

# 10

---

## *Bibliografía*

## Referencias Bibliográficas

1. van Santen, R. A. *Theoretical Heterogeneous Catalysis*. World Scientific, Singapore, **1991**.
2. Olah, G. A.; Prakash, S. K., Sommer, J. *Superacids*. J. Wiley, New York, N. Y, **1985**.
3. a) Olah, G. A.; Klopman, G.; Schlosberg, R. H. *J. Am. Chem. Soc.* **1971**, *91*, 3261; b) Olah, G. A.; Halpem, Y.; Shen, J.; Mo, Y. K. *J. Am. Chem. Soc.* **1971**, *93*, 1251; c) Olah, G. A. *J. Am. Chem. Soc.* **1972**, *94*, 808; d) Olah, G. A.; DeMember, J. R.; Shen, J. *J. Am. Chem. Soc.* **1973**, *95*, 4952; e) Olah, G. A.; Halpem, Y.; Shem, J.; Mo, Y. K. *J. Am. Chem. Soc.* **1973**, *95*, 4960.
4. Hiroaka, A.; Kebarle, P. *J. Am. Chem. Soc.* **1976**, *98*, 6119.
5. a) Kranilla, H.; Haag, W. O.; Gates, B. C. *J. Catal.* **1987**, *135*, 115; b) Meusinger, J.; Vinek, H.; Lercher, J. A. *J. Mol. Catal.* **1994**, *87*, 263; c) Shertukde, P. V.; Marcelin, G.; Still, G. A.; Hall, W. K. *J. Catal.* **1992**, *136*, 446.
6. Bartlett, R.J.; Stanton, J.F. en *Reviews in Computational Chemistry*, vol. 5. K. B. Lipkowitz, D. B. Boyd, editors, VCH Publishers, Inc., New York, **1994**, pp. 65-169
7. Labanowski, J.; Andzelm, J.: *Density Functional Methods in Chemistry*. Springer-Verlag:, New York, **1991**.
8. Sinclair, P.E. and Catlow, C.R.A. *Faraday Trans.* **1997**, *93*(2), 333.
9. van Santen, R.A. *Catalysis Today* **1997**, *38*, 377.
10. Boronat, M.; Viruela, P. and Corma, A. *J. Phys. Chem. A* **1998**, *102*, 982.
11. Blaszkowski, S. R. and van Santen. *J. Phys. Chem. B* **1997**, *101*, 2292.
12. Frash, M.V.; Kazansky, V.B.; Rigby, A.M. and van Santen, R.A. *J. Phys. Chem. B* **1997**, *101*, 5346.
13. van Santen, R. A.: Neurock; S. *Catalytic Review* **1995**, *37*, 4.
14. Bader, R. F. W., Popelier, P. L. A., Keith, T. A. *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **1994**, *33*, 620.
15. Bader, R.F.W. *Atoms in Molecules. A Quantum Theory*, Clarendon, Oxford, **1990**.
16. Popelier, P.L.A. *Atoms in Molecules. An Introduction*. Pearson Education, Harlow, UK, **1999**.
17. Mulliken, R. S. *J. Chem. Phys.* **1955**, *23*, 1833.
18. a) Olah, G. A.; Halpern, Y.; Shen, J.; Mo, Y. K. *J. Am. Chem. Soc.* **1973**, *95*, 4960. b) Olah, G. A. *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **1973**, *12*, 173.

19. Hall, N. F.; Canant, J. B. *J. Am. Chem. Soc.* **1927**, *49*, 3047.
20. a) Gillespie, R. J.; Peel, T. E. *Adv. Phys. Org. Chem.* **1972**, *9*,1. b) Gillespie, R. J.; Pell, T. E. *J. Am. Chem. Soc.* **1973**, *95*, 5173.
21. a) Hammett, L. P.; Deyrup, A. J. *J. Am. Chem. Soc.* **1932**, *54*, 2721; b) Lowry, T. H.; Richardson, K. S. *Mechanism and Theory in Organic Chemistry*, Harper and Row, Nova Iorque, **1981**.
22. Jost, R.; Sommer, J. *Rev. Chem. Intermed.* **1988**, *9*, 171.
23. Olah, G. A.; Prakash, G. K. S.; Sommer, J. *Science* **1979**, *206*, 13.
24. Sommer, J.; Bukula, J. *Acc. Chem. Res.* **1993**, *26*, 370.
25. a) Mota, C. J. A.; Martins, R. L. *J. Chem. Soc.; Chem. Commun.* **1991**, 171; b) Mota, C. J. A.; Martins, R. L.; Nogueira, L.; Kover, W. B. *J. Chem. Soc.; Faraday Trans.* **1994**, *90*, 2297.
