

УДК 544.344.2

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПАРОЖИДКОСТНОГО РАВНОВЕСИЯ В СИСТЕМЕ 1,1-ДИХЛОРЭТАН – ХЛОРОФОРМ

Д. Д. Модурова,
Е. К. Чурина,
Т. В. Челюскина

Институт тонких химических технологий
имени М.В. Ломоносова
федерального бюджетного образовательного
учреждения высшего образования
«МИРЭА – Российский технологический
университет»
119571, Россия, Москва,
пр-т Вернадского, д. 86
Тел.: +7(926) 527-45-79
E-mail: cheluskina@mitht.ru
Тел.: +7(926) 527-45-79

С использованием современного программного комплекса «Aspen Plus® v.10.0» выполнена оценка параметров ряда моделей и проведено математическое моделирование парожидкостного равновесия при различных значениях давления в системе 1,1-дихлорэтан – хлороформ, которая является составляющей промышленной смеси производства винилхлорида по сбалансированной схеме. Впервые установлено, что при пониженном давлении исследуемая система является биазеотропной.

Ключевые слова: математическое моделирование; парожидкостное равновесие; азеотропия; биазеотропная система

MATHEMATICAL MODELING OF VAPOR-LIQUID EQUILIBRIUM IN THE 1,1-DICHLOROETHANE – CHLOROFORM SYSTEM

D. D. Modurova,
E. K. Churina,
T. V. Chelyuskina

M.V. Lomonosov Institute of Fine Chemical
Technologies,
MIREA – Russian Technological University
86, Vernadskogo av., Moscow, 119571, Russia
Tel.: +7(926) 527-45-79
E-mail: cheluskina@mitht.ru

Using the modern software package «Aspen Plus® v.10.0», the parameters of a number of models were estimated and mathematical modeling of vapor-liquid equilibrium was carried out at various pressures in the 1,1-dichloroethane - chloroform system, which is a component of an industrial mixture of vinyl chloride production according to a balanced scheme. It was established for the first time that the system under study is biazeotropic at reduced pressure.

Keywords: mathematical modeling; vapor-liquid equilibrium; azeotropy; biazeotropic system

Введение

Большинство целевых продуктов, выпускаемых в химической и нефтехимической отраслях промышленности, выделяются из смесей – природных или синтетических. Основные термодинамические ограничения на процесс ректификационного разделения различных смесей связаны с близкой летучестью компонентов, а также с наличием в системах азеотропов и сепаратрических многообразий. В связи с этим исследования фазового равновесия жидкость-пар играют важную роль в химической технологии при разработке, а также оптимизации технологических схем разделения многокомпонентных смесей.

При изучении термодинамики фазовых равновесий, в частности равновесия жидкость-пар, особое внимание привлекает явление биазеотропии (наличию на одном элементе концентрационного симплекса двух азеотропов) [1]. Отметим, что биазеотропия может возникать двумя путями [2]:

1) через стадию образования граничного тангенциального азеотропа (ГТА) [3] на каком-либо элементе концентрационного симплекса, уже содержащем один азеотроп;

2) через стадию образования внутреннего тангенциального азеотропа [4] в зеотропной составляющей системы.

Диаграмма фазового равновесия, содержащая тангенциальный азеотроп, является тонкой структурой, которая существует при определенной величине внешнего параметра [5].

В настоящее время известно 14 двухкомпонентных смесей, в которых наличие биазеотропии подтверждено экспериментальными данными. К ним относятся системы: бензол – перфторбензол [6–10]; NbCl_5 – NbF_5 и TaCl_5 – TaF_5 [11]; диэтиламин – метанол [12, 13]; пропионовая кислота – бутилпропионат [14]; масляная кислота – бутилбутират [15]; валериановая кислота – бутилвалерат [16]; капроновая кислота – бутилкапроат [16]; гептановая кислота – бутилгептанат [16]; изобутилацетат – уксусная кислота [17]; аммиак – 1,1,1,2,2-пentaфторэтан [18]; 1,1,1,2,3,4,4,5,5,5-декафторпентан – тетрагидрофуран [19, 20]; вода – *N*-метилэтилендиамин [21]; Е-1,1,1,4,4,4-

гексафтор-2-бутен – этиленоксид [22]. С помощью математического моделирования в определенном интервале давлений обнаружена биазеотропия в системе метилэтилкетон – перфторбензол [23], а также в системе метил-*трет*-бутиловый эфир – вода, содержащей одновременно гомогенный и гетерогенный азеотропы [24]. Таким образом, представляется актуальным выявление и других биазеотропных систем, особенно в промышленно значимых смесях.

На одной из стадий процесса получения винилхлорида сбалансированным по хлору методом встречается смесь, содержащая целевой продукт – 1,2-дихлорэтан и в качестве примесей – хлороформ, тетрагидрид углерода, 1,1-дихлорэтан и др. [25]. Для оценки возможности отделения 1,2-дихлорэтана от примесей на этой стадии необходимо обладать информацией о фазовом равновесии в указанной системе и в ее составляющих.

Целью настоящего исследования является математическое моделирование парожидкостного равновесия (ПЖР) при различных значениях давления в системе 1,1-дихлорэтан (1) – хлороформ (2), которая входит в состав указанной промышленной смеси.

