Полная исследовательская публикация *Тематический раздел:* Квантовая химия.
Регистрационный код публикации: 10-21-7-34 *Подраздел:* Неорганическая химия.
Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции "*Бутлеровские чтения*". http://butlerov.com/readings/
УДК 544.47+544.18. Поступила в редакцию 17 августа 2010 г.

Теоретический анализ адсорбции молекулярного кислорода на кластере серебра Ag_4

© Салаев Михаил Анатольевич,[1]*+ **Полещук Олег Хемович**[1,2]
и **Курина Лариса Николаевна**[1]

[1] *Кафедра физической и коллоидной химии. Томский государственный университет. Пр. Ленина, 36. г. Томск, 634050. Россия. Тел.: (3822) 42-07-80. E-mail: mihan555@yandex.ru*
[2] *Кафедра органической химии. Томский государственный педагогический университет. Пр. Комсомольский, 75. г. Томск, 634041. Россия. Тел.: (3822) 59-14-54. E-mail: poleshch@tspu.edu.ru*

* Ведущий направления; + Поддерживающий переписку

Ключевые слова*: теория функционала плотности*, *B3LYP/DGDZVP, адсорбция, каталитические процессы.*

Аннотация

В настоящей работе на уровнях теории HF/DGDZVP и B3LYP/DGDZVP выполнены квантово-химические расчеты энергий адсорбционного взаимодействия в системах, содержащих четырехатомный кластер серебра и молекулярный адсорбированный кислород. Показано, что уровень теории HF/DGDZVP позволяет получить качественные представления, хорошо согласующиеся с экспериментальными данными, однако не дает необходимой точности при описании адсорбционных взаимодействий, в то время как уровень теории B3LYP/DGDZVP позволяет адекватно оценивать геометрию адсорбированных форм и адсорбционные взаимодействия. Показано, что в окислительных каталитических процессах, протекающих на поверхности серебра, с большей вероятностью участвует молекулярный кислород в синглетном состоянии.