

Т. Р. Ахметзянов, Л. Ю. Яруллин, Ф. Р. Габитов,  
В. Ф. Хайрутдинов

### ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ ФАЗОВОГО РАВНОВЕСИЯ ФЕНИЛАМИНА В СВЕРХКРИТИЧЕСКОМ РАСТВОРИТЕЛЕ

*Ключевые слова:* фазовая диаграмма, критическая кривая, растворимость, сверхкритический флюид.

Результаты проведенных экспериментов показывают, что фазовое поведение фениламина при высоких давлениях и температуре заметно отличается от поведения при обычных условиях. В частности, наблюдается значительное смещение кривых равновесия, что может быть связано с изменением взаимодействий между молекулами фениламина и углекислого газа. Эти данные могут быть полезны для оптимизации процессов экстракции и разделения, где углекислый газ играет роль растворителя. Анализ полученных данных позволяет более глубоко понять механизмы взаимодействия между компонентами в суб- и сверхкритических условиях, а также предсказать поведение других подобных систем. Использование оптической ячейки высокого давления демонстрирует достоверные результаты для точного определения свойств VLE в различных условиях. Благодаря данной работе открывается путь для дальнейших исследований, нацеленных на изучение фазовых превращений других органических соединений в сверхкритических средах. Это может привести к разработке более эффективных технологий в химической и нефтехимической отраслях. Эти исследования также могут способствовать более экологически чистым методам разделения и очистки веществ, снижая потребность в токсичных растворителях. В данной статье представляются новые экспериментальные данные о свойствах фазового равновесия жидкость-пар при четырех выбранных изотермах: 313,15; 333,15; 353,15 и 443,15 К, охватывающих диапазон давлений от 0,8 до 32,4 МПа. Пробы отбирались из обеих равновесных фаз, а их состав анализировался с помощью гравиметрического метода.

T. R. Akhmetzyanov, L. Yu. Yarullin, F. R. Gabitov,  
V. F. Khairutdinov

### EXPERIMENTAL STUDY OF THE PROPERTIES OF PHASE EQUILIBRIUM OF PHENYLAMINE IN A SUPERCRITICAL SOLVENT

*Key words:* phase diagram, critical curve, solubility, supercritical fluid.

The results of the experiments show that the phase behavior of phenylamine at high pressures and temperatures differs significantly from the behavior under normal conditions. In particular, a significant shift of the equilibrium curves is observed, which can be associated with a change in the interactions between phenylamine molecules and carbon dioxide. These data can be useful for optimizing extraction and separation processes where carbon dioxide acts as a solvent. Analysis of the obtained data allows for a deeper understanding of the mechanisms of interaction between the components in sub- and supercritical conditions, as well as for predicting the behavior of other similar systems. The use of a high-pressure optical cell demonstrates reliable results for accurate determination of the VLE properties under various conditions. This work opens the way for further research aimed at studying the phase transformations of other organic compounds in supercritical media. This can lead to the development of more efficient technologies in the chemical and petrochemical industries. These studies can also contribute to more environmentally friendly methods of separation and purification of substances, reducing the need for toxic solvents. This paper presents new experimental data on the properties of liquid-vapor phase equilibrium at four selected isotherms: 313.15; 333.15; 353.15 and 443.15 K, covering the pressure range from 0.8 to 32.4 MPa. Samples were taken from both equilibrium phases, and their composition was analyzed using the gravimetric method.

#### Введение

Фениламин и его бинарные смеси широко используются в промышленности, охватывая такие области, как производство полиуретанов, резинотехнических изделий, красителей, пигментов, медикаментов и агрохимикатов, а также специализированных волокон [1 – 3]. Эффективное проектирование и реализация химических процессов, например, получение фениламина, требуют глубокого понимания как кинетики, так и термодинамики реагирующих систем. Особенно важные данные о термодинамических свойствах смеси фениламина и углекислого газа необходимы для достижения успеха в технологии синтеза ароматических карбаматов с использованием этих веществ и спиртов. Кроме того, проведенные исследования выявили высокоэффективные гомогенные катализаторы,

способствующие превращению углекислого газа и аминов в диалкилформаиды. Понимание этих сложных процессов является ключом к оптимизации производства и открывает новые горизонты для инновационных решений в химической отрасли.