Математическое моделирование парожидкостного равновесия в системе 1,1-дихлорэтан – хлороформ

В литературе приведены полные экспериментальные данные о ПЖР в системе 1,1-дихлорэтан – хлороформ при давлениях 101,32 [26] и 33,33; 53,33; 73,33 кПа [27]. При этом в работе [26] представлены диаграммы, из которых следует, что при атмосферном давлении система 1,1-дихлорэтан – хлороформ не содержит азеотропов, т.е. является зеотропной. Авторы [27] получили экспериментальные данные о ПЖР в исследуемой системе при давлениях 33,33; 53,33 и 73,33 кПа, но не провели их обработку (не построили диаграммы фазового равновесия, не определили характеристики азеотропа). Вследствие этого они сделали ошибочный вывод о практически идеальном фазовом поведении исследуемой системы при указанных давлениях, однако приведенные в статье

экспериментальные данные противоречат такому выводу. Нами была проведена собственная обработка экспериментальных данных [26, 27], а именно: построены зависимости температур кипения (T) от составов паровой (y) и жидкой (x) фаз, а также коэффициентов распределения компонентов (K) между жидкой и паровой фазами от состава жидкости. На основе анализа этих зависимостей определено, что при давлениях 73,33 и 101,32 кПа система 1,1-дихлорэтан (1) – хлороформ (2) является эотропной; а при давлениях 33,33 и 53,33 кПа она содержит положительный азеотроп со следующими характеристиками: при давлении 33,33 кПа $x_1^{Az} = 0,9000$ мол.д., $T_{кип} = 28,35$ °С; а при давлении 53,33 кПа $x_1^{Az} = 0,9120$ мол.д. и $T_{кип} = 40,10$ °С. При этом на диаграмме $K_1, K_2 = f(x_p)$, соответствующей давлению 33,33 кПа, в области концентраций, обогащенной хлороформом, имеется максимум. Основываясь на теории тангенциальной азеотропии для бинарных систем [28], мы спрогнозировали наличие второго, отрицательного, азеотропа в исследуемой системе при давлении ниже 33,33 кПа.

Для подтверждения сделанного нами предположения был проведен вычислительный эксперимент по моделированию ПЖР в рассматриваемой системе при различных

давлениях с использованием современного программного комплекса «Aspen Plus® v.10.0».

На первом этапе исследования была выбрана математическая модель, позволяющая качественно и количественно воспроизвести все термодинамические особенности фазового поведения указанной системы. Были рассмотрены уравнения локальных составов (NRTL, Wilson и UNIQUAC), которые широко используются при описании ПЖР систем различной физико-химической природы. Для оценки параметров этих уравнений использованы экспериментальные данные при давлениях 33,33; 53,33; 73,33 и 101,32 кПа, представленные в работах [26, 27], с включением определенных нами характеристик положительного азеотропа при давлениях 33,33 и 53,33 кПа. В результате для каждого из рассмотренных уравнений получен универсальный набор параметров, позволяющий описать фазовое равновесие жидкость-пар и характеристики положительного азеотропа в системе 1,1-дихлорэтан – хлороформ в диапазоне давлений от 33,33 до 101,32 кПа с минимальными средними относительными ошибками (таблица 1).

Сравнение полученных результатов (см. таблицу 1) позволяет сделать вывод, что все рассмотренные нами математические модели

Таблица 1

Средние относительные ошибки описания ПЖР и характеристик азеотропа в системе 1,1-дихлорэтан – хлороформ

Уравнение	Давление, кПа							
	33,33		53,33		73,33		101,32	
	$\Delta y, \%$	$\Delta T, \%$	$\Delta y, \%$	$\Delta T, \%$	$\Delta y, \%$	$\Delta T, \%$	$\Delta y, \%$	$\Delta T, \%$
при описании парожидкостного равновесия								
NRTL	2,19	1,53	3,19	1,19	2,80	0,62	3,91	0,40
Wilson	2,70	1,68	2,82	1,16	2,64	0,59	6,26	0,40
UNIQUAC	2,26	1,51	2,98	1,18	2,68	0,62	6,16	0,43
при оценке характеристик азеотропа								
NRTL	1,48	4,51	3,19	2,74	система эотропна			
Wilson	2,57	4,55	3,92	2,79	система эотропна			
UNIQUAC	2,18	4,78	3,29	2,77	система эотропна			

описывают фазовое равновесие жидкость-пар в исследуемой системе при давлениях 33,33; 53,33 и 73,33 кПа адекватно (ошибки описания $< 5\%$). Поскольку точность описания ПЖР при атмосферном давлении, а также характеристик азеотропа уравнением NRTL выше, то для дальнейших исследований нами выбрано это уравнение с параметрами:

$$A_{12} = -8,31198; A_{21} = 2,07340; B_{12} = 3200,71; B_{21} = -1018,16; C_{12} = 0,3.$$

На следующем этапе нами проведен анализ преобразований фазовых диаграмм жидкость-пар рассматриваемой системы при изменении давления (*рис. 1*).

