

УДК 544.144.9

## ОПРЕДЕЛЕНИЕ МОЛЕКУЛЯРНЫХ РЕФРАКЦИЙ УГЛЕРОД-УГЛЕРОДНЫХ ХИМИЧЕСКИХ СВЯЗЕЙ

<sup>1</sup>Гладченко Д.В., <sup>1</sup>Путинцев Н.М., <sup>1</sup>Долгопятова Н.В., <sup>2</sup>Путинцев Д.Н.

<sup>1</sup>ФГБОУ ВО «Мурманский государственный технический университет», Мурманск, e-mail: glagchenkodmitriy@gmail.com, putintsevnm@mstu.edu.ru, iranion@yandex.ru;

<sup>2</sup>Институт системного анализа ФИЦ ИУ РАН, Москва, e-mail: 2001dnp@mail.ru

Рефрактометрия используется как предварительное исследование к спектроскопическим методам определения структуры молекул. При этом предполагается, что молекулярная рефракция может быть представлена в виде суммы молекулярных рефракций химических связей, образующих молекулу. В статье предлагается оригинальный метод расчета значений молекулярных рефракций углерод-углеродных химических связей. Метод исследования основывается на теоретически обоснованном уравнении молекулярной рефракции  $R_M$ . Это уравнение отличается от формулы Лоренца – Лоренца тем, что в его левой части нет знаменателя  $(n^2 + 2)$ . Значения молекулярных рефракций вещества и химических связей рассчитываются по справочным данным. Расчет значений  $R_M$  различных по природе веществ ведется для 20 °С и для желтой линии натрия (589,26 нм). Учет температуры необходим для стандартизации энергетического состояния молекул. Для классификации химических связей используется понятие гибридизации атомов углерода. Гибридизация атомов углерода позволяет частично учесть ближнее окружение атомов данной связи и избавиться от «экзальтации», используемых в рефрактометрическом методе. Метод аддитивности молекулярной рефракции вещества, рассматриваемый в работе, учитывает гибридизацию атомов углерода, участвующих в химических связях. Рассчитаны значения молекулярных рефракций 14 типов химических связей ( $C_X - C_Y$ ). Показано, что абсолютные значения молекулярных рефракций этих связей отличаются от соответствующих значений, приведенных в справочной литературе. Показано, что данное отличие обусловлено не только отсутствием члена  $(n^2 + 2)$  в уравнении для  $R_M$ , но и в однозначности величин молекулярных рефракций связей  $x_0$ ,  $x_1$ ,  $x_2$  и  $x_3$ , используемых в нашем методе.

**Ключевые слова:** поляризация, рефракция, молекулярная рефракция вещества, метод аддитивности, показатель преломления, электронная поляризуемость молекулы

## DETERMINATION OF MOLECULAR REFRACTIONS OF CARBON – CARBON CHEMICAL BONDS

<sup>1</sup>Gladchenko D.V., <sup>1</sup>Putintsev N.M., <sup>1</sup>Dolgopyatova N.V., <sup>2</sup>Putintsev D.N.

<sup>1</sup>Murmansk State Technical University, Murmansk, e-mail: glagchenkodmitriy@gmail.com, putintsevnm@mstu.edu.ru, iranion@yandex.ru;

<sup>2</sup>Institute for Systems Analysis, FRC CSC RAS, Moscow, e-mail: 2001dnp@mail.ru

