



论文

基于全生命周期评价的中国制氨路线碳排放、能源效率研究及展望

刘梦华^{1,3}, 黄逍², 李爽^{1,3}, 史翊翔^{1,3*}, 喻朝庆^{2*}, 蔡宁生^{1,3}

1. 清华大学能源与动力工程系, 北京 100084;

2. 海南大学生态与环境学院, 海口 570228;

3. 清华大学山西清洁能源研究院, 太原 030032

* E-mail: shyx@tsinghua.edu.cn; chaoqingyu@hainanu.edu.cn

收稿日期: 2023-06-15; 接受日期: 2023-08-28; 网络版发表日期: 2023-11-01

国家重点研发计划(编号: 2022YFB4202201)、国家自然科学基金(批准号: T2241003)、鄂尔多斯-清华碳中和创新合作研究计划、国家高层次人才专项支持计划和清华大学能源与动力工程系青年优秀人才支持计划资助项目

摘要 我国实现双碳目标的核心在于能源系统的低碳化和清洁化. 未来风电、光伏电等一次能源大比例接入电网, 其波动性、间歇性等特点使得可跨季广域消纳储能技术的发展成为刚需. 氨的稳定性、易存储、输储设施完善等特性使其成为极具竞争力的化学储能介质, 有望破解当前氢储运难题, 助力实现“碳中和、碳达峰”目标. 目前面向我国规模化应用的中国制氨路线生命周期评估工作较少, 缺乏考虑细分环节的合成氨路线的全生命周期碳排放及能效等指标的评估与分析. 针对上述氨储能技术发展存在的机遇和挑战, 本文建立各主要阶段的合成氨全生命周期评估(life cycle assessment, LCA)集成模型, 结合低碳排技术对不同制氨路线生命周期的一次能源投入及碳排放进行评估与分析. 通过核算煤制氨(R1)、天然气制氨(R2)、市电制氨(R3)及可再生电力制氢合成氨(R4)四种技术路线的碳排放及能源效率, 并对关键参数进行敏感度分析, 确定造成碳排放的关键环节和关键因素, 提出减少碳排放的技术改进建议. 研究表明, 未采用碳捕获与封存技术(carbon capture and storage, CCS)的煤制氨(R1-w/o CCS)与天然气制氨路线(R2-w/o CCS)碳排放则分别高达4.190和2.356 kg CO₂/kg NH₃, R3路线碳排放高达6.384 kg CO₂/kg NH₃, 分别以光伏电站(R4-PV)和风力发电站(R4-Wind)为电力输入的可再生电力制氢合成氨路线碳排放分别为0.569和0.335 kg CO₂/kg NH₃. 结合CCS技术后, R1-w/CCS和R2-w/CCS路线碳排放可分别降低61.8%和55.4%, 但因CO₂捕获、运输和封存带来的额外能耗使每功能单位氨生产的化石能源消耗量相应增长4.2%和5.8%, 生命周期能源效率分别降低1.6%和2.5%. 本文从全生命周期的碳排放和能效角度出发, 通过定义统一系统边界提高模型的精准度与可对比度, 为不同制氨路线的工艺改进情景提供了可靠的分析.

关键词 合成氨, 生命周期评价, 能效分析, 能源消耗, 碳排放

引用格式: 刘梦华, 黄逍, 李爽, 等. 基于全生命周期评价的中国制氨路线碳排放、能源效率研究及展望. 中国科学: 技术科学, 2024, 54: 1329–1346
Liu M H, Huang X, Li S, et al. Carbon emission and energy efficiency analysis of ammonia production routes in China from life-cycle perspective and prospects (in Chinese). Sci Sin Tech, 2024, 54: 1329–1346, doi: [10.1360/SST-2023-0197](https://doi.org/10.1360/SST-2023-0197)

1 引言

随着我国能源需求量增长与能源低碳化、零碳化压力的逐步加大, 发展可再生能源加速推动能源生产和消费革命成为能源战略的重要方向. 根据《中国电力统计年鉴2021》^[1], 2020年中国可再生能源发电量2.45万亿千瓦时, 占全部发电量29.7%. 然而, 可再生能源具有波动性、间歇性及分布不均性的特点, 以我国为例, 太阳能和风能集中在西北区域, 而西南区域水利资源丰富, 东、南沿海则是海上风电资源丰富^[2]. 随着可再生能源并网比例逐渐提高, 发展近零碳排放、能量密度大且可长时储存的化学储能技术将成为未来清洁化、低碳化能源系统的刚需. 氢能源以制备工艺成熟、储运基础设施及法规完善成为化学储能方式的优选, 有望成为未来能源系统的重要组成部分.

目前国内合成氨一般使用Haber-Bosch方法, 以化石燃料为氢源和热源, 在高温高压环境下进行催化合成, 该过程会产生大量CO₂气体排放. 2021年中国化工行业中合成氨工业碳排放量超过2亿吨, 在化工行业总碳排放中占比超过23%^[3], 因此基于化石燃料的传统合成氨工艺难以满足未来碳中和需求. 根据中国氮肥工业协会统计数据, 2022年全国累计生产合成氨6096万吨, 同比增长3.2%^[4]. 在合成氨生产原料比例方面, 煤制氨、天然气制氨和焦炉气制氨的比例分别为79.6%, 17.3%和1.8%, 其他方式制氨占比约为1.3%^[5]. 新兴碳捕获与封存技术(carbon capture and storage, CCS, 包括在其基础上增加利用环节的CCUS技术)是煤制氨和天然气制氨路线实现快速减排的关键手段, 也是目前可实现化石能源大规模低碳化利用的减排技术^[6,7]. 目前中国结合CCS的示范项目已有多项投入运行, 如我国最大的碳捕集利用与封存全产业链示范基地、国内首个百万吨级CCUS项目“齐鲁石化-胜利油田百万吨级CCUS项目”进入技术示范中后段^[8]. 此外, 近年氢能的爆发也使得基于可再生能源电力的电解制氢合成“绿氨”路线逐步进入应用视野. 总体而言, 结合CCS技术的化石燃料制氨过程、可再生制氢合成氨路线具备全生命周期碳减排优势已成为业内共识, 但针对不同路线的具体过程的碳足迹及能效定量优化仍不清晰. 针对不同原料的碳捕集过程和可再生电力制氢过程, 其全生命周期的碳减排潜力也存在较大

差距.

利用生命周期评价(life cycle assessment, LCA)方法从合成氨原料的获取、运输、利用的主要过程对直接和间接碳排放强度进行定量计算, 有利于准确识别不同合成氨路线的关键碳排放和化石能源消耗环节. 关于制氨的全生命周期的研究, 国内外已有不少研究成果. 例如, Al-Breiki和Bicer^[9]针对卡塔尔(Qatar)的能源结构, 研究了由天然气或可再生能源产生的液氨在整个生命周期中产生的温室气体排放, 研究表明结合CCS技术的天然气制氨碳排放为1.68 kg CO₂/kg NH₃, 而风电制氨的碳排放可以降低至0.47 kg CO₂/kg NH₃. Ozawa等人^[10]针对日本的能源现状, 使用日本的全生命周期数据库评估了“天然气制氢/可再生能源制氢-合成氨-储存-海运-燃烧发电”全生命周期的碳排放, 研究表明天然气制氢过程的碳排放占总排放量的80%以上, 而电解水制氢可有效消除可再生氨供应链排放量. Liu和Lin^[11]以挪威到中国和欧洲两条路线为例, 研究了以液氨和氨两种储运方式的能量效率和碳排放参数, 发现液氨运输链能源效率最高为41.6%和33.6%, 高于液氢运输链的30.4%和24.8%. Zhang等人^[12]分别对传统间歇煤气化制氢技术、水煤浆气化制氢技术、焦炉气制氢技术和天然气水蒸气重整制氢技术作为合成氨的氢源技术进行全生命周期分析, 结果表明使用更先进的煤制氢技术可降低40%以上碳排放, 而电力系统带来的碳排放难以避免.

综上所述, 当前基于全生命周期的制氨路线碳排放研究工作多针对制氢过程的工艺优化上, 对CCS技术、生产绿氢的设备建设及运维附加的一次能源消耗(及其碳排放)等因素尚未考虑, 难以对不同技术路线的减排效果进行全面量化评估. 此外, 不同研究划分的系统边界(如通常不会考虑原料开采环节)不一致也使得文献之间对比性较差. 因此, 本文基于国内制氨工艺、光伏、风力发电站及电解槽建设等数据, 从单位质量产品氨的碳排放、能源效率、初级化石能源需求量角度对传统煤制氨、天然气制氨、市电电解水制氢合成氨和可再生电力制氢合成氨四种制氨路线进行全生命周期评估, 并测算原料开采及生产过程、制氢制氨过程、合成氨过程等细分环节的碳排放和效率, 通过识别关键能耗与碳排放过程并分析相关参数的影响, 为我国合成氨工业的节能低碳发展提供科学依据.