Химические взаимодействия аминов с углекислым газом (CO<sub>2</sub>) привлекали внимание многих исследователей [4 – 7] благодаря своей практической значимости. В частности, были разработаны технологии для очистки аминных газов, позволяющие эффективно улавливать CO<sub>2</sub> из промышленных выбросов, исходящих от электростанций, нефтеперерабатывающих и нефтехимических заводов, а также газоперерабатывающих предприятий. В этих процессах для удаления углекислого газа используют водные растворы аминов, далеко не всегда чистых [8 – 12]. Ключевым аспектом здесь является химическая

абсорбция: аминовые соединения должны вступать в реакцию с  $\text{CO}_2$ . Однако в обычных условиях множество аминов, включая фениламин, не проявляют активности из-за высоких энергетических барьеров активации [4, 6]. Для стимуляции этих реакций применяются катализаторы [11, 12] или вода [13], снижающие энергию активации. В данной работе мы обращаем внимание на обезвоженный фениламин и чистый  $\text{CO}_2$ , проводя измерения равновесия фаз «пар-жидкость» (VLE) без добавления катализаторов или воды.

Знания о поведении вещества в различных условиях позволяют инженерам и технологам не только улучшать производственные процессы, но и существенно сокращать затраты, повышая эффективность использования сырья и энергии. Таким образом, данные ПТху служат своеобразным навигатором в мире высоких технологий, позволяя предсказывать взаимодействия между компонентами и обеспечивая стабильность процессов.

В промышленности распространен подход, при котором критические и термодинамические свойства чистых компонентов, а также параметры бинарных взаимодействий оцениваются на базе надежных экспериментальных данных о фазовом равновесии (VLE, ПТху). В данной работе осуществляется исследование фазового равновесия для смеси сверхкритического углекислого газа (СК  $\text{CO}_2$ ) и фениламина при высоких давлениях и температурах, что имеет важное значение для промышленных процессов. Экспериментально было определено поведение фазового равновесия (ПТху) данной бинарной системы. Исследование является частью долгосрочного проекта, посвященного детальному изучению фазово-равновесных свойств VLE в бинарных смесях с участием СК  $\text{CO}_2$ . Сверхкритические жидкости, и особенно СК  $\text{CO}_2$ , находят широкое применение в производстве электроэнергии, экстракции, повышении нефтеотдачи, очистке окружающей среды, химических реакциях и переработке полимеров [14–20]. Таким образом, промышленные секторы продолжают активно использовать замечательные аномальные термодинамические и транспортные свойства сверхкритических флюидов, что делает СК  $\text{CO}_2$  и его бинарные смеси предметом возрастающего научного интереса.

Обзор литературы показал, что VLE -измерения  $\text{CO}_2$  + фениламин при высоких температурах и высоких давлениях отсутствуют. Были найдены только два источника данных [21,22] по растворимости  $\text{CO}_2$  в фениламин при температуре окружающей среды (293,15 и 298,15 К) и атмосферном давлении. Ленуар и др. [21] сообщили о константе Генри для  $\text{CO}_2$  (газообразного растворенного вещества) в полярном растворителе (фениламин) при комнатной температуре 298,15 К и атмосферном давлении. Измерения проводили методом газожидкостной хроматографии. Люринг и Шумпе [22] также сообщили о растворимости  $\text{CO}_2$  в фениламин при температуре окружающей среды 293,15 К и атмосферном давлении. Измерения проводились барометрическим методом. В настоящей работе представлены новые данные о VLE (ПТху) и критических свойствах смеси  $\text{CO}_2$  + фениламин.

Данные охватывают диапазон температур от (313 до 443) К и давлений от (0,8 до 33) МПа. Эти данные значительно расширяют диапазоны давлений и температур предыдущих исследований.

## 1 Экспериментальная часть

### 1.1 Материалы

Образцы, использованные в настоящей работе, приобретены у компаний «ТехГазСерв» и ООО «Реактив Экспресс» (Москва). Чистота образцов оценивалась поставщиками. Все химикаты использовались в том виде, в котором они были получены; никакой дальнейшей очистки перед измерениями не проводилось. Молярная фракционная чистота составляла 0,995 и 0,980 для  $\text{CO}_2$  и фениламина соответственно. Содержание воды в образце определяется с использованием метода Карла Фишера.

### 1.2 Аппарат VLE

Измерения VLE проводились с применением аппарата, подробно описанного в работах [14 – 20]. В нашей работе мы использовали тот же аппарат VLE без каких-либо изменений и модификаций, предоставляя лишь необходимую информацию. Основная конструкция установки VLE включает в себя ячейку фазового равновесия (оптическую ячейку) и систему контроля температуры и давления. Пробы жидкости и пара, отобранные из оптической ячейки в равновесных условиях, подвергались гравиметрическому анализу. Ячейка, способная выдерживать давление до 50 МПа и температуру до 473 К с рабочим объемом 117 см<sup>3</sup>, состоит из сапфировых окон, расположенных между крышкой и корпусом из нержавеющей стали. Границу фаз можно наблюдать визуально через сапфировые окна, которые обеспечивают возможность убедиться в том, что экспериментальные условия равновесия находятся в двухфазной области, что подтверждает устойчивость границы раздела фаз. Это позволяет фазовой границе «жидкость-пар» в ячейке обзора сохранять одно и то же положение (условие стабильности) на протяжении всего эксперимента. Это означает, что Т и Р остаются практически постоянными, а их колебания находятся в пределах экспериментальной неопределенности.

