ФИЗИЧЕСКАЯ ОПТИКА

УДК 539.194

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ВКЛАДОВ МЕЖМОЛЕКУЛЯРНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ РАЗЛИЧНЫХ ТИПОВ В ТРАНСЛЯЦИОННЫЕ КОЛЕБАТЕЛЬНЫЕ ЧАСТОТЫ ЖИДКОСТЕЙ НА ОСНОВЕ КЛАСТЕРНО-КОНТИНУАЛЬНОЙ МОДЕЛИ

© 2005 г. **В. Н. Демидов**, канд. хим. наук

Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Санкт-Петербург

На основе термодинамической кластерно-континуальной модели, предложенной ранее для идентификации квазирешеточных трансляционных колебательных частот жидкостей, получены новые сведения о физико-химических механизмах влияния межмолекулярных взаимодействий на формирование указанных частот. В частности, таким путем определены вклады в значения частот полос поглощения длинноволновых ИК спектров ряда неассоциированных и ассоциированных жидкостей со стороны межмолекулярных сил дисперсионной, ориентационно-индукционной и резонансной природы. Возможности нового подхода сопоставлены с результатами применения для этих целей известных алгоритмов, основанных на континуальной модели Онзагера–Беттчера, а также методе дисперсии эффективного поля.

Коды OCIS: 300.6270, 300.6250.

Поступила в редакцию 26.10.2004.

Введение

Выделение вкладов в частоту трансляционных квазирешеточных межмолекулярных колебаний в жидкостях, отражающих проявление межмолекулярных взаимодействий (ММВ) различных типов, то есть универсальных (дисперсионных, ориентационно-индукционных, резонансных) и специфических (комплексообразование и образование водородных связей), представляет интерес с точки зрения анализа механизмов формирования длинноволнового ИК поглощения жидких неупорядоченных сред.

В настоящее время уже имеется обширный материал, показывающий как ММВ различной природы влияют на смещение внутримолекулярных полос поглощения в ИК и электронных спектрах, которое наблюдается при сольватации молекул, а также в процессе конденсации пара в жидкое или твердое состояние [1–3]. Указанные сольватохромные сдвиги проанализированы с позиций континуальной модели Онзагера–Беттчера и известного подхода, основанного на нахождении полных потенциалов ММВ [1, 2]. При этом было показано, что величина сдвига определяется работой, производимой полем межмолекулярных сил при переходе частицы из газовой фазы в конденсированную среду [1]. Что же касается вклада разных ММВ в колебательные трансляционные частоты максимумов ν_{max} межмолекулярных полос длинноволнового ИК поглощения, то (хотя проявление в низкочастотных ИК спектрах жидкостей этих полос обусловлено именно реализацией в конденсированных средах ММВ разной природы) такие данные пока весьма немногочисленны.

Трансляционную колебательную частоту ν_{max} принято подразделять на статическую и динамическую составляющие и выделять проявление в ней межмолекулярных сил отталкивания и других универсальных ММВ, включая резонансные [4–6]. Для определения вклада резонансных ММВ широко применялся метод дисперсии эффективного поля [4–6], а также независимый подход [7].

Для этой цели может быть использована также термодинамическая кластерно-континуальная модель, описывающая надмолекулярный лабильный среднестатистический кластер (квазисферический полимолекулярный ассоциат) жидкости как "погруженную" в диэлектрический континуум квазизамкнутую подсистему без граничной поверхности. Эта модель была предложена ранее для определения квазирешеточных трансляционных колебательных частот жидкостей [8] и идентификации структурно-энергетических параметров межмолекулярного взаимодействия [9, 10].