Refractometry is used as a preliminary study to spectroscopic methods for determining the structure of molecules. It is assumed that the molecular refraction can be represented as a sum of molecular refractions of the chemical bonds forming the molecule. The article proposes an original method for calculating the values of molecular refractions of carbon-carbon chemical bonds. The method of investigation is based on the theoretically grounded equation of molecular refraction of  $R_M$ . This equation differs from the Lorentz-Lorentz formula in that there is no denominator  $(n^2 + 2)$  in its left-hand side. The values of molecular refractions of the substance and chemical bonds are calculated from reference data. The calculation of  $R_M$  values of different substances is carried out for 20 °C and for the yellow sodium line (589.26 nm). Temperature accounting is necessary to standardize the energy state of molecules. The concept of hybridization of carbon atoms is used to classify chemical bonds. Hybridization of carbon atoms allows us to partially take into account the near environment of the atoms of a given bond and to get rid of the «exaltations» used in the refractometric method. The method of additivity of molecular refraction of matter, considered in the work, takes into account the hybridization of carbon atoms participating in chemical bonds. The values of molecular refractions of 14 types of chemical bonds ( $C_X - C_Y$ ) are calculated. It is shown that the absolute values of the molecular refractions of these bonds differ from the corresponding values given in the reference literature. It is shown that this difference is due not only to the absence of the term  $(n^2 + 2)$  in the equation for  $R_M$ , but also to the uniqueness of the molecular refraction values of the  $x_0$ ,  $x_1$ ,  $x_2$  and  $x_3$  bonds used in our method.

**Keywords:** polarization, refraction, molecular refraction of matter, additivity method, refractive index, electron polarizability of a molecule

В настоящее время рефрактометрия используется как предварительное исследование к спектроскопическим методам определения структуры молекул [1–3]. При этом предполагается, что молекулярная рефракция может быть представлена в виде суммы молекулярных рефракций химических связей  $R_{Mi}$  (X – Y), образующих молекулу.

Вклады в молекулярную рефракцию вещества определяются из формулы (1) и табулированы [4, 5]

$$R_M^* = \frac{(n_v^2 - 1)}{(n_v^2 + 2)} \frac{M}{d_4} = \frac{N_A}{3\epsilon_0} \alpha_{эл} \quad (1)$$

где  $R_M^*$  – молекулярная рефракция исследуемого вещества,  $n_v$  – абсолютный показатель

преломления на частоте  $\nu$ ,  $\alpha_{\text{эл}}$  – среднее значение электронной поляризуемости молекулы,  $d_4$  – плотность вещества,  $N_A = 6,022 \times 10^{23}$  моль<sup>-1</sup>,  $M$  – молярная масса,  $\epsilon_0 = 8,85419 \times 10^{-12}$  Ф/м.

### Цель исследования

В работе поставлена задача модернизировать метод аддитивности молекулярной рефракции вещества. В [6] показано, что молекулярная рефракция  $R_M$  должна определяться из выражения

$$R_M = (n_v^2 - 1) \frac{M}{d_4} = \frac{N_A}{\epsilon_0} \alpha_{\text{эл}} \quad (2)$$

Из левых частей формул (1) и (2) следует, что величина отношения  $R_M / R_M^*$  равна  $(n_v^2 + 2)$ . Очевидно, что суммарное значение молекулярных рефракций химических связей анализируемых молекул также будет отличаться в  $(n_v^2 + 2)$  раза. В случае разреженного газа величина  $(n_v^2 + 2)$  примерно равна 3, поэтому значения  $R_M^*$  незначительно отличаются от значений  $R_M$ , что позволяет использовать выражение (1) для оценки величины  $\alpha_{\text{эл}}$  и в настоящее время. В плотных средах величина отношения  $(n_v^2 + 2)/3$  заметно больше 1. Например, у воды на линии насыщения при 20 °С величина  $(n_v^2 + 2)/3$  в жидкой фазе равна 1,25926, а в газовой фазе – 1,000004 [7]. Естественно, что в плотных средах формула Лоренца – Лоренца непригодна для расчета значений  $\alpha_{\text{эл}}$ . Модифицированные формулы Лоренца – Лоренца [7] уменьшают погрешность расчета показателей преломления вещества, но не дают точных определений величины электронной поляризуемости молекул.

### Материалы и методы исследования

В настоящей работе для расчета значений  $R_M$  вещества и химических связей используется формула (2). Значения  $R_M$  рассчитываются по справочным данным работ [4, 8]. Расчет значений  $R_M$  различных по природе веществ ведется для 20 °С и для желтой линии натрия (589,26 нм). Учет температуры необходим для стандартизации энергетического состояния молекул.

