

УДК: 544.01:544.2:543.572.3

ИЗУЧЕНИЕ ФАЗОВЫХ РАВНОВЕСИЙ В ДВУХКОМПОНЕНТНОЙ ОРГАНИЧЕСКОЙ СИСТЕМЕ ДИФЕНИЛ – *n*-ДОКОЗАН

© 2024 г. А.И. Казакова^{а,*}, И.К. Гаркушин^а, И.Г. Яковлев^а

^а Самарский государственный технический университет, Самара, Россия

^{*} e-mail: anna.kazakova96@yandex.ru

Поступила в редакцию 18.11.2023

После доработки 21.12.2024

Принята к публикации 13.01.2024

Методами Шредера, UNIFAC и UNIFAC Dortmund рассчитана диаграмма плавкости системы дифенил – *n*-докозан и показано, что она относится к эвтектическому типу. Экспериментально с применением дифференциального сканирующего микрокалориметра исследованы индивидуальные вещества и их смеси. На кривой ДТА нагрева эвтектического сплава отмечен эндоэффект, отвечающий плавлению эвтектики. Представлено сравнение координат эвтектики, рассчитанных указанными методами, с экспериментальными данными. Для эвтектического сплава рассчитаны удельная энтальпия плавления, молярные значения энтропии и энтальпии плавления, объемная удельная энтальпия плавления и плотность для стандартных условий. Эвтектическая смесь может быть рекомендована к использованию в качестве теплоносителя, а также рабочего тела теплового аккумулятора.

Ключевые слова: эвтектика, дифенил, *n*-докозан, фазовые равновесные состояния

DOI: 10.31857/S0235010624020031

ВВЕДЕНИЕ

Применение эвтектических смесей органических веществ в системах терморегулирования и теплоснабжения благодаря комплексу теплофизических и транспортных свойств основано на использовании фазовых диаграмм двойных и более сложных систем [1–4]. Эвтектические смеси имеют низкие температуры плавления по сравнению с исходными компонентами и позволяют использовать их в качестве теплоносителей, топлива или теплоаккумулирующих веществ, растворителей [5–8].

Поиск новых составов теплоносителей, теплоаккумулирующих веществ, растворителей с оптимальными свойствами является важной задачей для современного производства. Поэтому проводятся систематические исследования систем из органических веществ, включающих *n*-алканы, циклоалканы, арены и их производные, дифенил и дифенил, хлорпроизводные *n*-алканов и алкенов [7]. Это позволит улучшить технологические процессы, основанные на применении смеси из указанных компонентов. Целью данной работы являются математическое моделирование двойной эвтектики в системе дифенил – *n*-докозан и экспериментальное исследование системы, а также расчет некоторых свойств эвтектики.

МЕТОДИКА

Моделирование координат двойных эвтектик и описание ликвидусов систем возможно с использованием методов Шредера, UNIFAC и UNIFAC Dortmund. Первый метод применяется для идеальных систем «жидкость — твердое тело» [9, 10], а два других метода в основном применяются для описания равновесия «жидкость — пар», и в некоторой модификации также для описания «жидкость — твердое тело» [10–14]. Эти методы позволяют в некоторой степени уменьшить количество эксперимента при исследовании систем.

Методика экспериментальных исследований, описанная в предыдущих работах [15], проведена с использованием дифференциального сканирующего микрокалориметра теплового потока (микрокалориметр DSC-500) с навесками исходных веществ и смесей от 0.1 до 0.2 г. Свойства исходных веществ приведены в таблице 1.

Таблица 1. Свойства индивидуальных веществ

Вещество	Температура плавления, °C	Энтальпия плавления, кДж/моль	Температура кипения, °C	Молярная масса, г/моль
Дифенил (ч.д.а.)	70.5 [16]	19.7 [16]	254 [16]	154.21 [16]
<i>n</i> -Докозан (ч.д.а.)	44.0 [16]	49.7 [16]	370 [17]	310.60 [16]

Диапазон исследования при записи температурной и дифференциальной кривых составлял от 0°C до 75°C.

ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ

В результате анализа ряда изученных систем дифенил — *n*-C_nH_{2n+2} [18], которые являются эвтектическими, можно предположить, что изучаемая система дифенил — *n*-докозан также будет относиться к эвтектической с полной взаимной растворимостью компонентов в жидком состоянии и полной нерастворимостью компонентов в твердом состоянии.