С использованием кластерно-континуальной модели было показано, что в гармоническом приближении частота квазирешеточных трансляционных колебаний в жидкостях связана с внутренним эффективным давлением для исходного $p^*(\alpha_p, \beta_T)$ и

колебательно-возбужденного $p^*(\alpha_p^*, \beta_T^*)$ состояний соотношением [11]:

$$h\nu_{\max} = \Delta u = \nu^* \Delta p^* = \nu^* [p^*(\alpha_p^*, \beta_T^*) - p^*(\alpha_p, \beta_T)], \quad (1)$$

где α_p, β_T и α_p^*, β_T^* – коэффициенты изобарического термического расширения и изотермической сжимаемости жидкости для стандартного внешнего давления $p = 1$ атм и для внешнего давления $p = p^*(\alpha_p, \beta_T)$ соответственно.

Выражение (1) может быть записано иначе, через отношения обобщенных восприимчивостей исходного (α_p/β_T) и колебательно-возбужденного (α_p^*/β_T^*) состояний:

$$h\nu_{\max} = kT[(\alpha_p^*/\beta_T^*)(\beta_T/\alpha_p) - 1]. \quad (2)$$

Для того чтобы соотношения (1) и (2) можно было использовать для выделения компонентов, соответствующих определенным ММВ, необходимо учесть, что

$$h\nu_{\max}^i = \Delta u^i = \nu^* \Delta p^{*i}, \quad (3)$$

где индекс i характеризует вклад ММВ i-го типа.

В этом случае, например, для дисперсионного компонента $h\nu_{\max}^{\text{disp}}$ длинноволновой трансляционной частоты соотношения (3) переходят соответственно в соотношения:

$$h\nu_{\max}^{\text{disp}} = \Delta u^{\text{disp}} = \nu^* \Delta p^{*\text{disp}} =$$

$$= \nu^* [p^{*\text{disp}}(\alpha_p^*, \beta_T^*) - p^{*\text{disp}}(\alpha_p, \beta_T)] \quad (4)$$

и

$$h\nu_{\max}^{\text{disp}} = kT[(\alpha_p^*/\beta_T^*)^{\text{disp}}(\beta_T/\alpha_p)^{\text{disp}} - 1]. \quad (5)$$

Задача, таким образом, сводится к определению дисперсионных вкладов в изменение внутреннего эффективного давления $\Delta p^{*\text{disp}}$ или в отношение обобщенных восприимчивостей $(\alpha_p^*/\beta_T^*)^{\text{disp}}/(\alpha_p/\beta_T)^{\text{disp}}$.

Для этого кластерную модель необходимо дополнить на основе анализа взаимосвязей параметров модели с известными термодинамическими свойствами жидкостей такими, например, как изотермическая сжимаемость, характеризуемая коэффициентом β_T. В частности, необходимо сформулировать понятие о внешней изотермической сжимаемости надмолекулярного кластера, или ассоциата, жидкости $\beta_{T,\text{ass}}$ как о его отклике на изменение внешнего давления p.

Определение локальной "внешней" сжимаемости надмолекулярного ассоциата в основном равновесном состоянии. Свойства непрерывности и однородности диэлектрического континуума

Сформулируем понятие о локальной внешней изотермической сжимаемости жидкости на структурном уровне ассоциата (кластера) $\beta_{T,\text{ass}}$. Как известно, макроскопическая сжимаемость жидкой среды (коэффициент изотермической сжимаемости) β_T характеризует относительный отклик объема жидкости на изменение внешнего давления [12–14]:

$$\beta_T = -(1/V)(\partial V/\partial p)_T = -(1/\nu)(\partial \nu/\partial p)_T, \quad (6)$$

где V – мольный объем жидкости, p – внешнее давление в системе, ν – объем в расчете на одну частицу. Аналогично определим локальную внешнюю сжимаемость $\beta_{T,\text{ass}}$ на структурном уровне ассоциата с объемом ν_{ass}^*:

$$\beta_{T,\text{ass}} = -(1/\nu_{\text{ass}}^*)(\partial \nu_{\text{ass}}^*/\partial p)_T. \quad (7)$$