Для классификации химических связей используется понятие гибридизации атомов углерода. Гибридизация атомов углерода позволяет частично учесть ближнее окружение атомов данной связи и избавиться от «экзальтаций», использующихся в рефрактометрическом методе. Естественно,

что строгой аддитивностью данный метод не обладает, так как он не учитывает все «ближнее» окружение данной связи, и поэтому он применяется для получения предварительной информации о структуре молекулы.

Из формулы (2) следует, что абсолютный показатель преломления определяется величиной электронной поляризуемости молекул [9, 10]. Следовательно, формула (2) наиболее непосредственным образом связывает макроскопические свойства вещества (показатель преломления и плотность) с поляризуемостью молекулы.

### Результаты исследования и их обсуждение

Для расчета значений  $R_M^{20}$  химических связей представим молекулярную рефракцию воды в виде суммы молекулярных рефракций связей (О–Н):

$$R_M = 2R_M^{20}(\text{O} - \text{H}) = 14,010 \times 10^{-6} \text{ м}^3/\text{моль}.$$

Обозначая  $R_M^{20}(\text{O} - \text{H})$  как  $x_0$ , получаем  $x_0 = R_M^{20}(\text{O} - \text{H}) = 7,005 \times 10^{-6} \text{ м}^3/\text{моль}$ . Используя значения  $n_v$  и  $d_4$  молекул тетрахлорметана ( $\text{CCl}_4$ :  $n_v = 1,46018$ ,  $d_4 = 1594,03$  кг/м<sup>3</sup>,  $M = 153,823 \times 10^{-3}$  кг/моль [8]) и дихлорметана ( $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ :  $n_v = 1,42416$ ,  $d_4 = 1325,60$  кг/м<sup>3</sup>,  $M = 84,930 \times 10^{-3}$  кг/моль [8]), находим:  $x_1 = 5,627 \times 10^{-6} \text{ м}^3/\text{моль}$ . Из данных по  $n_v$  и  $d_4$  гексана и  $x_1 = 5,627 \times 10^{-6} \text{ м}^3/\text{моль}$  определяем величину рефракции связи ( $\text{C}_{\text{sp}^3} - \text{C}_{\text{sp}^3}$ ):  $x_3 = R_M^{20}(\text{C}_{\text{sp}^3} - \text{C}_{\text{sp}^3}) = 7,516 \times 10^{-6} \text{ м}^3/\text{моль}$ . Из данных по  $n_v$  и  $d_4$  этанола ( $R_M = 49,822 \times 10^{-6} \text{ м}^3/\text{моль}$ ) и ранее найденных значений  $x_0$ ,  $x_1$  и  $x_3$  определяем величину  $x_2 = R_M^{20}(\text{C}_{\text{sp}^3} - \text{O}) = 7,166 \times 10^{-6} \text{ м}^3/\text{моль}$ .

Далее, обозначая молекулярные рефракции химических связей, входящих в уравнения для  $R_M$  ацетона (62,201), ацетальдегида (43,703), метилацетата (67,673), ацетилхлорида (65,926), тетрахлорметана (129,504), гексена-1 (115,797), муравьиной кислоты (33,230), диметилкарбоната (73,592) и 2-метил-1-бутена ( $96,877 \times 10^{-6} \text{ м}^3/\text{моль}$ ), как  $x_4$ ,  $x_5$ ,  $x_6$ ,  $x_7$ ,  $x_{16}$  и  $x_{26}$  соответственно, составляем систему линейных уравнений. Для полученной переопределенной системы уравнений методом наименьших квадратов находим решение минимальной нормы при  $x_0 = 7,005$ ;  $x_1 = 5,627$ ;  $x_2 = 7,166$  и  $x_3 = 7,516 \times 10^{-6} \text{ м}^3/\text{моль}$ , а полученные значения заносим в табл. 1:

$$x_4 = R_M(\text{C}_{\text{sp}^2} - \text{O}) = 8,021;$$

$$x_5 = R_M(\text{C}_{\text{sp}^2} = \text{O}) = 9,583;$$

$$x_6 = R_M(C_{sp^2} - H) = 8,142; x_7 = R_M(C_{sp^3} - C_{sp^2}) = 9,364;$$

$$x_{16} = R_M(C_{sp^2} = C_{sp^2}) = 9,122; x_{26} = R_M(C_{sp^2} - Cl) = 27,312 \times 10^{-6} \text{ м}^3/\text{моль}.$$

Расчеты были сделаны в программном пакете MATLAB.