В методе Шредера идеальным считается раствор с коэффициентами активности компонентов равными 1. Уравнение позволяет описать кривые ликвидуса первого и второго компонентов, которые пересекаются в эвтектике, определяемой системой уравнений (1) относительно x_i и T [9, 15]:

$$\left\{ \begin{array}{l} \ln x_1 = \frac{\Delta_{nl} H_1 (T_e - T_{nl,1})}{RT_{nl,1} T_e} \\ \ln x_2 = \frac{\Delta_{nl} H_2 (T_e - T_{nl,2})}{RT_{nl,2} T_e}, \\ 1 = x_1 + x_2 \end{array} \right. \quad (1)$$

где $x_{1(2)}$ — мольная доля компонента; $\Delta_m H_{1(2)}$ — энтальпия плавления компонента, Дж/моль; $T_{nl,1(2)}$ — температура плавления чистого компонента, К; T_e — температура плавления эвтектики, К; R — универсальная газовая постоянная.

Диаграмма плавокости, построенная по системе уравнений (1), показана на рис. 1, а в таблице 3 приведены расчетные координаты эвтектики.

В методах UNIFAC и UNIFAC Dortmund [10–14] рассчитывали коэффициенты активности компонентов в эвтектической смеси. Для этого в уравнение Шредера введен коэффициент активности:

$$\ln(x_i \cdot \gamma_i) = \frac{\Delta_{nl} H_i (T_e - T_{nl,i})}{R \cdot T_{nl,i} \cdot T_e}, \quad (2)$$

где γ_i — коэффициент активности компонента i .

Теоретически коэффициент активности компонента определяли с помощью методов UNIFAC [18, 19] и UNIFAC Dortmund [19, 20]. Оба этих метода основываются на уравнении:

$$\ln \gamma_i = \ln \gamma_i^C + \ln \gamma_i^R, \quad (3)$$

где γ_i^C — комбинаторная часть коэффициента активности, γ_i^R — остаточная часть коэффициента активности.

Методика расчета комбинаторной γ_i^C и остаточной частей γ_i^R коэффициента активности приведена в [21–26]. Отличие методов состоит в различных принципах расчета параметров группового взаимодействия [21–25]. Исходные вещества представлены в качестве групп атомов, на которые разбивается молекула при расчете (табл. 2).

Расчетные значения координат эвтектики методами UNIFAC и UNIFAC Dortmund приведены в таблице 3 и показаны на рисунке 1.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

С помощью микрокалориметра DSC-500 экспериментально исследована смесь у, близкая по составу к расчетной эвтектической, по методу UNIFAC: 44.0 мас.% дифенила и 56.0 мас.% *n*-докозана. На дифференциальной кривой

Таблица 2. Группы атомов в методах UNIFAC и UNIFAC Dortmund

Компонент	Метод UNIFAC		Метод UNIFAC Dortmund	
	Группа	Количество групп	Группа	Количество групп
Дифенил	АСН	12	АСН	10
			АС	2
<i>n</i> -Докозан	СН ₃	2	СН ₃	2
	СН ₂	19	СН ₂	19

Таблица 3. Сравнение расчетных и экспериментальных данных по эвтектической смеси

Показатель	Эксперимент	Шредер	UNIFAC	UNIFAC Dortmund
Содержание <i>n</i> -докозана, мол. %	67.0	56.0	67.0	69.0
Содержание дифенила, мол. %	33.0	44.0/–33.33*	33.0/0*	31.0/6.06*
Температура плавления эвтектики, °С (К)	37.72 (310.87)	34.42 (307.57)/1.06*	37.87 (311.02)/0.05*	38.32 (311.47)/–0.19*
Коэффициент активности <i>n</i> -докозана в эвтектике	1.02		1.03	1.04
Коэффициент активности дифенила в эвтектике	1.46		1.47	1.59

Примечание: знак «–» означает превышение расчетных данных по сравнению с экспериментальными; знак «*» означает относительное отклонение, %

