

УДК 541.6

**ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ЭНТАЛЬПИИ ИСПАРЕНИЯ НА ОСНОВЕ
МОДИФИЦИРОВАННЫХ ИНДЕКСОВ РАНДИЧА. I. АЛКАНЫ**© 2008 **Е.Л. Красных****ГОУВПО Самарский государственный технический университет**Статья поступила 4 марта 2008 г.*

Рассмотрены методы расчета энтальпии испарения алканов при нормальных условиях с использованием классического метода Рандича и его модификаций. Показано, что расчет с использованием модифицированных методов позволяет прогнозировать энтальпию испарения алканов с погрешностью, соизмеримой с погрешностью экспериментального определения.

Ключевые слова: энтальпия испарения, топологический индекс, индекс связанности, алканы, QSPR.

ВВЕДЕНИЕ

Энтальпия испарения является одной из важнейших термодинамических характеристик фазового перехода из жидкости в пар. Без наличия надежных данных о значениях энтальпии испарения невозможно создание эффективных технологий синтеза соединений, невозможно рассчитать процессы ректификации, испарения и конденсации. Но в ряде случаев получение данных об энтальпии испарения соединений сопряжено со значительными экспериментальными трудностями, связанными как с получением высокочистых веществ, так и с выполнением самого эксперимента. Альтернативой экспериментальным исследованиям служат различные расчетные методы, основанные на аддитивных схемах [1—4] и на подходе QSPR [5—14].

Методы QSPR (количественные соотношения структура—свойство) широко используются для расчета и прогнозирования различных физико-химических и термодинамических свойств соединений. На текущий момент предложен ряд методов QSPR, основанных на топологических индексах, таких как индексы Винера [5], Рандича [6], Лу [7], Балабана [8] и многих других, включая различные модификации. В применении к энтальпии испарения предложен ряд методов, основанных на сольватационном индексе [9], индексах молекулярных орбиталей [10—12], индексах χ [13] и трехмерных молекулярных топологических индексах [14].

В настоящей работе рассмотрены варианты расчета энтальпии испарения алканов при нормальных условиях, основанные на классическом методе Рандича и его различных модификациях.

МЕТОДИКА РАСЧЕТА

В работе рассмотрено три метода для расчета энтальпии испарения алканов при нормальных условиях: классический метод Рандича, метод Рандича с кодовыми числами (дескрипторами), настроенными по экспериментальным данным, и модифицированный метод с дескрипторами, рассчитанными на основе экспериментальных данных и с применением логарифмической функции вместо степенной и учетом веса каждого индекса. Во всех вариантах расчет велся до индекса связанности третьего порядка, поскольку вклады индексов четвертого порядка и более в суммарный индекс незначительны.

* E-mail: kinterm@samgtu.ru

В классическом варианте (метод 1) индексы Рандича, или индексы связанности, рассчитывали по следующим формулам [15]:

индекс связанности нулевого порядка

$${}^0\chi = \sum_1^n (\delta_i)^{-1/2}, \quad (1)$$

первого порядка

$${}^1\chi = \sum_1^m (\delta_i \delta_j)^{-1/2}, \quad (2)$$

второго порядка

$${}^2\chi = \sum_1^p (\delta_i \delta_j \delta_k)^{-1/2}, \quad (3)$$

третьего порядка

$${}^3\delta = \sum_1^r (\delta_i \delta_j \delta_k \delta_l)^{-1/2}, \quad (4)$$

где δ — кодовое число (дескриптор) — разность между числом валентных электронов и количеством атомов водорода, связанных с данным атомом; n — число атомов в молекуле; m — число связей в молекуле; p — число трех последовательно связанных атомов в молекуле; r — число четырех последовательно связанных атомов в молекуле.