2 研究对象与系统边界

2.1 研究对象

生命周期评价是汇总和评估一个产品(或服务)体系在整个寿命周期内所有投入、投出及其对环境直接造成或潜在影响的方法. 评价主要包括四个部分: 目的与范围确定、清单分析、影响评价和结果解释. 本文以大型合成氨工厂为研究对象, 选择针对煤气化制氨(R1)、天然气制氨(R2)、市电制氢合成氨(R3)、可再生电力制氢合成氨(R4)四种制氨途径进行全生命周期碳排放及能源效率研究, 各自的工艺流程如图1所示, 选择以上制氨过程进行研究主要基于以下考虑: 煤气化制氨和天然气制氨占据超过我国95%以上的合成氨市场, 而煤是我国资源禀赋最为丰富的化石能源, 具有经济性优势和规模优势, 而天然气在部分省份资源丰富成本较低, 研究两种制氨工艺参数优化、结合新兴CCS技术对整体能耗和CO₂排放量的影响对现阶段合成氨工艺优化具有重要意义; 以市电为主的电解水制氢替代现有合成氨工业的化石能源制氢可降低氢源获

取过程的直接碳排放, 电力结构是制氢过程能耗和碳排放的主要来源. 相对于传统电力结构制氢合成氨, 可再生电力主导的电力结构制氢合成氨过程需在不同细分环节的直接、间接碳排放进行细致深入的研究, 有助于深入探讨如何因地制宜选择制氨路线.

2.2 系统边界

本文的研究边界是基于以上四种制氨路线, 结合不同的氢源制备工艺及氢储运工艺, 运输到合成氨工厂通过Haber-Bosch工艺合成氨. 该系统输入为原材料、能量、水等资源, 输出为成品液氨(按千克计算), 过程中产生的氢气以高压氢气或液氢的方式运输到合成氨厂进行利用, 全流程排放物为CO₂等. R1和R2的工艺成熟、寿命长, 且煤制氢和天然气制氢设备多为已有固定设备, 其维护阶段折算到每千克液氨合成过程中贡献的能耗和温室气体排放可以忽略不计. 在R4中, 风力发电站、光伏发电站及制氢设备的建设及运维均纳入系统边界内, 并考虑其寿命, 产生的碳排放和能耗一并折算到每功能单位氨生产的生命周期评价中. 涉

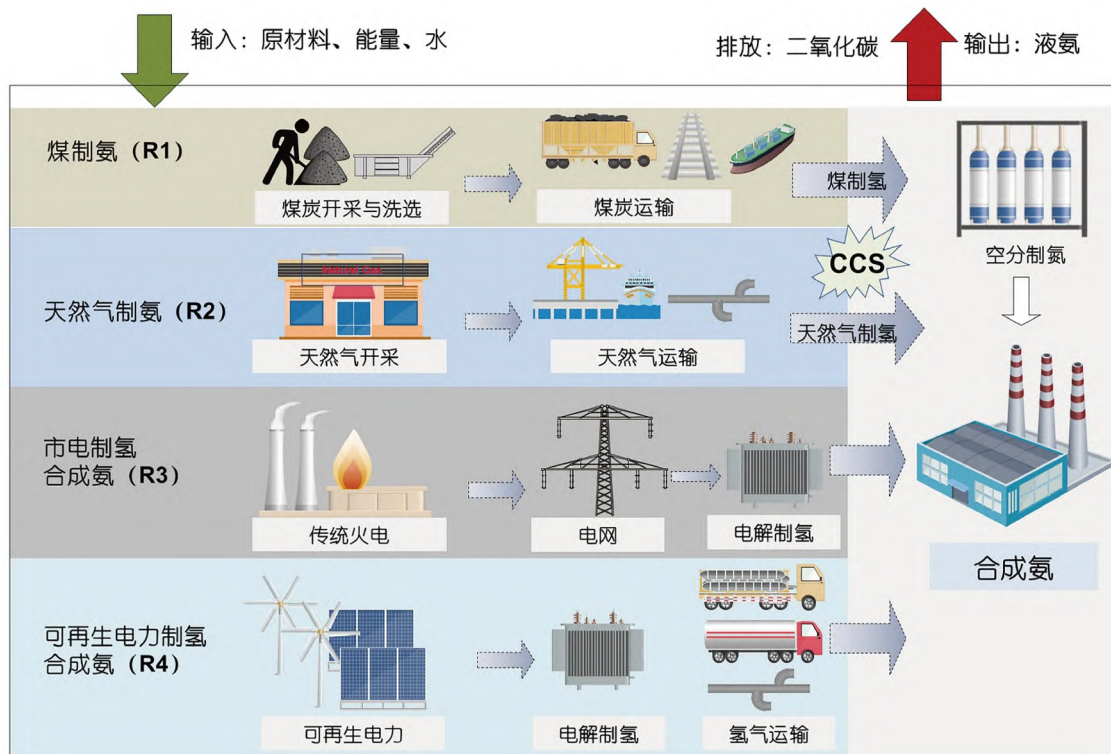


图1 (网络版彩图)制氨过程全生命周期分析系统边界

Figure 1 (Color online) Boundary of the life-cycle analysis system for the ammonia production pathways.

及运输部分根据中国各原料运输方式和距离比例设定, 煤制氢设备、合成氨厂房设备等基础设施部分不予考虑。中国电力结构根据《中国电力统计年鉴2021》选用典型省份发电结构进行分析。

3 制氮路线描述

本文采用的生命周期评价软件是美国阿贡实验室开发的GREET(the greenhouse gases, regulated emissions, and energy use in technologies model)^[13]。该软件中对产品生成过程分为原料开采、原料预处理、原料运输、加工转化四个阶段, 并允许用户根据实际情况对各个阶段进行组合, 修改阶段效率和排放系数以满足生命周期评价需求。针对化石能源制氮过程, 本研究基于中国本土的煤炭及天然气开采、处理和运输过程对各个阶段数据进行参数修订。化石原料制氮的热化学制氮效率采用当前工艺的平均值, 燃烧过程的碳排放量根据化石燃料含碳量进行折算, 并对比不同碳捕集率条件下的单位氮合成碳排放和能耗。针对电解水制氮合成氮路线, 本研究基于2020年数据构建了混合电网模型和光伏电站、风力发电站、碱性水电解槽的生命周期模型, 考虑氢气压缩及运输过程的能耗和损失, 并对比不同电力输入下的合成氮碳排放和能耗。表1列出了当前热化学制氮、电解水制氮及可再生发电过程的效率分布范围, 并标注在基础计算案例中使用的具体参数。表2为原料输运过程及可再生制氮设备寿命的相关参数。为了对比分析全生命周期过程中的能源消耗与碳排放数据, 并比较路线的可持续性, 现定义生命周期能源效率和净效率为

$$\eta_{\text{sustainability}} = \frac{\text{LHV}_{\text{NH}_3}}{Q_{\text{primary fossil energy}}} \times 100\%, \quad (1)$$

$$\eta_{\text{net efficiency}} = \frac{\text{LHV}_{\text{NH}_3}}{Q_{\text{total primary energy}}} \times 100\%, \quad (2)$$

其中, $\eta_{\text{sustainability}}$ 和 $\eta_{\text{net efficiency}}$ 分别是生命周期能源效率和净效率, LHV_{NH_3} 为产出单位质量氮的低位热值 (18.68 MJ/kg), $Q_{\text{primary fossil energy}}$ 和 $Q_{\text{total primary energy}}$ 则为每单位质量氮生产消耗的初级化石能源消耗量和总能源消耗量(MJ/kg NH_3)。 $\eta_{\text{sustainability}}$ 数值高于100%代表该路线是可持续性的发展路线。

3.1 煤制氮路线

煤制氮路线关键环节如图2所示, 主要包括煤炭开采与洗选、煤炭运输、煤气化制氮、合成氮四个过程。其中煤炭开采及洗选效率分别为99%, 95.0%^[14], 煤炭开采及洗选比例参照补充材料表S1。煤炭运输主要通过铁路、公路与水路方式进行。根据中国煤炭协会发布的《2021年煤炭行业发展年度报告》, 2021年全国铁路累计发运煤炭25.8亿吨, 占全国煤炭产量的62.46%。省内煤运主要通过公路运输进行, 平均运输距离约为180 km。煤气化制氮的能耗、碳排放及成本99%都来自于煤气化制氮反应过程。煤气化制氮反应过程的碳排放为20.35 kg/kg H_2 , 其中17.97 kg CO_2 来自于煤气化热反应释放的碳源, 而另外2.38 kg CO_2 来自于电力系统的隐含碳。本过程中生产每公斤 H_2 需消耗210.8 MJ煤炭和12.6 MJ电力, 因此综合能耗为223.4 MJ/kg H_2 。

