

УДК 541.183

## КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ АЛЮМИНИЙ- И БОРСОДЕРЖАЩИХ ЦЕОЛИТНЫХ КЛАСТЕРОВ С МОЛЕКУЛАМИ ВОДЫ И АММИАКА

С.В. Малышев, А.А. Кубасов, Л.Е. Китаев

*(кафедра физической химии; e-mail: kubasov@comp.chem.msu.su)*

Проведены квантово-механические расчеты цеолитных кластеров с молекулами воды и аммиака. Кластеры включали 10 атомов кремния и алюминия, причем один атом алюминия также замещали на атом бора. Получены значения длин связей и валентных углов, а также определена геометрия адсорбционных комплексов и величина энергии связи молекул воды и аммиака с атомами алюминия и бора фрагмента цеолита. Рассчитанные величины энергии связи молекул-зондов дают количественную характеристику силы апротонных кислотных центров цеолита.

**Ключевые слова:** квантово-механический расчет, цеолитный кластер, апротонный центр, адсорбция, вода, аммиак.

Введение атомов бора в структуру цеолитов различного типа, как в ходе их синтеза, так и путем последующей обработки соединениями бора, ведет к образованию композиций, обладающих иными каталитическими свойствами по сравнению с аналогичными кристаллическими алюмосиликатами, не содержащими гетероатомов [1]. Существенно увеличивается выход линейных  $\alpha$ -олефинов при дегидратации первичных алифатических спиртов [2], структурных изомеров  $C_6$  в ходе конверсии  $n$ -гексана [3], образования  $\epsilon$ -капролактама в результате бекмановской перегруппировки циклогексаноксима [4] и изменение селективности иных промышленно важных процессов [1]. Общеизвестным является положение о том, что основной причиной подобных изменений служит ослабление кислотных свойств цеолитов в результате их модифицирования. Для установления совокупной силы кислотных центров используют калориметрические измерения адсорбции молекул-зондов, имеющих электронодонорные атомы (азот, кислород) или термодесорбцию этих молекул с поверхности катализаторов. Дифференцировать и идентифицировать центры по типу позволяют спектральные измерения (ИК, ЭПР), однако определение силы и числа центров этими способами не является достаточно строгим. В связи с этим некоторые возможности сравнительной оценки силы кислотных центров открывают квантово-механические расчеты фрагментов цеолитной структуры с некоторыми молекулами-зондами. Большинство подобных работ посвящено изучению структурных протонных центров. В данной работе

была поставлена задача оценить изменения в свойствах адсорбционной системы при замене структурного атома алюминия на атом бора.

При проведении расчетов использовали кластерное приближение, применимость которого для подобных структур была показана в работах [5–12]. Его применение оказалось оправданным, поскольку при адсорбции молекул жесткой структурой цеолита возмущение ограничено в основном ближайшим окружением, о чем можно судить по сохранению характеристических частот колебаний отдельных частей адсорбционной системы. Особенностью нашего подхода является использование малых циклических кластеров. В качестве модельного был использован льюисовский акцепторный центр.

Предыдущий этап наших работ состоял в квантово-химическом исследовании взаимодействия подобных центров на примере трехчленных кластеров [13]. В настоящей работе указанный подход был использован при квантово-механическом моделировании взаимодействия молекул воды и аммиака с расширенным кластером, более полно моделирующим структуру цеолита типа фожазита до и после замещения в нем атома алюминия на атом бора. Одной из задач была также оценка возможностей созданной на химическом факультете МГУ программы PRIRODA.

### Проведение расчетов

Все расчеты проводили при использовании теории функционала плотности с функционалом PBE, базис-

ным набором *ss-pVTZ* программного пакета *PRIRODA-04* [14]. Полученные данные сравнивали с результатами квантово-химических расчетов с использованием программного пакета *Jaguar* (функционал *BLYP*, базисный набор *6-31G\*\**). Предварительно были сопоставлены полученные при расчете разными программами геометрические и энергетические параметры кластеров, включающих восемь тетраэдрически координированных по кислороду атомов алюминия и кремния (8Т). При этом наибольшее расхождение геометрических параметров составило не более 3 пм для межатомных расстояний и не более 8 град для углов, различие энергетических характеристик не превышало  $2 \cdot 10^{-4}$  а.е. При такой воспроизводимости результатов было решено использовать пакет *PRIRODA-04* как более быстрый (аналогичные расчеты занимали меньше времени в среднем на 10%).

