РАЗДЕЛ II ТЕХНОЛОГИЯ ОРГАНИЧЕСКИХ ВЕЩЕСТВ

SECTION II TECHNOLOGY OF ORGANIC SUBSTANCES

УДК 544.015:66.011

ТЕРМОДИНАМИКО-ТОПОЛОГИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ СТРУКТУРЫ ФАЗОВОЙ ДИАГРАММЫ ПЯТИКОМПОНЕНТНОЙ СИСТЕМЫ И СИНТЕЗ СХЕМЫ РАЗДЕЛЕНИЯ СМЕСИ ОРГАНИЧЕСКИХ ПРОДУКТОВ

А.В. Фролкова¹⁾,

¹⁾ Институт тонких химических технологий имени М.В. Ломоносова федерального бюджетного образовательного учреждения высшего образования «МИРЭА – Российский технологический университет» Тел.: 8-916-665-83-97 е-mail: frolkova@gmail.com ²⁾ Общество с ограниченной ответственностью ООО «ЛАБВЭА», 115093, г. Москва, ул. Люсиновская, д. 36, стр. 1 Разработка схем разделения многокомпонентных водных смесей органических продуктов, представляющих разные классы веществ, является сложной задачей. Цель исследования – совершенствование схемы ректификации смеси вода – этанол – *н*-бутанол – толуол – хлорбензол на основе термодинамико-топологического анализа фазовой диаграммы и ее составляющих. Показана возможность полного разделения смеси на минимальном числе аппаратов. Определены статические параметры работы колонн.

Ключевые слова: схема; ректификация; многокомпонентная система; фазовая диаграмма; моделирование

THERMODYNAMIC-TOPOLOGICAL ANALYSIS OF THE PHASE DIAGRAM STRUCTURE OF A FIVE-COMPONENT SYSTEM AND SEPARATION SCHEME SYNTHESIS FOR A MIXTURE OF ORGANIC PRODUCTS

A.V. Frolkova¹⁾, E.A. Okhlopkova²⁾, A.K. Frolkova¹⁾

1) M.V. Lomonosov Institute of Fine Chemical Technologies, Federal State Budgetary Educational Institution of Higher Education «MIREA – Russian Technological University» Tel.: 8-916-665-83-97 e-mail: frolkova@gmail.com

2) «LABWARE» LLC, 115093, Russia, Moscow, Lusinovskya str., 36-1 The development of separation flowsheet for multicomponent aqueous mixtures of organic products representing different classes of substances is a difficult problem. The aim of this study is to improve the separation flowsheet for a mixture of water – ethanol – n-butanol – toluene – chlorobenzene based on thermodynamic-topological analysis of the phase diagram and its constituents. The possibility of mixture complete separating on the minimum number of devices is shown. The static parameters of the columns are determined.

Keywords: flowsheet; distillation; multicomponent system; phase diagram; modeling

Е.А. Охлопкова²⁾,

А.К. Фролкова1)

Введение

Синтез принципиальных схем ректификационного разделения жидких смесей на основе термодинамико-топологического анализа (ТТА) структур диаграмм фазового равновесия является в настоящее время стандартной процедурой соответствующего алгоритма, представленного в работе [1]. Для всех 26 структур фазовых диаграмм (без антиподов) трехкомпонентных систем применение данного алгоритма позволило выявить предельные составы продуктовых потоков и возможные варианты схем обычной ректификации смесей конкретного состава. При этом рассматриваются режимы ректификации, ориентированные на первое и второе заданные разделения [1, 2]. Наличие азеотропов разной компонентности и различных типов приводит к необходимости применения специальных приемов ректификации: сочетания ректификации и расслаивания, варьирования давления в колоннах, добавления разделяющих агентов в экстрактивной и азеотропной ректификации, использования кривизны сепаратрических многообразий [3].

