

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

© **Пермякова Ирина Александровна, Казаков<sup>+</sup> 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; <sup>+</sup>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.