

УДК: 544.01:544.2:543.572.3

## ИССЛЕДОВАНИЕ ФАЗОВЫХ РАВНОВЕСИЙ В ДВУХКОМПОНЕНТНОЙ СИСТЕМЕ ДИФЕНИЛОКСИД – *n*-НОНАДЕКАН

© 2024 г. А. И. Казакова<sup>а,\*</sup>, И. Г. Яковлев<sup>а</sup>, И. К. Гаркушин<sup>а</sup>

<sup>а</sup> Самарский государственный технический университет, Самара, Россия

\* e-mail: anna.kazakova96@yandex.ru

Поступила в редакцию 17.07.2023 г.

После доработки 27.08.2023 г.

Принята к публикации 16.09.2023 г.

Методами Шредера, UNIFAC и UNIFAC Dortmund рассчитана диаграмма плавкости системы дифенилоксид – *n*-нонадекан 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 отмечено два эндозффекта, отвечающих полиморфному переходу *n*-нонадекана и плавлению эвтектики. Приведено 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, дифенилоксид, *n*-нонадекан, фазовое равновесное состояние

DOI: 10.31857/S0235010624010027

### 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 дифенилоксид, хлорпроизводные *n*-алканов и алкенов [7]. Это позволит повысить эффективность и надежность производственных процессов в различных отраслях промышленности.

Цель данной работы — теоретический расчет и экспериментальное изучение фазовых равновесных состояний в двухкомпонентной системе дифенилоксид — *n*-нонадекан и определение некоторых свойств эвтектической смеси.

Существуют различные методы расчета и прогнозирования. Методы Шредера, UNIFAC и UNIFAC Dortmund широко применяют при планировании эксперимента и оценивании фазового равновесия в органических системах. Это позволяет получить достоверные данные о составе и свойствах веществ и способствует более эффективному проектированию и оптимизации технологических процессов.

## МЕТОДИКА

Свойства компонентов исследуемой системы приведены в табл. 1.

При планировании эксперимента по исследованию фазовых диаграмм двухкомпонентных систем для уменьшения объема экспериментальных данных проводится расчет кривых ликвидуса и состава эвтектики разными методами: Шредера [12, 13], UNIFAC и UNIFAC Dortmund [13–17].

Экспериментальные исследования осуществляли с использованием дифференциального сканирующего калориметра теплового потока (микрокалориметр DSC-500). Установка и методика эксперимента аналогичны описанным в работе [18] при исследовании двойной системы дифенил — *n*-нонадекан.

## ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ

Различие температур плавления и строения молекул дифенилоксида и *n*-нонадекана позволяет предположить, что система дифенилоксид — *n*-нонадекан, аналогично системе дифенил — *n*-нонадекан, будет эвтектической, с полной взаимной растворимостью компонентов в жидком состоянии и полной нерастворимостью — в твердом.

При расчетах в методе Шредера раствор считают идеальным с коэффициентами активности компонентов, равными единице. Данное уравнение позволяет описать кривые ликвидуса как первого, так и второго компонентов. Эти кривые пересекаются в точке эвтектики, для нахождения которой необходимо решить систему уравнений (1) относительно  $x_i$  и  $T$ :

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

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

**Таблица 1.** Свойства индивидуальных веществ

| Вещество                        | Температура фазового перехода, °С |                     | Энтальпия плавления, кДж/моль | Температура кипения, °С | Молярная масса, г/моль |
|---------------------------------|-----------------------------------|---------------------|-------------------------------|-------------------------|------------------------|
|                                 | Плавления                         | Полиморфный переход |                               |                         |                        |
| Дифенилоксид<br>(ч.д.а.)        | 27 [9]                            | –                   | 17.2 [9]                      | 259 [9]                 | 170.21 [9]             |
| <i>n</i> -нонадекан<br>(ч.д.а.) | 31.5 [9]                          | 18.7 [10]           | 42.7 [9]                      | 330 [11]                | 268.52 [9]             |

Построение диаграммы плавкости на основании решения системы уравнений (1) приведено в работах [12, 18].

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

$$\ln(x_i \gamma_i) = \frac{\Delta_{\text{пл}} H_i (T_e - T_{\text{пл},i})}{RT_{\text{пл},i} \Delta T_e}, \quad (2)$$

где  $\gamma_i$  — коэффициент активности компонента  $i$ .