Из молекулярной рефракции этилаллена ( $C_5H_8$ :  $M = 68,120 \times 10^{-3}$  кг/моль,  $n_D = 1,42091$ ,  $d_4 = 692,57$  кг/м<sup>3</sup> [4])

$$R_M = 3x_6 + 2x_{37} + x_7 + 5x_1 + x_3 = 100,226 \times 10^{-6} \text{ м}^3/\text{моль}$$

по известным  $x_1$ ,  $x_3$ ,  $x_6$  и  $x_7$  находим величину  $x_{37} = R_M(C_{sp^2} = C_{sp}) = 15,392 \times 10^{-6} \text{ м}^3/\text{моль}$ . Для нахождения значений  $x_{13} = R_M(C_{sp} - C_{sp^3})$ ,  $x_{15} = R_M(C_{sp} \equiv C_{sp})$ ,  $x_{24} = R_M(C_{sp^2} - C_{sp^2})$ ,  $x_{24}^{comp} = R_M(C_{sp^2} - C_{sp^2})$ ,  $x_{27} = R_M(C_{sp^2} - C_{sp})$ ,  $x_{30} = R_M(C_{ar} - C_{sp})$  и  $x_{32} = R_M(C_{sp} - C_{sp})$  требуется определить молекулярные рефракции связей  $x_8 = R_M(C_{ar} - C_{ar})$ ,  $x_9 = R_M(C_{ar} - H)$  и  $x_{10} = R_M(C_{ar} - C_{sp^3})$ . Величину молекулярной рефракции  $x_{10}$  ( $4,128 \times 10^{-6} \text{ м}^3/\text{моль}$ ) определяем из уравнения для *n*-ксилола, а  $x_8$  и  $x_9$  находим из системы уравнений для бензола ( $C_6H_6$ ), пиридина ( $C_5H_5N$ ) и хинолина ( $C_9H_7N$ ):

$$(6x_8 + 6x_9) = 111,381 \times 10^{-6} \text{ м}^3/\text{моль} - \text{бензол},$$

$$(4x_8 + 5x_9 + 2x_{17}) = 103,027 \times 10^{-6} \text{ м}^3/\text{моль} - \text{пиридин},$$

$$(9x_8 + 7x_9 + 2x_{17}) = 194,636 \times 10^{-6} \text{ м}^3/\text{моль} - \text{хинолин}.$$

Отсюда имеем

$$x_8 = R_M^{20}(C_{ar} - C_{ar}) = 18,160 \times 10^{-6} \text{ м}^3/\text{моль},$$

$$x_9 = R_M^{20}(C_{ar} - H) = 0,404 \times 10^{-6} \text{ м}^3/\text{моль},$$

$$x_{17} = R_M^{20}(C_{ar} - N_{ar}) = 14,184 \times 10^{-6} \text{ м}^3/\text{моль}.$$

Из молекулярных рефракций  $R_M$  акрилонитрила  $C_3H_3N$  (61,563), фенилацетилена  $C_8H_6$  (153,013), пропаргилового эфира уксусной кислоты  $C_5H_6O_2$  (99,324), тетрилового альдегида  $C_4H_4O$  (80,261), бензилцианида  $C_8H_7N$  (152,002), нитрил амилпропиоловой кислоты  $C_8H_{11}N$  (159,189), бензонитрила  $C_6H_5N$  (136,958), циановодорода HCN (23,288) и 5-децина  $C_{10}H_{18}$  ( $190,911 \times 10^{-6} \text{ м}^3/\text{моль}$ ) составляем систему линейных уравнений. Решаем ее методом наименьших квадратов, используя ранее найденные значения  $x_0 - x_9$  и  $x_{16}$ . Полученные значения ( $x_{13}$ ,  $x_{15}$ ,  $x_{24}$ ,  $x_{24}^{comp}$ ,  $x_{27} - x_{30}$  и  $x_{32}$ ) заносим в табл. 1.