В результате вычислительного эксперимента установлено, что в системе 1,1-дихлорэтан – хлороформ, зеотропной при давлениях 101,32 и 73,33 кПа (*рис. 1а, 1б*), положительный азеотроп появляется через стадию образования граничного тангенци-

ального азеотропа в точке легкокипящего компонента (1,1-дихлорэтана) при давлении 72,82 кПа (*рис. 1в*). При понижении давления этот азеотроп обогащается хлороформом (*рис. 1г, 1д*). Отрицательный азеотроп появляется через стадию образования граничного тангенциального азеотропа в точке тяжелокипящего компонента (хлороформа) при давлении 31,64 кПа (*рис. 1е*). При дальнейшем понижении давления исследуемая система становится биазеотропной (*рис. 1ж*). В *таблице 2* представлены характеристики азеотропов в системе 1,1-дихлорэтан – хлороформ, полученные нами в результате вычислительного эксперимента.

При понижении давления положительный азеотроп обедняется, а отрицательный обогащается 1,1-дихлорэтаном, что находится в полном соответствии со вторым законом Вревского и подтверждается соотношением

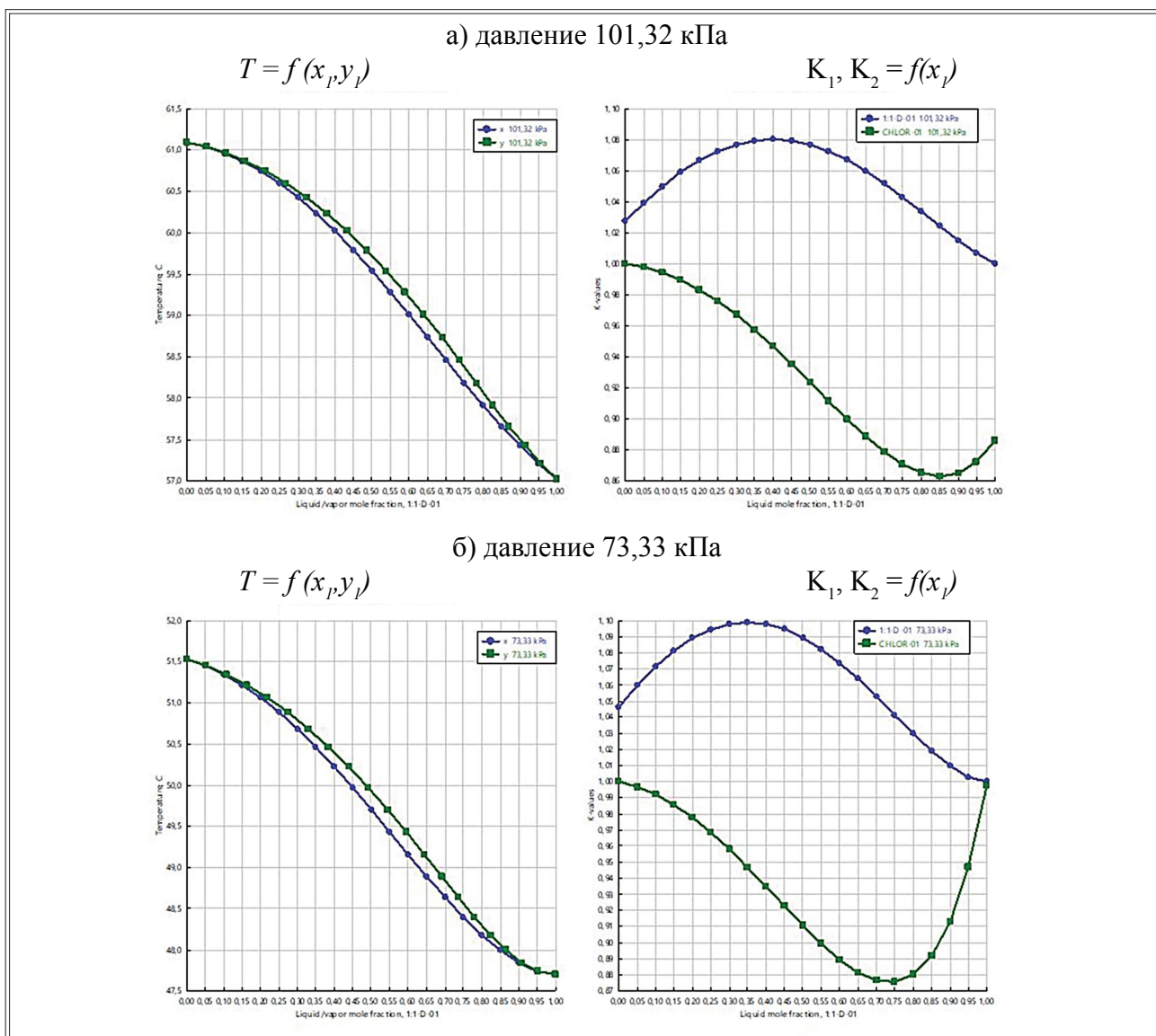
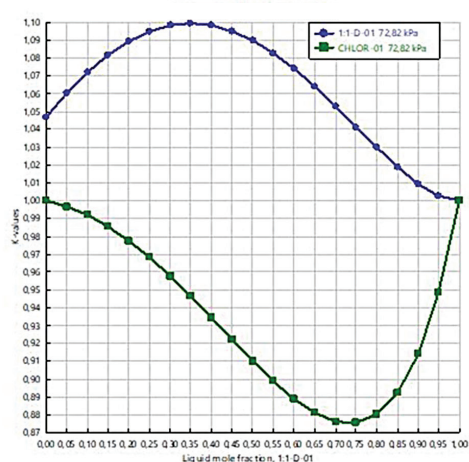
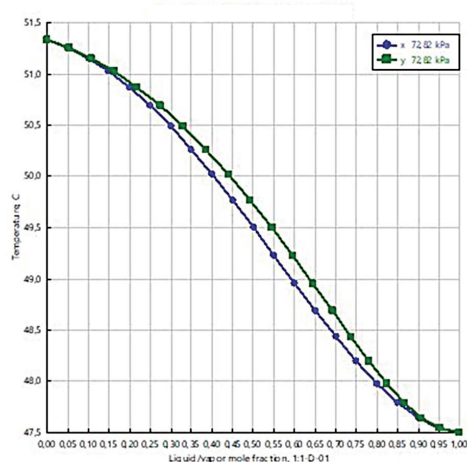


