>3</sub>	2	
зан	CH <sub>2</sub>	21	CH <sub>2</sub>	21	

Координаты эвтектики, полученные расчетом по методу UNIFAC Dotrmund для системы дифенил – *н*-генэйкозан: температура плавления 35,82 °C при содержании компонентов 25,0 мол.% (39,06 мас.%) дифенила и 75,0 мол.% (60,94 мас.%) *н*-генэйкозана; для системы дифенил – *н*-трикозан: температура плавления 41,52 °C при содержании компонентов 32,0 мол.% (49,77 мас.%) дифенила и 68,0 мол.% (50,23 мас.%) *н*-трикозана.

Коэффициент активности также рассчитывали исходя из экспериментальных значений параметров эвтектики. Расчет вели согласно уравнению Шредера, из которого выразили коэффициент активности:

$$\ln \gamma_i = \frac{\Delta_{\Pi \pi} H_i (T_e - T_{\Pi \pi, i})}{R \cdot T_{\Pi \pi, i} \cdot T_e} - \ln x_i$$
(5)

Результаты расчета коэффициентов активности представлены в табл. 2.

#### ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

Перед планированием эксперимента каждую смесь исследовали на аппарате ДСК, близкую к расчетной по методу UNIFAC эвтектической смеси. Так как для смесей было зафиксировано несколько термоэффектов, потребовались дополнительные экспериментальные исследования, в результате которых были построены экспериментальные фазовые диаграммы двухкомпонентных систем (рис. 1 и рис. 2). Кривые  $\Delta T$  сплавов эвтектических составов для каждой смеси приведены на рис. 3 и рис. 4.

Ликвидус системы дифенил – *н*-генэйкозан (рис. 1) представлен кривыми, которые пересекаются в двойной эвтектике с температурой плавления 31,82 °С и содержанием дифенила – 26,0 мол.% (40,32 мас.%) и *н*-генэйкозана – 74,0 мол.% (59,68 мас.%). Эвтектический сплав системы дифенил – *н*-трикозан (рис. 2) также представлен кривыми, которые пересекаются в двойной эвтектике с температурой плавления 36,4 °С и содержанием дифенила – 34,0 мол.% (51,98 мас.%) и *н*-трикозана – 66,0 мол.% (48,02 мас.%).



Рис. 1. Фазовая диаграмма системы (Ph)<sub>2</sub> – *н*-С<sub>21</sub>Н<sub>44</sub>, построенная по результатам эксперимента







Fig. 2. Phase diagram of the system  $(Ph)_2 - n-C_{23}H_{48}$ , built according to the results of the experiment



Рис. 3. Термограмма эвтектического сплава дифенил – *н*-генэйкозан. 1 – кривые нагревания; 2 – I производные кривых нагревания

Fig. 3. Thermogram of the eutectic alloy diphenyl – *n*-geneucosan. 1 – heating curves; 2 – I derivatives of heating curves

Изв. вузов. Химия и хим. технология. 2024. Т. 67. Вып. 3



Рис. 4. Термограмма эвтектического сплава дифенил – *н*-трикозан: 1 – кривые нагревания; 2 – I производные кривых нагревания



# ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Сравнительные данные для эвтектической смеси системы приведены в табл. 2.

Отклонения расчетных данных состава эвтектики и температуры плавления от экспериментальных данных говорит о наличии в системе взаимодействий между молекулами.

Метод Шредера рассчитывает систему в идеальном состоянии без учета возможного взаимного влияния компонентов друг на друга, и, соответственно, большие отклонения между ним и экспериментом можно объяснить наличием в системе межмолекулярных взаимодействий.

UNIFAC Dortmund появился как модификация оригинального UNIFAC и в общем демонстрирует более точный прогноз [24, 28]. Отличие экспериментальных данных от расчетных методом UNIFAC Dortmund объясняется тем, что даже модифицированный метод не полностью учитывает особенности взаимодействия компонентов системы между собой. И хотя метод постоянно улучшается и пересматривается, он не строго специализирован на расчете равновесий "жидкость – твердое" [28].

