

Тематическое направление: Теоретическая и компьютерная химия. Часть 1.

Квантовохимические методы в теории гетерогенного катализа

© **Жидомиров Георгий Михайлович**

Химический факультет. Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова. Ленинские горы, д. 1. сер. 3. г. Москва ГСП-2, 119992. Россия. Тел.: (495) 9391814. E-mail: zhidomirov@mail.ru

Ключевые слова: хемосорбции, поверхностные структуры, кластеры, гетерогенный катализ, квантовохимические методы.

Аннотация

В обзоре приведена формальная систематизация квантовохимических расчётных схем. Акцент внимания сделан на тех методиках, которые применялись в расчётах хемосорбции и катализа. Представлено описание расчетных схем, начиная с полуэмпирических МО ЛКАО и кончая различными пост-хартри-фоковскими расчетами. Детально обсуждается теория DFT, применимость различных расчетных схем к кластерному подходу, описываются твдотельные (зонные) методы расчета.