合成氮所需的另一重要原料为氮气, 工业上主要

表1 制氮、碳捕集及可再生发电过程的关键技术参数

Table 1 Key technical parameters for hydrogen production, carbon capture and renewable electricity processes

工艺名称	下阈值	基准值	上阈值	参考文献
煤气化制氮	50%	53.6%	57%	[13,25,26]
天然气制氮	61%	72.1%	80%	[13,18,27,28]
电解制氮效率	68%	72%	75%	[19,29,30]
CO_2 捕集率	85%	90%	95%	[31,32]
CO_2 捕集能耗*	29 kW h/t	27 kW h/t	25 kW h/t	[33,34]
CO_2 管道运输及封存能耗*	130 kW h/t	130 kW h/t	100 kW h/t	[35,36]
光伏效率	15%	15.9%	22%	[37~39]
风电效率	26%	40%	45%	[40]

表 2 原料输运过程及可再生制氢设备寿命参数

Table 2 Parameters of feedstock transportation process and renewable hydrogen production equipment lifetime

工艺名称	数值	参考文献
煤炭运输损耗率	1%	[41]
CO ₂ 运输半径	100 km	[36]
天然气开采效率	96.9%	—
天然气处理效率	95.2%	—
天然气管道泄漏	0.026% ^[9]	省内输气管网损耗率一般不得高于0.5%
电力输送效率	95%	—
煤电效率	39.5%	—
天然气联合循环发电效率	55.8%	—
风电寿命	20 years	[23]
光伏组件寿命	20 years	[24]
电解槽寿命	90000 h	[19]
高压氢气运输损耗	0.21%	—
高压氢气压缩能耗(~20 MPa)	3.1 kW h/kg H ₂	[20]
氢气管道损耗	4.6%	[42]

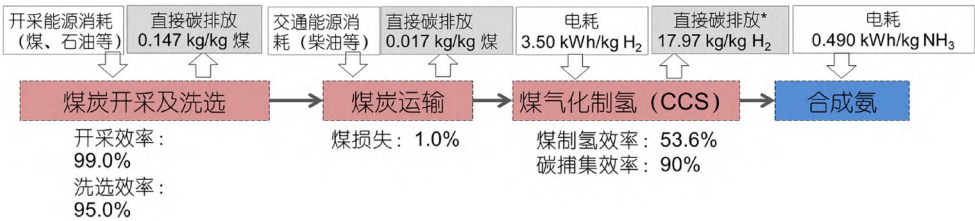


图 2 (网络版彩图)煤制氨路线主要过程及效率(*代表无CCS技术的制氢过程直接碳排放)

Figure 2 (Color online) Main processes and efficiencies of the coal-to-ammonia pathway (* represents direct CO₂ emissions from ammonia production without CCS technology).

使用深冷分离、变压吸附等方法制备。变压吸附适用于中小规模制氮，根据《变压吸附制氧、制氮设备》国家标准^[15]，制取纯度≥99.5%的氮气且产量在5~5000 m³/h时，单位制氮电耗为0.43~0.60 kW h/m³，此处计算取值0.365 kW h/kg N₂。深冷分离制氮适用于单位规模≥5000 m³/h的氮气制备过程，制氮单位电耗为0.162 kW h/kg N₂^[16]。

煤制氨路线中煤气化得到的原料氢气无需运输即就地使用，与氮气等原料气体经过压缩后进入合成氨循环工段。中小氮肥企业常压固定床合成氨系统大多采用电驱动压缩机，压缩机大多是1~6级往复式压缩机，大型合成氨厂电耗在0.3~0.5 kW h/kg NH₃之间^[17]，此处取煤制氨电耗为0.490 kW h/kg NH₃。

3.2 天然气制氨路线

天然气制氨路线关键环节如图3所示，主要包括天然气开采及处理、天然气运输、天然气制氢、合成氨四个过程。其中天然气开采效率为96.8%，天然气处理效率为95.2%。天然气开采及处理过程能耗比例参照表S1。

天然气蒸汽重整制氢在有蒸汽输出回收利用和无蒸汽输出回收利用时制氢效率为分别在82%~86%，61%~73%范围内^[18]，此处效率值为72.1%。原料天然气发生水蒸气重整反应所需要的热量由燃料天然气与电力共同提供，二者占比分别为96.79%与3.21%。同样地，此过程大部分碳排放来自于化学反应过程，每功能单位碳排放约为11.80 kg/kg H₂，其中仅有0.43 kg来自于

电力系统隐含碳. 已有研究表明合成氨压力为200 bar (1 bar= 10^5 Pa)时, 制氨电耗为0.324 kW h/kg NH_3 ^[16]. 合成氨工段所需原料氮气制备方式及能耗与R1路线相同.

3.3 市电制氢合成氨路线

市电直接电解水合成氨路线关键环节如图4所示, 主要包括市电电解水制氢、氢气压缩和合成氨三个过程. 电解制氢效率参照国家强制性标准《水电解制氢系统能效限定值及能耗等级》^[19], 即大中型制氢系统单位能耗需 ≤ 4.9 kW h/ Nm^3 H_2 , 制氢系统能效值不得低于72%. 电解制备的氢气经过压缩机成200 bar的高压氢气, 再与氮气反应生成产品氨, 氢气压缩过程效率为91.5%, 压缩过程氢气损失为0.5%, 单位质量耗电为3.1 kW h/kg H_2 ^[20].

根据《中国电力统计年鉴2021》^[1]数据显示,

2020年全国总发电量达到76264亿千瓦时, 其中62.8%的发电量来自于燃煤发电, 燃气、水电、风电和核电分别占比3.3%, 17.8%, 6.1%和4.8%. 根据国际能源署(IEA)和中国统计数据综合分析^[21], 煤电效率在35%~46%之间, 此处取中间值39.5%; 天然气联合循环发电效率为55.8%. 考虑到电力上网、运输、变压等过程的损失后的电网电力 CO_2 排放系数为622.6 g/kW h.

3.4 可再生电力制氢合成氨路线

可再生电力制氢合成氨路线关键环节如图5所示, 主要包括可再生电站建设、电解槽制备、氢气压缩、氢气输运和合成氨五个过程. 根据国际能源署2021年发布的《中国能源体系碳中和路线图》^[22], 2030~2060年间, 我国太阳能光伏和风电装机的年均新增装机量将分别为220和57 GW, 新增光伏、风电和电解槽装机的零部件生产、组装、建设与维护过程也需要考

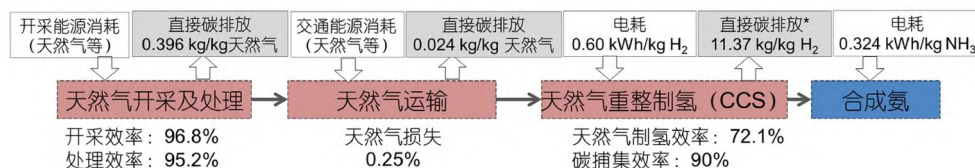


图3 (网络版彩图)天然气制氨路线主要过程及效率

Figure 3 (Color online) Main processes and efficiencies of natural gas to ammonia pathway.

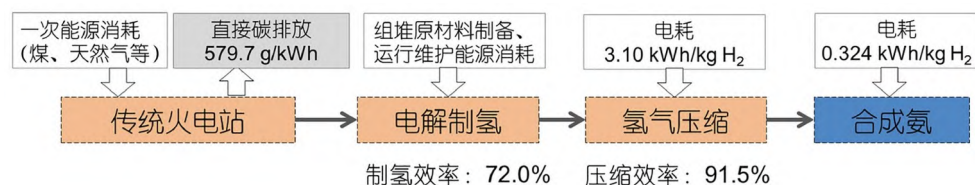


图4 (网络版彩图)市电制氢合成氨路线主要过程及效率

Figure 4 (Color online) Main processes and efficiencies of ammonia production from hydrogen driven by electrolysis via utility power pathway.

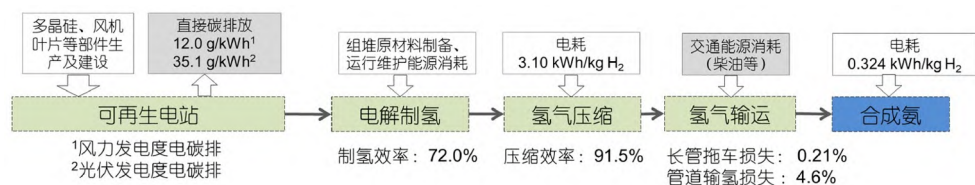


图5 (网络版彩图)可再生电力制氢合成氨路线主要过程及效率

Figure 5 (Color online) Main processes and efficiencies of ammonia production from hydrogen driven by electrolysis via renewable electricity pathway.