Теоретически коэффициент активности компонента определяли с помощью методов UNIFAC [19, 20] и UNIFAC Dortmund [21]. Оба этих метода основаны на уравнении

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

где  $\gamma_i^C$  — комбинаторная часть коэффициента активности,  $\gamma_i^R$  — остаточная часть коэффициента активности.

Методика расчета комбинаторной  $\gamma_i^C$  и остаточной частей  $\gamma_i^R$  коэффициента активности приведена в работах [19–25]. Отличие методов — разные принципы расчета параметров группового взаимодействия и разные параметры групп [19–24]. Соединения представляют как группы атомов, на которые они разбиваются при расчете (табл. 2).

Расчетные значения координат эвтектики методами Шредера, UNIFAC и UNIFAC Dortmund приведены в табл. 3.

## ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

С помощью микрокалориметра DSC-500 экспериментально исследована смесь  $x$ , близкая по составу к расчетной эвтектической: 69 мол. % дифенилоксида и 31 мол. % *n*-нонадекана. На дифференциальной кривой  $\Delta T$  отмечено три термоэффекта — при 18.53, 19.43 и 21.76 °С (рис. 1). Поэтому для построения фазовой диаграммы системы дифенилоксид — *n*-нонадекан дополнительно исследованы восемь смесей компонентов.

На дифференциальной кривой нагревания эвтектической смеси двухкомпонентной системы фиксируется наложение двух эндоэффектов — полиморфного перехода *n*-нонадекана (18.53 °С) и плавления эвтектики (19.43 °С) (рис. 2).

**Таблица 2.** Группы атомов в методах UNIFAC и UNIFAC Dortmund

| Компонент           | Метод UNIFAC      |                  | Метод UNIFAC Dortmund |                  |
|---------------------|-------------------|------------------|-----------------------|------------------|
|                     | Группа            | Количество групп | Группа                | Количество групп |
| Дифенилоксид        | АССН <sub>2</sub> | 10               | АСН                   | 10               |
|                     | АСН               | 2                | АС                    | 2                |
|                     | О                 | 1                | О                     | 1                |
| <i>n</i> -нонадекан | СН <sub>3</sub>   | 2                | СН <sub>3</sub>       | 2                |
|                     | СН <sub>2</sub>   | 17               | СН <sub>2</sub>       | 17               |

**Таблица 3.** Сравнение расчетных и экспериментальных данных по эвтектической смеси

|   | Эксперимент    | Шредер               | UNIFAC                | UNIFAC Dortmund       |
|---|----------------|----------------------|-----------------------|-----------------------|
| Содержание <i>n</i> -нонадекана, мол. %                 | 40.0           | 31.0                 | 18.0                  | 7.0                   |
| Содержание дифенилоксида, мол. %                        | 60.0           | 69.0/–15.0*          | 82.0/–36.6*           | 93.0/–55.0*           |
| Температура плавления эвтектики, °С (К)                 | 19.43 (292.58) | 11.68 (284.83)/2.65* | 21.29 (294.44)/–1.87* | 25.06 (298.21)/–1.87* |
| Коэффициент активности <i>n</i> -нонадекана в эвтектике | 1.26           |                      | 3.07                  | 9.81                  |
| Коэффициент активности дифенилоксида в эвтектике        | 1.39           |                      | 1.07                  | 1.03                  |

\* «–» означает превышение расчетных данных по сравнению с экспериментальными;

«\*» означает относительное отклонение, %.

## РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

*T*-*x*-диаграмма двухкомпонентной системы включает в себя однофазное поле жидкого состояния (выше кривых ликвидуса *aeб*) и четыре двухфазных поля — твердых фаз в солидусе  $\beta$ -*n*-C<sub>19</sub>H<sub>40</sub>+(Ph)<sub>2</sub>O,  $\alpha$ -*n*-C<sub>19</sub>H<sub>40</sub>+(Ph)<sub>2</sub>O, а также поля —  $\mathcal{J}$ + $\beta$ -*n*-C<sub>19</sub>H<sub>40</sub>,  $\mathcal{J}$ +(Ph)<sub>2</sub>O. Кривым ликвидуса и эвтектике фазовой диаграммы системы (см. рис. 1) соответствуют моновариантные двухфазные равновесия ( $\mathcal{J} \rightleftharpoons \beta$ -*n*-C<sub>19</sub>H<sub>40</sub>, линия *ae*;  $\mathcal{J} \rightleftharpoons$  (Ph)<sub>2</sub>O, линия *eb*) и невариантное трехфазное равновесие  $\mathcal{J} \rightleftharpoons \beta$ -*n*-C<sub>19</sub>H<sub>40</sub>+(Ph)<sub>2</sub>O, точка *e*. Кривые ликвидуса *ae* и *be* пересекаются в эвтектической точке.