**Таблица 1**

Значения молекулярных рефракций углерод-углеродных связей (C – C) при 20 °C

Связь	$x_i$	$R_M^{20}, 10^{-6} \text{ м}^3/\text{моль}$	
		Настоящая работа	Рефракции по Фогелю [4]
1	2	3	4
$(C_{sp^3} - C_{sp^3})$	$x_3$	7,516	$R_M^{*20}(C - C) = 1,296$
$(C_{sp^3} - C_{sp^2})$	$x_7$	9,364	То же
$(C_{sp^3} - C_{sp})$	$x_{13}$	7,148	То же
$(C_{sp^3} - C_{ar})$	$x_{10}$	4,128	То же
$(C_{sp^2} - C_{sp^2})$	$x_{24}$	12,309	То же
$(C_{sp^2} - C_{sp^2})$	$x_{24}^{comp}$ (сопряженные диены)	20,308	То же

Окончание табл. 1			
1	2	3	4
$(C_{sp^2} = C_{sp^2})$	$x_{16}$	9,122	4,17
$(C_{sp^2} - C_{sp})$	$x_{27}$	10,315	$R_M^{*20} (C - C) = 1,296$
$(C_{sp^2} - C_{ar})$	$x_{14}$	11,414	То же
$(C_{sp^2} = C_{sp})$	$x_{37}$	15,392	–
$(C_{sp} \text{ } ^\circ C_{sp})$	$x_{15}$	27,371	$R_M^{*20} (C \equiv C): 5,87$ (концевая), 6,24 (не концевая)
$(C_{ar} - C_{ar})$	$x_8$	18,160	2,688; 2,69
$(C_{sp} - C_{ar})$	$x_{30}$	9,986	$R_M^{*20} (C - C) = 1,296$
$(C_{sp} - C_{sp})$	$x_{32}$	15,069	$R_M^{*20} (C - C) = 1,296$

В табл. 2 приведены значения молекулярных рефракций химических связей атома углерода с другими атомами (X).

Таблица 2

Значения связей  $R_M^{*20} (C - X)$  при 20 °С [4]

Связь	$R_M^{*20} \times 10^6 \text{ м}^3/\text{моль}$	Связь	$R_M^{*20} \times 10^6 \text{ м}^3/\text{моль}$
(C – H)	1,676	(N – H)	1,76
(C – Cl)	6,51	(N – O)	2,43
(C – O), эфиры	1,54	(O – H), спирты	1,66
(C – O), ацетали	1,46	(O – H), кислоты	1,80
(C = O)	3,32	(C – C), циклопропан	1,50
(C = O), метилкетон	3,49	(C – C), циклобутан	1,38
(C – N)	1,57	(C – C), циклопентан	1,27
(C = N)	3,75	(C – F)	1,55
(C ≡ N)	4,82	(C – Br)	9,39

Примечание. Величина  $R_M^{*20} (O - H)$  в воде из формулы (2) равна  $1,854 \times 10^{-6} \text{ м}^3/\text{моль}$ .

Для сравнения величин молярных рефракций, найденных по данным табл. 1 ( $R_M^{20}$ ) и табл. 1; 2 ( $R_M^{*20} \times (n_D^2 + 2)$ ), рассчитаем значения молекулярных рефракций исследуемых веществ и занесем их в табл. 3.