26. Mota, C. J. A.; Martins, R. L.; Nogueira, L.; Kover, W. B. *Appl. Catal.: Gen. A* **1996**, *146*, 181.
27. a) Sommer, J.; Hauchoumy, M.; Garin, F.; Bartho Meuf, D. *J. Am. Chem. Soc.* **1994**, *116*, 5491. b) Sommer, J.; Hauchoumy, M.; Garin, F.; Bartho Meuf, D. *J. Am. Chem. Soc.*, **1995**, *117*, 1135.
28. a) Otvos, J. W.; Stevenson, D. P.; Wagner, C. D.; Breek, O. *J. Am. Chem. Soc.* **1951**, *73*, 5741; b) Stevenson, D. P.; Wagner, C. D.; Otvos, J. W. *J. Am. Chem. Soc.* **1952**, *74*, 3269.
29. Kerr, G. T., *Sci. Am.* **1989**, *261*, 100; b) Vaughna, D. E. W., *Chem. Eng. Prog.* **1988**, *84*, 25; c) Gianneto, G., *Zeolitas: Características, Propiedades y Aplicaciones Industriales*, EdIT, Caracas, **1989**.
30. Ribeiro, F. R., Rodrigues, A. E.; Rollman, L. D. E Naccache, C. (eds), *Zeolites: Science and Technology*, Martins Nijhoff, Amsterdam, **1984**.
31. Ribeiro, Rodriguez, A. E.; Rollman, L. D. E. Naccache, C. (eds), *Zeolites: Science and Technology*, Martins Nijhoff, Amsterdam, **1984**.
32. Cusumaro, J. A.; en: *Perspectives in Catalysis*, J. M. Thomas and K. Zamarev (eds) IUPAC, Chemistry for the 21<sup>st</sup> Century, Blackwell Scientific Publication, **1992**.
33. Catlow, C. R. A. *Zeolites: Structure, Synthesis and Properties. An Introduction*. In: *Modelling of Structure and Reactivity in Zeolites*. Catlow, C. R. A. Ed., Academic Press, London, **1992**.
34. van Santen, R. A.; Kramer, G. J. *Chem. Rev.* **1995**, *95*, 637.

35. Thomas, J.M. *Acs. Symposium Series* **1983**, 211, 445.
36. a) Csicsery, S. M. *Zeolite* **1984**, 4, 202; b) Derovane, E. G. *Catalysis by Acid and Bases*. B. Imelik et al. Eds. Elsevier Sc. Publishers, Amsterdam, **1985**.
37. Breck, D. W. *Zeolite Molecular Sieves*. J. Wiley and Sons Eds., **1974**.
38. Mota, C. J. A. *Quim. Nova* **1995**, 18(2), 202.
39. a) Olson, D.H.; Dempsey, E. *J. Catal.* **1969**, 13, 221; b) Mortier, W. J.; Pluth, J. J.; Smith, J. V. *J. Catal.* **1968**, 45, 367; c) Jiráček, Z.; Vratislav, V.; Bosacek, V. *Phys. Chem. Solids* **1980**, 41, 1089; d) Czjzek, M.; Jovic, H.; Fitch, A. N.; Vogt, T. *J. Phys. Chem.* **1992**, 96, 1535.
40. a) Dub Sky. J.; Beran, S.; Bosacek, V. *J. Molec. Catal.* **1979**, 6, 321; b) Malley, P. J.; Dwyer, j. *J. Phys. Chem.* **1988**, 92, 3005; c) Schröder, K. P.; Saber, J. Leslie, M.; Catlow, C. R. A.; Thomas, J. M. *Chem. Phys. Lett.* **1992**, 188 (3, 4), 320; d) Kramer, G. J.; van Santen, R. A. *J. Am. Chem. Soc.* **1993**, 115, 2887.
41. a) Beyerlein, R. A.; McVecker, G. B.; Yacullo, L. N.; Ziemiak, J. J. *J. Phys. Chem.* **1988**, 92 1967; b) Carvajal, R.; Chu, P. J.; Lunsford, J. H., *J. Catal.* **1990**, 125, 121; c) Biaglow, A. I.; Parrillo, D. J.; Kokotailo, G. T.; Gorte, R. J. *J. Catal.* **1994**, 148, 213; d) Wang, Q. L.; Giannetto; G.; Guisnet, M. *J. Catal.* **1991**, 130, 471.