考虑到全生命周期能耗中. 本文中所使用的风电和光伏的全生命周期数据分别来自于广西玉林30 MW风力发电场^[23]和云南昆明的1 MW光伏发电场^[24].

电解制氢之后的氢气通过氢气管道、高压气体压缩-长管拖车两种运输方式转运至合成氨工厂, 其运输半径分别为500和180 km. 在省内运输中假设管道运输和高压气态运输为主要方式, 占比分别为25%和75%.

4 结果分析与讨论

基于以上过程建模与计算, 即可获得四种合成氨路线的生命周期能源效率和碳排放. 如表3所示, 以天然气为原料的合成氨途径(R2)具有最低的总能源消耗量, 为39.718 MJ/kg NH₃, 与文献[43]中的35.0~37.9 MJ/kg NH₃相比, 其主要区别在于本研究中考考虑了天然气的开采处理及长途海运过程, 天然气长途海运过程耗能约为2.198 MJ/kg NH₃, 因此本计算数据偏差属于合理范畴. 其次是煤制氨过程(R1)全生命周期能源消耗量为50.554 MJ/kg NH₃, 因煤制氨中间过程技术种类广泛, 文献报道[12]在45.0~54.7 MJ/kg NH₃之间. 尽管R1和R2具有最低的总能源消耗量, 但其生命周期一次能源需求中化石能源占比均超过95%, 分

别达到了48.500和38.515 MJ/kg NH₃. 市电电解水制氢合成氨(R3)具有最高的化石能源消耗量, 为68.494 MJ/kg NH₃. 尽管可再生电力电解水制氢合成氨(R4)具有最高的全生命周期能耗需求, 但其能量损失主要来自于太阳能、风能转化为电能的过程, 总化石能源占比仅为R1路线中化石能源消耗量的1/10.

如图6(a)所示, 四种合成氨路线中原料处理及储运过程占比相对较小, R1和R2过程中原料分别为煤和天然气, 通过热化学方法制氢后直接在制氨厂使用, 因此氢气处理及运输过程忽略不计. 而R3和R4过程考虑制氨厂制氢后再通过管道或长管拖车运输到氨厂, 因此处理及运输过程不可忽略. 图6(b)是单位质量氨合成消耗的能源组成结构. 根据上述定义的生命周期能源效率 $\eta_{sustainability}$ 对不同路线进行计算与可持续性评价, 结果如图6(c)所示. R1-w/o CCS路线生命周期能源效率仅为38.5%, 结合CCS技术后生命周期能源效率降低1.0%左右, 而R2-w/o CCS路线效率为48.5%, 在结合CCS技术后也同样降低了2.2%. R3路线发展的可持续性最差, 其生命周期能源效率仅为27.3%. 而可再生电力制氢合成氨方法单位质量氨合成消耗的化石能源不足5%, 其余全部来自于可再生能源, 使得生命周期能源效率分别达到了284.1%和467.7%, 相较于前三者具

表 3 合成氨路线的一次能源需求 (单位: MJ/kg NH₃)^{a)}

Table 3 Primary energy consumption for ammonia production

	净效率 (%)	总能耗	化石能源	非化石能源	煤炭	天然气	石油	生物质	核能	可再生能源
R1-w/o CCS	37.0	50.554	48.500	2.054	47.667	0.419	0.414	0.422	0.244	1.810
			95.94%	4.06%	94.29%	0.83%	0.82%	0.83%	0.48%	3.58%
R1-w CCS	35.4	52.699	49.844	2.855	48.848	0.556	0.44	0.586	0.339	2.515
			94.58%	5.42%	92.69%	1.06%	0.83%	1.11%	0.64%	4.77%
R2-w/o CCS	47.0	39.718	38.515	1.202	5.047	5.044	1.043	0.245	0.150	0.000
			96.97%	3.03%	12.71%	12.70%	2.63%	0.62%	0.38%	0.00%
R2-w CCS	44.5	42.013	40.360	1.653	6.829	6.825	1.065	0.338	0.204	0.000
			96.07%	3.93%	16.25%	16.24%	2.53%	0.80%	0.49%	0.00%
R3	20.5	91.058	68.494	22.564	63.492	3.954	1.048	9.879	1.901	20.663
			75.22%	24.78%	69.73%	4.34%	1.15%	10.85%	2.09%	22.69%
R4-PV	7.9	236.175	6.576	229.598	2.463	2.341	2.463	0.279	0.229	229.369
			2.78%	97.22%	1.04%	0.99%	1.04%	0.12%	0.10%	97.12%
R4-Wind	19.6	95.316	3.994	91.32	1.133	1.3	1.561	0.067	0.164	91.156
			4.19%	95.81%	1.19%	1.36%	1.64%	0.07%	0.17%	95.64%

a) R1, R2, R3, R4分别代表煤制氨、天然气制氨、市电制氢合成氨和可再生电力制氨过程. w/o CCS代表“without CCS”, 即未结合碳捕集技术, 而“w CCS”代表“with CCS”, 即结合碳捕集技术.

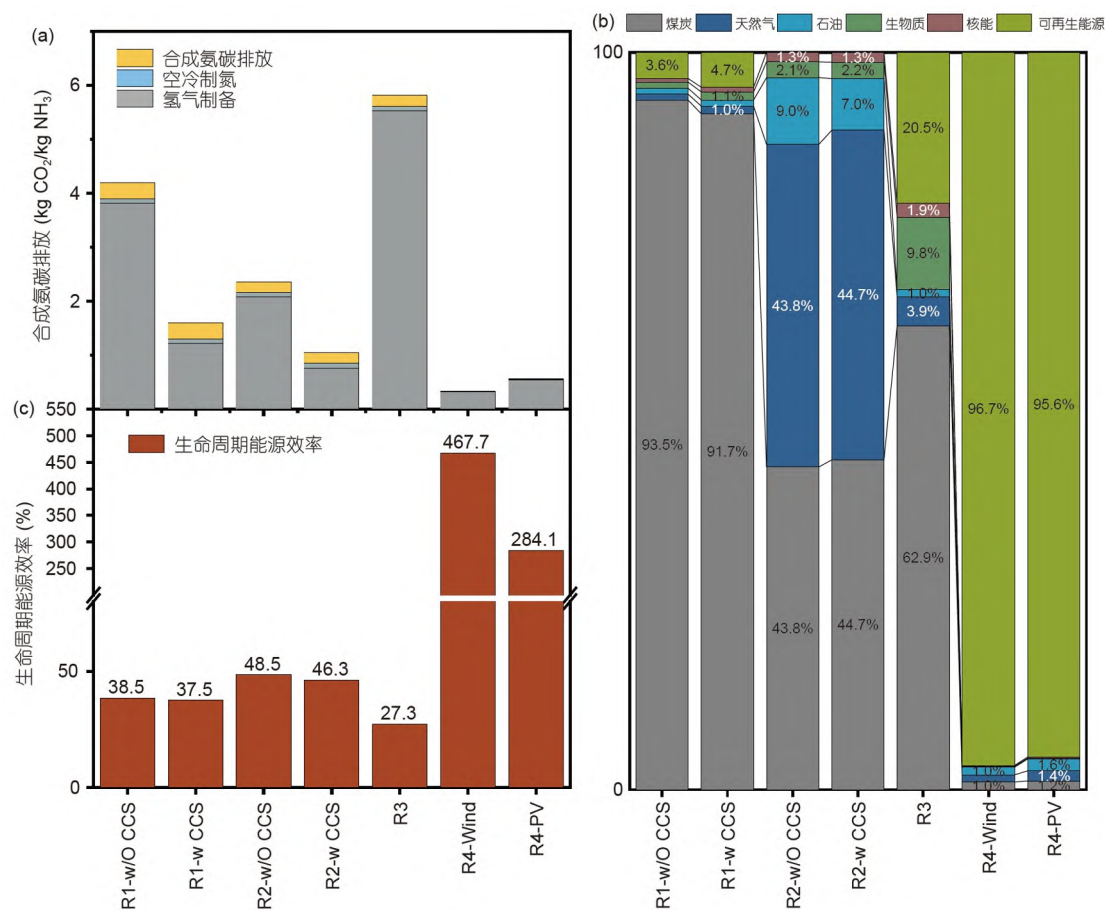


图6 (网络版彩图) (a)不同路线合成氨碳排放, (b)单位质量氨合成消耗的能源组成结构和(c)生命周期能源效率对比

Figure 6 (Color online) Comparison of (a) CO₂ emissions from ammonia production by different pathways, (b) energy composition per unit mass consumed for ammonia production and (c) life-cycle energy efficiency.

