

## Изучение межмолекулярных комплексов диметилселенида с $\nu$ -акцепторами: квантовохимические аспекты

© Маджидов Тимур Исмаилович,<sup>1+</sup> Чмутова Галина Алексеевна<sup>1\*</sup>  
и Angel Martín Pendás<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Кафедра органической химии. Химический институт им. А.М. Бутлерова. Казанский (Приволжский) федеральный университет. Ул. Кремлевская, 18. г. Казань, 420008. Республика Татарстан. Россия.  
Тел.: (843) 233-77-89. E-mail: Timur.Madzhidov@ksu.ru, Galina.Tschmutowa@ksu.ru

<sup>2</sup> Departamento de Química Física y Analítica. Facultad de Química. Universidad de Oviedo, Avda. Julián Clavería, 8. Oviedo, 33006. Spain. E-mail: angel@fluor.quimica.unovi.es

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

**Ключевые слова:** селеноорганические соединения, межмолекулярные комплексы,  $\nu$ -акцепторы, теория атомов в молекулах, подход взаимодействующего квантового атома, природа межмолекулярных взаимодействий.

### Аннотация

С использованием метода теории функционала плотности (B3LYP/6-311++G(d,p)) исследованы комплексы диметилселенида с несколькими  $\nu$ -электроноакцепторами разной силы. Обнаружено, что обобществление электронной плотности играет более важную роль, нежели электростатическое взаимодействие между компонентами комплексов. С использованием анализа топологии распределения электронной плотности выявлено, что в зависимости от характера электроноакцептора природа связи между компонентами меняется от ван-дер-ваальсовой до слабой ковалентной. С использованием подхода взаимодействующего квантового атома на примере комплекса  $H_2Se \cdots AlH_3$  были проанализированы вклады от электростатических и обменно-корреляционных взаимодействий в связь  $Se \cdots Al$  и межмолекулярное связывание в целом.