Таблица 3

Значения молекулярных рефракций некоторых веществ

Вещество	Молекулярная рефракция, $10^{-6} \text{ м}^3/\text{моль}$		$(n_D^2 + 2)$	$R_M^{20 \text{ экс}}$ [4, 8]
	$R_M^{20}$	$R_M^{*20} \times (n_D^2 + 2)$		
1	2	3	4	5
$\text{CCl}_4$ , тетрахлорметан	$4R(C_{sp^3} - \text{Cl}) = 109,248$	107,601	4,132126	109,249
$\text{CH}_2\text{Cl}_2$ , дихлорметан	$2R(C_{sp^3} - \text{H}) + 2R(C_{sp^3} - \text{Cl}) = 65,878$	65,950	4,028232	65,878
$\text{C}_6\text{H}_{14}$ , гексан	$14R(C_{sp^3} - \text{H}) + 5R(C_{sp^3} - C_{sp^3}) = 116,358$	116,489	3,890240	116,358

Окончание табл. 3				
1	2	3	4	5
$C_7H_{16}$ , гептан	$16R(C_{sp^3} - H) + 6R(C_{sp^3} - C_{sp^3}) = 135,128$	135,792	3,925544	135,638
$CH_3OH$ , метанол	$3R(C_{sp^3} - H) + R(C_{sp^3} - O) + R(O - H) = 31,052$	30,976	3,764646	30,971
$C_2H_5OH$ , этанол	$5R(C_{sp^3} - H) + R(C_{sp^3} - O) + R(O - H) +$ $+R(C_{sp^3} - C_{sp^3}) = 49,822$	49,618	3,853492	49,822
$C_4H_{10}O$ , этоксизэтан	$10R(C_{sp^3} - H) + R(C_{sp^3} - C_{sp^3}) +$ $+2(C_{sp^3} - O) = 85,634$	85,904	3,829527	86,162
$C_4H_{10}O_2$ , 1,2-диметоксиэтан	$10R(C_{sp^3} - H) + R(C_{sp^3} - C_{sp^3}) +$ $+4(C_{sp^3} - O) = 92,450$	92,433	3,868142	92,029
$C_3H_6O$ , пропанон	$6R(C_{sp^3} - H) + R(C_{sp^2} - O) +$ $+2(C_{sp^3} - C_{sp^2}) = 62,073$	62,067	3,846039	62,201
$C_3H_5O_2$ , 2-оксопропанол (ацетилкарбинол)	$5R(C_{sp^3} - H) + R(C_{sp^3} - O) + R(O - H) +$ $+2R(C_{sp^3} - C_{sp^2}) + R(C_{sp^2} = O) = 70,617$	71,092	4,043470	71,416
$C_2H_4O_2$ , этановая кислота	$3R(C_{sp^3} - H) + R(C_{sp^3} - C_{sp^2}) + (C_{sp^2} - O) +$ $+R(O - H) + R(C_{sp^2} = O) = 50,854$	50,755	3,882110	50,472
$C_3H_6O_2$ , пропановая кислота	$5R(C_{sp^3} - H) + R(C_{sp^3} - C_{sp^3}) +$ $+R(C_{sp^2} - O) + R(C_{sp^3} - C_{sp^2}) +$ $+R(C_{sp^2} = O) + R(O - H) = 69,624$	69,557	3,924879	69,070
$C_3H_6O_2$ , метилацетат	$6R(C_{sp^3} - H) + R(C_{sp^3} - O) + R(C_{sp^2} - O) +$ $+2R(C_{sp^3} - C_{sp^2}) + R(C_{sp^2} = O) = 67,896$	67,789	3,853410	67,673
$C_4H_8O_2$ , пропилформат	$7R(C_{sp^3} - H) + 2R(C_{sp^3} - C_{sp^3}) +$ $+R(C_{sp^3} - O) + R(C_{sp^2} - O) +$ $+R(C_{sp^2} = O) + R(C_{sp^2} - H) = 87,175$	87,308	3,895936	87,175
$C_3H_8O$ , пропанол-1	$7R(C_{sp^3} - H) + 2R(C_{sp^3} - C_{sp^3}) +$ $+R(C_{sp^3} - O) + R(O - H) = 68,592$	68,925	3,919776	68,783
$CH_2O_2$ , метановая кислота	$R(O - H) + R(C_{sp^2} - O) + R(C_{sp^2} = O) +$ $+R(C_{sp^2} - H) = 32,751$	32,698	3,880656	33,226
$\sum_1^{16} \Delta(R_M^{20расч} - R_M^{20экс}) = -0,650$ ; $\sum_1^{16} \Delta[(R_M^{*20расч}) \times (n_D^2 + 2) - R_M^{20экс}] = -1,250$				

