

Квантовохимическое исследование силовых полей 4-нитро-5-метилбензофураксана и 4-нитро-7-метилбензофураксана

© **Белик Александр Васильевич*** и **Рыбин Тимофей Владимирович⁺**

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; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: фураксаны, силовые коэффициенты, теория функционала плотности (DFT), координаты X_{δ}^0 .

Аннотация

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