Медная рубашка использовалась для более плавного регулирования температуры и равномерного нагрева измерительной ячейки. Температуру ячейки измеряли с помощью хромель-алюмелевых термопар, предварительно откалиброванных по эталонному платиновому термометру сопротивления (ПРТ-10). Давление в оптической ячейке высокого давления создавалось с помощью насоса Thar Technology (Supercritical 24). Для измерения давления в оптической ячейке использовался грузовой манометр (МО-1226, ООО «Манометр», Россия).

1.3 Методика (отбор проб, разделение компонентов, определение фазовой концентрации)

Одна треть оптической ячейки заполнялась фениламином (конденсированная фаза, жидкость)

через открытое сапфировое окно. Затем перед началом эксперимента (обычная процедура дегазации) вся система (включая трубопроводы) была вакуумирована с помощью вакуумной системы (вакуумного насоса). После этого оптическая ячейка нагревалась до нужной температуры и в нее с помощью насоса высокого давления подавался  $\text{CO}_2$  до достижения необходимого давления. Перед проведением отбора проб (извлечения пробы из жидкой или газовой фаз в условиях равновесия) необходимо достижение состояния фазового равновесия в двухфазной (жидкость + газ) системе. Равновесное состояние фаз доводят перемешиванием двухфазной смеси путем покачивания измерительной ячейки [15] в течение 30 – 40 мин (поворотом измерительной ячейки на 90 градусов вокруг своей оси). После достижения состояния фазового равновесия перемешивание образца прекращали, измерительную ячейку устанавливали вертикально и выдерживали 40 мин. Фазовое равновесие определяется как состояние, при котором температура и давление остаются почти постоянными в пределах своих колебаний. Также осуществлялось визуальное наблюдение за устойчивостью границы фазы. Когда система пришла в равновесие, давление считывается с манометра. Система отбора проб (пробоотборник) использовалась для извлечения пробы из равновесных фаз с целью разделения и определения их состава. Перед отбором проб пустой пробоотборник (объемом  $4,1 \text{ см}^3$ ) взвешивался на электронных весах «Vibra» с погрешностью  $10^{-4}$  гр. Проба, взятая из измерительной ячейки из жидкой или газовой фазы в состоянии равновесия (постоянные P и T), представляет собой смесь  $\text{CO}_2$  и фениламина. Гравиметрический (весовой) метод анализа проб жидкой и паровой фазы (определение концентрации фаз) требует отделения компонентов смеси ( $\text{CO}_2$  и фениламина) от экстрагированной пробы. Разделение экстрагированной пробы на газообразную ( $\text{CO}_2$ , летучий компонент) и жидкую (фениламин, конденсируемая компонента) компоненты достигалось путем охлаждения пробоотборника до комнатной температуры (293 K), вызывающих образование тяжелых (конденсируемый, фениламин) и легких (не -конденсирующиеся,  $\text{CO}_2$ ) компоненты необходимо отделить. При этом растворенный в СК  $\text{CO}_2$  фениламин переходит в жидкую (конденсированную фазу, фениламин) и неконденсируемую газовую фазу ( $\text{CO}_2$ ). Для полного удаления растворенной в фенилаmine газовой фазы ( $\text{CO}_2$ ) при атмосферном давлении и комнатной температуре после выпуска первой порции ( $\text{CO}_2$ ) в пробоотборнике создавали вакуум для удаления оставшегося газообразного ( $\text{CO}_2$ ) в жидком фенилаmine. Эту процедуру повторяли несколько раз, чтобы убедиться, что  $\text{CO}_2$  полностью отделился от жидкого фениламина. Измерение состава фазы является наиболее важной частью эксперимента VLE, особенно концентрации паровой фазы. Для повышения точности измерения концентрации паровой фазы мы использовали пробоотборник сравнительно большого объема ( $4,1 \text{ см}^3$ ) (обычно при низких давлениях общая масса пара в ячейке невелика). После завершения разделения необходимо взвесить пробоотборник с чистым компонентом (фениламин). Составы жидкости