Расчетные и экспериментально полученные координаты эвтектики приведены в табл. 3. Отклонения расчетных данных от экспериментальных указывает на наличие

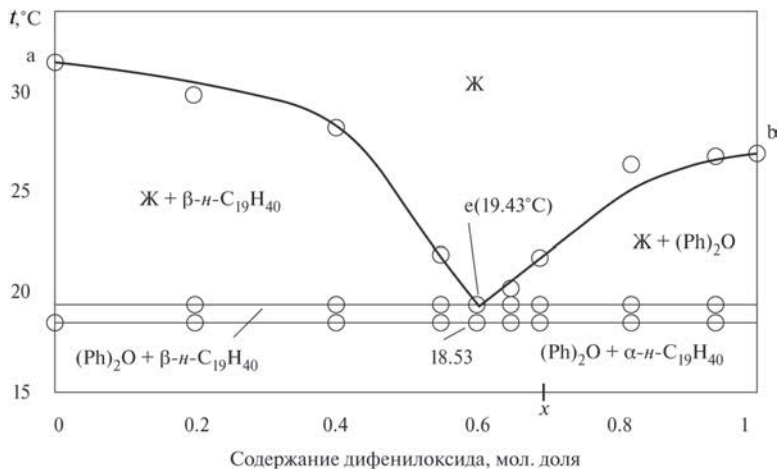


Рис. 1. Экспериментальная фазовая диаграмма системы дифенилоксид – *n*-нонадекан.

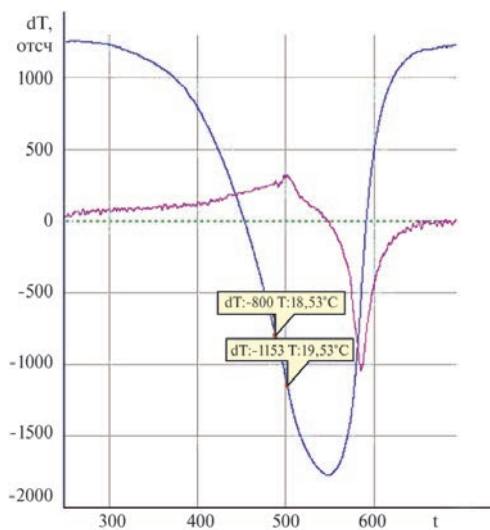


Рис. 2. Дифференциальная кривая нагревания эвтектической смеси.

межмолекулярного взаимодействия между компонентами изученной системы. С учетом экспериментальных данных рассчитаны коэффициенты активности компонентов в эвтектике по уравнению

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

В табл. 3 приведены результаты расчета коэффициентов активности и сравнение расчетных и экспериментальных данных по координатам эвтектики.

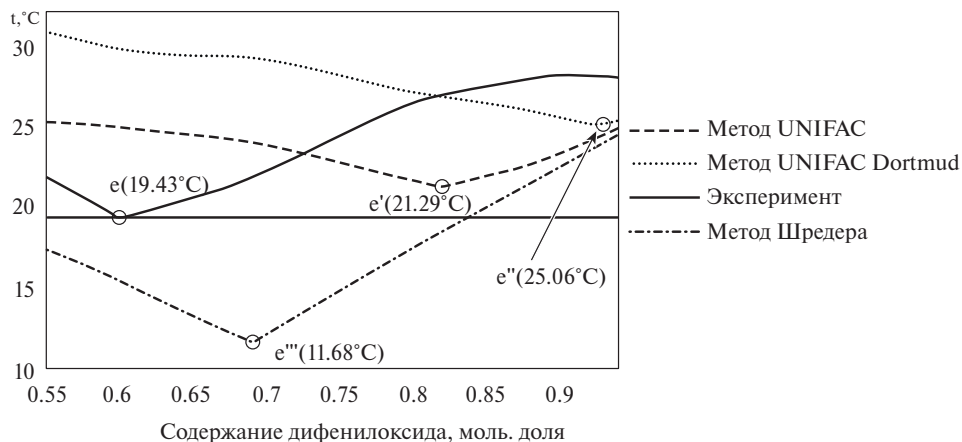


Рис. 3. Сравнение расчетных и экспериментальных данных.