42. a) Barthomeuf, D. *J. Phys. Chem.* **1984**, 88, 42; b) Barthomeuf, D. *Catalysis and Adsorption by Zeolites* Eds. G. Öhlmann; Pfeiter and Fricke, Elsevier, Amsterdam, **1991**.
43. Vetrivel.; Colbourn, E. A.; Catlow, C. R. A. *J. Phys. Chem.* **1989**, 93, 4595.
44. Breck, D. W. *Zeolite Molecular Sieves: Structure, Chemistry and Use*. R. E. Krieger, Malabar, F. L. **1984**.
45. King, L. J.; Campbell, D. O., Collins, E. D.; Knaver, J. B.; Wallace, R. M.. In: *Proceedings of the Sixth International zeolite conference* Eds. D. Olson and A. Bisio, Butterworths, Guildford, **1984**.
46. Herron, N.; Wang, Y.; Eddy, M. M.; Stucky, G. D.; Cox, D. E.; Moller, K.; Bein, T. *J. Am. Chem. Soc.* **1989**, 111, 530.
47. Enzel, P.; Bein, T. *J. Phys. Chem.* **1989**, 93, 6270.
48. Weifcamp, J. *Catalysis and Adsorption by Zeolites* G. Öhlman, H. Pfeifer and Fricke. Elsevier, eds. Amsterdam, **1991**.
49. Binder, K. *Theory and technical aspects of Monte Carlo simulations in Statistical Physics*. Springer Verlag, Berlin, **1979**.

50. Halton, J. *A retrospective and prospective survey of the Monte Carlo method*. *SIAM Rev.* **1970**, *12*, 1.
51. Pisan, C.; Dovesi, R.; Roetti, C. *Hartree-Fock ab initio treatment of crystalline solids*. In: *Lecture Notes in Chemistry Series*. Springer, Berlin, **1988**, 48.
52. Whitten, J. L. *Chem. Phys.* **1993**, *177*, 387.
53. a) Barandiarán, Z.; Seijo, L. *J. Chem. Phys.* **1988**, *89*, 5739; b) Barandiarán, Z.; Seijo, L. in: *Computacional Chemistry: Structure, Interactions and Reactivity*, vol. 77B of *Studies in Physical and Theoretical Chemistry*. Fraga, S. Ed. Elsevier, Amsterdam, **1992**.
54. Koga, N.; Morokuma, K. *Chem. Rev.* **1991**, *91*, 823
55. Veillard, A. *Chem. Rev.* **1991**, *91*, 743.
56. Aqvist, J.; Warshel, A. *Chem. Rev.* **1993**, *93*, 2523.
57. Rappé, A. K.; Casewit, C. J.; Colwell, K. S.; Goddard, W. A., III *J. Am. Chem. Soc.* **1992**, *114*, 10124.
58. Eksterowicz, J. E.; Houk, K. N. *Chem. Rev.* **1993**, *93*, 2439.
59. Dapprich, S.; Komáromi, I.; Byun, K. S.; Morokuma, K.; Frisco, M. J. *J. Mol. Struct. (Theochem)* **1999**, *461-462*, 1.
60. Gao, J. in: Lipkowitz, K. B.; Boyd, D. B. (Eds.), *Reviews in Computational Chemistry*, vol. 7. VCH, New York, **1995**, 119.
61. a) Bakowies, D.; Thiel, W. *J. Phys. Chem.* **1996**, *100*, 10580; b) Bakowies, D.; Thiel, W. *J. Comput. Chem.* **1996**, *17*, 87.
62. Singh, U. C.; Kollman, P. A. *J. Comput. Chem.* **1986**, *7*, 718.
63. Field, M. J.; Bash, P. A.; Karplus, M. *J. Comput. Chem.* **1990**, *11*, 700.
64. Eichler, U.; Kölmel, K. M.; Sauer, J. *J. Comput. Chem.* **1996**, *18*, 463.
65. Matsubara, T.; Maseras, F.; Koga, N.; Morokuma, K. *J. Phys. Chem.* **1996**, *100*, 2573.
66. Ujaque, G.; Maseras, F.; Lledos, A. *Theor. Chim. Acta* **1996**, *94*, 67.
67. van Bekkum, H.; Flanigen, E. M.; Jansen, J. C. eds., *Introduction to zeolite Science and Practice, Studies in Surface Science and Catalysis*, Vol. 58. Elsevier, Amsterdam, **1991**.
68. Sommer, J., Jost, R., Hachoumy, M. *Catal. Today* **1997**, *38*, 309.
69. Haag, W. O.; Dessau, R. M. *Proceeding of the 8<sup>th</sup> International Congress on Catalysis*. Vol. 2. Berlin, **1984**.