Суммарный индекс определяли по уравнению

$${}^{0-3}\chi = {}^0\chi + {}^1\chi + {}^2\chi + {}^3\chi. \quad (5)$$

Расчет по второму предлагаемому методу (метод 2) проводили аналогично предложенному выше, но в качестве дескрипторов использовали числовые значения, полученные путем обработки линейной корреляцией суммарных индексов алканов и значений их энтальпии испарения при нормальных условиях (ΔH_v^0 , 298 К) с помощью метода наименьших квадратов, без фиксации каких-либо дескрипторов [16]. В качестве тренировочного набора были использованы: рекомендованные в качестве стандартов значения энтальпии испарения линейных углеводородов C5—C18 [16]; 17 соединений, содержащих третичные атомы углерода [17]; 8 соединений, содержащих четвертичные атомы углерода [17, 18]. Если были доступны сведения об энтальпии испарения при температурах, отличных от 298 К, то проводили их пересчет к температуре 298,15 К по методике, предложенной в работе [17].

В третьем методе (метод 3) расчет индексов связанности производили по следующим уравнениям:

индекс нулевого порядка

$${}^0\chi = \sum_1^n 1/\ln(\delta_i), \quad (6)$$

первого порядка

$${}^1\chi = \sum_1^m 1/\ln(\delta_i \delta_j), \quad (7)$$

второго порядка

$${}^2\chi = \sum_1^p 1/\ln(\delta_i \delta_j \delta_k), \quad (8)$$

третьего порядка

$${}^3\chi = \sum_1^r 1/\ln(\delta_i \delta_j \delta_k \delta_l). \quad (9)$$

Суммарный индекс с учетом весовых составляющих находили по уравнению

$${}^{0-3}\chi = {}^0\chi + \frac{{}^1\chi}{2} + \frac{{}^2\chi}{3} + \frac{{}^3\chi}{4}. \quad (10)$$

Значения дескрипторов и линейная зависимость энтальпии испарения от суммарного индекса были найдены, как в методе 2.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Полученные в результате оптимизации значения дескрипторов для атомов углерода представлены в табл. 1, а экспериментальные данные о значениях энтальпии испарения, суммарные индексы и расчетные значения энтальпии испарения для тренировочного набора — в табл. 2.

Расчет энтальпии испарения проводили по следующим уравнениям:

метод 1

$$\Delta H_v, 298 \text{ K} = 2,9428 \cdot {}^{0-3}\chi + 3,0538, \quad (11)$$

метод 2

$$\Delta H_v, 298 \text{ K} = 10,2418 \cdot {}^{0-3}\chi - 2,5645, \quad (12)$$

метод 3

$$\Delta H_v, 298 \text{ K} = 1,6883 \cdot {}^{0-3}\chi + 2,0781. \quad (13)$$

Анализ результатов расчета энтальпии испарения приводит к выводу, что метод 1, основанный на классическом методе Рандича, не может быть рекомендован для прогнозирования значений энтальпии испарения алканов вследствие значительных отклонений расчетных значений от экспериментальных.

Расчеты по методам 2 и 3 дают гораздо лучшие и близкие между собой результаты по всем показателям (R^2 , s , $|\Delta|_{\max}$), однако для метода 3 показатели s и $|\Delta|_{\max}$ несколько лучше. Для проверки возможности прогнозирования энтальпии испарения этими методами был использован тестовый набор, в который вошли углеводороды C_8 — C_{24} различного строения, данные об экспериментальных значениях энтальпии испарения которых взяты из работы [17]. Результаты расчета представлены в табл. 3.

Анализ приведенных в таблице данных показывает, что отклонение расчетных значений энтальпии от экспериментальных для обоих методов может достигать в ряде случаев нескольких килоджоулей на моль. Однако это говорит не о плохом описании энтальпии испарения предлагаемой моделью, а, вероятнее всего, о неточностях и погрешностях в экспериментальном определении энтальпии, поскольку для ряда соединений эти значения единичны и приведены без погрешности, а для других соединений имеется ряд данных, значительно отличающихся друг от друга. Так, для тетракозана имеется 9 значений энтальпии испарения, полученных разными авторами, максимальное расхождение между которыми составляет 32,5 кДж/моль.