С учетом уравнения состояния кластера [10]

$$p_{\text{ass}}^*(\alpha_p, \beta_T)\nu_{\text{ass}}^* = kT \quad (8)$$

преобразуем соотношение (7) к виду:

$$\beta_{T,\text{ass}} = (1/p_{\text{ass}}^*)(\partial p_{\text{ass}}^*/\partial p)_T. \quad (9)$$

Проанализируем полученное соотношение (9) с учетом того, что согласно [14, 15] для жидкостей (в особенности при сверхвысоких давлениях) выполняется линейная зависимость отношения $(\alpha_p/\beta_T)T$ от внешнего давления p, т. е.

$$(\alpha_p/\beta_T)T = ap + b. \quad (10)$$

Принимая во внимание, что согласно [12–14] внутреннее давление p^* в жидкости равно

$$p^*(\alpha_p, \beta_T) = (\alpha_p/\beta_T)T, \quad (11)$$

из соотношений (10) и (11) получаем

$$p_{\text{ass}}^* = ap + p_{\text{ass}}^{*0}, \quad (12)$$

где p_{ass}^{*0} – стандартное внутреннее давление на уровне ассоциата при внешнем давлении, равном 1 атм.

Подстановка (12) в (9) дает

$$\beta_{T,\text{ass}} = (a/p_{\text{ass}}^*)/(\alpha_p T) \quad (13)$$

и с учетом (11)

$$\beta_{T,\text{ass}} = a\beta_T/(\alpha_p T). \quad (14)$$

Поскольку мы рассматриваем основное состояние кластера в структуре жидкости, то естественно предположить, что

$$\beta_{T,\text{ass}} \doteq \beta_T. \quad (15)$$

Тогда из (14) и (15) следует, что теоретическое значение коэффициента $a^{\text{теор}}$ равно

$$a^{\text{теор}} = \alpha_p T. \quad (16)$$

И поскольку при выводе соотношения (15) мы опирались на свойства исходного состояния надмолекулярного кластера, в частности, уравнение (8), которое взаимосвязано с дальнодействующими

дисперсионными ММВ, то коэффициент $a^{\text{теор}}$ является характеристикой именно дисперсионных ММВ, то есть

$$a^{\text{теор}} = \alpha_p T = a^{\text{disp}}. \qquad (17)$$

Для доказательства справедливости соотношения (15) и, следовательно, (16) используем фундаментальные свойства диэлектрического континуума – его непрерывность и однородность. Действительно, так как континуум непрерывен и однороден, то относительное бесконечно малое изменение объема на всех структурных уровнях континуума является величиной постоянной, то есть

$$(1/v)\, dv = (1/v^*_{\text{ass}}) dv^*_{\text{ass}}. \qquad (18)$$

Из соотношения (18) следует справедливость выражения (15).

Выделение вкладов отдельных составляющих ММВ в частоту квазирешеточных трансляционных межмолекулярных колебаний в жидкостях

Здесь необходимо остановиться на принципиальном различии в учете межмолекулярных сил отталкивания в кластерно-континуальной модели и модели, основанной на использовании полных потенциалов ММВ. Переход частицы конденсированной среды в колебательно-возбужденное состояние можно охарактеризовать разностью полных потенциалов межмолекулярных сил отталкивания и притяжения в возбужденном и исходном состояниях [2]:

$$h\nu_{\max} = \Phi(\xi)^{\text{отт}}_e - \Phi(\xi)^{\text{прит}}_e - (\Phi(\xi)^{\text{отт}}_g - \Phi(\xi)^{\text{прит}}_g) = \\ = \Delta\Phi(\xi)^{\text{отт}} - \Delta\Phi(\xi)^{\text{прит}}, \qquad (19)$$

где ξ – структурный параметр ММВ.

Соотношение (19) показывает, что энергия колебательного возбуждения $h\nu_{\max}$ затрачивается на преодоление разности в работах сил отталкивания и притяжения. С другой стороны, как следует из соотношения (1),

$$h\nu_{\max} = \Delta u = \nu^* \Delta p^* = \nu^* \Sigma \Delta p^{*i}. \qquad (20)$$

При этом, по определению, вклад в суммарное внутреннее давление p^* межмолекулярных сил притяжения и сил отталкивания учитывается совместно.