70. a) Kranni, H.; Haag, W. G.; Gates, B. C. *J. Catal.* **1992**, *135*, 125; b) Stefabadis, C.; Gates, B. C.; Haag, W. O. *J. Mol. Catal.* **1991**, *67*, 363.

71. a) Marczewski, M. *Bull. Chem. Soc.* **1986**, 5, 750; b) Marczewski, M. [2.49] *J. Chem. Soc., Faraday Trans.* **1986**, 82, 1687.
72. Dwyer, J. In: *Zeolite Microporous Solids: Synthesis, Structure and Reactivity*, NATO ASI Series, Vol. 352. Kluwer Academic Publishers, The Netherlands, **1992**.
73. Spielbaver, D.; Mekhemer, G. A. A. Zaki, M. I.; Knszinger, H. *Catal. Lett.* **1994**, 26, 339.
74. a) Rhodes, N. P.; Rudham, R. *J. Chem. Soc., Faraday Trans.* **1994**, 9, 809; b) Wu, P.; Komatsu, T.; Yashima, T. *J. Chem. Soc., Faraday Trans.* **1996**, 92, 861; c) Gruver, V.; Hong, Y.; Panov, A.G.; Fripiat, J. *J. Stud. Surf. Sci. Catal.* **1996**, 101, 741.
75. Levine, I. *Química Cuántica*. Editorial AC, España, **1977**.
76. Davidson, E. R.; Feller, D. *Chem Rev.* **1986**, 86, 681.
77. Raghavachari, K.; Anderson, J. B.; *J. Phys. Chem.* **1996**, 100, 12960.
78. Thomas, L. H. *Proc. Cambridge Phil. Soc.* **1927**, 23, 542.
79. a) Fermi, E. *Rend. Accad. Naz. Lincei* **1927**, 6, 602 ; b) Fermi, E. *Z. Phys.* **1928**, 48, 73.
80. Dirac, P. A. M. *Proc. Cambridge Phil. Soc.* **1930**, 26, 376.
81. Lieb, E. H. ; Simon, B. *Phys. Rev. Lett.* **1973**, 31, 681.
82. Hohenberg, P.; Kohn, W. *Phys. Rev.* **1964**, 136, B864.
83. Kohn, W.; Sham, L. *J. Phys. Rev.* **1965**, 140, A1133.
84. von Barth, U.; Hedin, L. *J. Phys. C* **1972**, 5, 1629.
85. Vosko, S.H.; Wilk, L.; Nusair, M. *Can. J. Phys.* **1980**, 58, 1200.
86. Perdew, J. P.; Zunger, A. *Phys. Rev. B* **1981**, 23, 5048.
87. Davidson, E. R. *Reduced Density Matrices in Quantum Chemistry*. Academic Press, NY, **1976**.
88. Gunnarsson, O.; Jonson, M.; Lundqvist, B. I. *Phys. Lett.* **1976**, 59A, 177.
89. a) Alonso, J. A.; Girifalco, L. A. *Solid State Commun.* **1977**, 24, 135; b) Gunnarsson, O.; Jonson, M.; Lundqvist, B. I. *Solid State Commun.* **1977**, 24, 765.
90. a) Langreth, D.C.; Mehl, M. J. *Phys. Rev. Lett.* **1981**, 47, 446; b) Langreth, D.C.; Mehl, M. J. *Phys. Rev. B* **1983**, 28, 1809.
91. a) Perdew, J. P. *Physica B* **1991**, 172, 1; b) Perdew, J. P. *Electronic Structure of Solids '91*. Ziesche, P. and Eschrig, H. eds. Akademie Verlag, Berlin, **1991**.
92. Perdew, J. P.; Wang, Y. *Phys. Rev. B* **1986**, 33, 1991.
93. Becke, A. D. *Phys. Rev. A* **1988**, 38, 3098.
94. Lie, G. C.; Clementi, E. *J. Chem. Phys.* **1974**, 60, 1288.

95. Perdew, J. P. *Phys. Rev. B* **1986**, *33*, 8822.
96. Lee, C.; Yang, W.; Parr, R. G. *Phys. Rev. B* **1988**, *37*, 785.
97. Wilson, L. C.; Levy, M. *Phys. Rev. B* **1990**, *41*, 12930.
98. Becke, A: D. *J. Chem. Phys.* **1993**, *98*, 1372.
99. Becke, A: D. *J. Chem. Phys.* **1993**, *98*, 5648.
100. a) Andzelm, J.; Wimmer, E. *J. Chem. Phys.* **1992**, *96*, 1280; b) Laming, G. J.; Handy, N. C.; Amos, R. D. *Mol. Phys.* **1993**, *80*, 1121; c) Johnson, B. G.; Gill, P. M. W.; Pople, J. A. *J. Chem. Phys.* **1993**, *98*, 5612.