и пара определяли гравиметрически. Массу экстрагированной смеси, массу разделенных компонентов ( $m_{\text{фен}}$  и  $m_{\text{CO}_2}$ ) можно легко измерить как разницу между заполненным и пустым пробоотборником после выпуска паровой фазы ( $\text{CO}_2$ ). Таким образом, концентрацию фениламина в жидкой (x) или паровой (y) фазах в этом методе можно получить как:

$$x \text{ или } y = \frac{\frac{m_{\text{фен}}}{M_{\text{фен}}}}{\frac{m_{\text{CO}_2}}{M_{\text{CO}_2}} + \frac{m_{\text{фен}}}{M_{\text{фен}}}},$$

где – масса растворенного фениламина в сверхкритическом  $\text{CO}_2$ ;  $M_{\text{фен}}$  — молярная масса фениламина;  $m_{\text{CO}_2}$  — масса  $\text{CO}_2$ ,  $M_{\text{CO}_2}$  — молярная масса  $\text{CO}_2$ .

Описанная выше установка VLE использовалась для измерения критических параметров свойств (критической температуры, давления и плотности) чистых жидкостей, таких как пропан и н-бутан, а также их бинарных смесей, для иллюстрации корректной работы установки и методики измерений [14,15]. Также на установке VLE измерялись фазово-равновесные свойства бинарных смесей (СК  $\text{CO}_2$ +толуол, СК  $\text{CO}_2$ +н-тетрадекан, СК  $\text{CO}_2$ +этилбензол, СК  $\text{CO}_2$ + гексадекан, СК  $\text{C}_3\text{H}_8$ +этилбензол и пропан + н-бутан), для которых в литературе имеются достоверные данные РТху [14–20]. Хорошее согласие с литературными и справочными данными для чистых компонентов дает некоторую уверенность в экспериментальном VLE. Данные для  $\text{CO}_2$ + фениламина получены с использованием той же аппаратуры и методики.

## 2 Результаты и обсуждение

Изотермические данные VLE (РТху) бинарной смеси СК  $\text{CO}_2$  + фениламина для четырех выбранных температур (313,15, 333,15, 353,15 и 443,15) K в зависимости от давления, измеренного с помощью оптической ячейки, представлены в таблице 1, экспериментальные проекции P-x,y (изотермическое фазовое равновесие, данные Pху) смеси СК  $\text{CO}_2$ + фениламина изображены на рис. 1. Как видно из рис. 1 присутствие фениламина в паровой фазе невелико, тогда как при высоких давлениях (особенно вблизи критической точки) и высоких температурах растворимость фениламина в СК  $\text{CO}_2$  быстро возрастает. А также для точного определения критических параметров бинарной системы можно использовать изохорный подход. Подход исследования в изохорических условиях заключается в наблюдении поведения границы раздела фаз (мениска) в зависимости от количества вещества в оптической ячейке и температуры исследуемого образца. В далеких от критического состояния плотность жидкой фазы много выше, чем плотность пара. По мере повышения температуры плотности фаз сближаются. Средняя плотность сосуществующих фаз постоянно при любой температуре и зависит от степени заполнения ячейки веществом. При этом возможны различные

варианты изменения системы в постоянном объеме при повышении температуры.

1. Средняя плотность много меньше критической плотности. При повышении температуры оптической ячейки с пробой жидкости, испаряясь, все больше переходит в паровую фазу, мениск при этом опускается и в конечном итоге исчезает. При этом весь объем ячейки заполнится паровой фазой, которая при малейшем повышении давления начнет конденсироваться. Критическое состояние не достигается, все параметры ниже критических значений.

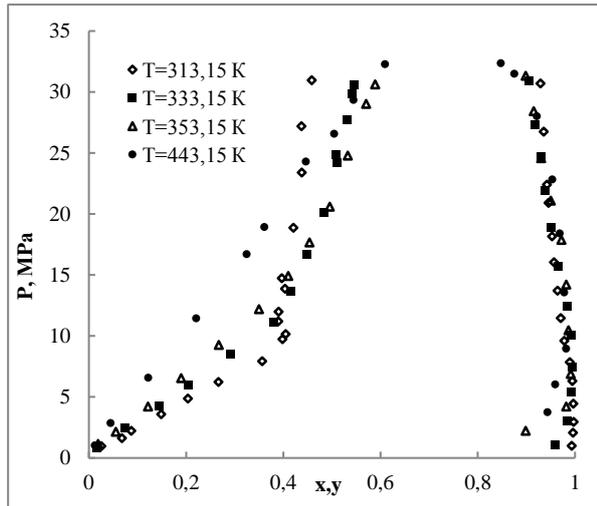


Рис. 1 – Изотермическое фазовое равновесие смеси СК CO<sub>2</sub> + фениламин

Fig. 1 – Isothermal phase equilibrium of the mixture SC CO<sub>2</sub> + phenylamine

2. Средняя плотность много выше критической плотности, мениск поднимается, жидкая фаза заполняет весь объем, при этом мениск исчезает при давлении и температуре ниже, чем критические.