Согласно [14], при расчетах с помощью программы *PRIRODA-04* точность значений энергии равновесных ядерных конфигураций и геометрических параметров не хуже  $\pm 0,1$  кДж/моль и  $\pm 0,1$  пм соответственно. При типичной длине связи порядка 100 пм погрешность пространственных координат  $\pm 0,1$  пм означает неточность в определении валентного угла порядка  $0,1/100 = 10^{-3}$  радиан или  $\pm 0,06$  град. Поэтому найденные значения валентных углов приведены в таблицах и тексте с точностью до 0,1 град.

Поскольку достоверность геометрических параметров не превышает  $\pm 1$  пм и  $\pm 1$  град, а точность значений энергии не превышает термодинамическую составляющую ( $\pm 4$  кДж/моль), точность численных результатов имеет следующие ограничения: 1 пм, 1 град и 1 кДж/моль.

На рис. 1 приведены условные обозначения атомов, использованные далее в рисунках. Для обозначения конкретных атомов введены верхние индексы к символам элементов (например,  $H^{w1}$ ,  $O^d$ ,  $O^2$ ). Использованные в настоящей работе обозначения и единицы измерения физических величин приведены в табл. 1.

В рамках поставленной в данной работе задачи (проведение квантово-механического расчета цеолитных кластеров с адсорбированными молекулами воды и аммиака) можно было бы ограничиться рассмотрением использованного ранее кластера 8Т [15]. Однако предполагаемое расширение модели для случая ад-



Рис. 1. Условные обозначения атомов

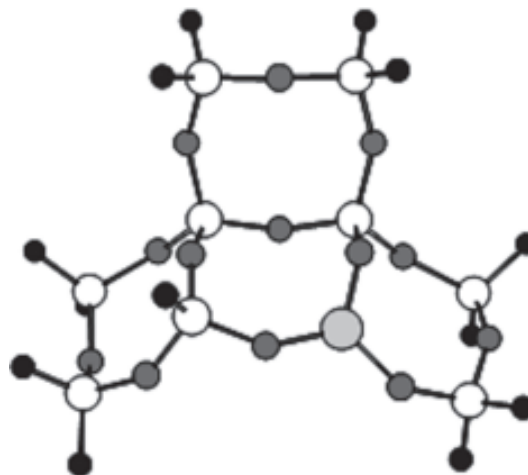
Таблица 1

Рассчитанные величины и их обозначение

Величина	Обозначение	Единица измерения
Энергия (удельная)	E	кДж/моль
Расстояние	r	пм
Угол	$\varphi$	град. (градусы)
Электрический заряд	Q	а.е. (атомные единицы)

сорбции углеводородов с числом углеродных атомов до  $C_4$  или введения в структуру цеолита иных гетероатомов требует увеличения числа атомов в кластере до 10. Параметры кластера 10Т (рис. 2) сравнивали с величинами длин связей и углов, полученными ранее расчетным [8] и кристаллографическим [16, 17] методами (табл. 2). Из табл. 2 видно, что различие геометрических параметров, рассчитанных для кластера 10Т, и кристаллографических данных не превышает 5 пм (длина связи) и 10 град (углы). Аналогичные характеристики для расчетных кластеров 8Т и 10Т практически совпадают.

Смоделированы кластеры, содержащие в своем составе 8 и 10 тетраэдрических атомов, в которых атом алюминия изоморфно замещен на атом бора (рис. 3). Основные геометрические параметры этих кластеров приведены в табл. 2. Сравнение длин связей В–О с литературными данными [8, 16, 17] показало правомерность использования моделей 8Т–В и 10Т–В, поскольку геометрические параметры, полученные разными методами, различались только на 1 пм.



10Т–Al

Рис. 2. Структура цеолитного кластера 10Т – Al

Т а б л и ц а 2

## Геометрические параметры кластеров 10Т

Параметр	Длина связи*	Кристаллографические данные	Кластер		
			8Т-А1	10Т-А1	10Т-В
r Al/BO	174	174–175	172	170	137
	146	135–136		170	
φ OAl/BO		120	120	119	
				119	118
				122	120
φ OSiO		108	108–112	108–111	108–112
φ SiOSi		132	139	140–142	138–139
			141	141	142
			145	143–153	147
r SiO	163	163	164–168	164–166	163–168

\* Межатомные расстояния, рассчитанные как сумма ионных радиусов [18].