Сложнее обстоит дело с многокомпонентными системами, т.к. в литературе представлены результаты исследований фазовых диаграмм [4–8] в основном четырех- и редко пятикомпонентных систем и схемы разделения смесей конкретных производств [9–19]. В дополнение к первому и второму заданным разделениям при ректификации четырехкомпонентных смесей с определенными соотношениями значений коэффициентов распределения компонентов (K) между фазами показана эффективность и выявлены области применения схем, ориентированных на промежуточные заданные разделения [20, 21].

На основе ТТА фазовых диаграмм нами предложен ряд принципиальных схем разделения четырехкомпонентных реакционных смесей получения эпихлоргидрина [9, 10] и циклогексанона [12–14] в присутствии разных растворителей, смесей разделения растворителей производства аскорбиновой кислоты [18], метилизобутилкетона [19]. В [16, 17] представлены принципиальные схемы разделения смеси, содержащей этанол, воду, толуол, *н*-бутиловый спирт и хлорбензол, которые отличаются организацией в колоннах режимов непрерывной и/или периодической ректифика-

ции. В обоих случаях используются сочетание ректификации и расслаивания и гетероазеотропная ректификация (азеотропообразующий агент – бензол).

Настоящая работа посвящена совершенствованию схемы разделения пятикомпонентной смеси вода – этанол – *н*-бутанол – толуол – хлорбензол, характеризующейся сложной структурой фазовой диаграммы, на основе новых подходов к исследованию внутреннего пространства концентрационного симплекса.

Экспериментальная часть

Для получения информации о структуре диаграммы парожидкостного равновесия пятикомпонентной системы используется вычислительный эксперимент в программном комплексе «Aspen Plus®». Математическое моделирование проводится на базе уравнения локальных составов NRTL. Параметры выбраны из базы данных программного комплекса. Относительная ошибка описания равновесия жидкость-пар, жидкостьжидкость в бинарных составляющих не превышает 5 %. Система характеризуется сложным фазовым поведением, содержит семь бинарных и четыре тройных азеотропа. Отсутствие четырех- и пятикомпонентных азеотропов доказано с использованием методики, изложенной в [4]. Температуры кипения чистых компонентов (Т_{кип}) и азеотропные характеристики системы (x_i^{Az}) при давлении 101,3 кПа представлены в *таблице 1*.

Важная роль при проведении ТТА фазовых диаграмм n-компонентных систем отводится разверткам концентрационного симплекса разной размерности (чаще всего от двух до максимальной, равной n-2) [1, 4, 5]. Для исследуемой пятикомпонентной системы рассматриваются развертки размерности два и три, а также элементы внутренней структуры (сепаратрические многообразия) концентрационного симплекса – пентатопа.

На *рис. 1* представлена двухмерная развертка фазовой диаграммы исследуемой пятикомпонентной системы, а в *таблице 2* – типы особых точек и значения их топологических индексов относительно трехмерной развертки и пентатопа.

Таблица 1

Компонент, азеотроп	Х ₁ ^{Аz} , мол. доли	Т _{кип} , °С	Компонент, азеотроп	х ₁ ^{Az} (х ₂ ^{Az}), мол. доли	Т _{кип} , °С
Этанол (Э)	—	78,4	В–Б	0,7529	92,64
Вода (В)	_	100,0	В–ХБ	0,6754	91,14
Толуол (Т)	_	110,6	Т–Б	0,6495	105,32
н-Бутанол (Б)	_	117,7	Б–ХБ	0,7050	114,72
Хлорбензол (ХБ)	_	131,0	Э–В-Т	0,4674 (0,2729)	73,85
Э–В	0,8952	78,15	Э–В–ХБ	0,5337 (0,3142)	77,37
Т-Є	Э–Т 0,8101		В–Б–ХБ	0,6514 (0,3648)	83,45
В-Т 0,5595		84,53	В-Т-Б	0,5307 (0,3654)	83,47





Рис. 1 Двухмерная развертка концентрационного симплекса системы этанол (Э) – вода (В) – толуол (Т) – *н*-бутанол (Б) – хлорбензол (ХБ)

