

Тематический раздел: Теоретическая и компьютерная химия. **Полная исследовательская публикация**
Подраздел: Кинетика и катализ.

Регистрационный код публикации: 7-11-1-43

Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции “Бутлеровские чтения”. <http://butlerov.com/readings/>
Поступила в редакцию 15 сентября 2007 г. УДК 541.124/128.

Автоматизация построения механизмов гетерогенных каталитических реакций

© **Димитриева Ольга Валерьевна и Кольцов Николай Иванович***⁺

*Кафедра физической химии и высокомолекулярных соединений. ФГОУ ВПО Чувашский
государственный университет им. И.Н. Ульянова. Московский пр-т, 15. г. Чебоксары, 428015.
Чувашская Республика. Россия. Тел.: (8352) 30-57-92. E-mail: koltsovni@mail.ru*

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: алгоритм, автоматизация, гетерогенные каталитические реакции, стадийные схемы, механизмы.

Аннотация

Приведены алгоритмы и программы построения стадийных схем и механизмов гетерогенных каталитических реакций с учетом основных и промежуточных веществ.