Таким образом, построенные системы удовлетворяли требованиям кластерного подхода (квантово-механических расчетов), так как содержали минимально достаточное число тетраэдрических атомов в системе и обладали необходимой жесткостью, т.е. возмущение, накладываемое адсорбируемой молекулой на каркас цеолита, не передавалось на вторичное окружение модельного адсорбционного лююисовского кислотного центра (ЛКЦ).

Оптимизацию по энергии комплексов кластеров с адсорбированными на них молекулами проводили до достижения полной релаксации как молекул-зондов в поле адсорбционных центров, так и самого молекулярного фрагмента цеолита. Этот подход позволяет получать наиболее информативные и сопоставимые с экспериментальными данными результаты, а также с большей точностью отслеживать проявляемые тенденции поведения адсорбционных центров.

### Комплексы с водой

Квантово-механический анализ комплексов кластеров 10Т-А1 и 10Т-В с молекулой воды показал нали-

чие единственного энергетического минимума для каждой структуры (рис. 4). На рис. 4 показаны также две проекции координации молекулы адсорбата на акцепторных центрах. В табл. 3 приведены некоторые характеристики полученных комплексов. Сравнение результатов с данными, полученными ранее в работе [19], показали небольшие расхождения значений длин связей  $O^w-H^{w1}$  и  $O^w-H^{w2}$  адсорбированной молекулы воды (0,6 и 0,7 пм). Напомним, что в [19] расчеты проводили при помощи программного пакета Jaguar. В остальном параметры, рассчитанные с помощью программ PRIRODA-04 и Jaguar, не давали расхождений, превосходящих 0,3 пм (длина связей) и 0,7 град (углы) для водных комплексов кластеров. Отметим, что ориентация молекулы воды относительно акцепторного центра практически одинакова, однако в комплексе с бором она более удалена от акцепторного центра.

Рассчитанные нами для комплексов кластеров 10Т-А1 и 8Т-А1 (оптимизация по энергии программным пакетом PRIRODA-04) данные не отличались в пределах установленных погрешностей, что можно