101. Becke, A: D. *J. Chem. Phys.* **1992**, *97*, 9173.
102. Sosa, C.; Novoa, J. *J. Phys. Chem.* **1995**, *99*, 15837.
103. Boys, S. F.; Bernardi, F. *Mol. Phys.* **1970**, *19*, 553.
104. Schwenke, D. W.; Truhlar, D. G. *J. Chem. Phys.* **1985**, *82*, 2418.
105. Frisch, M.; del Bene, J. E.; Binkley, J. S.; Schaefer III, H. F. *J. Chem. Phys.* 1986, *84*, 2279.
106. Szalewics, K.; Cole, S. J.; Kolos, W.; Bartlett, J. J. *J. Chem. Phys.* 1988, *84*, 2279.
107. Alberts, I. L.; Handy, N. C.; Simandiras, E. D. *Theor. Chim. Acta* 1988, *74*, 415.
108. Szczesniak, M. M.; Scheiner, S. *J. Chem. Phys.* **1986**, *84*, 6328 .
109. Collins, J. R.; Gallup, G. A. *Chem. Phys. Lett.* **1986**, *123*, 56.
110. Daudey, J. P.; Claviere, P.; Malrieu, J. P. *Int. J. Quantum Chem. Commun.* **1974**, *8*, 1.
111. Szczesniak, M. M.; Scheiner, S. *Coll. Czech. Chem. Commun.* **1988**, *53*, 2214.
112. Scheiner, S. *Reviews in Computational Chemistry* **1990**, *5*, 165.
113. Bader, R. F. W.; Beddal, P. M. *J. Chem. Phys.* **1972**, *56*, 3320.
114. Popelier, P. L. A. *J. Phys. Chem. A.* **1999**, *103*, 2883.
115. Runtz, G. R.; Bader, R. F. W.; Messer, R. R. *Can. J. Chem.* **1977**, *55*, 3040.
116. Bader, R. F. W., Nguyen-Dang, T. T.; Tal, Y. *J. Chem. Phys.* **1979**, *70*, 4316.
117. Nguyen-Dang, T. T.; Bader, R. F. W. *Physica* **1982**, *114*, 68.
118. Morse, P. M. and Feshbach. *Methods of theoretical Physics*. Mc Graw-Hill, New Cork, **1953**, part I.
119. Bader, R. F. W. *J. Chem. Phys.* **1980**, *73*, 2871.
120. Bader, R. F. W.; Nguyen-Dang, T. T. *Adv. Quantum Chem.* **1981**, *14*, 63.
121. Pauli, W. *General Principles of Mechanics*. Springer, Berlin, **1980**.
122. Löwdin, P. O. *Phys. Rev.* **1955**, *97*, 1474.

123. a) Collard, K.; Hall, G. G. *Int. J. Quantum Chem.* **1977**, *12*, 623.;b) Smith, V. H., Price, J. F.; Absar, I. *Israel J. Chem.* **1977**, *16*, 187.
124. Bader, R. F. W.; Anderson, S. G.; Duke, A. J. *J. Am. Chem. Soc.* **1979**, *101*, 1389.
125. a) Cade, P. E. *Trans. Am. Crystallogr. Assoc.* **1972**, *8*, 1.; b)Bader, R. F. W.; Stephens, M. E. *J. Am. Chem. Soc.* **1975**, *97*, 7391.; c) Smith, V. H. *Phys. Scr.* **1977**, *15*, 147.
126. Bader, R. F. W.; Tang, T. H.; Tal, Y; Biegler-König, W. *J. Am. Chem. Soc.* **1982**, *104*, 946.
127. Bader, R. F. W.; Essen, H. *J. Chem. Phys.* **1984**, *80*, 5.
128. Coulson, C. A.; March, N. H.; Laman, S. *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **1952**, *38*, 372.
129. Ehrenfest, Z. *Phys.* **1927**, *45*, 455.
130. Epstein, S. T. *J. Chem. Phys.* **1975**, *63*, 3573.
131. Bader, R. F. W.; Essen, H. *Local Aproximations in Quantum and Solid State Physics*. Dahl, J. P.; Avery, J. A. eds. Plenum, NY, **1984**.