Таблица 2

Баланс топологических индексов особых точек относительно трехмерной развертки и внутреннего пространства пентатопа

Особая точка	Трехмерная развертка		Пентатоп		Особая	Трехмерная развертка		Пентатоп	
	тип	i	тип	i	TO IRu	тип	i	тип	i
Этанол (Э)	CN	0	_	0	Az _{B-6}	С	-1	С	-1
Вода (В)	Ny	+1	Ny	+1	Az _{T-6}	CN	0	_	0
Толуол (Т)	CN	0	_	0	Az _{b-Xb}	С	-1	С	-1
н-Бутанол (Б)	Ny	+1	Ny	+1	Az _{B-X5}	С	-1	С	-1
Хлорбензол (ХБ)	Ny	+1	Ny	+1	Az _{э-в-т}	N ^H	-1	$N^{\scriptscriptstyle\! H}$	+1
Az _{3-B}	CN	0	_	0	Az _{B-T-XE}	CN	0	_	0
Az _{3-T}	CN	0	_	0	Az _{э-в-хь}	CN	0	_	0
Az _{B-T}	CN	0	_	0	Az _{B-Б-ХБ}	С	+1	С	+1
							$\Sigma i = 0$		$\Sigma i = 2$

Примечание: сложные особые точки типа седло–узел CN образуются при склеивании границ на развертках разной размерности, Az – азеотроп

Баланс индексов особых точек свидетельствует о термодинамической согласованности структуры фазовой диаграммы [1].

Анализ приведенной информации (рис. 1, таблица 2) позволяет сделать вывод о наличии в системе трех областей дистилляции, которые опираются на точки неустойчивого узла (азеотроп Э-В-Т) и три особые точки типа «устойчивый узел» (вода, н-бутанол, хлорбензол). Эти области дистилляции в пентатопе характеризуются разными наборами конечных продуктов и отделяются друг от друга двумя сепаратрическими многообразиями размерности 3, приведенными на *рис.* 2. Можно отметить, что одна трехмерная сепаратрическая гиперповерхность является симплексом (*рис. 2, а*), другая – комплексом (*рис. 2, б*). В формировании комплекса участвуют и части концентрационных симплексов тройных составляющих (двухмерные грани пентатопа).

Структура данных многообразий (гиперповерхностей) определена в соответствии с методикой, представленной в [4].

Следует иметь ввиду, что наличие ограниченной взаимной растворимости воды и *н*-бутанола (толуола, хлорбензола) приводит к образованию в пентатопе области двухфазного расслаивания, причем ей принадлежит значительная часть одного из сепаратрических многообразий (*puc. 2, a*). Однако при расслаивании составов, принадлежащих сепаратрисе, в равновесных жидких слоях присутствуют все пять компонентов, что не позволяет использовать для полного разделения смеси сочетание расслаивания с ректификацией без увеличения числа колонн в схеме.

Для синтеза принципиальной схемы разделения и определения статических параметров работы аппаратов выбран состав исходной смеси (мол. доли) [17]: этанол – 0,7202; вода -0,1677; толуол -0,0338; *н*-бутанол -0,0599; хлорбензол – 0,0184. Количество смеси – 100 кмоль/ч. Данная смесь принадлежит области дистилляции, в которой устойчивым узлом является точка чистого н-бутанола. Однако использовать второе заданное разделение (выделение в кубе первой колонны н-бутанола) не рекомендуется, поскольку дистиллят в этом случае будет располагаться на трехмерном сепаратрическом многообразии и содержать все пять компонентов. Следовательно, для разделения смеси априори потребуется большее число колонн. Аналогичная ситуация будет наблюдаться и при попадании дистиллята в область двухфазного расслаивания, о чем упоминалось выше. Использование промежуточного заданного разделения для данной смеси неэффективно из-за большого числа азеотропов (потоки дистиллята и куба будут содержать все компоненты).