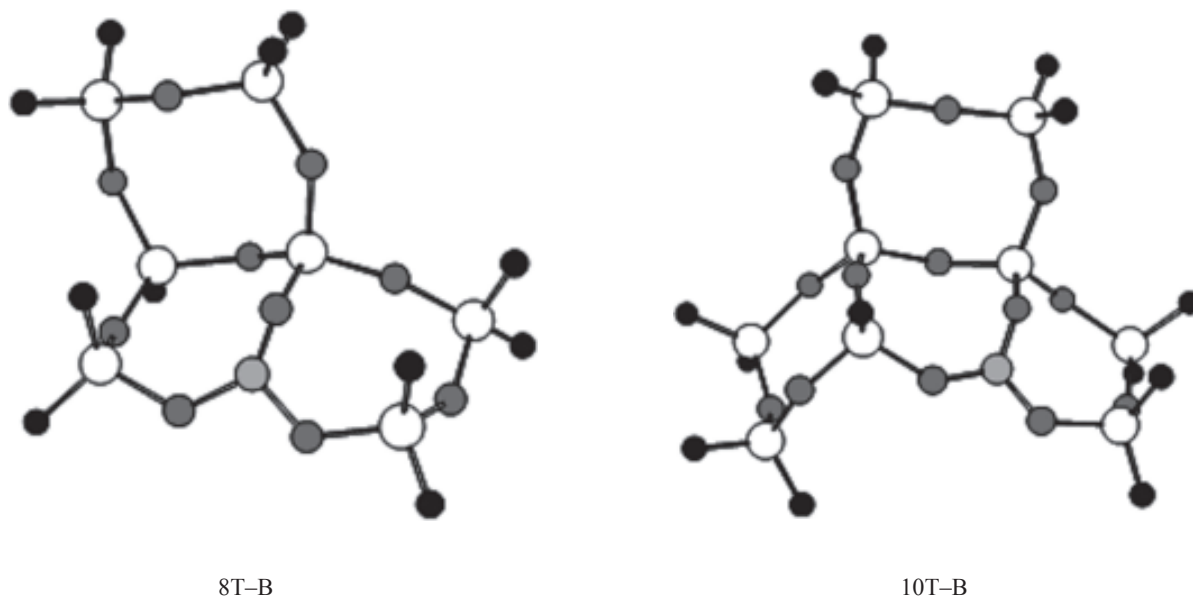


Рис. 3. Борсодержащие кластеры с 8 и 10 тетраэдрическими атомами

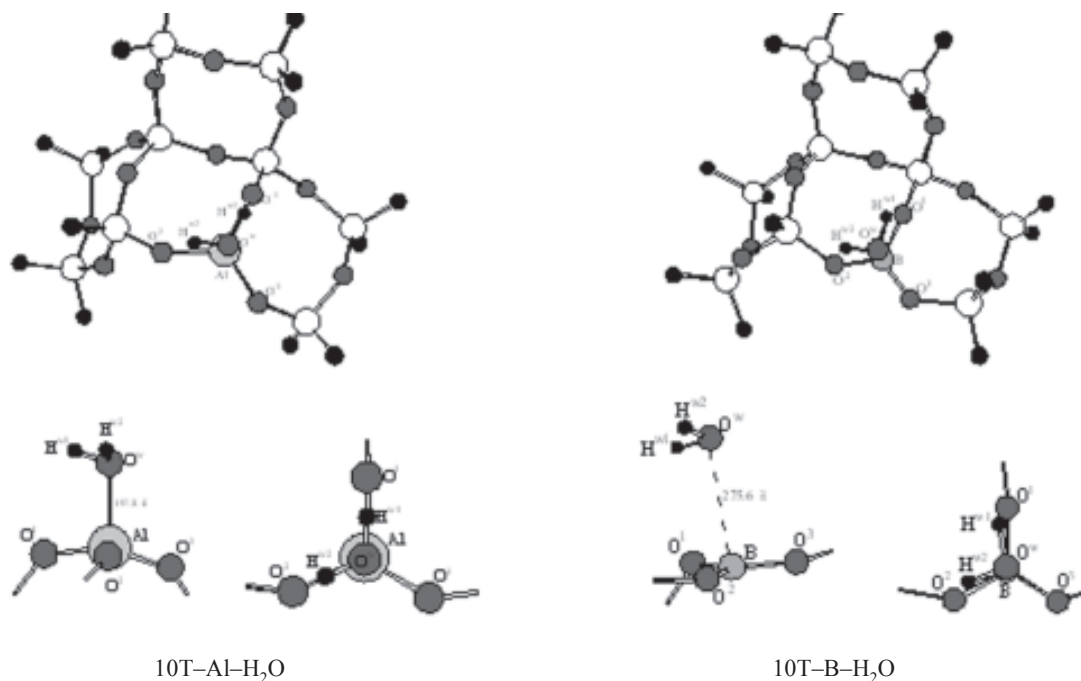


Рис. 4. Координация воды в комплексах с 10Т-кластерами

видеть по численным значениям параметров, приведенных в табл. 3.

Сравнение с данными работ [15, 20], где расчеты кластеров 8Т и 3Т проводили при помощи программного пакета PC GAMESS, свидетельствует о соответствии полученных результатов по длинам связей и углам OSiO цеолитного фрагмента. Так, в упомянутых работах при расчете длин связей в молекулах воды получена величина 96–97 пм, расстояние Al...O<sup>w</sup> 191–198 пм, а углы OSiO цеолитного фрагмента в пределах 106–111 град. Как видно из табл. 3,

аналогичные значения, полученные в настоящей работе, совпадают с литературными или их отличия находятся в пределах установленной погрешности. Однако энергия диссоциации комплексов с молекулой воды, образованных по координационному пути (рис. 4, молекула воды координируется в поле ЛКЦ без диссоциации), оценивается большей величиной, находящейся в пределах 145–153 кДж/моль; полученные нами значения составляют 122–123 кДж/моль.