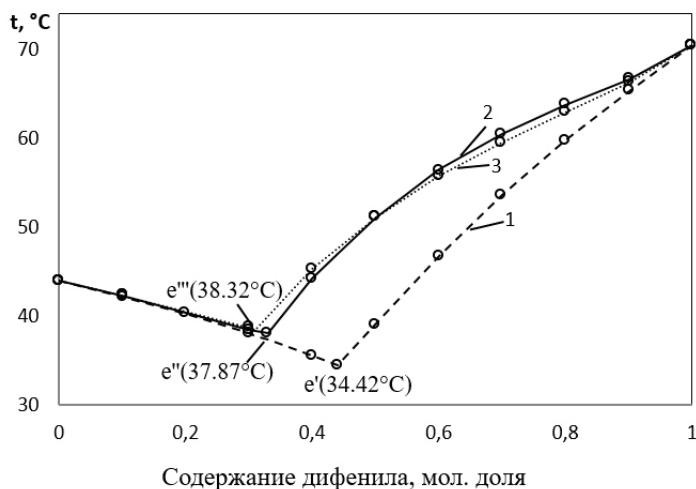


Рис. 1. Диаграммы плавления системы $(\text{Ph})_2 - \text{C}_{22}\text{H}_{46}$, рассчитанные по трем методам: 1 – Шредера; 2 – UNIFAC; 3 – UNIFAC Dortmund

ΔT отмечено два термоэффекта — при 37.72, и 39.51°C (Рис. 2). Поэтому для построения фазовой диаграммы системы дифенил — *n*-докозан (Рис. 3) дополнительно исследованы семь смесей компонентов.

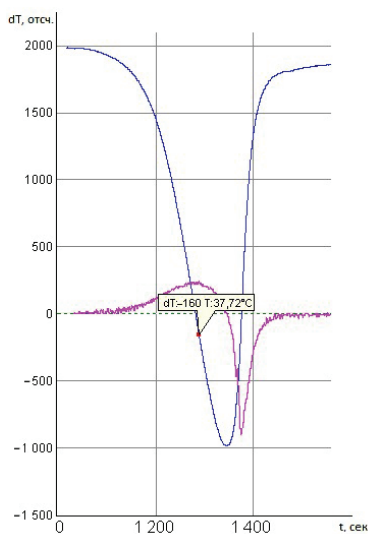


Рис. 2. Дифференциальная кривая нагревания эвтектической смеси

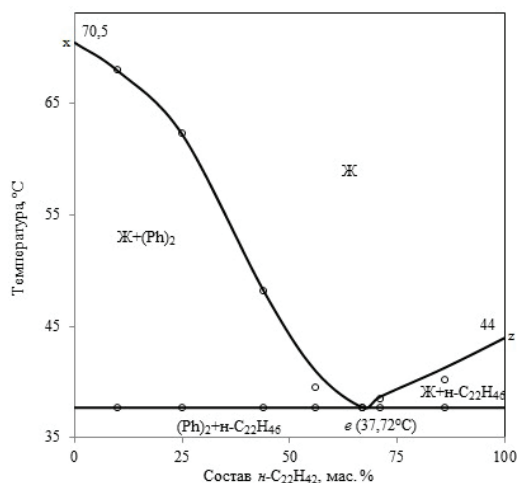


Рис. 3. Экспериментальная фазовая диаграмма системы дифенил — *n*-докозан

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

T - x -диаграмма двухкомпонентной системы включает однофазное поле жидкого состояния (выше кривых ликвидуса xz) и три двухфазных поля — твердых фаз в солидусе $n\text{-C}_{22}\text{H}_{46} + (\text{Ph})_2$, а также поля $\text{Ж} + n\text{-C}_{22}\text{H}_{46}$ и $\text{Ж} + (\text{Ph})_2$. Кривым ликвидуса и эвтектике фазовой диаграммы системы (Рис. 3) соответствуют моновариантные двухфазные равновесия ($\text{Ж} \rightleftharpoons n\text{-C}_{22}\text{H}_{46}$, линия xe ; $\text{Ж} \rightleftharpoons (\text{Ph})_2$,

линия ez) и невариантное трехфазное равновесие $J \rightleftharpoons n-C_{22}H_{46} + (Ph)_2$, точка e . Кривые ликвидуса xe и ze пересекаются в эвтектической точке.