Рис. 1

в) давление 72,82 кПа

$$T = f(x_p, y_p)$$

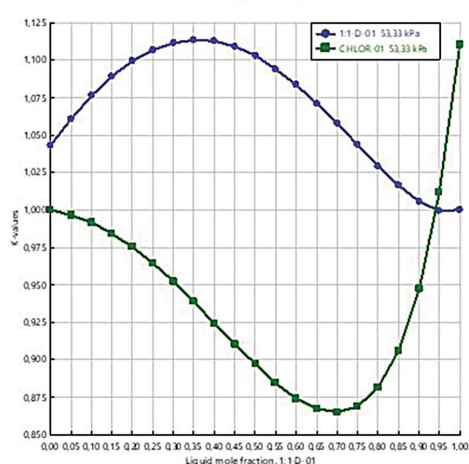
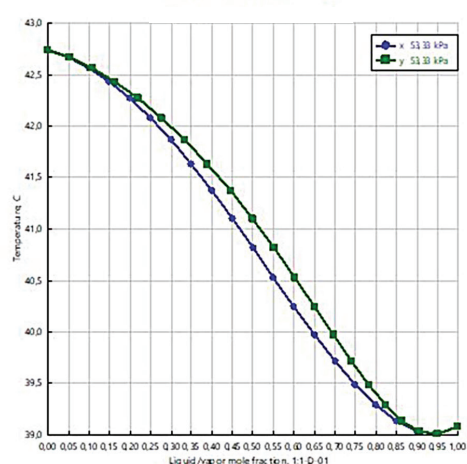
$$K_1, K_2 = f(x_p)$$



г) давление 53,33 кПа

$$T = f(x_p, y_p)$$

$$K_1, K_2 = f(x_p)$$



д) давление 33,33 кПа

$$T = f(x_p, y_p)$$

$$K_1, K_2 = f(x_p)$$

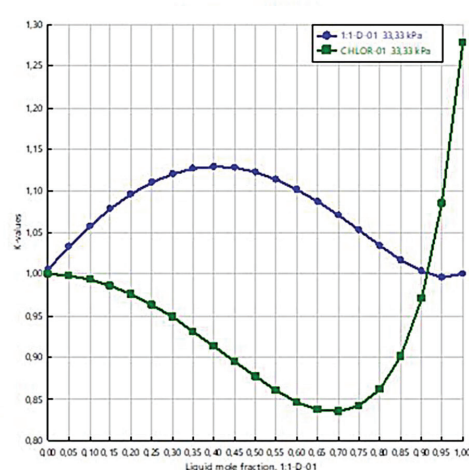
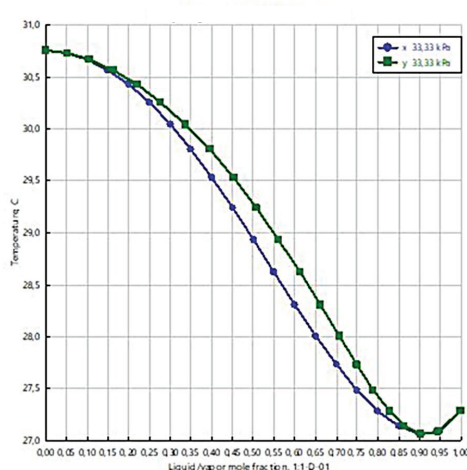