Особенность структуры диаграммы парожидкостного равновесия позволяет на первом этапе в дистилляте колонны по первому заданному разделению выделить тройной азеотроп Э–Т–В; при этом в кубе будет содержаться смесь Э–В–Б–ХБ. Схема разделения смеси приведена на *рис. 3*, она включает пять ректификационных колонн и два сепаратора.



Рис. 2 Структура сепаратрических многообразий фазовой диаграммы системы этанол (Э) – вода (В) – толуол (Т) – *н*-бутанол (Б) – хлорбензол (ХБ): (а) – симплекс; (б) – комплекс



Рис. 3

Схема разделения смеси этанол (Э) – вода (В) – толуол (Т) – *н*-бутанол (Б) – хлорбензол (ХБ) *K1–К5* – колонны; Ф1, Ф2 – сепараторы; D1–D5 – потоки дистиллята; W1, W3 – кубовые потоки

В первой колонне реализуется первое заданное разделение: в дистилляте выделяется смесь, отвечающая тройному азеотропу этанол – вода – толуол, которая после конденсации расслаивается в сепараторе $\Phi 1$. Поток, обогащенный толуолом, направляется в колонну K5 для отделения толуола, водный слой R_{σ_1} возвращается рециклом в колонну К1. Колонна K2 работает в режиме второго заданного разделения четырехкомпонентной составляющей (в кубе выделяется *н*-бутиловый спирт). Для разделения тройной смеси Э-В-ХБ предложено использовать автоэкстрактивно-гетероазеотропную ректификацию (разделяющий агент - хлорбензол). Расчет относительной летучести пары компонентов вода-этанол показал, что в присутствии хлорбензола последняя увеличивается более чем в 3 раза (*таблица 3*).

Таким образом, в колонне K3 в дистилляте ожидается выделение смеси вода – хлорбензол азеотропного состава, а в кубе – зеотропной смеси этанол – хлорбензол, которая может быть разделена обычной ректификацией (колонна K4). Смесь воды и хлорбензола направляется в сепаратор $\Phi2$; поток $R_{\Phi2}$, обогащенный хлорбензолом (99,8 % мол.), возвращается рециклом в колонну K3; водный слой (99,9 % мол.) представляет собой самостоятельный продуктовый поток.

Работоспособность схемы была подтверждена расчетом процесса ректификации. В вычислительном эксперименте подобраны статические параметры работы колонн (*таблица 4*), позволяющие получить вещества товарного качества.

Таблица 3

№ п/п	Соста	ав тройной смеси,	Коэффициент относительной		
	вода	этанол	хлорбензол	летучести пары вода – этанол	
1	0,180	0,804	0,016	0,945	
2	0,162	0,738	0,100	1,173	
3	0,150	0,650	0,200	1,452	
4	0,109	0,491	0,400	2,076	
5	0,073	0,327	0,600	2,689	
6	0,036	0,164	0,800	3,242	

Изменение летучести воды относительно этанола в присутствии хлорбензола

Таблица 4

	Кол-во	Кол-во куба, кмоль/ч	Тарелка подачи	Флег- Дистил		лят	Куб	
Колонна	дист.,			мовое	состав,	Ткип,	состав,	Ткип,
	кмоль/ч		потока	число	мол. доли	°C	мол. доли	°C
KI	47,57	96,62	R _{ф1} /исх.смесь 3/15	2	0,4460	72,85	0,7550	79,35
					0,2840		0,1680	
					0,2700		0,0	
					0,0		0,0620	
					0,0		0,0150	
K2	90,53	5,99	14	2,5	0,7965	78,07	0,0	115,61
					0,1825		0,0010	
					0,0		0,0	
					0,0		0,9990	
					0,0210		0,0	
K3	24,73	345,8	X6+R ₄₂ /D2 4/26	3	0,0	76,92	0,2080	84,71
					0,5980		0,0010	
					0,0		0,0	
					0,0		0,0	
					0,4020		0,7910	
K4	72,02	273,88	28	3	0,9900	78,36	0,0030	130,55
					0,0		0,0	
					0,0		0,0	
					0,0		0,0	
					0,0100		0,9970	
K5	7,94	3,38	2	0,01	0,1869	79,16	0,0	110,68
					0,0086		0,0	
					0,8045		1	
					0,0		0,0	
					0,0		0,0	