Экспериментальные данные отличаются от расчетных (табл. 3), что может свидетельствовать о наличии межмолекулярного взаимодействия между компонентами изученной системы. Расчет коэффициентов активности компонентов проведен по уравнению (4):

$$\ln \gamma_i = \frac{\Delta_{nl} H_i (T_e - T_{nl,i})}{R \cdot T_{nl,i} \cdot T_e} - \ln x_i \quad (4)$$

Как видно из таблицы 3, значительные отклонения температуры плавления эвтектик и состава от данных эксперимента наблюдаются в методах Шредера и UNIFAC Dortmund. Метод UNIFAC практически точно прогнозирует состав и температуру плавления эвтектики в изученной системе дифенил – n -докозан. Также температура плавления эвтектической смеси, рассчитанная методом UNIFAC, имеет минимальное отклонение (0.15 K), в отличие от методов Шредера (3.30 K) и UNIFAC Dortmund (0.60 K) (рис. 4).

В таблице 4 приведены некоторые теплофизические свойства, рассчитанные по правилу аддитивности [27].

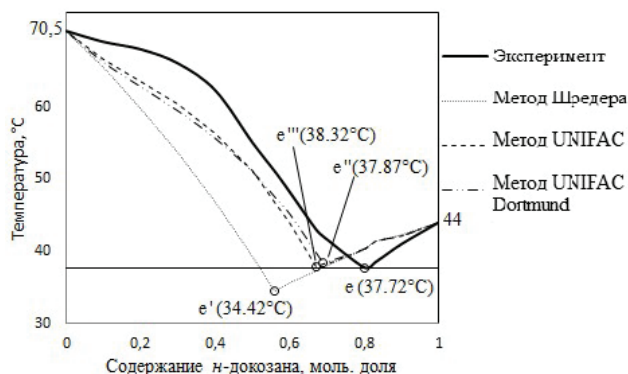


Рис. 4. Сравнение расчетных и экспериментальных данных

Таблица 4. Свойства эвтектического расплава системы дифенил – n -докозан

Свойства	Энтальпия плавления			Молярная энтропия плавления, Дж/моль · К	Плотность, г/см ³
	Удельная, кДж/кг	Молярная, кДж/моль	Объемная, кДж/м ³		
Числовые значения	143.9	39.8	135.0	128.0	0.973

Теплофизические свойства, приведенные в таблице 4, показывают, что эвтектическая смесь может быть использована в качестве теплоаккумулирующего материала. Эвтектический расплав системы дифенил – *n*-докозан обладает среднеинтенсивной энтальпией плавления, соответствует экологическим требованиям и безопасности при эксплуатации.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Впервые рассчитана диаграмма плавкости и экспериментально изучена система дифенил – *n*-докозан.

Рассчитан ликвидус двухкомпонентной системы дифенил – *n*-докозан методами Шредера, UNIFAC и UNIFAC Dortmund.

Экспериментально определено содержание компонентов и температура плавления эвтектики: дифенила – 33.0 мас. % (49.80 мол. %) и *n*-докозана – 67.0 мас. % (50.20 мол. %), температура плавления 37.72°C, построена фазовая диаграмма на основании экспериментальных данных.

Рассчитаны значения удельной, молярной и объемной энтальпии плавления, плотность и молярная энтропия плавления.

Полученные результаты экспериментальной работы сопоставлены с расчетными данными. Минимальное отклонение расчетного содержания компонентов в эвтектике от экспериментального отмечено при использовании метода Шредера, а при расчетах этим методом получено наименьшее отклонение по температуре плавления. Этот метод может быть использован для предварительной оценки координат эвтектик в системах из органических веществ перед планированием эксперимента.