«Экспериментальные» значения молекулярных рефракций находились из формулы (2) по справочным данным абсолютного показателя преломления и плотности [4, 8]. Из табл. 3 видно, что величина среднего отклонения молекулярной рефракции из 16 различных по природе веществ  $\langle \Delta R_M^{20} \rangle = \langle (R_M^{20\text{расч}} - R_M^{20\text{экс}}) \rangle$  по нашим данным практически равна величине  $\left[ \sum_1^{16} (R_M^{*20\text{расч}}) \times (n_D^2 + 2) - R_M^{20\text{экс}} \right] / 16$ . При этом следует отметить, что значения молекулярных рефракций некоторых связей (O–H),  $(C_{\text{sp}^3} - \text{Cl})$ ,  $(C_{\text{sp}^3} - C_{\text{sp}^3})$  и  $(C_{\text{sp}^3} - \text{O})$  имеют однозначные величины. Этот факт, кроме знаменателя  $\{(n_D^2 + 2)\}$  в формуле (1), является одной из причин расхождения значений молекулярных рефракций химических связей, определенных нами и в литературе [4].

### Заключение

Таким образом, в настоящей работе предложен метод расчета значений молекулярной рефракции химических связей, основанный на теоретически обоснованном выражении для  $R_M$ , что позволяет рассчитывать значения электронной поляризуемости различных по природе молекул в реальном веществе, в то время как формула Лорентц – Лоренца в настоящее время используется как первое приближение только для сильно разреженных газов.

### Список литературы

1. Weiss L., Tazibt A., Tidu A., Aillerie M. Water density and polarizability deduced from the refractive index determined by interferometric measurements up to 250 MPa // The Journal of Chemical Physics. – 2014. – Vol. 141. – 149904.
2. Lemoine F., Castanet G. Temperature and chemical composition of droplets by optical measurement techniques: a state-of-the-art review // Experiments in Fluids, 2013, no. 1. Available at: <https://link.springer.com/article/10.1007/s00348-013-1572-9> (дата обращения: 17.12.17). DOI: 10.1007/s00348-013-1572-9.
3. Martinez-Reina M., Amado-Gonzalez E., Gomez-Jaramillo W. Experimental Study and Modeling of the Refractive Indices in Binary and Ternary Mixtures of Water with Methanol, Ethanol and Propan-1-ol at 293.15K // Journal of Solution Chemistry – 2015. – Vol. 44, № 2. – P. 206-222. DOI: 10.1007/s10953-015-0305-5.
4. Справочник химика. Т. 4. Аналитическая химия. Спектральный анализ. Показатели преломления / Б.П. Никольский [и др.]. – 2-е изд., испр. – Л.: Химия, 1967. – 919 с.
5. Putintsev N.M., Putintsev D.N., Zinov'eva A.B., Stepanova N.V. The method of bond additivity for the deformation polarization of substances // Russian Journal of Physical Chemistry A – 2010. – Vol. 84, № 4. – P. 624-628. DOI: 10.1134/S0036024410040187.
6. Путинцев Н.М., Путинцев Д.Н. Классическая теория поляризации молекулярных систем. – М.: Физматлит, 2011. – 176 с.
7. Harvey A.H., Gallagher J.S., Levelt Sengers J.M.H. Revised Formulation for Refractive Index of Water and Steam as a Function of Wavelength, Temperature and Density // J. Phys. Chem. Ref. Data. – 1998. – Vol. 27, № 4. – P. 761. DOI: 10.1063/1.556029.
8. Ахадов Я.Ю. Диэлектрические параметры чистых жидкостей: справочник / Я.Ю. Ахадов. – М.: Изд-во МАИ, 1999. – 856 с.
9. Putintsev N.M., Dolgopyatova N.V., Gladchenko D.V., Putintsev D.N. A method for calculating the molecular refraction of binary solvent mixtures // Russian Journal of Physical Chemistry A – 2016. – Vol. 90, № 2. – P. 507-510. DOI: 10.1134/S0036024416020254.
10. Zotov S.D., Kazantsev S.Yu., Kudryavtsev E.M., Kuznetsov A.A., Lebedev A.A., Firsov K.N. Measuring the refractive index in a wave excited in water by a laser pulse // Instruments and Experimental Techniques – 2017. – Vol. 60, № 6. – P. 858-863. DOI: 10.1134/S0020441217050207.

