**Диаграммы фазового равновесия и** **особенности ректификационного разделения смесей, получаемых в процессе этерификации уксусной кислоты спиртами С1-С4**

***Сибирцев М.М.,1 Фролкова А.К.1***

*Аспирант, 1 год обучения*

*1МИРЭА - Российский технологический университет (РТУ МИРЭА),*

*Институт тонких химических технологий имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия*

*E-mail:* [*sibirtsev.98@mail.ru*](mailto:sibirtsev.98@mail.ru)

Сложные эфиры уксусной кислоты и спиртов С1-С4находят широкое применение в химической, фармацевтической, пищевой и др. отраслях. Одним из основных методов их получения является реакция этерификации, в результате которой образуются системы сложный эфир – уксусная кислота – спирт – вода разного состава. Комплексное исследование фазового поведения систем в целом, их бинарных и тройных составляющих в совокупности с анализом литературных и собственных данных по ректификационному разделению таких смесей позволяет выявить закономерности поведения объектов, в которых компоненты варьируются по гомологическим рядам, полезные при разработке новых схем разделения и прогноза их энергоэффективности. Работа посвящена термодинамико-топологическому анализу структур фазовых диаграмм четырехкомпонентных систем и синтезу принципиальных схем разделения смесей эквимолярного состава. Цель работы: установление взаимосвязи фазового поведения «гомологичных» систем и «гомологичных» структур схем разделения.

В качестве объектов рассматриваются системы I-IV, содержащие уксусную кислоту (УК), воду (В), спирт (метанол (М), этанол (Э), пропанол (П), н-бутанол (Б)), сложный эфир (метилацетат (МА), этилацетат (ЭА), пропилацетат (ПА), бутилацетат (БА)).

Увеличение числа углеродных атомов в молекулах спирта и эфира приводит к закономерному изменению фазового поведения: увеличению концентрации воды в бинарных азеотропах спирт-В (в системе I азеотроп отсутствует), эфир-В, тройных азеотропах спирт-эфир-В (в системе I азеотроп отсутствует); наличию области двухфазного расслаивания закрытого типа (в системе IV – открытого типа). В системе IV появляются: азеотроп Б-УК с максимумом температуры кипения и седловидный азеотроп БА-Б-УК, порождающий сепаратрическое многообразие. Структуры фазовых диаграмм систем I-III характеризуются наличием одной области дистилляции; системы IV – двумя, что исключает последнюю из рассматриваемого ряда.

Т.о. по ряду признаков к гомологическому ряду структур диаграмм относятся системы I-III, к которым можно применить общие принципы синтеза технологических схем ректификационного разделения. Им поставлен в соответствие первый ряд структур схем. На начальной стадии отделяется УК как кубовый продукт с наивысшей температурой кипения; в дистилляте выделяется тройная смесь эфир-спирт-вода, для разделения которой предложены комплексы экстрактивной ректификации (ЭР) с диметилсульфоксидом (ДМСО), этиленгликолем (ЭГ), автоэкстрактивной ректификации (АЭР) с водой. Системы II и III являются гомологичными по всем признакам и их разделение возможно в схемах второго ряда, построенных на сочетании ректификации и расслаивания, а также применении комплекса обезвоживания спирта (гетероазеотропная ректификация, ЭР).

Проведены расчеты процесса ректификации с использованием программного комплекса Aspen Plus и модели фазового равновесия NRTL, определены статические параметры работы колонн схем первого гомологического ряда. Наблюдается рост суммарных энергозатрат в кипятильниках колонн: 4457, 5189, 8853 кВт, соответственно, при переходе от I к III системе, что связано, в том числе, и с уменьшением селективности ДМСО (в отношении эфира) и ЭГ (в отношении спирта) и увеличением их расхода. Полученные результаты показывают возможность совершенствования существующих и создания новых схем разделения смесей, обладающих общими признаками диаграмм, на основе известных данных и обоснованного прогноза.