**Яковлев, Алексей Львович.**

## Кластерное квантовохимическое моделирование формирования активных центров в металлсодержащих цеолитах : диссертация ... кандидата химических наук : 01.04.17. - Новосибирск, 1999. - 103 с. : ил.

## Оглавление диссертациикандидат химических наук Яковлев, Алексей Львович

ВВЕДЕНИЕ

ГЛАВА 1. ЦЕОЛИТЫ И СОСТОЯНИЕ МЕТАЛЛОВ В ЦЕОЛИТАХ

Общие представления о строении цеолитов

Каталитически активные центры в цеолитах

Квантовохимическое моделирование активных центров в цеолитах

ГЛАВА 2. ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ

Метод функционала плотности

Программа расчетов методом функционала плотности ьСйТО-ОР

Влияние ориентации сетки на результаты расчета в методе ФП

Топологический анализ электронной плотности в программе ЬССТО-БР

Полуэмпирический метод МБОО/МС

ГЛАВА 3. ОБРАЗОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННО-ДЕФИЦИТНОЙ ПЛАТИНЫ В МОРДЕНИТЕ

Кластерные модели

Теоретический анализ наблюдаемых величин

Заряд платины

Частоты колебаний адсорбированной молекулы СО

ГЛАВА 4. ФОРМИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННО-ДЕФИЦИТНЫХ КЛАСТЕРОВ ПАЛЛАДИЯ В ФОЖАЗИТАХ

Геометрия кластеров

Энергетические характеристики

Сдвиг частоты колебаний СО при адсорбции

Влияние протонирования кластеров на адсорбцию молекулярного водорода

ГЛАВА 5. ФОРМИРОВАНИЕ ЦЕНТРОВ СЕЛЕКТИВНОГО ОКИСЛЕНИЯ В ВЫСОКОКРЕМНЕЗЕМИСТЫХ ЦЕОЛИТАХ ПРИ РАЗЛОЖЕНИИ ЗАКИСИ АЗОТА

Центры селективного окисления в РЕг8М-5

Разложение И20 на Льюисовских кислотных центрах

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

ЛИТЕРАТУРА