Согласно квантово-механическим расчетам методом функционала плотности с базисным набором

Таблица 3

## Энергетические и геометрические параметры комплексов кластеров с водой

Параметр	Кластер			
	8Т–Al–H <sub>2</sub> O	10Т–Al–H <sub>2</sub> O	8Т–В–H <sub>2</sub> O	10Т–В–H <sub>2</sub> O
E <sub>Diss</sub>	122,0	122,6	19,2	19,3
r O <sup>w</sup> H <sup>w1</sup>	97,6 (0,0)	97,6 (0,0)	97,1 (–0,5)	97,1 (–0,5)
r O <sup>w</sup> H <sup>w2</sup>	97,5 (–0,1)	97,5 (–0,1)	97,0 (–0,6)	97,0 (–0,6)
φ НОН	107,0 (+4,4)	107,0 (+4,4)	104,3 (+1,7)	104,4 (+1,8)
r O <sup>w</sup> Al/B	198,9	197,8	273,5	275,6
q Al/B	+0,524	+0,525	+0,269	+0,272
q O <sup>w</sup>	–0,127	–0,126	–0,225	–0,258
q H <sup>w1</sup>	+0,214	+0,215	+0,152	+0,147
q H <sup>w2</sup>	+0,215	+0,215	+0,157	+0,156
q H <sub>2</sub> O	+0,302	+0,304	+0,084	+0,045

Примечание. В скобках приведены разности полученных параметров с аналогичными для свободной молекулы воды (квантово-механический расчет).

сс-pVDZ, приведенным в работе [21], длина связи для димера воды в молекуле составляет 97,4 пм, что хорошо согласуется с полученной величиной.

Параметры комплексов борсодержащих кластеров с молекулами воды сравнивали с результатами работы [13], где взаимодействие акцепторного центра с молекулой воды моделировали на малых 3Т-кластерах. Геометрия адсорбционного центра в обоих случаях являлась почти плоской: для комплекса 3Т–В–H<sub>2</sub>O φ ОВО (123; 123; 117), а для 10Т–В–H<sub>2</sub>O φ ОВО (118; 121; 121); сумма углов составляет около 360 град. Сопоставление других параметров выявило заметные различия. Так, например, энергия взаимодействия кластера с молекулой воды составила 41 и 19 кДж/моль для 3Т- и 10Т-кластера. Сравнение длин связей: r Н<sup>w1/w2</sup>...O<sup>Z</sup> ≈ 340 пм, а r В...O<sup>w</sup> ≈ 275 пм (O<sup>Z</sup> – условное обозначение атома кислорода в кластере) с аналогичными значениями для кластера, содержащего Al (~340 и ~200 пм), дает объяснение существенно менее прочному связыванию молекулы воды с атомом В (см. табл. 3). Обращает на себя внимание и тот факт, что величина заряда на трехкоординированном атоме алюминия примерно в 2 раза

больше, чем на аналогичном атоме бора. Это означает, что полярность связи Al–O выше, чем В–О, что отражает снижение электроакцепторных свойств атомов бора по сравнению с атомами алюминия.

Таким образом, сопоставляя энергии диссоциации Al- и В-содержащих кластеров с водой, можно заключить, что бор способен образовывать нестабильные комплексы с молекулами воды, проявляя свойства слабой кислоты Льюиса (образует слабые кислотные центры). Поляризация молекулы воды в данном случае существенно менее выражена, чем на атомах алюминия.

### Комплексы с аммиаком

При изучении комплексов 10Т–Al и 10Т–В с аммиаком были определены структуры, отвечающие единственным энергетическим минимумам (рис. 5). Причем в случае с кластером 10Т–В атомы кислорода окружения бора не обладали направляющим эффектом по отношению к протонам молекулы аммиака, тогда как для алюминиевого кластера этот эффект прослеживался (рис. 5). Это можно объяснить уменьшением электроакцепторных свойств



атомов бора по сравнению с атомами алюминия кластера  $10T-Al-NH_3$ .

Обращает на себя внимание принципиально иная ориентация молекулы аммиака относительно фрагмента цеолита, содержащего атом В (атомы Н располагаются между атомами О каркаса). В комплексе с атомом Al такой эффект проявляется значительно слабее. Полученная в ходе данной работы величина энергии диссоциации комплексов  $10T-Al-NH_3$  составила около 160 кДж/моль, что хорошо согласуется с результатами работы [22], где теплота адсорбции аммиака на льюисовском кислотном центре оценена в 160–161 кДж/моль. Геометрические параметры адсорбированной молекулы аммиака по данным [22] не отличались от полученных в настоящей работе более чем на 0,4 пм для связей  $N^aH^{ai}$ ; длина связи  $Al...N^a$ , рассчитанная в [22], составила 203,3 пм (в настоящей работе 201,7 пм).