ФИНАНСИРОВАНИЕ РАБОТЫ

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки РФ в рамках проектной части государственного задания № 0778-2020-0005 и № FSSE–2023–0003.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Анисимов И.Г., Бадыштов К.М., Бнатов С.А. и др. Топлива, смазочные материалы, технические жидкости. Ассортимент и применение: Справочник. Изд. 2-е, перераб. и доп. М.: Техинформ, 1999.
2. Гаркушин И.К., Колядо А.В., Яковлев И.Г. Теплоноситель. Патент РФ № 2656666. Оpubл. 06.06.2018 в БИ № 16.
3. Резницкий Л.А. Обратимое аккумулирование тепла. М. 1996.
4. Каган С.З., Четчин А.В. Органические высокотемпературные теплоносители и их применение в промышленности. М.: Гос. науч. технич. изд. хим. литературы. 1951.
5. Бедрик Б.Г., Чулков П.В., Калашников С.И. Растворители и составы для очистки машин и механизмов: Справ. изд. М.: Химия. 1989.
6. Колядо А.В., Гаркушин И.К., Дорохина Е.В., Моценский Ю.В. Смесевой растворитель. Патент РФ № 2453588. Оpubл. 20.10.2011 в БИ № 29.
7. Гаркушин И.К., Люстрицкая Д.В., Агафонов И.А. Анализ, прогнозирование и экспериментальное исследование рядов двухкомпонентных систем с участием *n*-декана и *n*-ундекана: Монография. Екатеринбург: УрО РАН. 2008.
8. Трофимов Е.А. Фазовые равновесия в многокомпонентных системах, сопряженных с металлическими расплавами // Расплавы. 2012. № 2. С. 70–75.

9. Stephenson R.M., Malanowski S. Properties of organic compounds // Handbook of the Thermodynamics of Organic Compounds. Springer, Dordrecht. 1987.
10. Christian L. Silveira, Alessandro C. Galvão, Weber S. Robazza. Modeling and parameters estimation for the solubility calculations of nicotinamide using UNIFAC and COSMO-based models. Fluid Phase Equilibria. 2021. **535**. P. 112970.
11. Морозов С.А., Яковлев И.Г., Гаркушин И.К. Фазовые равновесия в двухкомпонентной системе дифенил – *n*-тетракозан // Журн. физ. химии. 2022. **96**. № 5. С. 628–633.
12. Fabiele Bernardi, Alessandro C. Galvão, Pedro F. Arce. Xylitol solubility in DMF + ethylene glycol or 1,2-propyleneglycol: Measurement and modeling with PC-SAFT and CPA equations of state and UNIFAC activity coefficient model // Fluid Phase Equilibria. 2020. **519**. P. 112651.
13. Mohammad Saeed Afsharian, Aliakbar Paraj. Thermodynamic representation of ionic liquids phase equilibrium with PDH-ASOG and PDH-UNIFAC models // J. Molec. Liq. 2021. **333**. P. 115926.
14. Яковлев И.Г., Гаркушин И.К., Колядо А.В. Коэффициенты активности в системах тетрахлорэтилен – *n*-алкан // Журн. физ. химии. 2021. **95**. № 10. С. 1474–1480.
15. Казакова А.И., Яковлев И.Г., Гаркушин И.К. Фазовые равновесные состояния в двухкомпонентной системе дифенил-*n*-нонадекан // Изв. вузов. Химия и хим. технология. 2023. **66**. № 6. С. 46–53.
16. NIST Chemistry WebBook, SRD69. <https://webbook.nist.gov/> Дата обращения 23.12.2022.
17. Рид Р., Праусниц Дж., Шервуд Т. Свойства газов и жидкостей: справ. пособие. Л.: Химия, Ленингр. отд.-ние. 1982.
18. Гаркушин И.К., Колядо А.В., Яковлев И.Г., Аленова С.М. Фазовые равновесия в системах с участием дифенила, дифенилоксида, *n*-алканов и дикарбоновых кислот: монография. Самара: Самара гос.техн.ун-т. 2017.
19. Казакова А.И., Яковлев И.Г., Гаркушин И.К. Исследование фазовых равновесий в двухкомпонентной системе дифенилоксид – *n*-нонадекан // Расплавы. 2024. № 1. С. 17–25.
20. Weidlich U., Gmehling J. UNIFAC model. 1. Prediction of VLE, HE, and gamma-infinity. Ind. Eng. Chem. Res. 1987. **26**. P. 1372–1381.
21. Vyazovkin S., Chrissafis K., Di Lorenzo M.L., Koga N., Pijolat M., Roduit B., Sbirrazzuoli N., Suñol J.J. ICTAC Kinetics Committee recommendations for collecting experimental thermal analysis data for kinetic computations // Therm. Acta. 2014. **590**. P. 1.
22. Hector T., Gmehling J. Present status of the modified UNIFAC model for the prediction of phase equilibria and excess enthalpies for systems with ionic liquids // Fluid Phase Equilibria. 2014. **371**. P. 82–92.
23. Морачевский А.Г., Смирнова Н.А., Пиотровская Е.М. и др. Термодинамика равновесия жидкость – пар. Л.: Химия. 1989.
24. 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. **338**. P. 135–140.
25. 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 // FluidPhase Equilibria. 2010. **295**. № 1. P. 93–97.
26. Constantinescu D., Gmehling J. Further development of modified UNIFAC (Dortmund): revision and extension 6 // J.Chem. Eng. Data. 2016. **61**. № 8. P. 2738–2748.
27. Иоффе Б.В. Рефрактометрия как метод физико-химического анализа органических систем: Усп. хим. 1960. С. 137–161.