有明显的可持续性优势。

4.1 煤制氨全流程碳足迹分析

4.1.1 碳足迹分析

如表4所示,煤制氨技术全流程二氧化碳排放量为4.190 kg CO₂/kg NH₃,其中煤气化制氢过程占比为91.13%,对整体的碳足迹的影响较大,而空冷制氮过程与合成氨过程耗电所导致的电力系统隐含碳排放量分别为0.080和0.290 kg CO₂/kg NH₃。图7(b)是煤气化制氢过程中的二氧化碳排放占比,煤炭开采及洗选过程和煤炭运输过程的碳排放量为0.212和0.021 kg CO₂/kg NH₃,在整个制氢过程中的占比分别为5.58%和0.55%。图7(c)和(d)分别是煤制氨技术与煤制氨工艺各环节的能耗占比,可见煤制氨工艺能耗占比为83.08%,其

中煤气化制氢反应过程的能耗损失超过87%。根据数据测算,煤制氢过程整体碳足迹为21.37 kg CO₂/kg H₂,此数据与文献[44]中的22.66 kg CO₂/kg H₂主要区别在于煤炭运输环节的设定不同。碳足迹涵盖了直接的温室气体排放(GHG)排放和用电、用水等带来的间接GHG排放,其中煤气化制氢反应环节的直接碳排放为17.97 kg CO₂/kg H₂,经过碳捕集可以将其下降至1.63 kg CO₂/kg H₂,减少90.9%的二氧化碳排放,与IEA发布的《中国耦合CCUS制氢机遇》[45]测算的1.7~1.9 kg CO₂/kg H₂有5%左右的误差,其主要原因在于煤制氢效率设置的不同。直接碳排放可在CCS技术辅助下大幅度降低。然而二氧化碳的捕集、运输和封存需要额外消耗电力、水、柴油等资源,带来额外的间接温室气体排放。我国煤炭开采一般在地下环境中进行,

表 4 煤制氨全生命周期碳排放及化石能量损失清单^{a)}

Table 4 Inventory of life-cycle CO₂ emissions and fossil energy losses from coal-to-ammonia pathway

阶段	碳排放 (kg CO ₂ /kg NH ₃)	能量损失 (MJ/kg NH ₃)	过程能源效率 (%)
煤炭开采	0.212	2.414	95.0
煤炭运输	0.021	0.701	99.0
煤气化制氢	3.587	19.007	53.6
空冷制氮	0.080	1.063	NA
合成氨工艺	0.290	6.635	80.8
共计	4.190	29.820	37.0

a) NA即“not available”, 氮气的低位热值及空气的低位热值难以进行计算. 以下同.

此技术环节产生的CO₂, CH₄, N₂O等温室气体虽然占比不大, 但后二者造成的温室效应分别是CO₂的25倍和298倍, 每吨煤开采过程中二氧化碳排放为147.17 kg CO₂/吨煤, 同时伴有5.22 kg CH₄和1.88 g N₂O, 折算成GHG排放为304.84 kg CO₂eq/吨煤, 远高于因电力消耗而产生的相关碳足迹, 因此煤制氢上游环节需要给予足够的重视.

4.1.2 工艺改进情景分析

煤制氢能源转换过程对于煤制氨技术全流程碳足

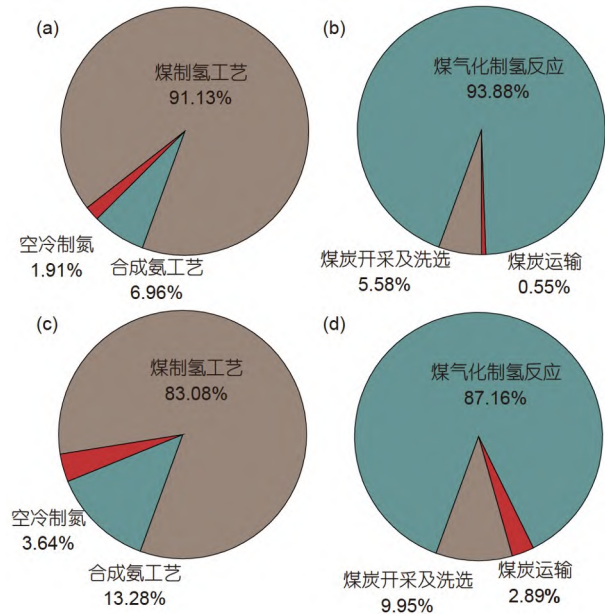


图 7 (网络版彩图)煤制氨全流程、煤制氢工艺各环节CO₂排放((a), (b))和能耗((c), (d))占比

Figure 7 (Color online) Proportion of CO₂ emission ((a), (b)) and energy consumption ((c), (d)) in each stage of coal-to-ammonia and coal-to-hydrogen processes.

迹及能耗的影响巨大, 且受煤炭种类、开采及运输方式等多重不确定因素的影响. 根据上述讨论结果, 以下选取煤制氢能源转化效率、二氧化碳捕集率两种变量进行工艺改进情景分析. 用于制氢的煤炭低位热值为26.44 MJ/kg, 在计算能耗时将氢气按照120 MJ/kg进行折算.

煤制氢效率是直接影响制氢环节碳排放的关键工艺参数, 提高制氢效率可以提高单位耗煤的产氢量, 同时降低能耗的碳排放. 当煤气化制氢的效率从50%提高到70%时, 单位产氢的碳排放量从22.82 kg CO₂/kg H₂降低至16.59 kg CO₂/kg H₂, 降低了27.3%. 如图8(a)所示, 煤制氨过程的碳排放也从4.452 kg CO₂/kg NH₃降低至2.994 kg CO₂/kg NH₃, 提高能源转化效率后单位制氨化石能源消耗也从51.581 MJ/kg NH₃降低至38.473 MJ/kg NH₃, 减少了24.5%的能源损失. 若不考虑CCS技术, 煤制氨技术即便在煤制氢效率为70%时其全流程碳足迹仍高达2.994 kg CO₂/kg NH₃, 仍高于现有天然气制氨过程.

在碳捕集率为90%的情况下, 煤制氨全流程碳足迹仅为1.603 kg CO₂/kg NH₃, 相较于不使用CCS技术碳排放量降低了61.8%. 同时, 单位氨合成能耗也从48.500 MJ/kg NH₃升高至49.993 MJ/kg NH₃, 这部分能耗的增加主要来源于CO₂运输及封存的耗能. 单位质量CO₂在运输半径为250 km时运输和封存总耗能为0.572 MJ/kg CO₂. 如图7(b)所示, 煤制氨全流程碳足迹随着CO₂捕集率的升高而降低, CO₂捕集量的增大也相应地带来了运输和封存过程的能耗, 进而带来了显著的能耗增加. 结合CCS技术是煤制氨工艺有效的减排手段, 降低碳捕集和运输各环节的能耗也亟待进行. 然而, 结合图6(c)可知, 煤制氨路线无论是否结合CCS

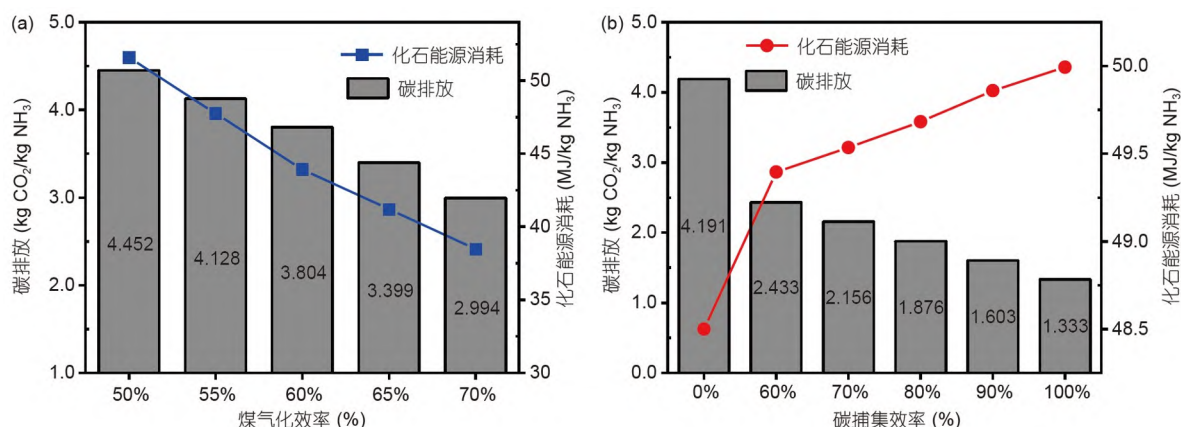


图8 (网络版彩图) (a)煤气化制氢效率和(b)碳捕集效率对煤制氨碳排放和能耗的影响

Figure 8 (Color online) Effects of efficiency of hydrogen production from (a) coal gasification and (b) carbon capture on CO₂ emissions and energy consumption of coal-to-ammonia pathway.