Обращает на себя внимание и другая закономерность, связанная с 2- и 3-метилзамещенными алканами. В случае углеводородов C_6 — C_8 разность между значениями энтальпии испарения 3- и 2-метилзамещенных соединений составляет 0,1—0,2 кДж/моль, а в случае более тяжелых алканов эта разность достигает –3 кДж/моль, что противоречит логике и, скорее всего, свидетельствует об экспериментальных погрешностях в определении энтальпии испарения.

Несмотря на все вышесказанное, метод 3 лучше описывает зависимость энтальпии испарения от суммарного индекса. Для него максимальное отклонение на 2,4 кДж/моль меньше, чем для метода 2, а средне-квадратичное отклонение составляет 1,1 против 1,8 для метода 2.

Таким образом, на основе проведенного исследования можно сделать следующие выводы: использова-

Т а б л и ц а 1

Дескрипторы для различных типов углеродных атомов

Тип атома	Значение дескриптора		
	Метод 1	Метод 2	Метод 3
—CH ₃	1,0	3,3357	1,4773
—CH ₂ —	2,0	9,2159	1,6201
—CH— 	3,0	38,8361	2,3685
—C— 	4,0	290,0141	7,5949

Т а б л и ц а 2

Экспериментальные и расчетные значения энтальпии испарения и суммарные индексы связанности для тренировочного набора алканов

