

Тематический раздел: Исследование зависимостей _____ **Полная исследовательская публикация**
“структура – свойство”.

Подраздел: Физическая органическая химия.

Регистрационный код публикации: 6-8-1-11

Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции “Бутлеровские чтения”. <http://butlerov.com/readings/>

Поступила в редакцию 20 сентября 2006 г. УДК 541.013.5:541.253:532.14.

Модель «ANSAB» расчета плотности органических соединений

© Рукавишников Владимир Васильевич⁺ и Белик Александр Васильевич*

Кафедра органической и неорганической химии. Челябинский государственный университет
(ГОУВПО «ЧелГУ»). Ул. Бр. Кашириных, 129. г. Челябинск, 454021. Россия.

Тел.: (351) 799-70-66. E-mail: vladimir_rukavis@mail.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: плотность вещества, объем молекулы, модель «ANSAB», пространственное строение органических соединений.

Аннотация

Представлена новая модель «ANSAB», которая по декартовым координатам атомов восстанавливает пространственный образ молекулы. При этом атомные образования не имеют традиционной сферической симметрии. С помощью вычисленного молекулярного объема оценены относительные плотности различных органических веществ. Показано удовлетворительное согласие расчетных и экспериментальных величин.