132. Bader, R. F. W.; Preston, H. J. T. *Theor. Chim. Acta* **1970**, *17*, 384.
133. Bader, R. F. W.; Henneker, W. H.; Cade, P.E. *J. Chem. Phys.* **1967**, *46*, 3341.
134. Srebrenik, S.; Bader, R. F. W. *J. Chem. Phys.* **1975**, *63*, 3945.
135. Gillespie, R. J. *Molecular Geometry*, Van Nostrand Reinhold, London, **1972**
136. Popelier, P. L. A. *Coord. Chem. Rev.* **2000**, *197*, 169.
137. Tal'roze, V. L.; Lyubimova, A. K. *Dokl. Akad. Nauk. SSSR* **1952**, *86*, 909.
138. Collins, S. J.; O' Malley, P. J. *J. Chem. Soc.; Faraday Trans.* **1996**, *92(22)*, 4347.
139. Schleyer, P.; Carneiro, J. W. M. *J. Comp. Chem.* **1992**, *13 (8)*, 997.
140. Schreiner, P. R.; Kim, S. J.; Schaeter, H. F.; Scheleyer, P. *J. Chem. Phys.* **1993**, *99*, 3716.
141. Collins, S. J., O' Malley, P. *J. Chem. Phys. Lett.* **1994**, *228*, 246.
142. Kolbuszewski, M.; Bunker, P. R. *J. Chem. Phys.* **1996**, *105*, 3469.
143. Müller, H.; Kutzelnigg, W.; Noga, J.; Klopper, W. *J. Chem. Phys.* **1997**, *106*, 1863.
144. Marx, D.; Parrinello, M. *Nature* **1995**, *375*, 216.
145. Olah, G. A.; Klopman, G.; Schlosberg, R. H. *J. Am. Chem. Soc.* **1969**, *91*, 3261.
146. Field, F. H.; Munson, M. S. B. *J. Am. Chem. Soc.* **1965**, *87*, 3289.
147. a) Boo, D. W.; Lee, Y. T. *Chem. Phys. Lett.* **1993**, *211*, 358; b) Boo, D. W.; Liu, Z. F.; Suits, A. G.; Lee, Y. T. *Science* **1995**, *269*, 57.
148. Hiraoka, K.; Kebarle, P. *J. Am. Chem. Soc.* **1975**, *97*, 4179.
149. Hiraoka, K.; Mori, T. *Chem. Phys. Lett.* **1989**, *161*, 111.



150. Hiraoka, K.; Kudaka, I.; Yamabe, S. *Chem. Phys. Lett.* **1991**, *184*, 271.
151. Heck, A. J. R.; de Koning, L. J.; Nibbering, N. M. M. *J. Am. Soc. Mass Spectrom.* **1991**, *2*, 453.
152. Oka, T. *Philos. Trans. R. Soc. London Ser. A* **1988**, *324*, 81
153. White, E. T.; Tang, J.; Oka, T. *Science* **1999**, *284*, 135.
154. Schreiner, P. R. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2000**, *39*, 3239.
155. Marx, D.; Parrinello, M. *Science* **1999**, *284*, 59.
156. a) Lammertsma, K.; Olah, G. A.; Barzaghi, M.; Simonetta, M. *J. Am. Chem. Soc.* **1982**, *104*, 6851; b) Lammertsma, K.; Barzaghi, M.; Olah, G. A.; Pople, J. A.; Schleyer, P.; Simonetta, M. *J. Am. Chem. Soc.* **1983**, *105*, 5258; c) Olah, G. A.; Rasul, G. *J. Am. Chem. Soc.* **1996**, *118*, 8503; d) Olah, G. A.; Rasul, G. *Acc. Chem. Res.* **1997**, *30*, 245.
157. Olah, G. A. *Angew. Chim. Ed. Engl.* **1973**, *32*, 767.
158. Gaussian 98, Revision A.6, M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, G. E. Scuseria, M. A. Robb, J. R. Cheeseman, V. G. Zakrzewski, J. A. Montgomery, Jr., R. E. Stratmann, J. C. Burant, S. Dapprich, J. M. Millam, A. D. Daniels, K. N. Kudin, M. C. Strain, O. Farkas, J. Tomasi, V. Barone, M. Cossi, R. Cammi, B. Mennucci, C. Pomelli, C. Adamo, S. Clifford, J. Ochterski, G. A. Petersson, P. Y. Ayala, Q. Cui, K. Morokuma, D. K. Malick, A. D. Rabuck, K. Raghavachari, J. B. Foresman, J. Cioslowski, J. V. Ortiz, B. B. Stefanov, G. Liu, A. Liashenko, P. Piskorz, I. Komaromi, R. Gomperts, R. L. Martin, D. J. Fox, T. Keith, M. A. Al-Laham, C. Y. Peng, A. Nanayakkara, C. Gonzalez, M. Challacombe, P. M. W. Gill, B. Johnson, W. Chen, M. W. Wong, J. L. Andres, C. Gonzalez, M. Head-Gordon, E. S. Replogle, and J. A. Pople, Gaussian, Inc., Pittsburgh PA, **1998**.