Соединение	$\Delta H_{\text{в}},$ 298 К эксп., кДж/моль	Метод 1			Метод 2			Метод 3		
		$0-3, \chi$	$\Delta H_{\text{в}},$ 298 К расч., кДж/моль	$\Delta \Delta H_{\text{в}},$ кДж/моль	$0-3, \chi$	$\Delta H_{\text{в}},$ 298 К расч., кДж/моль	$\Delta \Delta H_{\text{в}},$ кДж/моль	$0-3, \chi$	$\Delta H_{\text{в}},$ 298 К расч., кДж/моль	$\Delta \Delta H_{\text{в}},$ кДж/моль
Пентан	26,6±0,1	8,5962	22,2	4,4	2,8547	26,7	-0,1	14,5200	26,6	0,0
Гексан	31,5±0,1	10,4069	27,6	3,9	3,3401	31,6	-0,1	17,4707	31,6	-0,1
Гептан	36,6±0,1	12,2175	32,9	3,7	3,8256	36,6	0,0	20,4215	36,6	0,0
Октан	41,6±0,1	14,0282	38,2	3,4	4,3110	41,6	0,0	23,3722	41,5	0,1
Нонан	46,6±0,2	15,8388	43,6	3,0	4,7964	46,6	0,0	26,3229	46,5	0,1
Декан	51,4±0,1	17,6495	48,9	2,5	5,2818	51,5	-0,1	29,2736	51,5	-0,1
Ундекан	56,6±0,6	19,4602	54,2	2,4	5,7673	56,5	0,1	32,2243	56,5	0,1
Додекан	61,5±0,6	21,2708	59,5	2,0	6,2527	61,5	0,0	35,1750	61,5	0,0
Тридекан	66,5±0,2	23,0815	64,9	1,6	6,7381	66,4	0,1	38,1258	66,4	0,1
Тетрадекан	71,7±0,7	24,8921	70,2	1,5	7,2236	71,4	0,3	41,0765	71,4	0,3
Пентадекан	76,4±0,4	26,7028	75,5	0,9	7,7090	76,4	0,0	44,0272	76,4	0,0
Гексадекан	81,4±0,4	28,5135	80,9	0,5	8,1944	81,4	0,0	46,9779	81,4	0,0
Гептадекан	86,2±0,8	30,3241	86,2	0,0	8,6799	86,3	-0,1	49,9286	86,4	-0,2
Октадекан	91,4±1,3	32,1348	91,5	-0,1	9,1653	91,3	0,1	52,8793	91,4	0,0
2-Метилбутан [16]	25,2	9,0233	23,5	1,7	2,6917	25,0	0,2	13,6426	25,1	0,1
2,2-Диметилпропан [16]	22,4	8,4142	21,7	0,7	2,4142	22,2	0,2	12,1343	22,6	-0,2
2-Метилпентан [16]	30,1	10,8102	28,8	1,3	3,1907	30,1	0,0	16,6084	30,1	0,0
3-Метилпентан	30,3±0,2	10,8265	28,8	1,5	3,1905	30,1	0,2	16,5809	30,1	0,2
2,3-Диметилбутан	29,1±0,1	11,6188	31,1	-2,0	3,0717	28,9	0,2	15,8926	28,9	0,2
2,2-Диметилбутан	27,7±0,1	11,3033	30,2	-2,5	2,9485	27,6	0,1	15,2302	27,8	-0,1
2-Метилгексан	34,9±0,1	12,4357	33,5	1,4	3,6744	35,1	-0,2	19,4529	34,9	0,0
3-Метилгексан	35,1±0,1	12,7872	34,6	0,5	3,6853	35,2	-0,1	19,6242	35,2	-0,1
2,4-Диметилпентан	32,9±0,1	12,1374	32,7	0,2	3,4787	33,1	-0,2	18,3096	33,0	-0,1
2,2-Диметилпентан	32,4±0,1	12,8462	34,7	-2,3	3,4382	32,6	-0,2	18,1312	32,7	-0,3
3,3-Диметилпентан	33,0±0,1	13,2782	36,0	-3,0	3,4599	32,9	0,1	18,1296	32,7	0,3
3-Этилпентан	35,1±0,1	12,2902	33,1	2,0	3,6681	35,0	0,1	19,4749	35,0	0,1
2,2,3-Триметилбутан	32,0	13,8342	37,7	-5,7	3,3436	31,7	0,3	17,5113	31,6	0,4
2,3-Диметилпентан	34,2±0,1	13,2184	35,8	-1,6	3,5603	33,9	0,3	18,7962	33,8	0,4
2-Метилгептан	39,7±0,1	14,4505	39,5	0,2	4,1656	40,1	-0,4	22,5118	40,1	-0,4
2,3-Диметилгексан	38,8±0,1	15,3774	42,2	-3,4	4,0568	39,0	-0,2	21,9204	39,1	-0,3
2,4-Диметилгексан	37,8±0,1	14,1990	38,7	-0,9	3,9902	38,3	-0,5	21,4044	38,2	-0,4
2,2-Диметилгексан	37,4±0,3	14,6872	40,2	-2,8	3,9300	37,7	-0,3	21,0864	37,7	-0,3
2,2,3-Триметилпентан	36,9±0,1	16,0017	44,0	-7,1	3,8284	36,6	0,3	20,4871	36,7	0,2
2,5-Диметилгексан	37,9±0,1	13,7956	37,5	0,4	3,9289	37,7	0,2	21,2549	38,0	-0,1
3,4-Диметилгексан	39,0±0,1	15,0823	41,3	-2,3	4,0548	39,0	0,0	21,7962	38,9	0,1
2-Метилоктан	44,9	16,2611	44,8	0,1	4,6510	45,1	-0,2	25,4625	45,1	-0,2
2,2,4,4-Тетраметилпентан	38,5±0,1	15,9675	43,9	-5,4	4,0308	38,7	-0,2	21,6091	38,6	-0,1
2-Метилнонан	50,2±0,2	18,0718	50,1	0,1	5,1364	50,0	0,2	28,4133	50,0	0,2
2-Метилдекан	54,9	19,8825	55,5	-0,6	5,6218	55,0	-0,1	31,3640	55,0	-0,1
R^2			0,9770			0,9999			0,9999	
S			6,9			0,038			0,037	
$ \Delta _{\text{max}}$			7,1			0,5			0,4	

Примечание: $\Delta \Delta H_{\text{в}}$ — отклонение расчетного значения энтальпии испарения от экспериментального; R^2 — коэффициент детерминированности; s — среднеквадратичное отклонение; $|\Delta|_{\text{max}}$ — максимальное по модулю отклонение результатов расчета от экспериментальных данных, кДж/моль.