STUDY OF PHASE EQUILIBRIA IN THE TWO-COMPONENT ORGANIC SYSTEM BIPHENYL – *n*-DOCOSANEA.I. Kazakova^{a,*}, I.K. Garkushin^a, I.G. Yakovlev^a^a Samara State Technical University, Samara, Russia

*E-mail: anna.kazakova96@yandex.ru

The fusibility diagram of the diphenyl – *n*-docosane system was calculated by Schroeder, UNIFAC and UNIFAC Dortmund methods, and it was shown that it belongs to the eutectic type. Individual substances and their mixtures were studied experimentally using a differential scanning microcalorimeter. The endo-effect corresponding to the melting of the eutectic was noted on the DTA heating curve of the eutectic alloy. A comparison of the eutectic coordinates calculated by these methods with experimental data is presented. Specific fusion enthalpy, molar values of entropy and enthalpy of fusion, volumetric specific fusion enthalpy and density for standard conditions were calculated for an eutectic alloy. The eutectic mixture can be used as a heat carrier, as well as a working fluid of a heat accumulator.

Keywords: eutectic, diphenyl, *n*-docosane, phase equilibrium states.

REFERENCES

1. Anisimov I.G., Badystov K.M., Bnatov S.A. etc. Topliva, smazochnyye materialy, tekhnicheskiye zhidkosti. Assortiment i primeneniye [Fuels, lubricants, technical fluids. Assortment and application]: Handbook. Ed. 2nd, revised. and additional Moscow: Tekhinform, 1999. [In Russian].
2. Garkushin I.K., Kolyado A.V., Yakovlev I.G. Teplonositel' [Coolant]. Patent of the RF № 2656666. Publ. 06.06.2018 in BI № 16. [In Russian].
3. Reznitsky L.A. Obratimoye nakopleniye tepla [Reversible heat storage]. M.: MGU. 1996. [In Russian].
4. Kagan S.Z., Chechetkin A.V. Organicheskiye vysokotemperaturnyye teplonositeli i ikh primeneniye v promyshlennosti [Organic high-temperature heat carriers and their application in industry]. M.: State scientific and technical ed. chemical lit. 1951. [In Russian].
5. Bedrik B.G., Chulkov P.V., Kalashnikov S.I. Rastvoriteli i sostavy dlya ochistki mashin i oriyentiry [Solvents and compositions for cleaning machines and mechanisms]: Ref. ed. M.: Chemistry. 1989. [In Russian].
6. Kolyado A.V., Garkushin I.K., Dorokhina E.V., Moschensky Yu.V. Smesovoy rastvoritel' [Mixed solvent]. Patent of the RF № 2453588. Publ. 10.20.2011 in BI № 29. [In Russian].
7. Garkushin I.K., Lyustritskaya D.V., Agafonov I.A. Analiz, prognozirovaniye i eksperimental'noye issledovaniye ryadov dvukhkomponentnykh sistem s uchastiyem *n*-dekana i *n*-undekana [Analysis, prediction and experimental study of series of two-component systems involving *n*-decane and *n*-undecane]: Monograph. Yekaterinburg: Ural Branch of the RAS. 2008. [In Russian].
8. Trofimov E.A. Fazovyye ravnovesiya v mnogokomponentnykh komponentakh, svyazannykh s metallicheskimy rasplavami [Phase equilibria in multicomponent systems conjugated with metallic melts] // Rasplavy. 2012. № 2. P. 70–75. [In Russian].
9. Stephenson R.M., Malanowski S. Properties of organic compounds // Handbook of the Thermodynamics of Organic Compounds. Springer, Dordrecht, 1987. P. 561.
10. Christian L. Silveira, Alessandro C. Galvão, Weber S. Robazza. Modeling and parameters estimation for the solubility calculations of nicotinamide using UNIFAC and COSMO-based models // Fluid Phase Equilibria. 2021. 535. P. 112970.
11. Morozov S.A., Yakovlev I.G., Garkushin I.K. Fazovyye ravnovesiya v dvukhkomponentnoy sisteme difenil – *n*-tetrakozan [Phase equilibria in the two-component system diphenyl – *n*-tetracosane] // Zhurn. fiz. khimii. 2022. 96. № 5. P. 628–633. [In Russian].