Геометрия акцепторного центра  $10T-B-NH_3$  отличалась от плоской; величины углов  $\phi$  ОВО для комплекса кластера, содержащего 10 тетраэдрических атомов, составили 111; 116; 117 град. Значения аналогичных углов для  $3T-B-NH_3$ : 116; 114; 114 град. Торсионный угол ( $BO^1O^2O^3$ ) равен 137,5 град. Сравнение результатов данного квантово-механического расчета с полученными ранее данными для 3T-сис-

тем [13], выявляет некоторые различия, которые, по-видимому, обусловлены участием во взаимодействии с молекулой аммиака 3T-кластера не только льюисовского кислотного центра. Так, длина связи в комплексах  $3T-B-NH_3$   $r_{B...N}$  составила 178 пм, а расстояние  $r_{H(N)...O(Si)} = 270$  пм. В настоящей работе было получено значение параметра  $r_{B...N}$ , равное 172 пм. При расчете комплексов аммиака с кластерами  $10T-B$  учитывалась только связь молекул  $NH_3$  с атомами В при отсутствии других видов взаимодействия. Сравнение с комплексом, содержащим атом Al, показывает, что длина связи N–B короче, чем N–Al, т.е. за счет связей атомов водорода молекулы аммиака и атомов кислорода каркаса адсорбированная молекула расположена ближе к адсорбционному центру (значение длины связи B–N близко к сумме ионных радиусов). Это объясняет различие в энергии диссоциации: 43 кДж/моль для  $10T-B-NH_3$  (табл. 4), тогда как в случае комплекса  $3T-B-NH_3$  всего лишь 25 кДж/моль (чем ближе расстояние между атомами к равновесному значению, тем круче потенциальная кривая).

Взаимодействие борного кластера с аммиаком является более сильным, чем с водой, о чем свидетельствует энергия диссоциации соответствующих комплексов: 19 кДж/моль для воды и 43 кДж/моль

