

## **Квантовохимическое исследование силовых полей 4-нитро-5-метилбензофуроксана и 4-нитро-7-метилбензофуроксана**

© **Белик Александр Васильевич\*** и **Рыбин Тимофей Владимирович<sup>+</sup>**

*Кафедра химической технологии и вычислительной химии. Челябинский государственный университет. Ул. Бр. Кашириных, 129. г. Челябинск, 454001. Россия.*

*Тел.: (351) 799-70-66. E-mail: belik@csu.ru, motiphey@mail.ru*

---

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

**Ключевые слова:** фуроксаны, силовые коэффициенты, теория функционала плотности (DFT), координаты  $X_{\delta}^0$ .

### **Аннотация**

В рамках теории функционала плотности рассмотрено электронное строение 4-нитро-5-метилбензофуроксана и 4-нитро-7-метилбензофуроксана, вычислена матрица силовых коэффициентов в декартовой системе координат и  $X_{\delta}^0$ . Показаны особенности силовых полей рассмотренных молекул.