Рис. 1. Продолжение

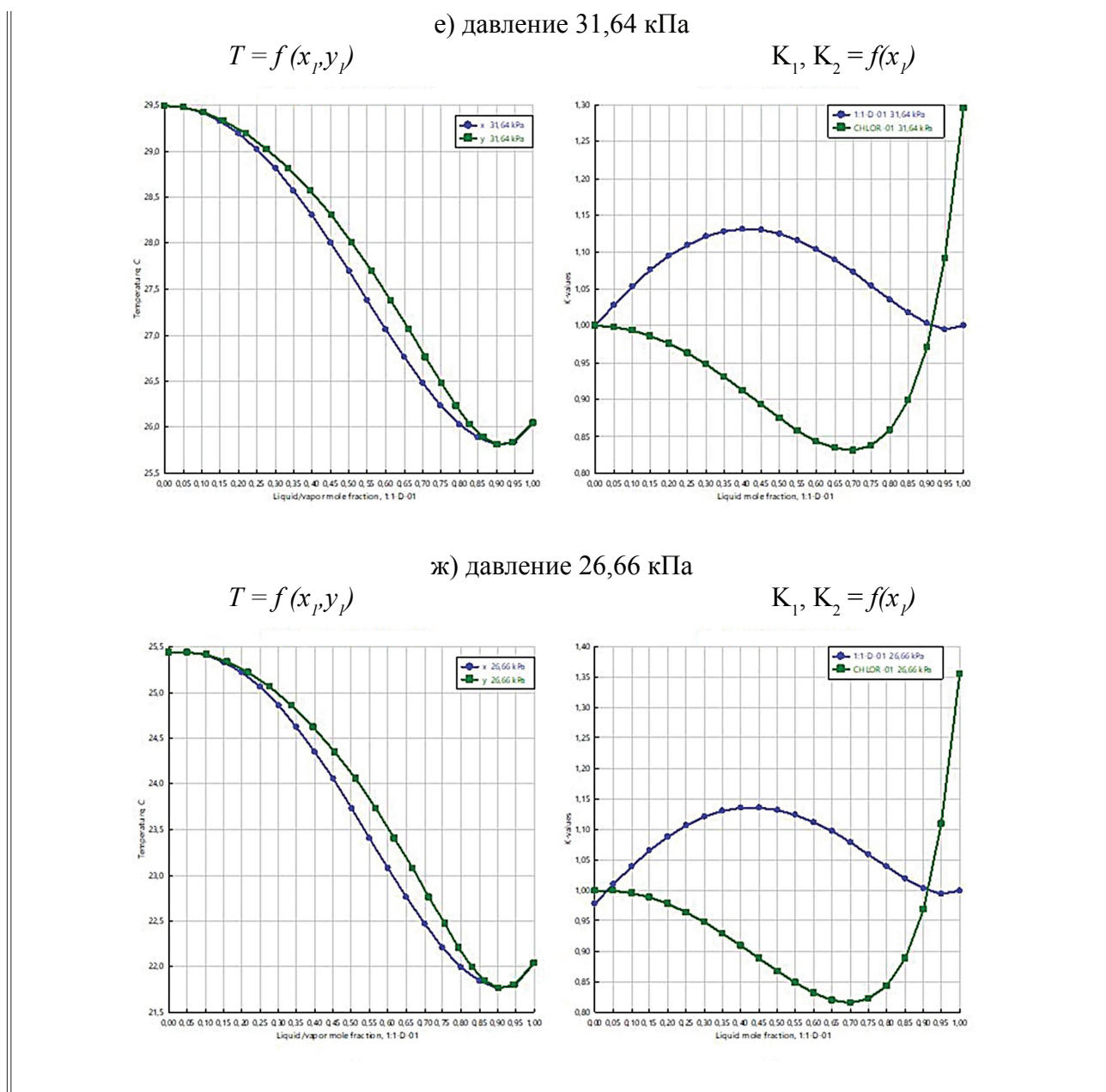


Рис. 1. Окончание
Диаграммы парожидкостного равновесия системы
1,1-дихлорэтан (1) – хлороформ (2) при различных давлениях

Таблица 2
Расчетные характеристики азеотропов в системе 1,1-дихлорэтан (1) – хлороформ (2)

Давление, кПа	Положительный азеотроп		Отрицательный азеотроп	
	$T_{кип}, ^\circ\text{C}$	$x_i^{Az}, \text{мол.д.}$	$T_{кип}, ^\circ\text{C}$	$x_i^{Az}, \text{мол.д.}$
101,32	система зеотропна			
73,33	система зеотропна			
72,82	47,50	1,0000 (ГТА)	—	—
53,33	39,00	0,9411	—	—
33,33	27,07	0,9133	—	—
31,64	25,82	0,9125	29,49	0,0000 (ГТА)
26,66	21,77	0,9114	25,44	0,0332

теплот испарения компонентов при 25 °С [29]: $L_1 = 7,30$ ккал/моль, $L_2 = 7,02$ ккал/моль, т.е. $L_1 > L_2$.

Заключение

Проведен вычислительный эксперимент по моделированию фазового равновесия жидкость-пар в диапазоне давлений от 26,66 до 101,32 кПа в системе 1,1-дихлорэтан – хлороформ, которая является составляющей промышленной смеси производства винилхлорида по сбалансированной схеме.

Впервые установлено наличие биазеотропии при пониженном давлении в указанной системе. Таким образом, расширен ряд биазеотропных бинарных смесей, известных в настоящее время. ■

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 18-03-01224-а).