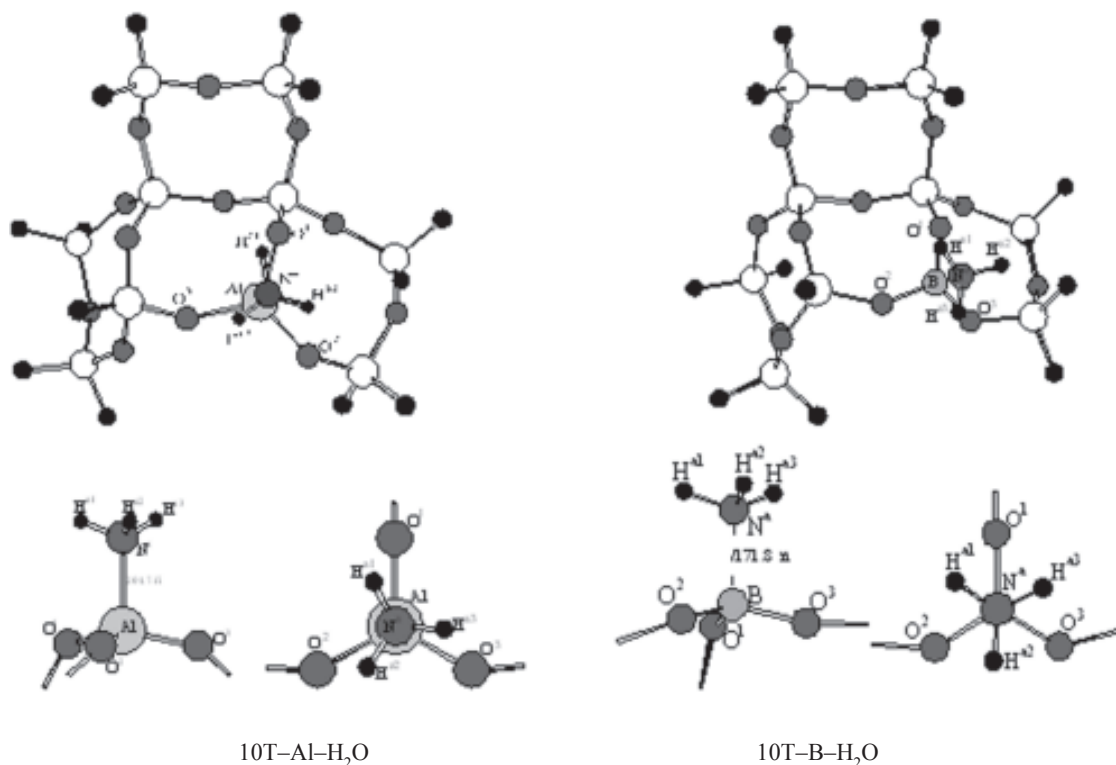


Рис. 5. Координация аммиака в комплексах с 10Т-кластерами

Т а б л и ц а 4

## Энергетические и геометрические параметры комплексов кластеров с аммиаком

Параметр	10Т–Al–NH <sub>3</sub>	10Т–В–NH <sub>3</sub>
E <sub>DISS</sub>	159,4	43,0
r N <sup>a</sup> H <sup>a1</sup>	102,4	102,4
r N <sup>a</sup> H <sup>a2</sup>	102,3	102,3
r N <sup>a</sup> H <sup>a3</sup>	102,3	102,3
φ HNH	107,7 107,8 107,8	108,5 108,9 108,8
r N <sup>a</sup> Al/B	201,7	171,8
q Al/B	+0,506	+0,214
q N <sup>a</sup>	–0,129	–0,089
q H <sup>a1</sup>	+0,165	+0,148
q H <sup>a2</sup>	+0,165	+0,158
q H <sup>a3</sup>	+0,165	+0,159
q NH <sub>3</sub>	+0,366	+0,376

для аммиака. Заметим, что в случае атома В молекула аммиака подходит к акцепторному центру существенно ближе, чем к Al (172 и 275 пм соответственно). Этим можно объяснить незначительную разницу в поляризации молекулы аммиака на обоих кластерах. Аммиак слабее адсорбируется на льюисовском центре кластера 10Т–В, чем на атоме алюминия кластера 10Т–Al, что вытекает из сравнения значений энергии диссоциации (43,0 и 159,4 кДж/моль). В целом следует отметить, что расширение кластера принципиально не влияет на оценку геометрии и энергии связи в исследованных адсорбционных комплексах.

Ослабление электроакцепторной способности цеолита при замещении поверхностных атомов алюминия на бор находит экспериментальное подтверждение. По данным температурно-программируемой десорбции аммиака [23] в результате такой замены происходит заметное увеличение концентрации слабых кислотных центров с 14 до 69 мкмоль/г. Количество сильных центров наоборот снижается с 234 до 185 мкмоль/г. Концентрация кислотных центров

средней силы остается практически неизменной и составляет примерно 158–168 мкмоль/г. Результаты конверсии *n*-гексана с использованием катализаторов, содержащих ультрастабильный цеолит Y до и после модифицирования раствором борной кислоты, также соответствуют изменению кислотности в результате модифицирования. По данным [24], селективность по продуктам крекинга (углеводороды C<sub>1</sub>–C<sub>3</sub>) для индивидуального и борсодержащего цеолитов составляет 5,1–5,3 и 1,4–1,6% соответственно. Селективность по изомерным углеводородам C<sub>6</sub> для этих цеолитов составляет соответственно 94,7–94,9 и 95,1–96 мас. %.

Тенденции поведения NH<sub>3</sub> на теоретически рассчитанных льюисовских кислотных центрах могут послужить хорошим дополнением к физико-химическим методам исследования или для интерпретации экспериментальных данных.

Таким образом, квантово-механическое моделирование адсорбционных комплексов цеолитных кластеров, включающих электроакцепторные центры различной природы, позволяет отказаться от использования эмпи-

рической оценки силы кислотных центров и предложить более удобную количественную характеристику кислотных свойств, основанную на рассчитанной энергии связи молекулы-зонда и кислотного центра.