159. Klieger-Konig, W.; Bader, R.F.W.; Tag, T.H. *J. Comput. Chem.* **1982**, *3*, 317.
160. a) Okulik, N.; Peruchena, M.; Esteves, P. M.; Mota, C.; Jubert, A. H. *J. Phys. Chem. A* **1999**, *103*, 8491; b) Okulik, N.; Peruchena, M.; Esteves, P. M.; Mota, C.; Jubert, A. H. *J. Phys. Chem. A* **2000**, *104*, 7586; c) Okulik, N.; Sosa, L.; Esteves, P. M.; Mota, C.; Jubert, A. H.; Peruchena, M. *J. Phys. Chem. A* **2002**, *106*, 1584.
161. Kohler, H. J.; Lischka, H. H. *Chem. Phys. Lett.* **1978**, *58*, 175.
162. Cremer, D.; Kraka, E.; Slee, T. S.; Bader, R. F. W.; Lau, C. D. H.; Nguyen-Dang, T. T.; MacDougall, P. J. *J. Am. Chem. Soc.* **1983**, *105*, 5069.
163. Hiraoka, K.; Kebarle, P. *J. Am. Chem. Soc.* **1976**, *98*, 6119.
164. Yeh, L. I.; Price, J. M.; Lee, Y. T. *J. Am. Chem. Soc.* **1989**, *111*, 5597.

165. Carneiro, J. W. M.; Scheyer, P.; Saunders, M.; Remington, R.; Schaeter, H. F.; III, Rauk, A.; Sorensen, T. S. *J. Am. Chem. Soc.* **1994**, *116*, 3483.
