

**Полная исследовательская публикация** Тематический раздел: Теория реакционной способности.  
Регистрационный код публикации: 11-25-5-64 Подраздел: Гетерогенный катализ.  
Публикация доступна для обсуждения в интернет как материал “Всероссийской рабочей химической конференции “Бутлеровское наследие-2011”. <http://butlerov.com/bh-2011/>  
УДК 66.097.13: 541.128.13. Поступила в редакцию 20 апреля 2011 г.

## **Физико-химические принципы прогнозирования гетерогенных катализаторов**

© Козловцев Вячеслав Андреевич,\* Навроцкий Валентин Александрович,  
Климова Ирина Юрьевна, Тростянская Мария Викторовна<sup>+</sup>  
и Навроцкий Александр Валентинович

*Кафедра технологии высокомолекулярных и волокнистых материалов. Волгоградский государственный технический университет. Пр. Ленина, 28. г. Волгоград, 400005. Россия.  
Тел.: (8442) 24-84-35. E-mail: Kozlovtsev\_va@vstu.ru*

\*Ведущий направление; <sup>+</sup>Поддерживающий переписку

**Ключевые слова:** *вынужденное излучение, каталитическая активность, структура, состав катализатора, резонанс, частота колебания, селективность.*

### **Аннотация**

Явление катализа рассматривается с позиции физико-химических процессов, при обмене энергией между катализатором и реагентами. Предложен подход к определению состава гетерогенных катализаторов органического синтеза, базирующийся на создании условий резонансного обмена энергией в виде вынужденного излучения в области ИК спектра между компонентами реакционной системы. Сформулированы физико-химические принципы прогнозирования гетерогенных катализаторов. Примеры подбора состава катализаторов, на основании анализа физических явлений взаимодействия катализатора с реагентами посредством резонансной передачи энергии и результаты квантово-химических расчетов, приведенные для отдельных химических превращений, указывают на справедливость предлагаемого подхода.