Как видно из табл. 3, методы UNIFAC и UNIFAC Dortmund дают значительные отклонения состава эвтектики от данных эксперимента, что может свидетельствовать о взаимодействии между молекулами в этой системе. Метод Шредера точнее прогнозирует состав эвтектики, однако температура плавления эвтектической смеси имеет большее отклонение, чем в методах UNIFAC и UNIFAC Dortmund. Максимальные отклонения по составу двойной эвтектики и ее температуре плавления от экспериментальных данных получены при расчете методом UNIFAC Dortmund (рис. 3).

В табл. 4 приведены теплофизические свойства, рассчитанные по правилу аддитивности.

Теплофизические свойства показывают, что эвтектическая смесь может быть использована в качестве теплоаккумулирующего материала. Эвтектический сплав системы дифенилоксид — *n*-нонадекан обладает среднеинтенсивной энтальпией плавления, соответствует экологическим требованиям и безопасности при эксплуатации.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Впервые изучена система дифенилоксид — *n*-нонадекан.

Рассчитан ликвидус двухкомпонентной системы дифенилоксид — *n*-нонадекан методами Шредера, UNIFAC и UNIFAC Dortmund.

Экспериментально определено содержание компонентов и температура плавления эвтектики: дифенилоксида — 60.0 мол. % (70.29 мас. %) и *n*-нонадекана — 40.0 мол. % (29.71 мас. %), температура плавления 19.43 °C, построена фазовая диаграмма по экспериментальным данным.

Полученные результаты экспериментальной работы сравнены с расчетными данными. Минимальное отклонение расчетного содержания компонентов в эвтектике от экспериментального отмечено при использовании метода Шредера, а при расчетах методом UNIFAC получено наименьшее отклонение температуры плавления. Эти методы могут быть использованы для предварительной оценки координат эвтектик в системах из органических веществ перед планированием эксперимента.

**Таблица 4.** Свойства эвтектического расплава системы дифенилоксид – *n*-нонадекан

| Свойства          | Энтальпия плавления |                    |                              | Молярная энтальпия плавления, Дж/моль·К | Плотность, г/см <sup>3</sup> |
|-------------------|---------------------|--------------------|------------------------------|---|------------------------------|
|                   | Удельная, кДж/кг    | Молярная, кДж/моль | Объемная, МДж/м <sup>3</sup> |   |                              |
| Числовое значение | 118.336             | 27.409             | 0.114                        | 90.428                                  | 0.966                        |