Таблица 2

		e ostanica aata	on cureene		
		Эксперимент	Шредер	UNIFAC	UNIFAC Dortmund
$(Ph)_2 - H-C_{21}H_{44}$	Содержание н-генэйкозана, мол. доля	74,0	59,0	71,0	75,0
	Содержание дифенила, мол. доля	26,0	41,0	29,0	25,0
	Температура плавления эвтектики, °С	31,82	31,50	35,02	35,82
	Коэффициент активности <i>н</i> -генэйкозана в эвтектике	0,81		1,0247	1,0166
	Коэффициент активности дифенила в эвтектике	1,60		1,5296	2,8168
(Ph) <sub>2</sub> - н-С <sub>23</sub> Н <sub>48</sub>	Содержание н-трикозана, мол. доля	66,0	53,0	64,0	68,0
	Содержание дифенила, мол. доля	34,0	47,0	36,0	32,0
	Температура плавления эвтектики, °С	36,4	37,03	40,45	41,63
	Коэффициент активности <i>н</i> -трикозана в эвтектике	0,77		1,0336	1,0230
	Коэффициент активности дифенила в эвтектике	1,38		1,4332	1,6549

Сравнение полученных данных по эвтектических смесях *Table 2.* Comparison of the obtained data on eutectic mixtures

Таблица З

Сравнение состава и температуры эвтектики *Table 3.* Comparison of the composition and temperature of the eutectic

		Относительное отклонение, %			
	Наименование показателя		Метод UNIFAC	Метод UNIFAC Dortmund	
(Ph) <sub>2</sub> -н-С <sub>21</sub> Н <sub>44</sub>	Содержание <i>н</i> -генэйкозана в эвтектике, мол. %	20,27	4,05	-1,35	
	Т <sub>пл</sub> эвтектики в системе дифенил – <i>н</i> -генэйкозан, К	0,10	-0,99	-1,26	
(Ph) <sub>2</sub> -н-С <sub>23</sub> Н <sub>48</sub>	Содержание н-трикозана в эвтектике, мол. %	19,69	3,03	-3,03	
	Т <sub>пл</sub> эвтектики в системе дифенил – <i>н</i> -трикозан, К	-0,21	-1,26	-1,60	

Table 4. Thermophysical properties of the eutectic							
Сройства	Энтальпия плавления			Молярная			
Системы	Удельная, кДж/кг	Молярная, кДж/моль	Объемная, МДж/м <sup>3</sup>	энтропия плавления <sub>.</sub> Дж/моль•К	Плотность, г/см <sup>3</sup>		
$(Ph)_2 - H - C_{21}H_{44}$	145,26	8,27	0,136	124,85	0,938		
$(Ph)_2 - H - C_{23}H_{48}$	144,18	41,41	0,142	127,94	0,984		

Теплофизические свойства эвтектики *Table 4*. Thermophysical properties of the eutectic

Как видно из табл. 2, два метода (Шредера и UNIFAC) показывают значительное отклонение состава эвтектики от результатов эксперимента. Тем не менее, обе системы, рассчитанные с помощью метода UNIFAC Dortmund, более точно прогнозируют составы эвтектик, однако температуры эвтектик не совпадают с расчетными, что представлено в табл. 3.

Рассчитаны значения удельных энтальпий плавления, с учетом плотности каждой эвтектики для стандартных условий без ее изменения при температуре плавления определены удельные объемные энтальпии плавления, а также молярные значения энтальпий и энтропий плавления (табл. 4), которые необходимо учитывать при использовании в качестве теплоносителей и теплоаккумулирующих веществ.

#### выводы

Расчеты ликвидусов эвтектических систем дифенил – *н*-генэйкозан и дифенил – *н*-трикозан проведены тремя методами: Шредера, UNIFAC и UNIFAC Dortmund.