Статические параметры работы колонн предложенной схемы

Примечание: все колонны работают при атмосферном давлении; эффективность колонн K1–K4 – 30, K5 – 10 теоретических тарелок (нумерация тарелок с верха колонны); количество возвращаемого потока XБ составляет 272,04 кмоль/ч; R_{ϕ_l} , R_{ϕ_2} – рецикловые потоки из сепараторов; в составах потоков компоненты указаны в следующей последовательности: Э, В, Т, Б, XБ.

Заключение

Актуальность полученных результатов связана с исследованием многокомпонентных смесей органических продуктов, относящихся к разным классам химических соединений и характеризующихся сложной структурой фазовой диаграммы. Анализ внутреннего пространства концентрационного симплекса таких систем и оценка принадлежности точки состава исходной смеси конкретной области дистилляции позволяет на качественном уровне прогнозировать возможность разделения смеси на фракции различного состава и выбирать схемы, содержащие минимальное число колонн. Предпочтение следует отдавать варианту схемы, когда на первом этапе удается разделить смесь на фракции, не содержащие хотя бы одного общего компонента, т.е. один или несколько компонентов должны быть представлены только в дистиллятном или кубовом потоке. В том случае, если расположение исходного состава неблагоприятно для реализации одного из видов четкого разделения (первое, второе или промежуточное), рекомендуется регулировать положение точки в концентрационном симплексе за счет направленного рецикла. Данный прием проиллюстрирован на примере реальной смеси растворителей [22]. Предлагаемая нами схема отличается от описанной в [17]:

 использованием комплекса автоэкстрактивно-гетероазеотропной ректификации, что позволило избежать загрязнения продуктов дополнительным веществом; 2) получением всех продуктов качества, соответствующего требованиям потребителей.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки России в рамках Государственного задания по теме № 0706-2020-0020

