

Методы описания фазовых равновесий в процессе жидкофазной экстракции

Курдакова Светлана Владимировна

Научный руководитель: д.х.н., профессор И.А. Успенская

Рецензент: д.х.н., профессор А.Я. Борщевский

Жидкофазная экстракция является одним из наиболее перспективных методов разделения и получения высокочистых соединений. Она основана на различии значений химических потенциалов компонентов смесей и, как следствие, неодинаковом равновесном распределении веществ между двумя взаимонерастворимыми или ограниченно растворимыми фазами [1].

При разработке новых технологий для оценки эффективности процесса экстракции используют коэффициенты распределения и разделения. Численные значения этих величин варьируются при изменении температуры, давления, типа растворителя, поэтому их корректная априорная оценка возможна только при построении термодинамических моделей многокомпонентных систем и расчете сечений и проекций фазовых диаграмм. Создание термодинамической модели интересующей системы – это начальный этап термодинамического моделирования. С его помощью можно решить несколько проблем, таких как сглаживание и согласование данных, их интерполяция, экстраполяция. Но наиболее существенной является возможность использовать термодинамические модели для расчётов равновесий в интересующих системах, основываясь на экстремальных свойствах характеристических функций.

В докладе будут рассмотрены основные типы фазовых диаграмм, представляющие интерес при проведении экстракции, экспериментальные методы изучения фазовых равновесий и термодинамических свойств фаз в исследуемых системах. Будет дана краткая характеристика расчетных методов – метода выпуклых оболочек [2, 3, 4], метода касательной [5] и метода площадей [6], основанных на минимизации энергии Гиббса системы или равенстве химических потенциалов при построении фазовых диаграмм на основе термодинамических моделей системы.

[1] Трейбал Р. Жидкостная экстракция. М.: Химия, 1966. 724 с.

[2] Гиббс, Дж. В. Термодинамика. Статистическая механика. М.: Наука, 1982. 584 с.

[3] Hildebrandt, D. *Chem. Eng. J.* 1994. V. 54. № 3. P. 187-197.

[4] Воронин Г.Ф. ЖФХ. 2003, Т.77, № 10, с. 1685-1694; ЖФХ, 2005, Т.79, № 12, с. 1890-1902

[5] Кауфман, Л. Расчет диаграмм состояния с помощью ЭВМ. М.: Мир, 1972. 326 с.

[6] Eubank, P.T. *Ind. Eng. Chem. Res.* 1992. V. 31. № 3. P. 942-949.