

Тематический раздел: Квантовая химия.  
Подраздел: Расчетные методы.

**Аналитический обзор**

Регистрационный код публикации: 9-16-3-1

Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "Бутлеровские чтения". <http://butlerov.com/readings/>  
Поступила в редакцию 27 августа 2009 г. УДК 544.144.

Тематическое направление: Теоретическая и компьютерная химия. Часть 2.

## **Квантовохимические исследования строения активных центров, хемосорбции и 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) 939-18-14. E-mail: [zhidomirov@mail.ru](mailto:zhidomirov@mail.ru)

**Ключевые слова:** катализатор, адсорбция, квантовохимический расчет, нанокластер металла.

### **Аннотация**

Обобщены литературные данные квантовохимических исследований хемосорбции на поверхностях металлов, описаны методы с периодическими граничными условиями. Рассмотрено влияние оксидного носителя на электронное строение нанесенного нанокластера металла. Значительное внимание уделено расчетам адсорбции и реакционных превращений на поверхности сплавов.