Т а б л и ц а 3

Экспериментальные и расчетные значения энтальпии испарения и суммарные индексы связанности для тестового набора алканов*

Соединение	ΔH_{ν} , 298 К эксп., кДж/моль	Метод 2			Метод 3		
		$0-3, \chi$	ΔH_{ν} , 298 К расч., кДж/моль	$\Delta \Delta H_{\nu}$, кДж/моль	$0-3, \chi$	ΔH_{ν} , 298 К расч., кДж/моль	$\Delta \Delta H_{\nu}$, кДж/моль
1	2	3	4	5	6	7	8
4-Метилгептан	39,7±0,1	4,1705	40,1	-0,4	22,5547	40,2	-0,5
3-Метилгептан	39,8±0,2	4,1652	40,1	-0,3	22,4641	40,0	-0,2
2,3,4-Триметилпентан	37,7±0,1	3,9347	37,7	0,0	21,0842	37,7	0,0
3-Этил-2-метилпентан	38,5±0,1	4,0204	38,6	-0,1	21,4720	38,3	0,2
3-Метил-3-этилпентан	38±0,1	3,9666	38,1	-0,1	20,9875	37,5	0,5
3,3-Диметилгексан	37,5±0,1	3,9259	37,6	-0,1	20,7641	37,1	0,4
2,4-Диметилгептан	42,9	4,5060	43,6	-0,7	24,3854	43,2	-0,3
3,3-Диэтилпентан	42,6±0,3	4,4772	43,3	-0,7	23,9166	42,5	0,1
3-Этилпентан	44,5	4,6374	44,9	-0,4	25,2888	44,8	-0,3
2,5-Диметилпентан	43,3	4,4793	43,3	0,0	24,3684	43,2	0,1
2,3,5-Триметилгексан	41,4	4,3564	42,1	-0,7	23,4716	41,7	-0,3
2,4,4-Триметилгексан	41,1	4,2993	41,5	-0,4	23,0471	41,0	0,1
2,3-Диметил-3-этилпентан	42,7	4,3820	42,3	0,4	23,4064	41,6	1,1
2,2-Диметил-3-этилпентан	41,7	4,3428	41,9	-0,2	23,4402	41,7	0,0
2,2,3,3-Тетраметилпентан	41,2	4,1649	40,1	1,1	22,2598	39,7	1,5
2,2,3,3-Тетраметилгексан	45,2	4,6354	44,9	0,3	24,9321	44,2	1,0
5-Метилнонан	49,8	5,1436	50,1	-0,3	28,3519	49,9	-0,1
2,4-Диметилотоктан	47,9±0,2	4,9904	48,5	-0,6	27,4117	48,4	-0,5
4-Пропилгептан	48,6	5,1215	49,9	-1,3	28,0941	49,5	-0,9
3-Метилнонан	50,1±0,2	5,1260	49,9	0,2	28,3423	49,9	0,2
2,7-Диметилотоктан	47,7	4,9910	48,6	-0,9	27,5529	48,6	-0,9
2,6-Диметилотоктан	49,3	5,0001	48,6	0,7	27,6180	48,7	0,6
3-Метил-3-этилгептан	47,7	4,9330	48,0	-0,3	26,6177	47,0	0,7
2,2-Диметилотоктан	49	4,9009	47,6	1,4	26,9879	47,6	1,4
3,3-Диметилотоктан	48,5	4,9101	47,7	0,8	26,7807	47,3	1,2
3,3-Диэтилгексан	47,3	4,9604	48,2	-0,9	26,6690	47,1	0,2
2,2,4,4-Тетраметилгексан	43,5	4,5777	44,3	-0,8	24,7830	43,9	-0,4
2,2,4,5-Тетраметилгексан	44,4	4,6406	45,0	-0,6	25,2294	44,7	-0,3
2,4-Диметил-3-изопропилпентан	45,6	4,7767	46,4	-0,8	25,7356	45,5	0,1
2-Метил-3,3-диэтилпентан	47,3	4,8807	47,4	-0,1	26,2626	46,4	0,9
4-Метилдекан	54,5	5,5729	54,5	0,0	31,0246	54,5	0,0
2,4,7-Триметилотоктан	51,2	5,3509	52,2	-1,0	29,6905	52,2	-1,0
2,4,6-Триметилотоктан	49	5,3058	51,8	-2,8	28,7545	50,6	-1,6
2,4,6-Триметилнонан	57,2	5,8385	57,2	0,0	32,5628	57,1	0,1
2-Метилундекан	57,5	6,0588	59,5	-2,0	33,9865	59,5	-2,0
4-Метилундекан	59,9	6,1162	60,1	-0,2	34,3595	60,1	-0,2
2,3-Диметилдекан	59,3	5,9978	58,9	0,4	33,6290	58,9	0,4
2,2,4,6,6-Пентаметилгептан	49±0,2	5,3684	52,4	-3,4	29,1331	51,3	-2,3
5-Этил-5-метилдекан	61,4±1,8	6,3857	62,8	-1,4	34,9193	61,0	0,4
2-Метилдодекан	63,1	6,5927	65,0	-1,9	37,2654	65,0	-1,9