### References

1. Weiss L., Tazibt A., Tidu A., Aillerie M. Water density and polarizability deduced from the refractive index determined by interferometric measurements up to 250 MPa. The Journal of Chemical Physics, 2014, no. 141, pp. 149904.
2. Lemoine F., Castanet G. Temperature and chemical composition of droplets by optical measurement techniques: a state-of-the-art review. Experiments in Fluids, 2013, no. 1. Available at: <https://link.springer.com/article/10.1007/s00348-013-1572-9> (accessed 17.10.2017). DOI: 10.1007/s00348-013-1572-9.
3. Martinez-Reina M., Amado-Gonzalez E., Gomez-Jaramillo W. Experimental Study and Modeling of the Refractive Indices in Binary and Ternary Mixtures of Water with Methanol, Ethanol and Propan-1-ol at 293.15K. Journal of Solution Chemistry, 2015, vol. 2, no. 44, pp. 206-222. DOI: 10.1007/s10953-015-0305-5.
4. Nikol'skii B.P. Spravochnik khimika. Tom 4. Analiticheskaia khimiia. Spektral'nyi analiz. Pokazateli prelomleniia. [Reference book of the chemist. Volume 4. Analytical chemistry. Spectral analysis. Refractive indices.]. 2-e izd., ispr. Leningrad, Khimiia, 1967, vol. 4, 919.
5. Putintsev N.M., Putintsev D.N., Zinov'eva A.B., Stepanova N.V. The method of bond additivity for the deformation polarization of substances. Russian Journal of Physical Chemistry A, 2010, vol. 4, no. 84, pp. 624-628. DOI: 10.1134/S0036024410040187.
6. Putintsev N.M., Putintsev D.N. Klassicheskaia teoriia poliarizatsii molekuliarnykh sistem [The classical theory of polarization of molecular systems]. Moscow, Fizmatlit, 2011, 176.
7. Harvey A.H., Gallagher J.S., Levelt Sengers J.M.H. Revised Formulation for Refractive Index of Water and Steam as a Function of Wavelength, Temperature and Density. J. Phys. Chem. Ref. Data, 1998, vol. 4, no. 27, pp. 761. DOI: 10.1063/1.556029.
8. Akhadov Ia.Iu. Dielektricheskie parametry chistykh zhidkosti: spravochnik [Dielectric parameters of pure liquids: a reference book]. Moscow, Izd-vo MAI, 1999, 856.
9. Putintsev N.M., Dolgopyatova N.V., Gladchenko D.V., Putintsev D.N. A method for calculating the molecular refraction of binary solvent mixtures. Russian Journal of Physical Chemistry A, 2016, vol. 2, no. 90, pp. 507-510. DOI: 10.1134/S0036024416020254.
10. Zotov S.D., Kazantsev S.Yu., Kudryavtsev E.M., Kuznetsov A.A., Lebedev A.A., Firsov K.N. Measuring the refractive index in a wave excited in water by a laser pulse. Instruments and Experimental Techniques, 2017, vol. 6, no. 60, pp. 858-863. DOI: 10.1134/S0020441217050207.