Библиография

1. Комарова Л.Ф., Серафимов Л.А., Гарбер Ю.Н. Классификация диаграмм трехкомпонентных смесей, включающих биазеотропные составляющие // Журн. физ. хим. 1974. Т. 48. N 6. С. 1391-1393.
2. Челюскина Т.В. Теоретические основы ректификационного разделения биазеотропных смесей: дис. ... докт. техн. наук. М.: МИТХТ, 2011. 196 с.
3. Жаров В.Т., Серафимов Л.А. Физико-химические основы дистилляции и ректификации. Л.: Химия, 1975. 240 с.
4. Серафимов Л.А., Челюскина Т.В., Якушев Р.А. Термодинамико-топологический анализ образования внутренних тангенциальных азеотропов в бинарных двухфазных системах // Тонкие химические технологии. 2015. Т. 10. N 4. С. 41-48.
5. Серафимов Л.А. Термодинамико-топологический анализ диаграмм гетерогенного равновесия многокомпонентных смесей // Журнал физической химии. 2002. Т. 76. N 8. С. 1351-1365.
6. Gaw W.J., Swinton F.L. Occurrence of a double azeotrope in the binary system hexafluorobenzene + benzene // Nature. 1966. V. 212. P. 238-284.
7. Gaw W.J., Swinton F.L. Thermodynamic properties of binary systems containing hexafluorobenzene. Part. 4. – Excess Gibbs free energies of the three system hexafluorobenzene + benzene, toluene and *p*-xylene // Trans. Faraday Soc. 1968. V. 64. N 8. P. 2023-2034.
8. Коган И.В., Морачевский А.Г. Равновесие жидкость-пар в системе перфторбензол – бензол (образование двух азеотропов) // Журнал прикладной химии. 1972. Т. 45. N 8. С. 1888-1890.
9. Chinikamala A., Houth G.N., Taylor Z.L. Vapor-Liquid equilibria of binary system containing selected hydrocarbons with perfluorobenzene // J. Chem. Eng. Data. 1973. V. 18. N 3. P. 322-325.
10. Aucejo A., Monton J.B., Munoz R., Wisniak J. Double azeotropy in the benzene + hexafluorobenzene system // J. Chem. Eng. Data. 1996. V. 41. N 1. P. 21-24.
11. Нисельсон Л.А., Третьякова К.В., Тюрин В.И. Равновесие кристаллы-жидкость и жидкость-пар в системах NbCl_5 - NbF_5 и TaCl_5 - TaF_5 // Журнал неорганической химии. 1973. Т. 18. N 11. С. 3063-3067.
12. Srivastava R., Smith B.D. Total-pressure vapor-liquid equilibrium data for binary system of diethyl amine with acetone, acetonitrile and methanol // J. Chem. Eng. Data. 1985. V. 30. N 3. P. 308-313.
13. Hiaki T., Saida K., Ishihara T., Sato T., Matsumoto M., Okada M. Measurement of vapor-liquid equilibria for diethyl amine + methanol system represented double azeotropy on elevated pressure // MATEC Web of Conf. 2013. Vol. 3.
14. Кушнер Т.М., Шутова Г.В., Раева В.М., Серафимов Л.А. Исследование биазеотропии в системе пропионовая кислота – бутилпропионат // Журнал физической химии. 1992. Т. 66. N 3. С. 832-836.
15. Кушнер Т.М., Шутова Г.В., Раева В.М., Серафимов Л.А. Исследование биазеотропии в системе масляная кислота – бутилбутират // Журнал общей химии. 1993. Т. 63. N 1. С. 171-176.
16. Шутова Г.В. Физико-химические закономерности биазеотропии в бинарных системах: дис. ... канд. техн. наук. М.: МИТХТ, 1992. 193 с.
17. Burguet M.C., Monton J.B., Munoz R., Wisniak J., Segura H. Polyazeotropy in associating systems: the 2-methylpropyl ethanoate + ethanoic acid system // J. Chem. Eng. Data. 1996. V. 41. N 5. P. 1191-1195.
18. Chai Kao C.-P., Paulaitis M.E., Yokozeki A. Double azeotropy in binary mixtures of NH_3 and CHF_2CF_3 // Fluid Phase Equilibria. 1997. V. 127. N 1. P. 191-203.
19. Chai Kao C.-P., Miller R.N., Sturgis J.F. Double azeotropy in binary mixtures 1,1,1,2,3,4,4,5,5,5-decafluoropentane + tetrahydrofuran // J. Chem. Eng. Data. 2001. V. 46. N 2. P. 229-233.
20. Loras S.; Aucejo A.; Monton J.B.; Wisniak J.; Segura H. J. Polyazeotropic behavior in the binary system 1,1,1,2,3,4,4,5,5,5-decafluoropentane + oxolane // Chem. Eng. Data. 2001. V. 46. N 6. P. 1351-1356.

21. Olson J.D. Thermodynamics of hydrogen-bonding mixtures 4: G^E , H^E , S^E and C_p^E and possible double azeotropy of water + *N*-methyl ethylene diamine // *Fluid Phase Equilibria*. 2001. V. 185. P. 209-218.
22. Patent WO2011106652, A61L2/18. Azeotropic and azeotrope-like composition of E-1,1,1,4,4,4-hexafluoro-2-butene and ethylene oxide and uses thereof / Robin M.L., Miller R.N.; appl. 2010-02-25; publ. 2011-09-01.
23. Chelyuskina T.V., Perenlei A. The research of vapor-liquid equilibrium at different pressures and revelation of biazeotropy in the system methyl ethyl ketone – perfluorobenzene // XIX International Conference on Chemical Thermodynamic in Russia. Moscow. 24-28 June, 2013. Abstracts. P. 217.
24. Серафимов Л.А., Челюскина Т.В., Шаронова Е.А. Биазеотропия в трехфазных системах // Вестник МИТХТ. 2010. Т. 5. N 5. С. 52-57.
25. Флид М.Р., Тререп Ю.А. Винилхлорид: химия и технология. В 2-х кн. Кн. 1. М.: Калвис, 2008. 584 с.
26. Каплан С.И., Монахова З.Д. Равновесие в растворах. IV. Температура кипения при атмосферном давлении и состав пара бинарных смесей, состоящих из хлоридов метана и этана // Журнал общей химии. 1937. Т. 7. С. 2499-2512.
27. Gölles F., Wolfbauer O., Still F. Dampf - flüssigkeits - gleichgewichte und stoffwerte des systems 1,1-dichloräthan - chloroform - 1,2-dichloräthan // Monatshefte für Chemie. 1975. V. 106. P. 1437-1447.
28. Серафимов Л.А. Тангенциальная азеотропия. II. Бинарные смеси // Сб. трудов «Физико-химические основы ректификации». М.: МИТХТ. 1970. С. 48-55.
29. Никольский Б.П., Григоров О.Н., Позин М.Е. Справочник химика. Л.: Химия, 1966. Т. 1. 1071с.