技术, 其生命周期能源效率都不足40%, 作为合成氨的原料始终难以持续. 此外, 由于煤种成分复杂, 煤气化制氢过程往往伴随着种类繁多的气体污染物(如一氧化碳、硫氧化物和氮氧化物等)^[46], 在未来无碳能源“氨”大比例替代现阶段化石燃料的背景下, 其对大气环境的污染可能更加严峻.

4.2 天然气制氨全流程碳足迹分析

4.2.1 碳足迹分析

天然气制氨全流程碳足迹为2.356 CO₂/kg NH₃, 此数值高出文献^[10]将近15%, 主要差异在于本文中考虑了因合成氨消耗电力所带来的隐含碳排放. 天然气制氨路线的碳排放及能耗占比如图9所示. 表5列出天然气制氨技术各个环节的碳排放和能耗, 整体来看, 合成氨工艺和空冷制氮的二氧化碳排放量分别为0.194和0.080 CO₂/kg NH₃, 相应的对整体碳排放的贡献占比为8.85%和3.39%. 此二者占据的能耗损失量同样也分别只有14.07%和5.79%. 天然气制氢能源转化环节所排放的二氧化碳量和损失的能耗占比均超过全流程80%以上.

根据测算, 天然气制氢过程整体碳排放量为11.65 kg CO₂/kg H₂, 其中9.25 kg CO₂来自于天然气制氢反应, 其他则为原料开采、辅助电耗等过程产生的间接碳排放. 已有文献^[47]证明考虑不同系统约束的天然气制氢过程碳排放放在9.10~14.5 kg CO₂/kg H₂, 本文测算结果属于合理中位数. 考虑CCS技术可将

直接碳排放降低至0.93 kg CO₂/kg H₂. 天然气开采过程和运输过程的能耗占比相对煤炭而言较高, 分别为24.94%和15.69%, 主要原因是天然气制氢反应能源转换效率较高, 因而能耗占比相对较低.

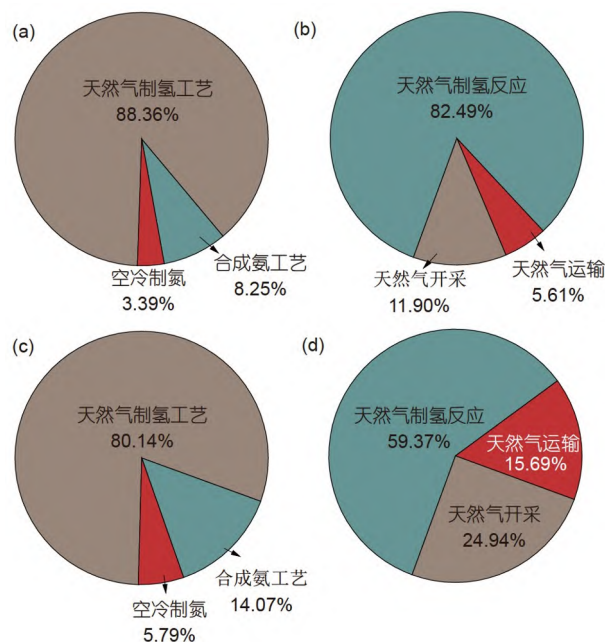


图9 (网络版彩图) 天然气制氨全流程、天然气制氢工艺各环节CO₂排放((a), (b))、能耗((c), (d))占比

Figure 9 (Color online) Proportion of CO₂ emissions ((a), (b)) and energy consumption ((c), (d)) in each stage of natural gas-to-ammonia and natural gas -to-hydrogen processes.

4.2.2 工艺改进情景分析

天然气制氢能源转换过程对于天然气制氨技术全流程碳足迹及能耗的影响占比超过80%，根据上述讨论结果，以下选取天然气制氢能源转化效率、二氧化碳捕集率两种变量进行敏感度分析。本文中用于制氢的天然气低位热值为50.60 MJ/kg，换算成体积低位热值为39.32 MJ/m³。当天然气制氢的效率从70%提高到90%时，单位产氢的碳排放量从12.01 kg CO₂/kg H₂降低至9.27 kg CO₂/kg H₂，降低22.8%。如图10(a)所示，天然气制氨过程的碳排放也从2.41 kg CO₂/kg NH₃降低至1.92 kg CO₂/kg NH₃，提高能源转化效率后单位制氨能耗也从40.81 MJ/kg NH₃降低至32.43 MJ/kg NH₃，减少20.53%的能源损失。

如图10(b)所示，天然气制氨全流程碳足迹随着CO₂捕集率的升高而降低，CO₂捕集量的增大也相应地

带来了运输和封存过程的能耗，进而带来了显著的能耗增加。在碳捕集率为90%的情况下，天然气制氨全流程碳足迹仅为1.052 kg CO₂/kg NH₃，相较于不使用CCS技术碳排放量降低了55.4%。其主要原因是天然气制氢过程在捕集90%二氧化碳尾气后碳排放降低为4.255 kg CO₂/kg H₂，其中仅有0.924 kg来源于天然气制氢工艺过程的直接碳排放，碳捕集及封存的电力消耗带来的隐含碳排放则高达1.008 kg CO₂/kg H₂。同时，单位氨合成能耗也从38.515 MJ/kg NH₃升高至40.360 MJ/kg NH₃，这部分能耗的增加主要来源于CO₂运输及封存的耗能。尽管与R1路线相比，R2在有无结合CCS技术的条件下 $\eta_{\text{sustainability}}$ 都高于40%，但此技术路线极有可能受到储量、地缘政治等因素叠加影响，在氨能源在我国规模使用的背景下可能难以维持稳定供应。

表 5 天然气制氨全生命周期碳排放及化石能量损失清单
Table 5 Inventory of life-cycle CO₂ emissions and fossil energy losses from natural gas-to-ammonia pathway

阶段	碳排放 (kg CO ₂ /kg NH ₃)	能量损失 (MJ/kg NH ₃)	净效率 (%)
天然气开采	0.247	3.67	93.6
天然气运输	0.116	2.308	99.97
天然气制氢	1.71	10.208	72.1
空冷制氨	0.08	1.063	NA
合成氨工艺	0.194	2.584	82.9
共计	2.347	18.361	47.0

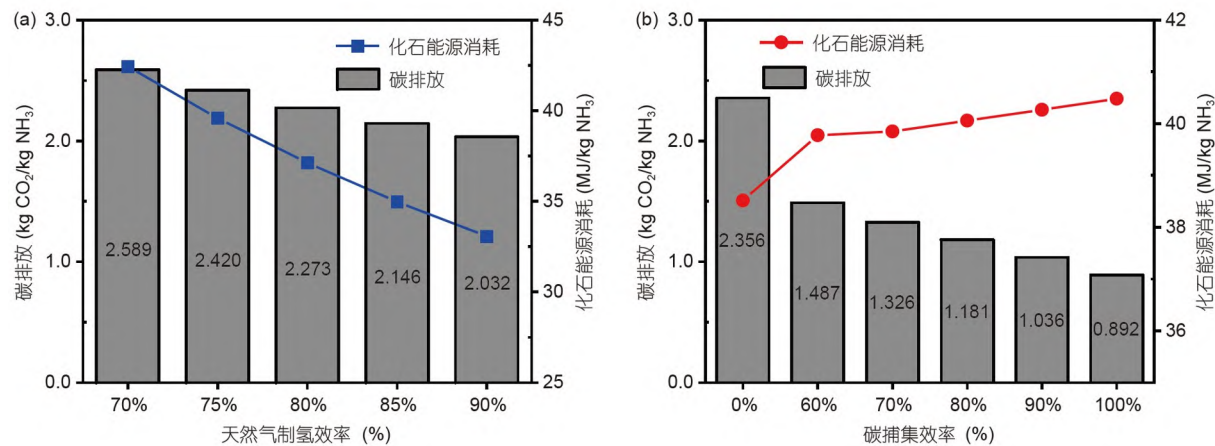


图 10 (网络版彩图) (a)天然气制氢效率和(b)碳捕集效率对天然气制氨碳排放和能耗的影响
Figure 10 (Color online) Effects of efficiency of hydrogen production from (a) natural gas and (b) carbon capture on CO₂ emissions and energy consumption of natural gas-to-ammonia pathway.