3. Средняя плотность соответствует критической плотности. При нагревании образца температура достигает критического значения, а плотность жидкости и пара уравниваются (при условии перемешивания содержимого ячейки), т.е. становится равными критической плотности, и мениск исчезает в середине объема. Давление оптической ячейке также будет критическим.

В 3 случае наблюдаться интересное явление, называемое критической опалесценцией. Суть явления в том, что при охлаждении гомогенной флюидной системы в области критического состояния перед образованием жидкой фазы возникает дисперсная система, состоящая из сплошной газовой среды и дисперсной жидкой фазы. При прохождении дисперсной системы электромагнитные волны оптического диапазона преломляются, свет рассеивается, и вещество в оптической ячейке становится непрозрачным. Данное явление часто используется для фиксации достижения критического состояния. Это наглядно видно из результатов наших исследований [14-20].

Таблица 1 - Измеренные данные изотермического VLE (PTxy) бинарной смеси CO<sub>2</sub> + фениламин

Table 1 - Measured isothermal VLE (PTxy) data of the binary mixture CO<sub>2</sub> + phenylamine

Давление, МПа	Мольная доля фениламина	Мольная доля CO <sub>2</sub>
1	2	3
<i>T = 313.15 K</i>		
<i>Жидкая фаза</i>		
0.98	0.975	0.025
1.64	0.932	0.068
2.24	0.913	0.087
3.59	0.851	0.149
4.88	0.796	0.204
6.23	0.733	0.267
7.94	0.644	0.356
9.74	0.626	0.374
10.17	0.617	0.383
11.22	0.620	0.380
12.00	0.610	0.390
13.87	0.597	0.403
14.75	0.603	0.397
18.88	0.580	0.420
23.40	0.562	0.438
27.21	0.563	0.437
30.97	0.542	0.458
<i>Газовая фаза</i>		
1.01	0.007	0.993
2.07	0.004	0.996
2.96	0.003	0.997
4.46	0.003	0.997
6.31	0.006	0.994
7.85	0.011	0.989
9.62	0.022	0.978
11.47	0.029	0.971
13.73	0.036	0.964
16.05	0.044	0.956
18.17	0.048	0.952
20.92	0.055	0.945
22.40	0.058	0.942
26.76	0.064	0.936
30.71	0.071	0.929
<i>T=333.15 K</i>		
<i>Жидкая фаза</i>		
0.80	0.983	0.017
2.50	0.926	0.074
4.26	0.856	0.144
5.97	0.795	0.205
8.54	0.709	0.291
11.14	0.620	0.380
13.70	0.586	0.414
16.68	0.551	0.449
20.12	0.516	0.484
24.16	0.490	0.510
27.72	0.470	0.530
29.83	0.459	0.541
30.58	0.455	0.545
<i>Газовая фаза</i>		
1.10	0.041	0.959

## Продолжение таблицы 1

1	2	3
3.05	0.015	0.985
5.39	0.007	0.993
7.42	0.005	0.995
10.04	0.007	0.993
12.47	0.016	0.984
15.69	0.034	0.966
18.92	0.049	0.951
21.92	0.062	0.938
24.68	0.071	0.929
27.29	0.081	0.919
30.94	0.095	0.905
<i>T = 353.15 K</i>		
<i>Жидкая фаза</i>		
1.16	0.981	0.019
2.16	0.945	0.055
4.22	0.879	0.121
6.55	0.810	0.190
9.27	0.733	0.267
12.20	0.650	0.350
14.92	0.590	0.410
17.67	0.546	0.454
20.60	0.504	0.496
24.80	0.468	0.532
29.04	0.430	0.570
30.64	0.411	0.589
<i>Газовая фаза</i>		
2.24	0.101	0.899
4.22	0.018	0.982
6.89	0.009	0.991
10.49	0.013	0.987
14.23	0.018	0.982
17.89	0.028	0.972
21.11	0.050	0.950
24.59	0.070	0.930
28.44	0.085	0.915
31.34	0.101	0.899
<i>T = 443.15 K</i>		
<i>Жидкая фаза</i>		
1.02	0.987	0.013
2.87	0.955	0.045
6.58	0.878	0.122
11.45	0.779	0.221
16.71	0.675	0.325
18.92	0.639	0.361
24.29	0.553	0.447
26.57	0.495	0.505
29.35	0.456	0.544
32.28	0.391	0.609
<i>Газовая фаза</i>		
3.74	0.057	0.943
6.02	0.041	0.959
8.97	0.018	0.982
13.57	0.022	0.978
18.41	0.031	0.969
22.82	0.047	0.953
28.02	0.078	0.922
31.50	0.125	0.875
32.36	0.152	0.848