Экспериментально построена фазовая диаграмма системы. Термограммы каждого эвтектиче-

#### ЛИТЕРАТУРА

- 1. Бобровская Е.И. Высокотемпературные органические теплоносители котельных установок. *Россия молодая: перед. технол. в пром-сть.* 2013. № 2. С. 201-203.
- 2. Левина Ю.С., Усачев С.М., Усачев А.М. Получение энергосберегающих строительных материалов на основе традиционного сырья и теплоаккумулирующих добавок. *Междунар. науч.-исслед. журн.* 2018. № 4 (46). С. 124-126. DOI: 10.18454/IRS.2016.46.218.
- Переверзев А.Н., Калиниченко А.Ю., Баташева А.А. Применение н-алканов в качестве ТАМ как экологически безопасного материала. Матер. VII рег. науч.-техн. конф. «Вузовская наука – Северо-Кавказскому региону». Естественные и точные науки, технические и прикладные науки. Т.1. Ставрополь: СевКавГТУ. 2003. С. 110.
- Переверзев А.Н., Калиниченко А.Ю., Асадчий О.Г. Теплоаккумулирующие материалы на основе парафинов. Матер. XXX науч.-техн. конф. по рез. раб. проф.препод. сост., асп. и студ. СевКавГТУ за 1999 год. Ставрополь: СевКавГТУ. 2000. С. 20.

ского сплава представлены двумя кривыми, пересекающимися в эвтектике.

Метод UNIFAC Dortmund показал наименьшее отклонение состава эвтектического сплава от экспериментальных данных при сравнительно близких расчетных значениях температуры плавления эвтектики с методом UNIFAC.

Эвтектические смеси могут быть использованы в качестве теплоносителей и теплоаккумулирующих веществ.

#### ФИНАНСИРОВАНИЕ РАБОТЫ

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки РФ в рамках проектной части государственного задания № 0778-2020-0005.

The work was carried out with financial support from the Ministry of Education and Science of the Russian Federation within the framework of the project part of state assignment No. 0778-2020-0005.

## КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов, требующего раскрытия в данной статье.

The authors declare the absence a conflict of interest warranting disclosure in this article.

## REFERENCES

- Bobrovskaya E.I. High-temperature organic coolants for boiler plants. *Rossiya Molodaya: Pered. Tekhnol. Promyshl.* 2013. N 2. P. 201-203 (in Russian).
- 2. Levina Yu.S., Usachev S.M., Usachev A.M. Production of energy-saving building materials based on traditional raw materials and heat-storing additives. *Mezhdunar. Nauch.-Is-sled. Zhurn.* 2018. N 4 (46). P. 124-126 (in Russian).
- Pereverzev A.N., Kalinichenko A.Yu., Batasheva A.A. The use of n-alkanes as TAM as an environmentally friendly material. Materials of the VII regional scientific and technical conference "University science – the North Caucasus region". Natural and exact sciences, technical and applied sciences. V.1. Stavropol: SevKavGTU. 2003. P. 110 (in Russian).
- Pereverzev A.N., Kalinichenko A.Yu., Asadchiy O.G. Heat-storing materials based on paraffins. Materials of the XXX scientific and technical conference on the results of the work of the teaching staff, graduate students and students of North Caucasian State Technical University for 1999. Stavropol: SevKavSTU. 2000. P. 20 (in Russian).

