

**Полная исследовательская публикация** Тематический раздел: Теоретическая и компьютерная химия.  
Регистрационный код публикации: 8-13-2-46 Подраздел: Взаимосвязь: “структура – свойство”.  
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции “Бутлеровские чтения”. <http://butlerov.com/readings/>  
УДК 541.013.5:541.253:532.14. Поступила в редакцию 12 декабря 2009 г.

## Прогноз относительной плотности фуроксанов с использованием модели «ANSAB»

© Рукавишников Владимир Васильевич<sup>+</sup> и Белик Александр Васильевич\*

Кафедра коллоидной и когерентной химии. Челябинский государственный университет. Ул. Бр. Кашириных, 129. г. Челябинск, 454021. Россия. Тел.: (351) 799-70-66. E-mail: [vladimir\\_rukavis@mail.ru](mailto:vladimir_rukavis@mail.ru)

\*Ведущий направление; <sup>+</sup>Поддерживающий переписку

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

### Аннотация

В работе показана возможность использования ранее предложенной модели «ANSAB» для прогноза относительной плотности фуроксанов. Получено удовлетворительное согласие расчетных и экспериментальных величин. Оценен молекулярный объем соединений, когда объем атомных образований, составляющих молекулы, не имел сферической симметрии.