

**Полная исследовательская публикация** *Тематический раздел:* Теоретическая и компьютерная химия.  
*Регистрационный код публикации:* 6-9-4-10 *Подраздел:* Квантовая химия.  
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции “*Бутлеровские чтения*”. <http://butlerov.com/readings/>  
УДК 541.1 + 530.145. Поступила в редакцию 30 октября 2006 г.

## Исследование электронного строения комплексов $\text{SO}_3$ и $\text{I}_2$ на основании теории функционала плотности

© Полещук Олег Хемович,<sup>1\*</sup> Юрьева Анна Геннадьевна,<sup>1</sup>  
Фатеев Александр Владимирович<sup>1</sup> и Бранчадел Висенс<sup>2</sup>

<sup>1</sup> *Кафедра органической химии. Томский государственный педагогический университет.  
Пр. Комсомольский, 75. г. Томск, 634041. Россия.*

<sup>2</sup> *Departament de Química. Universitat Autònoma de Barcelona. Edifici Cn, 08193 Bellaterra. Spain.  
E-mail: vicenc@klingon.uab.cat*

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

**Ключевые слова:** *микроволновая спектроскопия, теория функционала плотности, химическая связь, квадрупольное взаимодействие.*

### Аннотация

На основании расчета методом теории функционала плотности проведен анализ ряда  $\text{SO}_3 \dots \text{V}$ ,  $\text{I}_2 \dots \text{V}$  комплексов (ππ и πσ типа по Малликену), образованных между молекулами  $\text{SO}_3$  или  $\text{I}_2$  и Льюисовскими основаниями V. Геометрические параметры, константы вращения и константы ядерного квадрупольного взаимодействия азота и галогенов, полученные из этих расчетов, согласуются с данными микроволновой спектроскопии в газовой фазе. Хорошая корреляция обнаружена между рассчитанными энергиями связей этих комплексов и удлинением связи S-O. Схема разделения энергии и член стабилизирующего орбитального взаимодействия приводят к корреляциям между переносом заряда и прочностью донорно-акцепторной связи. Модель ZORA показала хорошие результаты в вычислении констант квадрупольного взаимодействия на атомах азота и галогенов. Из энергетического анализа и приближения Клопмана следует, что для  $\text{SO}_3 \dots \text{V}$  комплексов электростатический вклад в связывание сопоставим с ковалентным, а для  $\text{ICl} \dots \text{V}$  комплексов электростатическое связывание преобладает над ковалентным.