- 5. Диденко В.Н., Касимов Р.З., Попов Д.Н. Моделирование фазовых переходов в капсулированных теплоаккумулирующих материалах. Интеллект. системы в произв. 2013. № 1 (21). С. 13-17.
- Александров В.Д., Соболь О.В., Александрова О.В., Соболев А.Ю., Покинтелица Е.А., Лойко Д.П., Амерханова Ш.К. Применение фазопереходных теплоаккумулирующих материалов в строительстве. Вестн. Донбас. нац. акад. строит. и арх. Совр. строит. матер. 2016. № 1(117). С. 5-13.
- 7. Волшаник В.В., Бабаев Б.Д. Энергоэффективность стеновой панели с фазопереходным теплоаккумулирующим материалом. *Кровельные и изоляционные материалы*. 2012. № 3. С. 13-15.
- Марцинковский А.В., Данилин В.Н., Доценко С.П., Шурай П.Е., Шабалина С.Г., Долесов А.Г., Боровская Л.В., Гнеушев М.Ю., Дегтярев А.И. Физико-химические и технические проблемы аккумулирования тепла. Физ.-хим. анализ св-в многокомп. сис-м. 2003. № 1. С.25-30.
- Рауд Э.А., Фейгин Е.А., Романова Е.Г. Разработка и использование в нефтеперерабатывающей и нефтехимической промышленности высокотемпературных теплоносителей. М.: ЦНИИТЭ Нефтехим. 1990. 780 с.
- Wagner W. Properties of Organic Heat Carriers. Heat Transfer Practice with Organic Media. Begell House. 1997. 664 p. DOI: 10.1615/978-1-56700-083-2.0.
- Хорошев В.Г., Погодин Н.П. Применение органических теплоносителей в энергетических системах судов и морских сооружений. *Тр. Крылов. гос. науч. центра.* 2020. № 1 (391). С. 171-180. DOI: 10.24937/2542-2324-2020-1-391-165-174.
- Морковин А.В., Плотников А.Д., Борисенко Т.Б. Теплоносители для внутренних контуров систем терморегулирования пилотируемых космических аппаратов. Косм. техника и технология. 2013. № 1. С. 85-89.
- 13. Чечеткин А.В., Занемонец Н.А. Теплотехника. М.: Высш. шк. 1986. 344 с.
- Техническая брошюра «Синтетические теплоносители». Компания Dow. 14 с. URL: https://studylib.ru/doc/2565612/ sinteticheskie-teplonositeli-dowtherm-™\_•-syltherm (дата обращения 30.09.2023).
- Харченко Н.В. Индивидуальные солнечные установки. М.: Энергоатомиздат. 1991. 254 с.
- 16. Аймбетова И.О., Сулейменов У.С., Камбаров М.А., Калшабекова Э.Н., Риставлетов Р.А. Теплофизические свойства фазопереходных теплоаккумулирующих материалов, применяемых в строительстве. *Vcn. совр. естествозн.* 2018. № 12 (1) С. 9-13. DOI: 10.17513/use.36966.
- Hughes B.R., Chaudhry H.N., Calautit J.K. Passive energy recovery from natural ventilation air streams. *Appl. Energy*. 2014. T. 113. C. 127-140. DOI: 10.1016/j.apenergy.2013.07.019.
- Резницкий Л.А. Обратимое аккумулирование тепла. М.: МГУ. 1996. 91 с.
- Мезенцев И.В., Верниковская Н.В., Аристов Ю.И., Мухин В.А. Экспериментальное исследование и математическое моделирование процессов теплообмена в термоаккумулирующих средах. *Теплофизика и аэромеханика*. 2006. Т. 13. № 3. С. 435-442.
- Silveira C.L., Galvao A.C., Robazza W.S., Feyh, J.V. Modeling and parameters estimation for the solubility calculations of nicotinamide using UNIFAC and COSMO-based models. *Fluid Phase Equilibria*. 2021. V. 535. P. 112970. DOI: 10.1016/j.fluid.2021.112970.