Библиография

- 1. Жаров В.Т., Серафимов Л.А. Физико-химические основы дистилляции и ректификации. Л.: Химия, 1978. 240 с.
- 2. Тимофеев В.С., Серафимов Л.А., Тимошенко А.В. Принципы технологии основного органического и нефтехимического синтеза. 3-е изд. перераб. и доп. М.: Высш. шк., 2010. 408 с.
- Фролкова А.К. Разделение азеотропных смесей. Физико-химические основы и технологические приемы. Монография. М.: Гуманитар. изд. центр ВЛАДОС, 2010. 192 с.
- Серафимов Л.А., Фролкова А.В., Медведев Д.В. Определение структуры диаграммы четырёхкомпонентной смеси на основе её развёртки // Теоретические основы хим. технологии. 2012. Т. 46. N 2. С. 154–161.
- Serafimov L.A., Frolkova A.V. Determination of vapor-liquid equilibrium diagrams of multicomponent systems // Chemical Papers. 2016. V. 70. P. 1578–1589.
- Yus D., Moonyong L. Distillation design and optimization of quaternary azeotropic mixtures for waste solvent recovery // Journal of Industrial and Engineering Chemistry. 2018. V. 67. P. 255–265.
- Blagov S., Hasse H. Topological analysis of vapor-liquid equilibrium diagrams for distillation process design // Phys. Chem. Chem. Phys. 2002. N 4. P. 896–908.
- Лазуткина Ю.С., Клейменова М.Н., Комарова Л.Ф. Термодинамико-топологический анализ бутанольно-толуольной смеси // Тонкие химические технологии. 2015. Т.10. N 3. С. 51–55.
- Охлопкова Е.А., Серафимов Л.А., Фролкова А.В. Разделение многокомпонентной системы, образующейся в производстве эпихлоргидрина // Тонкие химические технологии. 2016. Т. 11. N 6. С. 36–42.
- Frolkova A.V., Okhlopkova E.A., Frolkova A.K. Phase equilibrium of reaction mixtures for the production of epichlorohydrin in the presence of solvents // Theoretical Foundations of Chemical Engineering. 2019. V. 53. N 2. P. 185–192, DOI: 10.1134/ S0040579519020039.
- Frolkova A.V., Frolkova A.K., Akishina A.A., et al. Phase equilibrium in the system water-acetonitrile-cyclohexene-cyclohexanone // Russian Chemical Bulletin. 2015. V. 64. N.10. P. 2330–2336.
- Frolkova A.V., Mayevskiy M.A., Smirnov A.Yu. Phase equilibrium of systems cyclohexene + water + cyclohexanone + *N*-methyl-2-pyrrolidone (+acetonitrile) // Journal of Chemical Engineering Data. 2019. V. 64. N 6. P. 2888–2893. DOI: 10.1021/ acs.jced.9b00245.
- Frolkova, A.V., Mayevskiy M.A., Frolkova A.K. Analysis of phase equilibrium diagrams of cyclohexene+water+cyclohexanone+solvent system // Journal of Chemical Engineering Data. 2019. V. 63. P. 679–683. DOI: 10.1021/acs.jced.7b00870.
- Патент 2 618 273 RU. Способ выделения циклогексанона из реакционной смеси вода ацетонитрил циклогексен – циклогексанон / Фролкова А.К., Фролкова А.В., Акишина А.А. Заяв. 2015148224, 10.11.2015; опубл. 03.05.2017, бюл. № 13.
- Фролкова А.В., Маевский М.А., Фролкова А.К., Плетнев Д.Б. Разработка энергоэффективных технологий получения органических веществ на основе комплексного исследования реакционной и разделительной составляющей // Теоретические основы хим. технологии. 2020. Т. 54. N 6. С. 706–713. DOI: 10.31857/S0040357120060159.
- Клейменова М. Н., Комарова Л. Ф., Лазуткина Ю. С. Создание ресурсосберегающих технологий в производстве кремнийорганических эмалей на основе ректификации // Химия в интересах устойчивого развития. 2013. N 21. C. 211–218.
- 17. Клейменова М.Н., Комарова Л.Ф., Лазуткина Ю.С. Технология переработки жидких отходов растворителей в производстве кремнийорганических эмалей // Экология и промышленность России. 2014. N 4. C.11–15.
- Фролкова А.В., Фролкова А.К., Челюскина Т.В. Разделение четырехкомпонентной системы ацетон хлороформ этанол – вода автоэкстрактивно-гетероазеотропной ректификацией // Тонкие химические технологии. 2010. Т.5. N 6. С. 27–31.
- Mayevskiy M.A., Frolkova A.V., Frolkova A.K. Separation and purification of methyl isobutyl ketone from acetone + isopropanol + water + methyl isobutyl ketone + methyl isobutyl carbinol + diisobutyl ketone mixture // ACS Omega. 2020. DOI: 10.1021/ acsomega.0c03718.
- Фролкова А.В., Пешехонцева М.С., Гаганов И.С. Промежуточное заданное разделение при ректификации четырёхкомпонентных смесей // Теоретические основы хим. технологии. 2018. Т. 13. N 3. C. 41–48.

- Пешехонцева М.Е., Маевский М.А., Гаганов И.С., Фролкова А.В. Области энергетического преимущества схем разделения смесей, содержащих компоненты с близкими летучестями // Тонкие химические технологии. 2020. Т. 15. N 3. C. 7-20. DOI: 10.32362/2410-6593-2020-15-3-7-20.
- Okhlopkova E.A., Frolkova A.V. Comparative analysis of separation schemes of reaction mixtures of epichlorohydrin production in the presence of various solvents // Theoretical Foundations of Chemical Engineering. 2019. V. 53. P. 1028–1034. DOI: 10.1134/S0040579519060101.