Объединяя соотношения (19) и (20), получаем

$$\Delta\Phi(\xi)^{\text{отт}} - \Delta\Phi(\xi)^{\text{прит}} = \nu^* \Sigma \Delta p^{*i}. \qquad (21)$$

Выражение (21) показывает, что для учета сил отталкивания в известном подходе [1, 2] достаточно просуммировать вклады Δp^{*i} сил притяжения. Соотношение (20) согласно [4–6] может быть записано в расширенном варианте:

$$\Delta\Phi(\xi)^{\text{отт}} - \Delta\Phi(\xi)^{\text{прит}} = h\nu^{\text{стат}}_{\max} + h\Delta\nu^{\text{дин}}_{\max} = \\ = \nu^* \Sigma \Delta p^{*i}, \qquad (22)$$

показывающем различие алгоритмов при учете вкладов ММВ в колебательную трансляционную частоту жидкостей в двух обсуждаемых подходах. Проанализируем соотношение (22), имея в виду, что авторы работ [4–6] в данном случае включают во вклад статических ММВ составляющие как сил отталкивания, так и дисперсионных, а также ориентационно-индукционных ММВ, то есть

$$h\nu^{\text{стат}}_{\max} + h\Delta\nu^{\text{дин}}_{\max} = h\nu^{\text{отт, disp}}_{\max} + h\Delta\nu^{\text{or–ind}}_{\max} + h\Delta\nu^{\text{дин (res)}}_{\max}.$$

Перепишем соотношение (12), раскрывая величину a как сумму Σa^i, в виде

$$\Delta p^*_{\text{ass}} = \Sigma \Delta p^{*i} = a p^{*0}_{\text{ass}} = (\Sigma a^i) p^{*0}_{\text{ass}}. \qquad (23)$$

При условии аддитивности ММВ из (23) следует, что

$$\Delta p^{*\text{disp}} = a^{\text{disp}} p^{*0}_{\text{ass}}. \qquad (24)$$

Комбинируя соотношения (4), (17) и (24), получаем

$$h\nu^{\text{disp}}_{\max} = k\alpha_p T^2. \qquad (25)$$

Для неполярных жидкостей из (20) и (23) легко получить, что резонансная составляющая колебательной трансляционной частоты $\Delta\nu^{\text{res}}_{\max}$ определяется соотношением:

$$h\Delta\nu^{\text{res}}_{\max} = k\,(a^{\text{эксп}} - \alpha_p T)T, \qquad (26)$$

где $a_{\text{эксп}}$ – экспериментальное значение параметра a.

То, что выражение (26) для неполярных жидкостей определяет вклад резонансных ММВ, обусловлено следующим. Поскольку среднестатистический ассоциат, выделяемый в кластерно-континуальной модели, представляет собой такое надмолекулярное образование, суммарный дипольный момент которого равен нулю, то вклад резонансных взаимодействий в колебательную трансляционную частоту в данном случае связан с появлением дипольного момента в колебательно-возбужденном состоянии, то есть полностью сопряжен с колебательным переходом и обусловлен, таким образом, проявлением динамических резонансных ММВ. Для полярных и ассоциированных жидкостей правая часть выражения (26) определяет суммарный вклад ориентационно-индукционных и резонансных ММВ.

Величина $a^{\text{эксп}}$, входящая в (26), в свою очередь может быть представлена как

$$a^{\text{эксп}} = h\nu_{\max} / kT, \qquad (27)$$

что вытекает из (2) и (12).