4.3 市电制氢合成氨碳足迹分析

4.3.1 碳足迹分析

以全国平均电力能源结构作为电解水的电力输入, 如表6所示, 市电电解水制氢合成氨全流程碳足迹高达6.384 kg CO₂/kg NH₃, 单位产品氨能耗为68.494 MJ/kg NH₃, 其中90%以上的碳排放和能耗均来自于电解水制氢工艺(图11)。以目前电解水制氢技术的能源转换效率在60%~80%之间进行估算, 单位氢气制备的碳排放量为24.90~33.22 kg CO₂/kg H₂, 接近化石燃料制氢的2~3倍。考虑到氢气在常温、常压下能量密度低, 通过压缩氢气到20 MPa的高压状态使氢气成为一种能量载体, 经测算, 氢气压缩过程因电力消耗产生的间接碳排放为1.94 kg CO₂/kg H₂。高压气氢运输主要分为长管拖车和管道运输两种方式, 长管拖车单车运氢约为363 kg。高压气氢运输过程产生的碳排放和能耗分别为0.127 kg CO₂/kg NH₃和1.493 MJ/kg NH₃, 相对于合成氨流程的贡献度分别为2.35%和3.55%, 几乎可以忽略不计。

4.3.2 工艺改进情景分析

安徽、四川、内蒙古、广东分别代表华东、西南、华北、华南省份电力结构占比较高的省份, 年发电量分别为2785亿千瓦时、4167亿千瓦时、5703亿千瓦时和5048亿千瓦时, 分别占据2022年全国发电总量的3.65%、5.46%、7.48%和6.62%。各省的2021年电力能源结构如补充材料图S1所示。根据发电结构进行测算, 各省的电力系统CO₂因子、电解制氢单位质量碳排放和合成氨碳排放如图12所示, 其中四川省电力系统CO₂因子仅为119.47 g/kW h, 以该电力为输入合成氨的全生命周期能耗仅为44.845 MJ/kg NH₃, 碳足迹仅为1.288 kg CO₂/kg NH₃。其次是广东省5.763 kg

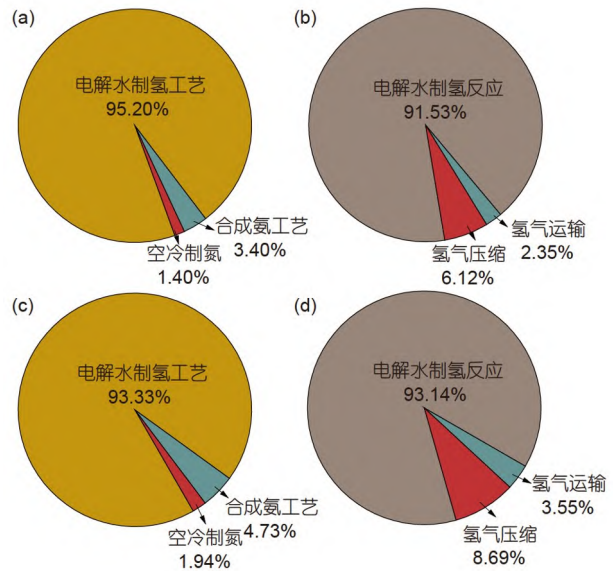


图 11 (网络版彩图)市电电解水制氢合成氨全流程各环节二氧化碳排放((a), (b))及能耗占比((c), (d))

Figure 11 (Color online) Proportion of CO₂ emissions ((a), (b)) and energy consumption ((c), (d)) in each stage of ammonia production from hydrogen driven by utility power (national average electricity).

CO₂/kg NH₃, 安徽省和内蒙古都超过了全国平均水平, 分别达到了7.718和7.058 kg CO₂/kg NH₃。即便提高电解水制氢的电-氢能源转换效率至75%~90%, 如图13所示, 以全国平均电力为制氢电力来源的合成氨路线全生命周期碳排放依然在4.798~5.608 kg CO₂/kg NH₃, 单位质量合成氨耗能为62.795~73.390 MJ/kg NH₃。无论如何提高制氢效率, “化石能源→电力→氢→合成氨”路线的能耗和碳排放都远远高于“煤→氢→合成氨”和“天然气→氢→合成氨”。

如图12所示, 市电制氢合成氨全流程的碳排放强度与区域电网的供电碳排放强度有极大的关联性。值得注意的是, 以水电为主的四川电力在制氢合成氨这

表 6 市电制氢合成氨全生命周期碳排放及化石能量损失清单(全国平均电力)

Table 6 Inventory of life-cycle CO₂ emissions and fossil energy losses from hydrogen to ammonia production by utility power (national average electricity)

阶段	碳排放 (kg CO ₂ /kg NH ₃)	能量损失 (MJ/kg NH ₃)	净效率 (%)
电解水制氢反应	5.755	40.573	34.3
氢气压缩	0.344	3.690	91.5
空冷制氮	0.083	0.890	NA
合成氨工艺	0.202	2.164	82.9
共计	6.384	47.317	27.3

条技术路线上展现了极大的优势, 其碳排放甚至低于捕集80%二氧化碳后的天然气制氨路线. 通过改变区域电网的发电组成机构实现电网的清洁脱碳, 可以从

源头实现制氢合成氨路线的低碳排放.

4.4 可再生电力制氢合成氨碳足迹分析

风电制氢合成氨、光伏制氢合成氨的碳足迹阶梯图如图14所示. 光伏、风电电解制氢合成氨全生命周期二氧化碳排放分别为0.569和0.335 kg CO₂/kg NH₃. 表7和表8分别给出了电解水制氢合成氨全生命周期的碳排放和化石能量损失清单. 光伏电解水制氢合成氨与风电制氢合成氨路线的碳排放差异来自于光伏发电和风力发电的电力碳排放因子差异. 光伏发电组件的制备流程中晶硅提纯环节耗能相对较高, 根据组件发电效率和功率不同, 其全生命周期度电碳排放因子可在30~106 g/kW h之间变动^[37]. 一般而言, 组件发电效率越高、功率和装机规模越大, 其度电排放因子越低. 而风力发电的度电碳排放因子一般低于光伏发电, 因装机规模、寿命与发电效率影响在7.1~31.1 g/kW h之间波动^[48].

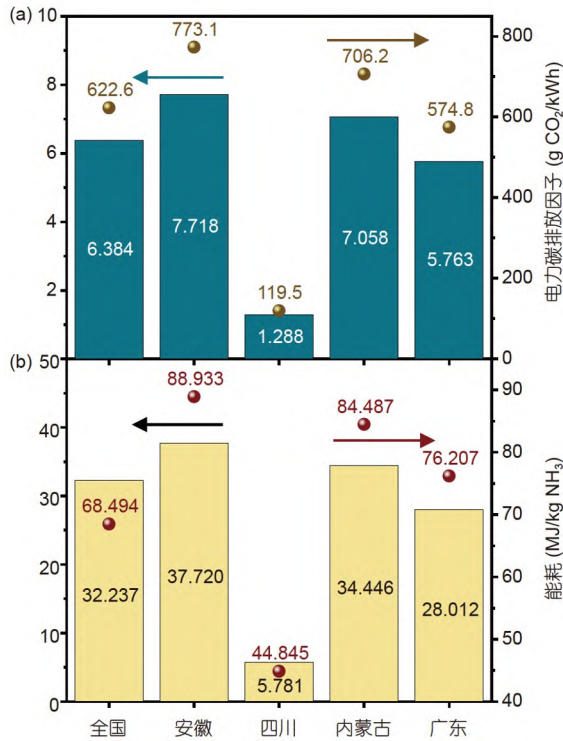


图 12 (网络版彩图)各省份电网制氢合成氨全流程碳排放(a)及能耗(b)

Figure 12 (Color online) CO₂ emissions (a) and energy consumption (b) of the overall process of ammonia production from hydrogen driven by grid electricity in each province.

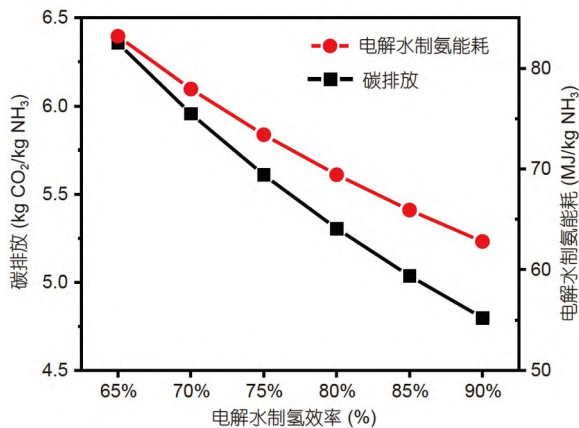


图 13 (网络版彩图)碳排放和电解水制氢能耗随制氢效率的变化

Figure 13 (Color online) Variation of CO₂ emissions and energy consumption for ammonia production from water electrolysis efficiency.