References

- 1. Zharov V.T., Serafimov L.A. Physicochemical bases of distillation and rectification. L.: Himiya, 1978. 240 s. (in Rus.).
- Timofeev V.S., Serafimov L.A., Timoshenko A.V. Principles of technology for basic organic and petrochemical synthesis. M.: Vyssh. shk., 2010. 408 s. (in Rus.).
- Frolkova A.K. Separation of azeotropic mixtures. Physico-chemical foundations and technological methods. Monograph. M.: Gumanitar. izd. centr VLADOS, 2010. 192 s. (in Rus.).
- 4. Serafimov L.A., Frolkova A.B., Medvedev D.V. Determination of the diagram structure of a four-component mixture based on its unfolding // Theoretical Foundations of Chemical Engineering. 2012. V. 46. N 2. P. 154–161. (in Rus.).
- Serafimov L.A., Frolkova A.V. Determination of vapor-liquid equilibrium diagrams of multicomponent systems // Chemical Papers. 2016. V. 70. P. 1578–1589.
- Yus D., Moonyong L. Distillation design and optimization of quaternary azeotropic mixtures for waste solvent recovery // Journal of Industrial and Engineering Chemistry. 2018. V. 67. P. 255–265.
- Blagov S., Hasse H. Topological analysis of vapor-liquid equilibrium diagrams for distillation process design // Phys. Chem. Chem. Phys. 2002. N 4. P. 896–908.
- 8. Lazutkina Yu.S., Klejmenova M.N., Komarova L.F. Thermodynamic-topological analysis of butanol-toluene mixture // Fine Chemical Technologies. 2015. V. 10. N 3. P. 51–55 (in Rus.).
- 9. Okhlopkova E.A., Serafimov L.A., Frolkova A.V. Separation of the multicomponent system formed in the epichlorohydrin production // Tonkie himicheskie tekhnologii. 2016. V. 11. N 6. P. 36–42 (in Rus.).
- Frolkova A.V., Okhlopkova E.A., Frolkova A.K. Phase equilibrium of reaction mixtures for the production of epichlorohydrin in the presence of solvents // Theoretical Foundations of Chemical Engineering. 2019. V. 53. N 2. P. 185–192. DOI: 10.1134/ S0040579519020039.
- 11. Frolkova A.V., Frolkova A.K., Akishina A.A., et al. Phase equilibrium in the system water-acetonitrile-cyclohexene-cyclohexanone // Russian Chemical Bulletin. 2015. V. 64. N.10. P. 2330–2336.
- Frolkova A.V., Mayevskiy M.A., Smirnov A.Yu. Phase equilibrium of systems cyclohexene + water + cyclohexanone + *N*-methyl-2-pyrrolidone (+acetonitrile) // Journal of Chemical Engineering Data. 2019. V. 64. N 6. P. 2888–2893. DOI: 10.1021/ acs.jced.9b00245.
- 13. Frolkova, A.V., Mayevskiy M.A., Frolkova A.K. Analysis of phase equilibrium diagrams of cyclohexene+water+cyclohexanone+solvent system // Journal of Chemical Engineering Data. 2019. V. 63. P. 679-683. DOI: 10.1021/acs.jced.7b00870.
- 14. Patent 2618273 RU. Method of cyclohexanone separation from the reaction mixture water acetonitrile cyclohexene cyclohexanone / Frolkova A.K., Frolkova A.V., Akishina A.A. : appl. 2015148224, 10.11.2015; publ. 03.05.2017.
- Frolkova A.V., Maevskij M.A., Frolkova A.K., Pletnev D.B. Development of energy-efficient technologies for the production of organic substances based on a complex study of the reaction and separating constituents // Theoretical Foundations of Chemical Engineering. 2020. V. 54. N 6. P. 706-713 DOI: 10.31857/S0040357120060159.
- 16. Klejmenova M. N., Komarova L. F., Lazutkina Yu. S. Creation of resource-saving technologies in the production of organosilicon enamels based on rectification // Himiya v interesah ustojchivogo razvitiya. 2013. N 21. P. 211-218 (in Rus.).
- 17. Klejmenova M.N., Komarova L.F., Lazutkina Yu.S. Technology for the processing of liquid waste solvents in the production of organosilicon enamels // Ekologiya i promyshlennost' Rossii. 2014. N 4. P.11-15 (in Rus.).
- Frolkova A.V., Frolkova A.K., Chelyuskina T.V. Separation of the four-component system acetone chloroform ethanol water by autoextractive-heteroazeotropic rectification // Fine Chemical Technologies. 2010. V. 5. N 6. P. 27–31. (in Rus.).
- Mayevskiy M.A., Frolkova A.V., Frolkova A.K. Separation and purification of methyl isobutyl ketone from acetone + isopropanol + water + methyl isobutyl ketone + methyl isobutyl carbinol + diisobutyl ketone mixture // ACS Omega. 2020. DOI: 10.1021/ acsomega.0c03718.
- Frolkova A.V., Peshekhonceva M.S., Gaganov I.S. Intermediate specified separation in the rectification of four-component mixtures // Theoretical Foundations of Chemical Engineering. 2018. V. 13. N 3. P. 41–48. (in Rus.).
- Peshekhonceva M.E., Maevskij M.A., Gaganov I.S., Frolkova A.V. Areas of energy advantage of separation schemes for mixtures containing components with close volatilities // Fine Chemical Technologies. 2020. V. 15. N 3. P. 7-20. DOI: 10.32362/2410-6593-2020-15-3-7-20 (in Rus.).
- 22. Okhlopkova E.A., Frolkova A.V. Comparative analysis of separation schemes of reaction mixtures of epichlorohydrin production in the presence of various solvents // Theoretical Foundations of Chemical Engineering. 2019. V. 53. P. 1028–1034. DOI: 10.1134/S0040579519060101.

