

**МОЛЕКУЛЯРНО-МАССОВОЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ
ПРОДУКТОВ СИНТЕЗА ФИШЕРА-ТРОПША
С УЧЕТОМ МНОГОКОМПОНЕНТНОГО СОСТАВА ПРОДУКТОВ**

Вертепа А.В.⁽¹⁾, Терещенко К.А.⁽¹⁾, Улитин Н.В.⁽¹⁾

⁽¹⁾ Казанский национальный исследовательский технологический университет
420015, г. Казань, ул. Карла Маркса, д. 68

Синтез Фишера-Тропша является ключевым процессом переработки синтез-газа (смеси СО и Н₂, получаемой газификацией угля или паровой конверсией метана) в ценное углеводородное сырье [1]. Продукты синтеза Фишера-Тропша представляют собой сложную многокомпонентную смесь, включающую алканы, алкены и кислородсодержащие соединения, которые образуются по похожему на полимеризацию механизму [1,2]. Для описания молекулярно-массового распределения продуктов синтеза Фишера-Тропша традиционно используется модель Андерсена-Шульца-Флори, которая предполагает единый параметр α (вероятность роста цепи) для всех углеводородов [1]. Однако, как показано в многочисленных исследованиях [1,2], классическое распределение Андерсена-Шульца-Флори не учитывает различий в механизмах обрыва цепи для разных классов соединений, что ограничивает его прогностическую способность и не позволяет адекватно описывать селективность процесса по целевым продуктам.

В данной работе теоретически выведено молекулярно-массовое распределение продуктов синтеза Фишера-Тропша, учитывающее многокомпонентный состав реакционной смеси. В отличие от классического подхода предложенная модель позволяет отдельно описывать молекулярно-массовое распределение для алканов, алкенов и кислородсодержащих соединений. Модель базируется на кинетическом анализе стадий инициирования, роста и обрыва цепи с участием интермедиатов, адсорбированных на поверхности пор частиц катализатора. Предложенное распределение точно аппроксимирует экспериментальные данные по составу продуктов синтеза Фишера-Тропша. Разработанный подход позволяет анализировать влияние природы катализатора и условий процесса на селективность образования отдельных соединений, что важно для оптимизации промышленных процессов получения синтетических углеводородов.

1. Глебов Л.С., Клигер Г.А. Молекулярно-массовое распределение продуктов синтеза Фишера-Тропша // *Успехи химии*. – 1994. – Т. 63, №2. – С. 192-202.

2. Shafer W.D., Gnanamani M.K., Graham U.M., Yang J., Masuku C.M., Jacobs G., Davis B.H. Fischer-Tropsch: product selectivity – The fingerprint of synthetic fuels // *Catalysts*. – 2019. – V. 9, №3. – Article 259.

Работа выполнена в рамках государственного задания «Молекулярный дизайн катализаторов с применением искусственного интеллекта», соглашение № 075-00021-26-00.