

Теоретическое изучение строения 3-(4-хлорфенил)-2,1-бензизоксазол-5-карбонил хлорида

© Котов*⁺ Александр Дмитриевич, Базлов Дмитрий Александрович
и Антонова Екатерина Алексеевна

Кафедра органической и биологической химии, Ярославский государственный университет
им. П.Г. Демидова. ул. Советская, 14. г. Ярославль, 150000. Россия.
Тел.: (4852) 442928. Факс: (4852) 79-77-51. E-mail: kot@bio.uniyar.ac.ru

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: 3-(4-хлорфенил)-2,1-бензизоксазол-5-карбонилхлорид, квантово-химическое моделирование, полуэмпирические и неэмпирические методы.

Аннотация

Рассчитаны разными методами оптимизированная молекулярная геометрия, кратность связей, атомные заряды для 3-(4-хлорфенил)-2,1-бензизоксазол-5-карбонилхлорида. Проведено сравнение результатов расчетов полуэмпирическими методами РМ3 и РМ6, методами Хартри-Фока (с разными базисными наборами), Меллера-Плессета, теории функционала плотности с данными РСА, сделан анализ Маликеновских атомных зарядов. На основе молекулярной геометрии и анализа Маликеновских зарядов идентифицированы межмолекулярные взаимодействия.