Статья поступила в редакцию 08.09.2020, одобрена после рецензирования 26.10.2020, принята к публикации 15.12.2020.

Сведения об авторах:

Фролкова Анастасия Валериевна,

кандидат технических наук, доцент 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 e-mail: frolkova_nastya@mail.ru, тел.: 8-916-665-83-97.

Охлопкова Елена Андреевна,

консультант LABWARE, общество с ограниченной ответственностью ООО «ЛАБВЭА», 115093, г. Москва, ул. Люсиновская, д. 36, стр. 1

Фролкова Алла Константиновна,

доктор технических наук, профессор, заведующий кафедрой Химии и технологии основного органического синтеза, Институт тонких химических технологий имени М.В. Ломоносова федерального бюджетного образовательного учреждения высшего образования «МИРЭА – Российский технологический университет», 19571, г. Москва, Проспект Вернадского, д. 86

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов

About the authors:

Anastasia V. Frolkova,

Ph. D. (Tech,), Associated 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 frolkova_nastya@mail.ru, tel.: 8-916-665-83-97

Elena A. Okhlopkova,

consultant LABWARE, «LABWARE» LLC, 115093, Russia, Moscow, Lusinovskya str., 36-1

Alla K. Frolkova,

Doc. Sc. (Tech.), Professor, Head of 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

The authors declare no conflicts of interests

Для цитирования:

Фролкова А.В., Охлопкова Е.А., Фролкова А.К. Термодинамико-топологический анализ структуры фазовой диаграммы пятикомпонентной системы и синтез схемы разделения смеси органических продуктов // Химия и технология органических веществ. 2020. N 4 (16). С. 15–23.

For citation:

Frolkova A.V., Okhlopkova E.A., Frolkova A.K. Thermodynamic-topological analysis of the phase diagram structure of a five-component system and separation scheme synthesis for a mixture of organic products // Chemistry and Technology of Organic Substances. 2020. N 4 (16). P. 15–23 (in Rus.).