Но для системы СК CO<sub>2</sub>+ фениламин вблизи критического состояния мы не смогли определить мольные соотношения (x,y) для изотерм представленных на рис. 1. Малейшее изменение соотношения каждого компонента приводит к большим отклонениям в графике.

Настоящее исследование показало, что гравиметрическим (весовым) методом анализа проб жидкой и паровой фазы можно точно определить фазовое равновесие смеси CO<sub>2</sub> + фениламин при высоких давлениях (до 32,4 МПа) и температуре до 443,15 К. Результаты настоящего исследования VLE (PТху) показали, что мольная доля фениламина в паровой фазе невелика, в то время как при высоких давлениях (особенно вблизи критической точки) и высоких температурах растворимость фениламина в СК CO<sub>2</sub> быстро возрастает. Форма критической линии смеси CO<sub>2</sub> + фениламин, подтверждает принадлежность исследуемой смеси к типу III по классификации Ван Кониненбурга и Скотта.

**Благодарность**

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках государственного задания на оказание государственных услуг (выполнение работ) от 29.12.2022 г. № 075-01508-23-00 (Сверхкритические флюидные технологии в переработке полимеров (FZSG-2023-0007))

**Литература**

- [1] S.P.M. Ventura, J. Pauly, J.L. Daridon, I.M. Marrucho, A.M.A. Dias, J.P. Coutinho. J. Chem. Eng. Data. 52, 1100–1102 (2007). DOI: 10.1021/je7000528 .
- [2] E. Vessallya, Kh Didehbana, M. Babazadehb, A. Hosseinianc, L. Edjlalib. J. CO<sub>2</sub> Util. 21, 480 – 490 (2017). DOI: 10.1016/j.jcou.2017.08.013.
- [3] P. Munshi, D.J. Heldebrant, E.P. McKoon, P.A. Kelly, Ch-Ch Tai, Ph.G. Jessop. Tetrahedron Lett. 44, 2725 – 2727 (2003). DOI: 10.1016/S0040-4039(03)00384-8.
- [4] B. Farbos, T. Tassaing. Phys. Chem. Chem. Phys. 11, 5052–5061(2009). DOI: 10.1039/B818956K.
- [5] K. Teranishi, A. Ishikawa, H. Sato, H. Naka. Bull. Chem. Soc. Jpn. 90, 4, 451 – 460 (2017). DOI: 10.1246/bcsj.20160375.
- [6] B. Arstad, R. Blom, O. Swang. J. Phys. Chem. A. 111, 7, 1222–1228 (2007). DOI: 10.1021/jp065301v.
- [7] E.F. da Silva, H.F. Svendsen. Int. J. Greenh. Gas Control. 1, 151–157 (2007). DOI: 10.1016/S1750-5836(07)00022-9.
- [8] A.B. Rao, E.S. Rubin. Environ. Sci. Technol. 36, 4467 – 4475 (2002). DOI: 10.1021/es0158861
- [9] B. Zhao, Y. Su, W. Tao, L. Li, Y. Peng. Int. J. Greenh. Gas Control. 9, 355 – 371 (2012). DOI: 10.1016/j.ijggc.2012.05.006.
- [10] Z.R. Lee, L.J. Quinn, Ch.W. Jones, S.E. Hayes, D.A. Dixon. J. Phys. Chem. A. 125, 45, 9802 – 9818 (2021). DOI: 10.1021/acs.jpca.1c05950.
- [11] R. Yuan, B. Wei, G. Fu. J. Org. Chem. 82, 3639 – 3647 (2017). DOI: 10.1021/acs.joc.7b0016.
- [12] M. Abila, J.C. Choi, T. Sakakura. Chem. Commun. 2238 – 2239 (2001). DOI: 10.1039/B106201h.
- [13] M.T. Nguyen, G. Raspoet, L.G. Vanquickenborne, P.Th Van Duijnen. Phys. Chem. A. 101, 40, 7379 – 7388 (1997). DOI: 10.1021/jp9701045.
- [14] V.F. Khairutdinov, F.M. Gumerov, Z.I. Zaripov, I.Sh Khabriev, L.Yu Yarullin, I. M. Abdulagatov. J. Supercrit.

