

Моделирование фазового равновесия жидкость-жидкость в системах триацилглицериды – жирная кислота – этанол

© **Пермякова Ирина Александровна, Казаков⁺ Дмитрий Александрович, Вольхин* Владимир Васильевич, Воронина Наталья Сергеевна и Зоричев Иван Юрьевич**

*Кафедра химии и биотехнологии. Пермский национальный исследовательский политехнический университет. Комсомольский пр., 29. г. Пермь, 614990. Пермский край. Россия.
Тел./Факс: (342) 239-15-11. E-mail: kazakovbiotech@mail.ru*

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: моделирование, фазовые равновесия, системы жидкость-жидкость, модель UNIFAC, триацилглицериды, этанол, олеиновая кислота, стеариновая кислота, лауриновая кислота.

Аннотация

Цель работы – определить возможность применения модели UNIFAC для анализа фазовых равновесий в системах TAG – CarbA – EtOH, где TAG – триацилглицериды (подсолнечное масло), CarbA – жирные карбоновые кислоты – олеиновая (OIA), стеариновая (StA), лауриновая (LaurA), EtOH – этанол при температурах от 30 до 70 °С, что связано с утилизацией отходов растительных масел, содержащих свободные жирные кислоты. В работе использована модель UNIFAC с изменёнными параметрами группового взаимодействия (a_{nm} , a_{nn}). Для исследованных систем выполнены как расчёты, так и эксперименты, что позволило построить фазовые диаграммы трёхкомпонентных систем, определить состав точек обратимого перехода систем из гетерогенного состояния в гомогенное, рассчитать по этим данным значения остаточной дисперсии и оценить степень соответствия расчётных данных экспериментальным. Установлено, что для систем с OIA применение модели UNIFAC с изменёнными параметрами группового взаимодействия приводит к расчётным результатам, близким экспериментальным, но даёт существенные отклонения для систем с LaurA и, особенно, с StA. За счёт достаточно высоких $T_{пл}$ эти кислоты повышают вероятность образования в системах твёрдых фаз с увеличением общего числа фаз в них до трёх.