- Didenko V.N., Kasimov R.Z., Popov D.N. Modeling of phase transitions in encapsulated heat-storing materials. *Intellekt. Sistemy Proizv.* 2013. N 1 (21). P. 13-17 (in Russian).
- Alexandrov V.D., Sobol O.V., Alexandrova O.V., Sobolev A.Yu., Pokintelitsa E.A., Loiko D.P., Amerkhanov Sh.K. Application of phase-transition heat-accumulating materials in construction. *Vestn. Donbas. Nats. Akad. Stroit. Arkh. Sovr. Stroit. Mater.* 2016. N 1 (117). P. 5-13 (in Russian).
- 7. Volshanik V.V., Babaev B.D. Energy efficiency of a wall panel with phase-transition heat-storing material. *Krovelnye Izolyatsionnye Mater*. 2012. N 3. P. 13-15 (in Russian).
- Martsinkovsky A.V., Danilin V.N., Dotsenko S.P., Shuray P.E., Shabalina S.G., Dolesov A.G., Borovskaya L.V., Gneushev M.Yu., Degtyarev A.I. Physico-chemical and technical problems of heat accumulation. *Fiz.-Khim. Analiz Sv-v Mnogokomp. Sis-m.* 2003. N 1. P. 25-30 (in Russian).
- Raud E.A., Feigin E.A., Romanova E.G. Development and use of high-temperature coolants in the oil refining and petrochemical industry M.: TsNIITE Neftekhim. 1990. 780 p. (in Russian).
- Wagner W. Properties of Organic Heat Carriers. Heat Transfer Practice with Organic Media. Begell House. 1997. 664 p. DOI: 10.1615/978-1-56700-083-2.0.
- Khoroshev V., Pogodin N. Application of thermal fluids in power systems of ships and marine structures. *Trudy Krylov. Gos. Nauch. Tsentra.* 2020. N 1(391). P. 165-174 (in Russian). DOI: 10.24937/2542-2324-2020-1-391-165-174.
- Morkovin A.V., Plotnikov A.D., Borisenko T.B. Coolants for internal circuits of thermal control systems of manned spacecraft. *Kosm. Tekh. Tekhnol.* 2013. N 1. P. 85-89 (in Russian).
- 13. Chechetkin A.V., Zanemonets N.A. Thermal engineering: study. for chem. technol. specialist. Universities. Vyssh. Shkola. 1986. 344 p. (in Russian)
- Technical brochure "Synthetic Heat Transfer Fluids" / Dow Company. – 14 s. – URL: https://studylib.ru/doc/2565612/ sinteticheskie-teplonositeli-dowtherm-TM-•-syltherm (access date 09/30/2023).
- Kharchenko N.V. Individual solar installations. M.: Energoatomizdat. 1991. 254 p. (in Russian).
- Aimbetova I.O., Suleimenov U.S., Kambarov M.A., Kalshabekova E.N., Ristavletov R.A. Thermophysical properties of phase-transition heat-storing materials used in construction. *Usp. Sovr. Estestvozn.* 2018. N 12 (1) P. 9-13 (in Russian). DOI: 10.17513/use.36966.
- Hughes B.R., Chaudhry H.N., Calautit J.K. Passive energy recovery from natural ventilation air streams. *Appl. Energy*. 2014. T. 113. C. 127-140. DOI: 10.1016/j.apenergy.2013.07.019.
- 18. **Reznitsky L.A.** Reversible heat storage. M.: MGU. 1996. 91 p. (in Russian).
- Mezentsev I.V., Vernikovskaya N.V., Aristov Yu.I., Mukhin V.A. Experimental study and mathematical modeling of heat transfer processes in thermal storage media. *Teplofizika Aeromekhanika*. 2006. V. 13. N 3. P. 435-442 (in Russian).
- Silveira C.L., Galvao A.C., Robazza W.S., Feyh, J.V. Modeling and parameters estimation for the solubility calculations of nicotinamide using UNIFAC and COSMO-based models. *Fluid Phase Equilibria*. 2021. V. 535. P. 112970. DOI: 10.1016/j.fluid.2021.112970.
- Song Z. Computer-aided design of ionic liquids as solvents for extractive desulfurization. *AIChE J.* 2018. V. 64. N 3. P. 1013-1025. DOI: 10.1002/aic.15994.