О к о н ч а н и е т а б л. 3

1	2	3	4	5	6	7	8
2,3-Диметилундекан	64,8	6,4833	63,8	1,0	36,5797	63,8	1,0
2,4-Диметилундекан	61,6	6,4177	63,2	-1,6	36,0717	63,0	-1,4
2-Метилтридекан	69,6	7,0781	69,9	-0,3	40,2161	70,0	-0,4
2,4-Диметилдодекан	66	6,9032	68,1	-2,1	39,0224	68,0	-2,0
3,3,4,4-Тетраэтилгексан	63,9±1,2	6,6841	65,9	-2,0	35,8853	62,7	1,2
2,2,3,3,4,4,5,5-Октаметилгексан	56,9±0,7	6,0761	59,7	-2,8	32,2606	56,5	0,4
2,4-Диметилтридекан	72,5	7,3886	73,1	-0,6	41,9731	72,9	-0,4
2-Метилтетрадекан	74,8	7,5636	74,9	-0,1	43,1668	75,0	-0,2
3-Метилтетрадекан	74,6	7,5727	75,0	-0,4	43,2319	75,1	-0,5
3-Метилпентадекан	80,2	8,0582	80,0	0,2	46,1826	80,0	0,2
2-Метилпентадекан	81,1	8,0490	79,9	1,2	46,1176	79,9	1,2
3,3,6,6-Тетраэтилоктан	72,3±1,9	7,5460	74,7	-2,4	41,3447	71,9	0,4
2,4-Диметилтетрадекан	77,7	7,8740	78,1	-0,4	44,9238	77,9	-0,2
2,2,4,4,6,8,8-Гептаметилнонан	71,1	7,0148	69,3	1,8	39,3477	68,5	2,6
2-Метилгесадекан	85,4	8,5344	84,8	0,6	49,0683	84,9	0,5
3-Метилгесадекан	85,3	8,5436	84,9	0,4	49,1333	85,0	0,3
4,4-Дипропилундекан	78,0±1,8	8,3407	82,9	-4,9	46,4608	80,5	-2,5
2-Метилгептадекан	93,2	9,0199	89,8	3,4	52,0190	89,9	3,3
3-Метилгептадекан	90,8	9,0290	89,9	0,9	52,0841	90,0	0,8
4,9-Диизопропилдодекан	83,1	8,5674	85,2	-2,1	49,0539	84,9	-1,8
Нонадекан	96,4	9,6507	96,3	0,1	55,8301	96,3	0,1
Эйкозан	101,8± ±2,0	10,1361	101,2	0,6	58,7808	101,3	0,5
Генэйкозан	107,1± ±2,6	10,6216	106,2	0,9	61,7315	106,3	0,8
Докозан	112,1± ±0,3	11,1070	111,2	0,9	64,6822	111,3	0,8
	126,8±0,4			5,7			5,6
	125,7±1,6			4,6			4,5
	126,2±2,3			5,1			5,0
	128,5			7,4			7,3
Тетракозан	148,6±2,0	12,0779	121,1	27,5	70,5837	121,2	27,4
	116,1			-5,0			-5,1
	123,3±4,6			2,2			2,1
	130,2			9,1			9,0
	132,0			10,9			10,8
s			1,8			1,1	
Δ _{max}			4,9			3,3	