- Fluids. 156, 104628 (2020). DOI: 10.1016/j.supflu.2019.104628.
- [15] V.F. Khairutdinov, F.M. Gumerov, F.R. Gabitov, Z.I. Zaripov, I.Sh Khabriev, T.R. Akhmetzyanov, I.M. Abdulagatov. *J. Chem. Eng. Data.* 65, 3306-3317 (2020). DOI: 10.1021/acs.jced.0c00104.
- [16] V.F. Khairutdinov, F.M. Gumerov, I.Sh Khabriev, M.I. Farakhov, I.Z. Salikhov, I. Polishuk, I.M. Abdulagatov. *Fluid Phase Equilib.* 510, 112502 (2020). DOI: 10.1016/j.fluid.2020.112502.
- [17] I.Sh. Khabriev, V.F. Khairutdinov, F.M. Gumerov, R.M. Khuzakhanov, R.M. Garipov, I.M. Abdulagatov. *J. Mol. Liq.* 337, 116371 (2021). DOI: 10.1016/j.molliq.2021.116371.
- [18] V.F. Khairutdinov, I.Sh Khabriev, T.R. Akhmetzyanov, L.Yu Yarullin, F.R. Gabitov, I. Polishuk, I.M. Abdulagatov. *J. Supercrit. Fluids.* 203 106060 (2023). DOI: 10.1016/j.supflu.2023.106060.
- [19] V.F. Khairutdinov, I.Sh Khabriev, T.R. Akhmetzyanov, L.Yu Yarullin, L. Yu Sabirova, A. Hern´andez, I.M. Abdulagatov. *J. Mol. Liq.* 390, 123172 (2023). DOI: 10.1016/j.molliq.2023.123172.
- [20] V.F. Khairutdinov, F.M. Gumerov, I.S. Khabriev, T.R. Akhmetzyanov, I.Z. Salikhov, I. Polishuk, I.M. Abdulagatov. *Fluid Phase Equilibria.* 564, 113615 (2023). DOI: 10.1016/j.fluid.2022.113615.
- [21] J.-Y. Lenoir, Ph Renault, H. Renon. *J. Chem. Eng. Data.* 16, 340 – 342 (1971). DOI: 10.1021/je60050a014.
- [22] P. Lührling, A. Schumpe. *J. Chem. Eng. Data.* 34, 250 – 252 (1989). DOI: 10.1021/je00056a029.
7. E.F. da Silva, H.F. Svendsen. *Int. J. Greenh. Gas Control.* 1, 151-157 (2007). DOI: 10.1016/S1750-5836(07)00022-9.
8. A.B. Rao, E.S. Rubin. *Environ. Sci. Technol.* 36, 4467 - 4475 (2002). DOI: 10.1021/es0158861.
9. B. Zhao, Y. Su, W. Tao, L. Li, Y. Peng. *Int. J. Greenh. Gas Control.* 9, 355 - 371 (2012). DOI: 10.1016/j.ijggc.2012.05.006.
10. Z.R. Lee, L.J. Quinn, Ch.W. Jones, S.E. Hayes, D.A. Dixon. *J. Phys. Chem. A.* 125, 45, 9802 - 9818 (2021). DOI: 10.1021/acs.jpca.1c05950.
11. R. Yuan, B. Wei, G. Fu. *J. Org. Chem.* 82, 3639 - 3647 (2017). DOI: 10.1021/acs.joc.7b0016.
12. M. Abla, J.C. Choi, T. Sakakura. *Chem. Commun.* 2238 - 2239 (2001). DOI: 10.1039/B106201h.
13. M. T. Nguyen, G. Raspoet, L.G. Vanquickenborne, P.Th Van Duijnen. *Phys. Chem. A.* 101, 40, 7379 - 7388 (1997). DOI: 10.1021/jp9701045.
14. V.F. Khairutdinov, F.M. Gumerov, Z.I. Zaripov, I.Sh Khabriev, L.Yu Yarullin, I. M. Abdulagatov. *J. Supercrit. Fluids.* 156, 104628 (2020). DOI: 10.1016/j.supflu.2019.104628.
15. V. F. Khairutdinov, F.M. Gumerov, F.R. Gabitov, Z.I. Zaripov, I.Sh Khabriev, T.R. Akhmetzyanov, I.M. Abdulagatov. *J. Chem. Eng. Data.* 65, 3306-3317 (2020). DOI: 10.1021/acs.jced.0c00104.
16. V.F. Khairutdinov, F. M. Gumerov, I. Sh Khabriev, M. I. Farakhov, I. Z. Salikhov, I. Polishuk, I.M. Abdulagatov. *Fluid Phase Equilib.* 510, 112502 (2020). DOI: 10.1016/j.fluid.2020.112502.
17. I.Sh. Khabriev, V.F. Khairutdinov, F.M. Gumerov, R.M. Khuzakhanov, R.M. Garipov, I.M. Abdulagatov. *J. Mol. Liq.* 337, 116371 (2021). DOI: 10.1016/j.molliq.2021.116371.
18. V. F. Khairutdinov, I.Sh Khabriev, T.R. Akhmetzyanov, L.Yu Yarullin, F.R. Gabitov, I. Polishuk, I.M. Abdulagatov. *J. Supercrit. Fluids.* 203 106060 (2023). DOI: 10.1016/j.supflu.2023.106060.
19. V.F. Khairutdinov, I.Sh Khabriev, T.R. Akhmetzyanov, L.Yu Yarullin, L.Yu Sabirova, A. Hern´andez, I.M. Abdulagatov. *J. Mol. Liq.* 390, 123172 (2023). DOI: 10.1016/j.molliq.2023.123172.
20. V. F. Khairutdinov, F. M. Gumerov, I. S. Khabriev, T. R. Akhmetzyanov, I.Z. Salikhov, I. Polishuk, I.M. Abdulagatov. *Fluid Phase Equilibria.* 564, 113615 (2023). DOI: 10.1016/j.fluid.2022.113615.
21. J.-Y. Lenoir, Ph Renault, H. Renon. *J. Chem. Eng. Data.* 16, 340 - 342 (1971). DOI: 10.1021/je60050a014.
22. P. Lührling, A. Schumpe. *J. Chem. Eng. Data.* 34, 250 - 252 (1989). DOI: 10.1021/je00056a029.