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

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Анисимов И.Г., Бадыштов К.М., Бнатов С.А. и др. Топлива, смазочные материалы, технические жидкости. Ассортимент и применение: справочник. М.: Техинформ, 1999.
2. Гаркушин И.К., Колядо А.В., Яковлев И.Г. Теплоноситель. Патент РФ № 2656666. Опубл. 06.06.2018 в БИ № 16.
3. Резницкий Л.А. Обратимое аккумулирование тепла. М., 1996.
4. Каган С.З., Четкин А.В. Органические высокотемпературные теплоносители и их применение в промышленности. М.: Гос. науч. техн. изд. хим. литературы, 1951.
5. Бедрик Б.Г., Чулков П.В., Калашников С.И. Растворители и составы для очистки машин и механизмов. М.: Химия, 1989.
6. Колядо А.В., Гаркушин И.К., Дорохина Е.В., Мошенский Ю.В. Смесевой растворитель. Патент РФ № 2453588. Опубл. 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. Екатеринбург: УрО РАН, 2008.
8. Трофимов Е.А. Фазовые равновесия в многокомпонентных системах, сопряженных с металлическими расплавами // Расплавы. 2012. № 2. С. 70–75.
9. NIST Chemistry WebBook, SRD69. <https://webbook.nist.gov/>
10. Książczak A. Vapour pressures of binary three-phase (solid + liquid + vapour) mixtures IV. Melting temperatures of the solid phases of *n*-octadecane and of *n*-nonadecane // J. Chem. Thermodynamics. 1989. **21**. № 12. С. 1231–1236.
11. Рид Р., Праусниц Дж., Шервуд Т. Свойства газов и жидкостей. Л.: Химия, Ленингр. отд., 1982.
12. Stephenson R.M., Malanowski S. Properties of organic compounds // Handbook of the Thermodynamics of Organic Compounds. Springer, Dordrecht, 1987. P. 561.
13. Silveira Ch.L., Galvão A.C., Robazza W.S. Modeling and parameters estimation for the solubility calculations of nicotinamide using UNIFAC and COSMO-based models // Fluid Phase Equilibria. 2021. **535**. P. 112970.
14. 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.
15. Bernardi F., Galvão A.C., Arce P.F. Xylitol solubility in DMF + ethylene glycol or 1, 2-propylene glycol: Measurement and modeling with PC-SAFT and CPA equations of state and UNIFAC activity coefficient model // Fluid Phase Equilibria. 2020. **519**. P. 112651.
16. Afsharian M.S., Paraj A. Thermodynamic representation of ionic liquids phase equilibrium with PDH-ASOG and PDH-UNIFAC models // J. Molec. Liq. 2021. **333**. P. 115926.
17. 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.
18. 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.

19. Vyazovkin S., Chrissafis K., Di Lorenzo M. et al. ICTAC Kinetics Committee recommendations for collecting experimental thermal analysis data for kinetic computations // *Therm. Acta*. 2014. **590**. P. 1.
20. Weidlich U., Gmehling J. UNIFAC model. 1. Prediction of hE, and gamma-infinity. *Ind. Eng. Chem. Res.* 1987. **26**. P. 1372–1381.
21. Морачевский А.Г., Смирнова Н.А., Пиотровская Е.М. и др. Термодинамика равновесия жидкость — пар. Л.: Химия, 1989.
22. 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.
23. 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.
24. Constantinescu D., Gmehling J. Further development of modified UNIFAC (Dortmund): revision and extension 6 // *J. Chem. Eng. Data*. 2016. **61**. № 8. P. 2738–2748.
25. 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.

## STUDY OF PHASE EQUILIBRIA IN A TWO-COMPONENT SYSTEM DIPHENYLOXIDE — *n*-NONADECANE

A.I. Kazakova<sup>1</sup>, I.G. Yakovlev<sup>1</sup>, I.K. Garkushin<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *Samara State Technical University, Samara, Russia*

Using the Schroeder, UNIFAC and UNIFAC Dortmund methods, the fusibility diagram of the diphenyl oxide — *n*-nonadecane system was calculated and it was shown that it belongs to the eutectic type. Individual substances and their mixtures were studied experimentally using a differential scanning microcalorimeter. On the DTA heating curve of the eutectic alloy, two endo-effects are noted, corresponding to the polymorphic transition of *n*-nonadecane and the melting of the eutectic. A comparison of the eutectic coordinates calculated by these methods with experimental data is presented. For a eutectic alloy, the specific enthalpy of fusion, molar values of entropy and enthalpy of fusion, volumetric specific enthalpy of fusion and density for standard conditions are calculated. The eutectic mixture can be recommended for use as a coolant, as well as the working fluid of a heat accumulator.