Таблица 1. Параметры колебательных трансляционных низкочастотных ИК полос поглощения и термодинамические характеристики неполярных, малополярных и полярных жидкостей ($T = 293$ K)

Жидкость	ν_{max}, см$^{-1}$ [5]	$\alpha_p \times 10^3$, K^{-1} [12]	ν_{max}^{disp}, см$^{-1}$ (25)	$\Delta\nu_{max}^{res}$, см$^{-1}$ (28)
Тетрахлорметан	53 ± 3	1,216	72,6	–19,6
Дисульфид углерода	70 ± 3	1,18	70,5	0
Циклогексан	80 ± 3	1,231	73,5	6,5
Бензол	75 ± 3	1,215	72,6	2,4
Толуол	80 ± 3	1,131	67,5	12,5
Хлорбензол	57 ± 3	0,98 [16]	58,5	–1,5
Бромбензол	43 ± 3	0,806 [17]	48	–5
Диоксан	70 ± 3	1,085	64,8	5,2
Хлороформ	72 ± 3 [18]	1,26	75,2	–3,2
Дихлорметан	78 ± 3 [18]	1,36	81,2	–3,2
Йодметан	60 ± 3	1,23	73,5	–13,5
Бромоформ	50 ± 3	0,91 [16]	54,3	–4,3
Транс-декалин (транс-декагидронафталин)	67 ± 3	0,943 [17]	56,3	10,7

Из (26) и (27) естественно следует

$$h\Delta\nu_{max}^{res} = h\nu_{max} - k\alpha_p T^2. \qquad (28)$$

В табл. 1–3 приведены данные о рассчитанных на основе соотношений (25) и (28) дисперсионных и резонансных составляющих колебательных трансляционных частот неполярных, полярных и ассоциированных жидкостей с межмолекулярными водородными связями, значения которых сопоставлены с их полными колебательными частотами. Данное сопоставление показывает, что в случае неполярных и малополярных жидкостей резонансная составляющая вносит небольшой вклад в общую колебательную частоту, которая в основном определяется дисперсионным компонентом ММВ. Этот вывод согласуется с полученными ранее результатами расчета ν_{max}^{res} на основе метода дисперсии эффективного поля [4–6]. Для полярных и ассоциированных жидкостей доля дисперсионного компонента уменьшается по мере усиления полярности молекул.

Так как для неполярных и малополярных жидкостей вклад резонансных ММВ в колебательную частоту чаще всего невелик (табл.1), выражение (25), записанное в форме

$$h\nu_{max} \approx k\alpha_p T^2, \qquad (29)$$

представляет собой хорошую аппроксимацию для наблюдаемой частоты ν_{max} в случае жидкостей этих типов и в этом смысле дополняет соотношения (1) и (2). Хорошая выполнимость этого соотношения, по-видимому, свидетельствует в пользу работоспособности предлагаемой модели в целом. Исключение составляют тетрахлорметан, йодметан и толуол, для которых абсолютное значение $\Delta\nu_{max}^{res}$ достаточно велико (табл. 1). Как следует из работы [5], вклад резонансных ММВ $\Delta\nu^{res}$ в общую колебательную

Таблица 2. Параметры колебательных трансляционных низкочастотных ИК полос поглощения и термодинамические характеристики высокополярных жидкостей ($T = 293$ K)

Жидкость	ν_{max}, см$^{-1}$ [5]	$\alpha_p \times 10^3$, K^{-1} [12]	ν_{max}^{disp}, см$^{-1}$ (25)	ω^{disp}	$\Delta\nu_{max}^{res+or-ind}$ **, см$^{-1}$ (28)
Нитробензол	50 ± 3	0,847 [20]	50,6	1,0	0
Ацетон	78 ± 3 [19]	1,42	84,8	~1,0	~0
Ацетонитрил	95 ± 3	1,365	81,5	0,86	13,5
Нитрометан	80 ± 3	1,103 [17]	65,9	0,82	14,1
Ацетофенон	76 ± 3	0,84	50,2	0,66	25,8
Диметилсульфоксид	68 ± 3 [19]	0,939 [17]	56,1	0,82	11,9
Бензонитрил	55 ± 3	0,859*	51,3	0,93	3,7

* По данным [21].

** $\Delta\nu_{max}^{res+or-ind}$ – суммарный вклад в частоту квазирешеточных трансляционных колебаний резонансных и ориентационно-индукционных взаимодействий.