References

1. Komarova L. F., Serafimov L. A., Garber Yu. N. Classification of diagrams of three-component mixtures including biazeotropic components // *Russ. J. Phys. Chem.* 1974. V. 48. N 6. P. 1391-1393.
2. Chelyuskina T.V. Theoretical foundations of distillation separation of biazeotropic mixtures: dis. Doc. Sc. (Tech.). M.: MITHT, 2011. 196 p.
3. Zharov V.T., Serafimov L.A. Physico-chemical fundamentals of distillation and rectification. L: Chemistry, 1975. 240 p.
4. Serafimov L.A., Chelyuskina T.V., Yakushev R.A. Thermodynamic-topological analysis of the formation of internal tangential azeotropes in binary two-phase systems // *Fine Chemical Technologies*. 2015. V. 10. N. 4. P. 41-48.
5. Serafimov L.A. Thermodynamic-topological analysis of heterogeneous equilibrium diagrams of multicomponent mixtures // *Russ. J. Phys. Chem.* 2002. V. 76. N 8. P. 1351-1365.
6. Gaw W.J., Swinton F.L. Occurrence of a double azeotrope in the binary system hexafluorobenzene + benzene // *Nature*. 1966. V. 212. P. 238–284.
7. Gaw W.J., Swinton F.L. Thermodynamic properties of binary systems containing hexafluorobenzene. Part. 4. – Excess Gibbs free energies of the three system hexafluorobenzene + benzene, toluene and *p*-xylene // *Trans. Faraday Soc.* 1968. V. 64. N 8. P. 2023–2034.
8. Kogan I.V., Morachevsky A.G. Liquid–vapor equilibrium in the perfluorobenzene – benzene system (formation of two azeotropes) // *Journal of applied chemistry*. 1972. V. 45. N. 8. P. 1888-1890.
9. Chinikamala A., Houth G.N., Taylor Z.L. Vapor-liquid equilibria of binary system containing selected hydrocarbons with perfluorobenzene // *J. Chem. Eng. Data*. 1973. V. 18. N 3. P. 322–325.
10. Aucejo A., Monton J.B., Munoz R., Wisniak J. Double azeotropy in the benzene + hexafluorobenzene system // *J. Chem. Eng. Data*. 1996. V. 41. N 1. P. 21–24.
11. Niselson L. A., Tretyakova K. V., Tyurin V. I. Crystal– liquid and liquid–vapor equilibrium in NbCl_5 - NbF_5 и TaCl_5 - TaF_5 systems // *J. Inorganic Chem.* 1973. V. 18. N.11. P. 3063-3067.
12. Srivastava R., Smith B.D. Total-pressure vapor-liquid equilibrium data for binary system of diethyl amine with acetone, acetonitrile and methanol // *J. Chem. Eng. Data*. 1985. V. 30. N 3. P. 308–313.
13. Hiaki T., Saida K., Ishihara T., Sato T., Matsumoto M., Okada M. Measurement of vapor-liquid equilibria for diethyl amine + methanol system represented double azeotropy on elevated pressure // *MATEC Web of Conf.* 2013. Vol. 14.
14. Kushner T. M., Shutova G. V., Raeva V. M., Serafimov L. A. Investigation of biazeotropy in the propionic acid – butylpropionate system // *J. Phys. Chem.* . 1992. V. 66. N. 3. P. 832-836.
15. Kushner T. M., Shutova G. V., Raeva V. M., Serafimov L. A. Investigation of biazeotropy in the butyric acid – butylbutyrate system // *J. General Chem.* 1993. V. 63. N. 1. P. 171-176.
16. Shutova G. V. Physico-chemical regularities of biazeotropy in binary systems: dis. Cand. Sc. (Tech.). M.: MITHT, 1992. 193 p.
17. Burguet M.C., Monton J.B., Munoz R., Wisniak J., Segura H. Polyazeotropy in associating systems: the 2-methylpropyl ethanoate + ethanoic acid system // *J. Chem. Eng. Data*. 1996. V. 41. N 5. P. 1191–1195.
18. Chai Kao C.-P., Paulaitis M.E., Yokozeki A. Double azeotropy in binary mixtures of NH_3 and CHF_2CF_3 // *Fluid Phase Equilibria*. 1997. V. 127. N 1. P. 191–203.
19. Chai Kao C.-P., Miller R.N., Sturgis J.F. double azeotropy in binary mixtures 1,1,1,2,3,4,4,5,5,5-decafluoropentane + tetrahydrofuran // *J. Chem. Eng. Data*. 2001. V. 46. N 2. P. 229–233.
20. Loras S.; Aucejo A.; Monton J.B.; Wisniak J.; Segura H. J. Polyazeotropic behavior in the binary system 1,1,1,2,3,4,4,5,5,5-decafluoropentane + oxolane // *Chem. Eng. Data*. 2001. V. 46. N 6. P. 1351-1356.
21. Olson J.D. Thermodynamics of hydrogen-bonding mixtures 4: G^E , H^E , S^E and C_p^E and possible double azeotropy of water + *N*-methyl ethylene diamine // *Fluid Phase Equilibria*. 2001. V. 185. P. 209-218.