Следует отметить, что одним из важных методических результатов настоящей работы является еще одно подтверждение эффективности отечественного программного продукта.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Millini R., Perego G., Bellussi G.* // Topics in Catalysis. 1999. **9**. P. 13.
2. *Китаев Л.Е., Колдашева Е.М., Кубасов А.А.* // I Всесоюзное совещание «Деактивация гетерогенных катализаторов компонентами реакционной среды, кинетика дезактивации и регенерации катализаторов»: Тез. докл. Уфа, 1985 г. С. 65.
3. *Абрамова А.В., Сливинский Е.В., Матиева З.М., Китаев Л.Е., Ющенко В.В., Кубасов А.А., Ткаченко О.П.* // Нефтехимия. 2000. **40**. С. 278.
4. *Anand R., Khomane R.B., Rao B.S., Kulkarni B.D.* // Catal. Lett. 2002. **78**. P. 189.
5. *Sauer J., Ugliengo P., Garrone E., Saunders V.* // Chem. Rev. 1994. **94**. P. 2095.
6. *Bates S., Dwyer J.* // J. Phys. Chem. 1993. **97**. P. 5897.
7. *Van Santen R.A.* // Catal. Today. 1997. **38**. P. 377.
8. *Van Santen R.A.* // J. Mol. Catal. A: Chemical. 1997. **115**. P. 405.
9. *Zhidomirov G.M., Kazansky V.B.* // Adv. Catal. 1986. **34**. P. 131.
10. *Gale J.D.* // Top. Catal. 1996. **3**. P. 169.
11. *Nicholas J.B.* // Top. Catal. 1997. **4**. P. 157.
12. *Blaszowski S.R., van Santen R.A.* // Top. Catal. 1997. **4**. P. 145.
13. *Tikhii Ya.V., Moskalets A.P., Kubasov A.A.* // Theor. Chem. Acc. 2007. **117**. P. 201.
14. *Laikov D.N., Ustynyuk Yu.A.* // Russ. Chem. Bull. 2005. **54**. P. 820.
15. *Домрачева Т.М., Степанов Н.Ф.* // ЖФХ. 2000. **74**. С. 132.
16. *Dessau R.M., Schlenker J.L., Higgins J.B.* // Zeolites. 1990. **10**. P. 522.
17. *Gutierrez G., Johansson B.* // Phys. Review B. 2002. **65**. P. 104202.
18. *Flodstrom S.A., Martinsson C.W.B.* // Phys. Review Lett. 1978. **40**. P. 503.
19. *Тухий Я.В.* // Дис. канд. хим. наук. М., 2005. С. 87.
20. *Домрачева Т.М., Новаковская Ю.В., Кубасов А.А., Степанов Н.Ф.* // ЖФХ. 1999. **73**. С. 1249.
21. *Kim K., Jordan K.D.* // J. Phys. Chem. 1994. **98**. P. 10089.
22. *Tikhii Ya.V., Kubasov A.A., Stepanov N.F.* // Rus. J. Phys. Chem. 2005. **79**. P. 1494.
23. *Абрамова А.В., Сливинский Е.В., Китаев Л.Е., Ющенко В.В., Кубасов А.А., Ткаченко О.П.* // Нефтехимия. 2000. **40**. С. 181.
24. *Букина З.М., Китаев Л.Е., Ющенко В.В., Абрамова А.В., Сливинский Е.В.* // Нефтехимия. 2003. **43**. С. 179.

Поступила в редакцию 26.06.08

## QUANTUM MECHANICAL APPROACH TO INVESTIGATE THE INTERACTION OF ALUMINUM AND BORON CONTAINED ZEOLITE CLUSTERS WITH WATER AND AMMONIA MOLECULES

S.V. Malyishev, A.A. Kubasov, L.E. Kitaev

(Division of Physical Chemistry)

**Quantum mechanical approach to investigate the interaction of water and ammonia molecules with the model acceptor center of zeolites was used. Zeolite like cyclic clusters consist of nine Si and one Al or B atoms. The geometry and energy of molecules and as well as their complexes with clusters were computed. The calculated values of the energy of studied test molecules coordination with zeolite clusters allow quantitative comparing the strength of the model acceptor centers.**

**Key words:** *quantum mechanical calculation, zeolite cluster, acceptor center, adsorption, water, ammonia.*

**Сведения об авторах:** Малышев Сергей Владимирович – студент-дипломник кафедры физической химии химического факультета МГУ; Кубасов Алексей Алексеевич – доцент кафедры физической химии химического факультета МГУ, канд. хим. наук (kubasov@comp.chem.msu.su); Китаев Леонид Евгеньевич – доцент кафедры физической химии химического факультета МГУ, канд. хим. наук (leonid-kitaev@yandex.ru).