Таблица 3. Параметры колебательных трансляционных низкочастотных ИК полос поглощения и термодинамические характеристики полярных ассоциированных жидкостей с межмолекулярной водородной связью ($T = 293$ K)

Жидкость	ν_{max}, см$^{-1}$ [5]	$\alpha_p \times 10^3$, K^{-1} [12]	ν_{max}^{disp}, см$^{-1}$ (25)	ω^{disp}	$\Delta\nu_{max}^{res+or-ind}$, см$^{-1}$ (28)
Вода	190 ± 5	0,2068 [20, 22]	12,3	0,065	177,7
Метанол	130 ± 5	1,175	70,2	0,54	59,8
Этанол	110 ± 5	1,08	64,5	0,59	45,5
1-пропанол	145 ± 5	0,96	57,3	0,39	87,7
2-метил-2-пропанол	150 ± 5	1,33	79,4	0,53	70,6
1-пентанол	150 ± 5	0,902 [20]	53,9	0,36	96,1
1-гептанол	190 ± 5	0,966	57,7	0,30	132,3

трансляционную частоту молекулярных жидкостей является, как правило, отрицательной величиной. Для внутримолекулярных ИК колебаний принято считать, что проявление резонансных ММВ также приводит к низкочастотному сдвигу [1–7, 23]. Однако существование различных механизмов реализации резонансных ММВ: за счет сил притяжения и сил отталкивания – проявляется в том, что знак сдвига $\Delta\nu^{res}$ определяется соотношением этих взаимодействий [24, 25]. Как показывает табл. 1, применение нашей модели также дает разные знаки величины $\Delta\nu^{res}_{max}$ – вклада резонансных ММВ в величину межмолекулярной колебательной трансляционной частоты.

Для полярных ассоциированных жидкостей доля дисперсионных ММВ ω^{disp} в общей колебательной трансляционной частоте довольно сложным образом зависит от состава и структуры молекул соединений, составляющих ту или иную жидкость (табл. 3).

Выводы

Развитие кластерно-континуальной модели, рассматривающей среднестатистический квазисферический надмолекулярный кластер жидкостей как квазизамкнутую термодинамическую подсистему, позволяет осуществить для жидкостей разных типов (неполярных, полярных, а также ассоциированных с межмолекулярными водородными связями) выделение вклада дисперсионных ММВ в общую колебательную трансляционную частоту. Для неполярных жидкостей предлагаемый подход позволяет оценить также резонансный компонент колебательной частоты, который, как правило, невелик и может иметь разный знак.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проект № 04-03-32932.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Бахшиев Н.Г.* Спектроскопия межмолекулярных взаимодействий. Л.: Наука, 1972. 265 с.

2. Сольватохромия. Проблемы и методы / Под ред. Н.Г. Бахшиева. Л.: ЛГУ, 1989. С. 224–312.

3. *Коровина В.М., Бахшиев Н.Г.* Количественная оценка вкладов основных видов межмолекулярных взаимодействий в полные спектральные сдвиги вибронных полос поглощения растворов фенола // В сб. "Спектрохимия внутри- и межмолекулярных взаимодействий" / Под ред. Н.Г. Бахшиева. 1986. В. 4. С. 79–90.

4. *Либов В.С.* Спектроскопия резонансных взаимодействий и низкочастотных межмолекулярных колебаний в конденсированных средах // Оптический журнал. 1993. Т. 60. № 11. С. 55–63.

5. *Либов В.С., Перова Т.С.* Низкочастотная спектроскопия межмолекулярных взаимодействий в конденсированных средах // Труды ГОИ. 1992. Т. 81. В. 215. С. 1–193.

6. *Либов В.С.* Низкочастотная спектроскопия межмолекулярных колебаний в неупорядоченных конденсированных средах // Оптический журнал. 1996. Т. 63. № 8. С. 3–25.