## References

1. S.P.M. Ventura, J. Pauly, J.L. Daridon, I.M. Marrucho, A.M.A. Dias, J.P. Coutinho. *J. Chem. Eng. Data.* 52, 1100-1102 (2007). DOI: 10.1021/je7000528.
2. E. Vessallya, Kh Didehbana, M. Babazadehb, A. Hosseinianc, L. Edjlalib. *J. CO<sub>2</sub> Util.* 21, 480 - 490 (2017). DOI: 10.1016/j.jcou.2017.08.013.
3. P. Munshi, D.J. Heldebrant, E.P. McKoon, P.A. Kelly, Ch-Ch Tai, Ph.G. Jessop. *Tetrahedron Lett.* 44, 2725 - 2727 (2003). DOI: 10.1016/S0040-4039(03)00384-8.
4. B. Farbos, T. Tassaing. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 11, 5052-5061(2009). DOI: 10.1039/B818956K
5. K. Teranishi, A. Ishikawa, H. Sato, H. Naka. *Bull. Chem. Soc. Jpn.* 90, 4, 451 - 460 (2017). DOI: 10.1246/bcsj.20160375.
6. B. Arstad, R. Blom, O. Swang. *J. Phys. Chem. A.* 111, 7, 1222-1228 (2007). DOI: 10.1021/jp065301v.

© **Т. Р. Ахметзянов** – к.т.н., доцент кафедры Теоретических основ теплотехники (ТОТ), Казанский национальный исследовательский технологический университет (КНИТУ), Казань, Россия, ahmetzyanov1992@bk.ru; **Л. Ю. Яруллин** – к.т.н., доцент кафедры ТОТ, КНИТУ, yarul.lenar@gmail.com; **Ф. Р. Габитов** – д-р техн. наук, проф., кафедра ТОТ, КНИТУ, farizan@kstu.ru; **В. Ф. Хайрутдинов** – д-р техн. наук, проф., кафедра ТОТ, КНИТУ, kvener@yandex.ru.

© **T. R. Akhmetzyanov** – PhD (Technical Sci.), Associate Professor, Theoretical Fundamentals of Thermal Engineering (TFTE) department, Kazan National Research Technological University (KNRTU), Kazan, Russia, ahmetzyanov1992@bk.ru; **L. Y. Yarullin** – PhD (Technical Sci.), Associate Professor, the TFTE department, KNRTU, yarul.lenar@gmail.com; **F. R. Gabitov** – Doctor of Sciences (Technical Sci.), Professor, the TFTE department, KNRTU, farizan@kstu.ru; **V. F. Khairutdinov** – Doctor of Sciences (Technical Sci.), Professor, the TFTE department, KNRTU, kvener@yandex.ru.