22. Patent WO2011106652, A61L2/18. Azeotropic and azeotrope-like composition of E-1,1,1,4,4,4-hexafluoro-2-butene and ethylene oxide and uses thereof / Robin M.L., Miller R.N.; appl. 2010-02-25; publ. 2011-09-01.
23. Chelyuskina T.V., Perenlei A. The research of vapor-liquid equilibrium at different pressures and revelation of biazeotropy in the system methyl ethyl ketone – perfluorobenzene // XIX International Conference on Chemical Thermodynamic in Russia. Moscow. 24-28 June, 2013. Abstracts.P. 217.
24. Serafimov L.A., Chelyuskina T.V., Sharonova E.A. Biazeotropy in three-phase systems // Vestnik MITHT. 2010. V. 5. N 5. P. 52-57.
25. Flid M.R., Treger Yu.A. Vinyl Chloride: chemistry and technology. In 2 books. Book 1. Moscow: Kalvis, 2008. 584 p.
26. Kaplan S.I., Monakhova Z.D. Equilibrium in solutions. IV: Boiling point at atmospheric pressure and composition of vapor of binary mixtures consisting of chlorides of methane and ethane // J. General Chem. 1937. V. 7. P. 2499-2512.
27. Gölles F., Wolfbauer O. und Still F. Dampf - flüssigkeits - gleichgewichte und stoffwerte des systems 1,1-dichloräthan - chloroform - 1,2-dichloräthan // Monatshefte für Chemie. 1975. V. 106. P. 1437-1447.
28. Serafimov L.A. Tangential azeotropy. II. Binary mixtures // Collection of works "Physical and chemical bases of rectification". M.: MITHT. 1970. P. 48-55.
29. Nikolsky B.P., Grigorov O.N., Posin M.E. Handbook of chemist, L.: Chemistry. 1966. V. 1. 1071 p.

Статья поступила в редакцию 12.08.2020, одобрена после рецензирования 02.12.2020, принята к публикации 15.12.2020.

Сведения об авторах:

Модурова Дарья Дмитриевна,

аспирант кафедры Химии и технологии основного органического синтеза,
Институт тонких химических технологий имени М.В. Ломоносова федерального бюджетного
образовательного учреждения высшего образования «МИРЭА – Российский технологический университет»
(РТУ – МИРЭА),
119571, г. Москва, Проспект Вернадского, д. 86

Чурина Екатерина Кирилловна,

студент кафедры Химии и технологии основного органического синтеза,
Институт тонких химических технологий имени М.В. Ломоносова федерального бюджетного
образовательного учреждения высшего образования «МИРЭА – Российский технологический университет»,
119571, г. Москва, Проспект Вернадского, д. 86

Челюскина Татьяна Владимировна*,

доктор технических наук, профессор кафедры Химии и технологии основного органического синтеза,
Институт тонких химических технологий имени М.В. Ломоносова федерального бюджетного
образовательного учреждения высшего образования «МИРЭА – Российский технологический университет»,
119571, г. Москва, Проспект Вернадского, д. 86
e-mail: cheluskina@mitht.ru, тел.: +7(926) 527-45-79, лицо, осуществляющее переписку

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов

About the authors:

Daria D. Modurova,

Post-graduate Student at the Department of Chemistry and Technology of Basic Organic Synthesis,
M.V. Lomonosov Institute of Fine Chemical Technologies, Federal State Budgetary Educational Institution
of Higher Education «MIREA – Russian Technological University»,
119571, Russia, Moscow, Vernadskogo av., 86

Ekaterina K. Churina,

Student at the Department of Chemistry and Technology of Basic Organic Synthesis,
M.V. Lomonosov Institute of Fine Chemical Technologies, Federal State Budgetary Educational Institution
of Higher Education «MIREA – Russian Technological University»,
119571, Russia, Moscow, Vernadskogo av., 86

Tatiana V. Chelyuskina*,

Doc. Sc. (Tech.), Professor at the Department of Chemistry and Technology of Basic Organic Synthesis,
M.V. Lomonosov Institute of Fine Chemical Technologies, Federal State Budgetary Educational Institution
of Higher Education «MIREA – Russian Technological University»,
119571, Russia, Moscow, Vernadskogo av., 86,
e-mail: cheluskina@mitht.ru; tel.: +7(926) 527-45-79, author to whom correspondence may be addressed

The authors declare no conflicts of interests

Для цитирования:

Модурова Д.Д., Чурина Е.К., Челюскина Т.В. Математическое моделирование парожидкостного равновесия в системе 1,1-дихлорэтан – хлороформ // Химия и технология органических веществ. 2020. N 4 (16). С. 67–76.

For citation:

Modurova D.D., Churina E.K., Chelyuskina T.V. Mathematical modeling of vapor-liquid equilibrium in the 1,1-dichloroethane - chloroform system // Chemistry and Technology of Organic Substances. 2020. N 4 (16). P. 67–76 (in Rus.).