

Квантово-химический подход к выбору гетерогенного катализатора синтеза *N*-метиланилина

© Козловцев Вячеслав Андреевич,^{1*} Климова Ирина Юрьевна,¹⁺
Навроцкий Валентин Александрович,¹ Навроцкий Александр Валентинович,¹
Попов Юрий Васильевич² и Шишкин Евгений Вениаминович²

¹ Кафедра технологии высокомолекулярных и волокнистых материалов;

² Кафедра технологии органического и нефтехимического синтеза.

Волгоградский государственный технический университет.

Пр. Ленина, 28. г. Волгоград, 400005. Россия. Тел.: (8442) 24-84-35. E-mail: vak504@vstu.ru

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: структура-свойство-каталитическая активность, частота колебания, амплитуда колебания, резонанс, состав катализатора

Аннотация

Установлен факт корреляции граничной коротковолновой частоты излучения в колебательных спектрах применяемых в промышленности гетерогенных катализаторов с колебательными спектрами трансформируемых групп и связей в реагентах и продуктах химических превращений. Предложена гипотеза, объясняющая действие гетерогенных катализаторов в управляемом химическом синтезе. Приведены примеры подбора состава катализаторов синтеза *N*-метиланилина на основании механизма химических превращений и результатов квантово-химических расчетов.