12. Fabbie Bernardi, Alessandro C. Galvão, Pedro F. Arce. Xylitol solubility in DMF + ethylene glycol or 1,2-propyleneglycol: Measurement and modeling with PC-SAFT and CPA equations of state and UNIFAC activity coefficient model // *Fluid Phase Equilibria*. 2020. **519**. P. 112651.
13. Mohammad Saeed Afsharian, Aliakbar Paraj. Thermodynamic representation of ionic liquids phase equilibrium with PDH-ASOG and PDH-UNIFAC models // *J. Molec. Liq.* 2021. **333**. P. 115926.
14. Yakovlev I.G., Garkushin I.K., Kolyado A.V. Activity coefficients in tetrachlorethylene – n-alkane systems // *Journal physical chemistry*. 2021. **95**. № 10. P. 1474–1480. [In Russian].
15. Kazakova A.I., Yakovlev I.G., Garkushin I.K. Fazovyie ravnovesnyie sostoyaniya v dvukhkompentnoy sisteme difenil-n-nonadekan [Phase equilibrium states in the two-component system of diphenyl-n-nonadecane] // *Izv. vuzov. Khimiya i khim. tekhnologiya*. 2023. **66**. № 6. P. 46–53. [In Russian].
16. NIST Chemistry WebBook, SRD69. <https://webbook.nist.gov/> Request date 23.12.2022.
17. Reed R., Prausnitz J. Sherwood T. Properties of gases and liquids: reference book. allowance. L.: Chemistry, Leningrad. department, 1982.
18. Garkushin I.K., Kolyado A.V., Yakovlev I.G., Alenova S.M. Fazovyie ravnesiya v sochetanii s upotrebleniyem difenila, difeniloksida, n-alkanov i dikarbonovykh kislot: monografiya [Phase equilibria in systems involving diphenyl, diphenyl oxide, n-alkanes and dicarboxylic acids: monograph]. Samara: Samara State Technical University. 2017. [In Russian]
19. Kazakova A.I., Yakovlev I.G., Garkushin I.K. Issledovaniye fazovykh ravnesiy v dvukhkompentnoy sisteme difeniloksid – n-nonadekan [Study of phase equilibria in the two-component system diphenyloxide – n-nonadecane] // *Rasplavy*. 2024. № 1. P. 17–25. [In Russian]
20. Weidlich U., Gmehling J. UNIFAC model. 1. Prediction of VLE, HE, and gamma-infinity // *Ind. Eng. Chem. Res.* 1987. **26**. P. 1372–1381.
21. Vyazovkin S., Chrissafis K., Di Lorenzo M.L., Koga N., Pijolat M., Roduit B., Sbirrazzuoli N., Suñol J.J. ICTAC Kinetics Committee recommendations for collecting experimental thermal analysis data for kinetic computations // *Therm. Acta*. 2014. **590**. P. 1.
22. Hector T., Gmehling J. Present status of the modified UNIFAC model for the prediction of phase equilibria and excess enthalpies for systems with ionic liquids // *Fluid Phase Equilibria*. 2014. **371**. P. 82–92.
23. Morachevsky A.G., Smirnova N.A., Piotrovskaya E.M. and others. Termodinamicheskaya plotnost' zhidkosti [Thermodynamics of liquid-vapor equilibrium]. L.: Chemistry. 1989. [In Russian]
24. 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. **338**. P. 135–140.
25. 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. **295**. № 1. P. 93–97.
26. Constantinescu D., Gmehling J. Further development of modified UNIFAC (Dortmund): revision and extension 6 // *J. Chem. Eng. Data*. 2016. **61**. № 8. P. 2738–2748.
27. Ioffe B.V. Refraktometriya kak metod fiziko-khimicheskogo analiza sistem [Refractometry as a method of physical and chemical analysis of organic systems] // *Usp. khim.* 1960. P. 137–161. [In Russian]