166. Sommer, J.; Bakula, J.; Hachoumy, M.; Jost, R. *J. Am. Chem. Soc.* **1997**, *119*, 3274.
167. East, A. L. L.; Liu, Z. F.; Mc Cague, C.; Cheng, K.; Tse, J. S. *J. Phys. Chem. A* **1998**, *108*, 10903.
168. Sauer, J.; Ugliengo, P.; Garrone, E.; Saunders, V. R. *Chem. Rev.* **1994**, *94*, 2095.
169. Viruela-Martín, P.; Zicovich-Wilson, C.M. and Corma, A. *J. Phys. Chem.* **1993**, *97*, 13713.
170. Zicovich-Wilson, C. M.; Viruela, P. and Corma, A. *J. Phys. Chem.* **1995**, *99*, 13224.
171. Blaszkowski, S. R. and van Santen. *Topics in Catalysis* **1997**, *4*, 145.
172. Soscún, H.; Hernández, J.; Castellano, O.; Díaz, G. And Hinchliffe, A. *Int. J. Quantum Chem.* **1998**, *70*, 951.
173. Sinclair, P.E. and Catlow, C.R.A. *Faraday Trans.* **1997**, *93(2)*, 333.
174. Sauer, J. *J. Chem. Rev.* **1989**, *89*, 199.
175. Labanowski, J.; Andzelm, J.: *Density Functional Methods in Chemistry*. Springer-Verlag:, New York, **1991**.
176. Blaszkowski, S. R. and van Santen. *J. Phys. Chem. B* **1997**, *101*, 2292.
177. Bader, R.F.W. *J. Phys. Chem. A* **1998**, *102*, 7314.
178. Eichler, U.; Brändle, M. and Sauer, J. *J. Phys. Chem. B* **1997**, *101*, 10035.
179. Trout, B.I.; Chakraborty, A.K.; Bell, A.T. *J. Phys. Chem.* **1996**, *100*, 17582.
180. Gonzales, N.O.; Bell, A.T.; Chakraborty, A.K. *J. Phys. Chem. B* **1997**, *101*, 10058.
181. Gonzales, N.O.; Chakraborty, A.K.; Bell, A.T. *Catal. Lett.* **1998**, *50*, 135.
182. Benco, L.; Demuth, T.; Hafner, J.; Hutschka, F.; Toulhoat, H. *J. Chem. Phys.* **2001**, *114*, 14, 6327.
183. Eder, F.; Lercher, J. A. *J. Phys. Chem. B* **1997**, *101*, 1273.
184. Parillo, D. J.; Gorte, R. J. *J. Phys. Chem.* **1993**, *97*, 8786;
185. Greatbanks, S. P.; Hillier, I. H.; Burton, N. A. *J. Chem. Phys.* **1996**, *105*, 3770.
186. Bader, R.F.W.; Beddall, P.M.; Cade, P.E. *J. Am. Chem. Soc.* **1971**, *93*, 3095;
187. Bader, R.F.W.; Carroll, M.T.; Cheeseman, J.R.; Chang, C. *J. Am. Chem. Soc.* **1987**, *109*, 7968.
188. Carroll, M.T.; Bader, R.F.W. *Mol. Phys.* **1988**, *65*, 695.
189. Koch, U.; Popelier, P.L.A. *J. Phys. Chem.* **1995**, *99*, 9747.

190. a) Bader, R.F.W. *J. Phys. Chem. A* **1998**, 102, 7314; b) Hernández-Trujillo, J.; Bader, R.F.W. *J. Phys. Chem. A* **2000**, 104, 1779.
191. Rigby, A.M.; Kramer, G.L.; van Santen, R.A. *J. Catal.* **1997**, 170, 1.
192. Kramer, G. J.; van Santen, R.A.; Emeis, C.A.; Novak, A.K. *Nature* **1993**, 363, 529.
193. Blaszkowski, S.R.; Jansen, A.P.J.; Nascimento, M.A.C.; van Santen, R.A. *J. Phys. Chem.* **1994**, 98,12938.
194. Kramer, G.J.; van Santen, R.A. *J. Am. Chem. Soc.* **1995**, 117, 1766.
195. Esteves, P.M.; Nascimento, M.A.C.; Mota, C.J.A. *J. Phys. Chem. B* **1999**, 103, 10417.
196. Wang, L. ; Tao, L. ; Xie, M. ; Xu, G. ; Huang, J. ; Xu, Y. *Catal. Lett.* **1993**, 21, 35.
197. Lins, J.O.M.A.; Nascimento, M.A.C. *J. Mol. Struct. (THEOCHEM)* **1996**, 371, 237.
198. Kazansky, V.B.; Frash, M.V.; van Santen, R.A. *Catal. Lett.* **1994**, 28, 211.
199. Blaszkowski, S.R.; Jansen, A.P.J.; Nascimento, M.A.C.; van Santen, R.A. *J. Phys. Chem.* **1994**, 98,11332.
200. Evleth, E.M.; Kassab, E.; Sierra, L.R. *J. Phys. Chem.* **1994**, 98, 1421.
201. Okulik, N.; Pis Diez, R., Jubert, H.; Esteves, P.; Mota, C. *J. Phys. Chem. A* **2001**, 105, 7079.
202. Parr, R.G., Yang, W. *Density Functional Theory of Atoms and Molecules*, Oxford University Press, Oxford, **1989**.
203. Gaussian 94, Revision E.1, M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, P. M. W. Gill, B. G. Johnson, M. A. Robb, J. R. Cheeseman, T. Keith, G. A. Petersson, J. A. Montgomery, K. Raghavachari, M. A. Al-Laham, V. G. Zakrzewski, J. V. Ortiz, J. B. Foresman, J. Cioslowski, B. B. Stefanov, A. Nanayakkara, M. Challacombe, C. Y. Peng, P. Y. Ayala, W. Chen, M. W. Wong, J. L. Andres, E. S. Replogle, R. Gomperts, R. L. Martin, D. J. Fox, J. S. Binkley, D. J. Defrees, J. Baker, J. P. Stewart, M. Head-Gordon, C. Gonzalez, and J. A. Pople, Gaussian, Inc., Pittsburgh PA, **1995**.
204. a) Baker, J. *J. Comp. Chem.* **1986**, 7, 385; b) Baker, J. *J. Comp. Chem.* **1987**, 8, 563.
205. a) Haw, J. F.; Richardson, B. R.; Oshiro, I. S.; Lazo, N.D.; Speed, A. J. *J. Am. Chem. Soc.* **1989**, 111, 2052; b) Haw, J. F.; Nicholas, J. B.; Xu, T.; Beck, L. W.; Ferguson, D. B. *Acc. Chem. Res.* **1996**, 29, 259.
206. Krannila, H.; Haag, W.O.; Gates, B. C. *J. Catal.* **1992**, 135, 115.
207. Kwak, B. S.; Sachtler, W. M. H.; Haag, W.O. *J. Catal.* **1994**, 149, 465.