*Keywords:* eutectic, diphenyl oxide, *n*-nonadecane, phase equilibrium state

## REFERENCES

1. Anisimov I.G., Badystov K.M., Bnatov S.A. etc. *Topliva, smazochnyye materialy, tekhnicheskiye zhidkosti. Assortiment i primeneniye: Spravochnik*. [Fuels, lubricants, technical fluids. Assortment and application: Directory]. M.: Tekhinform, 1999. [In Russian].
2. Garkushin I.K., Kolyado A.V., Yakovlev I.G. *Teplonositel' [Coolant]*. RF Patent № 2656666. Publ. 06/06/2018 in BI № 16. [In Russian].
3. Reznitsky L.A. *Obratimoye akkumulirovaniye tepla [Reversible heat storage]*. M., 1996. [In Russian].
4. Kagan S.Z., Chechetkin A.V. *Organicheskiye vysokotemperaturnyye teplonositeli i ikh primeneniye v promyshlennosti [Organic high-temperature coolants and their use in industry]*. M.: Gos. nauch. tekhnich. izd. khim. Literaturny, 1951. [In Russian].
5. Bedrik B.G., Chulkov P.V., Kalashnikov S.I. *Rastvoriteli i sostavy dlya ochistki mashin i mekhanizmov. [Solvents and compositions for cleaning machines and mechanisms]*. M.: Khimiya, 1989. [In Russian].
6. Kolyado A.V., Garkushin I.K., Dorokhina E.V., Moshchensky Yu.V. *Smesevoy rastvoritel' [Mixed solvent]*. RF patent № 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: Monografiya [Analysis, prediction and experimental study of a series of two-component systems involving *n*-decane and *n*-undecane]. Yekaterinburg: UB of the RAS, 2008. [In Russian].
8. Trofimov E.A. Fazovyye ravnovesiya v mnogokomponentnykh sistemakh, sopryazhennykh s metallicheskim rasplavami [Phase equilibria in multicomponent systems conjugated with metal melts] // Rasplavy. 2012. № 2. P. 70–75. [In Russian].
9. NIST Chemistry WebBook, SRD69. <https://webbook.nist.gov/>
10. Książczak A. Vapour pressures of binary three-phase (solid + liquid + vapour) mixtures IV. Melting temperatures of the solid phases of *n*-octadecane and of *n*-nonadecane // J. Chem. Thermodynamics. 1989. **21**. № 12. P. 1231–1236.
11. Rid R., Prausnitz Dzh, Shervud T. Svoystva gazov i zhidkostey. [Properties of gases and liquids.], L.: Khimiya, Leningr. otd., 1982. [In Russian].
12. Stephenson R.M., Malanowski S. Properties of organic compounds // Handbook of the Thermodynamics of Organic Compounds. Springer, Dordrecht, 1987. P. 561.
13. Silveira Ch.L., Galvão A.C., Robazza W.S. Modeling and parameters estimation for the solubility calculations of nicotinamide using UNIFAC and COSMO-based models // Fluid Phase Equilibria. 2021. **535**. P. 112970.
14. 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].
15. Bernardi F., Galvão A.C., Arce P.F. Xylitol solubility in DMF + ethylene glycol or 1, 2-propylene glycol: Measurement and modeling with PC-SAFT and CPA equations of state and UNIFAC activity coefficient model // Fluid Phase Equilibria. 2020. **519**. P. 112651.
16. Afsharian M.S., Paraj A. Thermodynamic representation of ionic liquids phase equilibrium with PDH-ASOG and PDH-UNIFAC models // J. Molec. Liq. 2021. **333**. P. 115926.
17. Yakovlev I.G., Garkushin I.K., Kolyado A.V. Koeffitsiyenty aktivnosti v sistemakh tetrakhloretilen — *n*-alkan [Activity coefficients in tetrachlorethylene — *n*-alkane systems] // Zhurn. fiz. khimii. 2021. **95**. № 10. P. 1474–1480. [In Russian].
18. Kazakova A.I., Yakovlev I.G., Garkushin I.K. Fazovyye ravnovesnyye sostoyaniya v dvukhkomponentnoy 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].
19. Vyazovkin S., Chrissafis K., Di Lorenzo M. et al. ICTAC Kinetics Committee recommendations for collecting experimental thermal analysis data for kinetic computations // Therm. Acta. 2014. **590**. P. 1.
20. Weidlich U., Gmehling J. UNIFAC model. 1. Prediction of  $h_E$  and gamma-infinity. Ind. Eng. Chem. Res. 1987. **26**. P. 1372–1381.
21. Morachevsky A.G., Smirnova N.A., Piotrovskaya E.M. Termodinamika ravnovesiya zhidkost' — par. [Thermodynamics of liquid-vapor equilibrium]. L.: Khimiya, 1989. [In Russian].
22. 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.
23. 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.
24. Constantinescu D., Gmehling J. Further development of modified UNIFAC (Dortmund): revision and extension 6 // J. Chem. Eng. Data. 2016. **61**. № 8. P. 2738–2748.
25. 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.