7. *Бахшиев Н.Г.* О статистической природе влияния резонансных взаимодействий на формирование контура колебательных полос поглощения конденсированных веществ // ЖПС. 1995. Т. 62. № 2. С. 30–37.

8. *Демидов В.Н., Либов В.С.* Обобщенное выражение для частоты межмолекулярных колебаний в конденсированных средах // Докл. РАН. 1996. Т. 346. № 5. С. 630–631.

9. *Демидов В.Н., Либов В.С.* Термодинамическая оценка эффективного параметра межмолекулярного взаимодействия в жидких средах // ЖФХ. 1997. Т. 71. № 12. С. 2207–2210.

10. *Демидов В.Н.* Кластерная термодинамическая модель межмолекулярных взаимодействий в жидкостях // Докл. РАН. 2004. Т. 394. № 2. С. 218–221.

11. *Демидов В.Н.* Выражение для частот спектральных полос квазирешеточных трансляционных колебаний жидкостей в рамках новой термодинамической модели // Оптический журнал. 2003. Т. 70. № 9. С. 3–8.

12. *Allen G., Gee G., Wilson G.J.* Intermolecular forces and chain flexibilities in polymers : I.Internal pressures and cohesive energy densities of simple liquids // Polymer. The chemistry, physics and technology of high polymers. 1960. V. 1. № 4. P. 456–466.

13. *Бараненко В.И., Киров В.С., Мушенко А.Н., Пионтковский А.И.* Внутреннее давление в жидкостях // ЖФХ. 1990. Т. 64. № 2. С. 464–469.

14. *Егоров Г.И., Грузнов Е.Л., Колкер А.М. p-Vm-T-x*-свойства смеси вода–ацетон в интервале температур 298–323 К и давлений 1–1000 бар. Коэффициенты изотермической сжимаемости, объемного расширения и внутреннее давление // ЖФХ. 1996. Т. 70. № 2. С. 216–223.

15. *Бриджмен П.Б.* Физика высоких давлений. М.–Л.: ОНТИ. Гл. ред. общетехнич. дисциплин, 1935. 402 с.

16. Теплофизические свойства веществ. Справочник / Под ред. Н.Б. Варгафтика. Л.: Госуд. энергетич. изд. 1956. 368 с.

17. *Орлова Н.Г., Столяров Е.А., Добычин С.Л.* Применение акустических величин для расчета термодинамических характеристик жидкостей // Научн. труды высш. учебн. завед. Лит. ССР. Ультразвук. 1977. № 9. С. 63–66.

18. *Калмыков Ю.П., Гайдук В.И.* Применение модели ограниченных ротаторов к вычислению микроволнового и дальнего ИК-поглощения полярных жидкостей // ЖФХ. 1981. Т. 55. № 2. С. 305–317.

19. *Лященко А.К., Новскова Т.А.* Структурно-кинетические характеристики и высокочастотные диэлектрические свойства жидкостей с диполь-дипольным взаимодействием // ЖФХ. 2002. Т. 76. № 11. С. 1949–1955.

20. Справочник химика. Т. I. 1971 / Под. ред. Б.П. Никольского. Л.: Химия, 1971.

21. *Антипин И.С., Коновалов А.И.* Прогнозирование энтальпий испарения и сольватации органических соединений на основе топологического индекса $^1\chi S$ // ЖОХ. 1996. Т. 66. № 3. С. 389–401.

22. *Мелвин-Хьюз Е.А.* Равновесие и кинетика реакций в растворах. М.: Химия, 1975. 472 с.

23. *Ходжиева Э.* Спектроскопическое изучение резонансных межмолекулярных взаимодействий в растворах бензола // Химич. физика. 2003. Т. 22. № 3. С. 31–33.

24. *Schweizer K.S., Chandler D.* // J. Chem. Phys. 1982. V. 76. № 5. P. 2296.

25. *Атаходжаев А.К., Погорелов В.Е., Ходжиева Э.* // Химич. физика. 1995. Т. 14. № 7. С. 41.