ChemChemTech. 2024. V. 67. N 3

- А.И. Казакова, И.Г. Яковлев, И.К. Гаркушин
- Song Z. Computer-aided design of ionic liquids as solvents for extractive desulfurization. *AIChE J.* 2018. V. 64. N 3. P. 1013-1025. DOI: 10.1002/aic.15994.
- Santiago R.S., Santos G.R., Aznar M. Liquid–liquid equilibrium in ternary ionic liquid systems by UNIFAC: New volume, surface area and interaction parameters. Part I. *Fluid Phase Equilibria.* 2010. V. 295. N 1. P. 93-97. DOI: 10.1016/j.fluid.2010.04.001.
- 23. Танеев А.А., Халиков А.Р., Кабиров Р.Р. Разработка методики расчета эвтектических концентраций и температур диаграмм состояния. *Вестн. УГАТУ.* 2008. Т. 11. № 2. С. 116-122.
- Constantinescu D., Gmehling J. Further development of modified UNIFAC (Dortmund): revision and extension 6. J. Chem. Eng. Data. 2016. V. 61. N 8. P. 2738-2748. DOI: 10.1021/acs.jced.6b00136.
- Казакова А.И., Яковлев И.Г., Гаркушин И.К. Фазовые равновесные состояния в двухкомпонентной системе дифенил – н-нонадекан. Изв. вузов. Химия и хим. технология. 2023. Т. 66. Вып. 6. С. 45-53. DOI: 10.6060/ ivkkt.20236606.6733.
- Hector T., Uhlig L., Gmehling J. Prediction of different thermodynamic properties for systems of alcohols and sulfate-based anion Ionic Liquids using modified UNIFAC. *Fluid Phase Equilibria*. 2013. V. 338. P. 135-140. DOI: 10.1016/j.fluid.2012.11.003.
- Afsharian M.S., Paraj A. Thermo-dynamic representation of ionic liquids phase equilibrium with PDH-ASOG and PDH-UNIFAC models. *J. Molec. Liq.* 2021. V. 333. P. 115926. DOI: 10.1016/j.molliq.2021.115926.
- Weidlich U., Gmehling J. UNIFAC model. 1. Prediction of VLE, HE, and gamma-infinity. *Ind. Eng. Chem. Res.* 1987. V. 26. P. 1372-1381. DOI: 10.1021/ie00067a018.

- 22. Santiago R.S., Santos G.R., Aznar M. Liquid–liquid equilibrium in ternary ionic liquid systems by UNIFAC: New volume, surface area and interaction parameters. Part I. *Fluid Phase Equilibria.* 2010. V. 295. N 1. P. 93-97. DOI: 10.1016/ j.fluid.2010.04.001.
- Taneev A.A., Khalikov A.R., Kabirov R.R. Development of a methodology for calculating eutectic concentrations and temperatures of state diagrams. *Vestn. UGATU*. 2008. V. 11. N 2. P. 116-122 (in Russian).
- Constantinescu D., Gmehling J. Further development of modified UNIFAC (Dortmund): revision and extension 6. J. *Chem. Eng. Data.* 2016. V. 61. N 8. P. 2738-2748. DOI: 10.1021/acs.jced.6b00136.
- Kazakova A.I., Yakovlev I.G., Garkushin I.K. Phase equilibrium states in a two-component diphenyl-n-nonadecane system. *ChemChemTech [Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved. Khim. Khim. Tekhnol.].* 2023. V. 66. N 6. P. 46-53 (in Russian). DOI: 10.6060/ivkkt.20236606.6733.
- Hector T., Uhlig L., Gmehling J. Prediction of different thermodynamic properties for systems of alcohols and sulfate-based anion Ionic Liquids using modified UNIFAC. *Fluid Phase Equilibria*. 2013. V. 338. P. 135-140. DOI: 10.1016/j.fluid.2012.11.003.
- Afsharian M.S., Paraj A. Thermo-dynamic representation of ionic liquids phase equilibrium with PDH-ASOG and PDH-UNIFAC models. *J. Molec. Liq.* 2021. V. 333. P. 115926. DOI: 10.1016/j.molliq.2021.115926.
- Weidlich U., Gmehling J. UNIFAC model. 1. Prediction of VLE, HE, and gamma-infinity. *Ind. Eng. Chem. Res.* 1987. V. 26. P. 1372-1381. DOI: 10.1021/ie00067a018.

Поступила в редакцию 10.07.2023 Принята к опубликованию 12.12.2023

Received 10.07.2023 (Accepted 12.12.2023