* См. примечание к табл. 2.

ние классического метода Рандича для прогнозирования энтальпии испарения алканов при нормальных условиях приводит к значительным ошибкам и не может быть рекомендовано для расчетов; методы 2 и 3, основанные на модификации классического метода Рандича, обладают хорошей прогнозирующей способностью и могут быть использованы для расчета значений энтальпии испарения алканов различного строения, причем метод 3 является более предпочтительным.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Рид Р., Праусниц Д., Шервуд Т. Свойства газов и жидкостей. – Л.: Химия, 1982.
2. Didier Dalmazzone D., Salmon A., Guella S. // Fluid Phase Equilibria. – 2006. – **242**. – P. 29.
3. Ducros M., Gruson J.F., Sannier H. // Thermochim. Acta. – 1980. – **36**. – P. 39.
4. Сагадеев Е.В., Барабанов В.П. // Журн. физ. химии. – 2004. – **78**, № 12. – С. 2119.
5. Wiener H. // J. Amer. Chem. Soc. – 1947. – **69**. – P. 17.
6. Randich M. // J. Chem. Comput. Sci. – 1977. – **17**. – P. 171.
7. Lu Ch., Guo W., Hu X. et al. // Chem. Phys. Lett. – 2006. – **417**. – P. 11.
8. Balaban A.T. // Ibid. – 1982. – **89**. – P. 399.
9. Антипин И.С., Коновалов А.И. // Журн. общ. химии. – 1996. – **66**, № 3. – С. 389.
10. Galvez J., Garcia-Domenech // Chem. Phys. Lett. – 2007. – **449**. – P. 249.
11. Тороров А.А., Торорова А.Р. // J. Mol. Struct. – 2003. – **637**. – P. 1.
12. Тороров А.А., Торорова А.Р., Nesterova A.I., Nabiev O.M. // Chem. Phys. Lett. – 2004. – **384**. – P. 357.
13. Biye Ren // Comp. Chem. – 2002. – **26**. – P. 357.
14. Мальшиева Ю.А., Папулов Ю.Г., Виноградова М.Г. et al. // Журн. структур. химии. – 1998. – **39**, № 3. – С. 484.
15. Курбатова С.В., Финкельштейн Е.Е., Колосова Е.А., Яшкин С.Н. // Там же. – 2004. – **45**, № 1. – С. 144.
16. Нестеров И.А., Нестерова Т.Н., Назмутдинов А.Г. и др. // Журн. физ. химии. – 2006. – **80**, № 11. – С. 2032.
17. Chickos J.S., Acree W.E. // J. Phys. Chem. Ref. Data. – 2003. – **32**, N 2. – P. 519.
18. Majer V., Svoboda V. Enthalpies of Vaporization of Organic Compounds: A Critical Review and Data Compilation. – Oxford: Blackwell Scientific Publications, 1985.