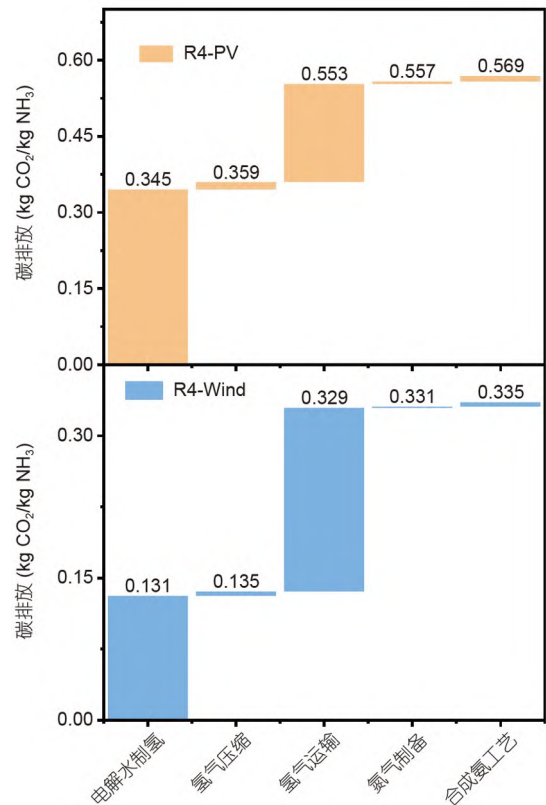


图 14 (网络版彩图)可再生电力制氢合成氨全流程碳排放
Figure 14 (Color online) CO₂ emissions of the overall process of ammonia production from hydrogen driven by renewable electricity.

表 7 光伏电解水制氢合成氨全生命周期碳排放及化石能量损失清单

Table 7 Inventory of life cycle CO₂ emissions and fossil energy losses from ammonia production from hydrogen produced by photovoltaic water electrolysis

阶段	碳排放 (kg CO ₂ /kg NH ₃)	能量损失 (MJ/kg NH ₃)	净效率 (%)
电解水制氢反应	0.345	11.954	72
氢气压缩	0.014	1.387	91.5
氢气运输	0.194	2.665	NA
空冷制氮	0.005	0.048	NA
合成氨工艺	0.011	2.584	82.9
共计	0.569	217.5	7.9

表 8 风电电解水制氢合成氨全生命周期碳排放及化石能量损失清单

Table 8 Inventory of life cycle CO₂ emissions and fossil energy losses from ammonia production from hydrogen driven by electrolysis of water with wind power

阶段	碳排放 (kg CO ₂ /kg NH ₃)	能量损失 (MJ/kg NH ₃)	净效率 (%)
电解水制氢反应	0.130	11.954	72
氢气压缩	0.005	1.387	91.5
氢气运输	0.194	2.665	NA
空冷制氮	0.002	0.048	NA
合成氨工艺	0.004	2.584	82.9
共计	0.335	76.636	19.6

根据“绿氢”标准^[49], 低碳氢与清洁氢的碳排放阈值为分别为14.51和4.9 kg CO₂/kg H₂. 在本场景中, 风电制氢过程和光伏制氢过程碳排放占比约为39%和60%, 单位质量氢制备的碳排放量分别为0.742和1.955 kg CO₂/kg H₂, 符合清洁氢标准, 较于煤制氨和天然气合成氨过程分别降低75.1%~91.9%, 55.6%~85.5%. 未来随着可再生发电装置制备过程低碳化、使用寿命及发电效率的增加, 生命周期碳排放仍有较大进一步下降的空间. 根据统计, 2022年我国累计生产合成氨6096万吨, 假设其中10%未来可由可再生电力电解制氢合成氨过程取代, 则相较于传统煤制氨过程累计可减少2200万吨~2400万吨二氧化碳排放.

4.5 不确定性讨论

由于本研究采用的关键参数如制氢效率等来源于广泛的文献调研和统计数据, 数值范围有一定的差异性, 如表1所示. 因此, 对关键过程参数进行不确定性分析, 假设所有参数同时满足上阈值或者下阈值来对最终的碳排放和生命周期能源效率进行上下阈值

估算.

图15(a)是不同技术路线的碳排放范围图, 图中红色和蓝色的误差棒分别代表使用下阈值和上阈值计算得到的误差范围. 在不结合CCS技术的条件下, R1-w/o CCS路线的碳排放阈值与基准值之间的差异在[+0.250, -0.216] kg CO₂/kg NH₃范围内波动, 而R2-w/o CCS路线则在[+0.360, -0.211] kg CO₂/kg NH₃范围内波动, 由于上下阈值取自文献中报道的数值, 天然气制氢效率之差达20%导致了碳排放较大的波动范围. 采取CCS技术之后, R1-w CCS路线和R2-w CCS路线的碳排放阈值与基准值之间的差异在[+0.210, -0.243] kg CO₂/kg NH₃和[+0.244, -0.180] kg CO₂/kg NH₃范围内波动. 采用电网电力制氢合成氨的路线阈值偏差范围不超过±5%, 而可再生电力由于碳排放的差异性阈值偏差范围最高可达±20%. 例如R4-PV的碳排放阈值与基准值差异在[+0.045, -0.119] kg CO₂/kg NH₃范围之间, 而R4-Wind路线则为[+0.068, -0.057] kg CO₂/kg NH₃范围之间. 图15(b)为采用技术路线的生命周期能源效率范围图, 不同颜色的误差棒与图15(a)代表的意

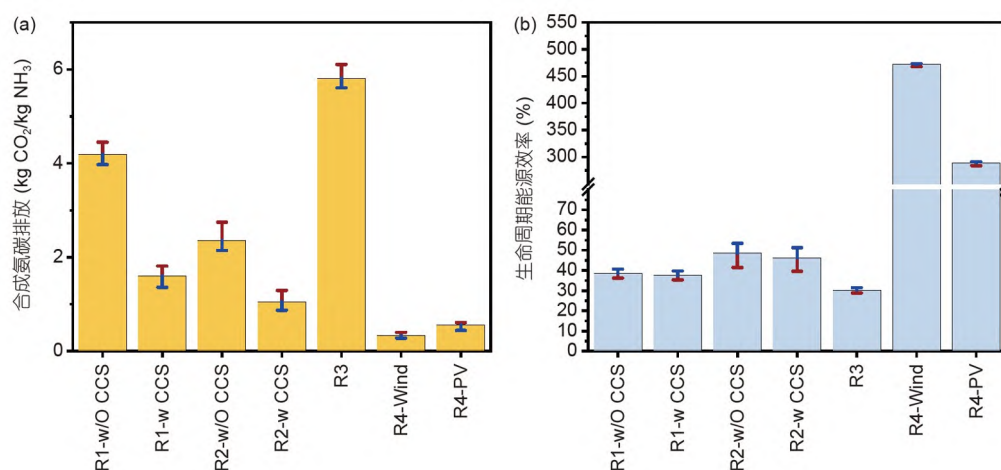


图 15 不同合成氨技术路线的碳排放范围(a)和生命周期能源效率范围(b)

Figure 15 CO₂ emission range (a) and life cycle energy efficiency range (b) for different ammonia production pathways.

义相同。所有技术路线的生命周期能源效率的阈值与基准值之间的差异小于6.7%。其中, 可再生制氢合成氨路线R4-Wind和R4-PV路线的生命周期能源效率均高于289.3%, 展现了极高的可持续性和环境友好性。而R1-w CCS与R2-w CCS技术路线即便在所有参数同时满足上阈值的条件下, 其生命周期能源效率难以超越50%。

5 结论与展望

本文基于原料开采、运输、制氢及氨合成等细分阶段的相关数据, 建立符合我国国情的全生命周期一次能源消耗和碳足迹评价模型, 通过该模型核算并评价了煤制氨、天然气制氨、市电制氨及可再生电力制氢合成氨四种技术路线的碳排放及生命周期能源效率, 并对关键环节进行工艺改进情景分析和可持续性比较, 确定技术发展改进方向及定量优化, 最终得到以下结论。

从全生命周期能源效率和碳排放角度, 市电制氢合成氨过程具有最高的碳排放和化石能源消耗, 其次是煤制氨和天然气制氨过程, 而可再生制氢合成氨过程具有最低的碳排放和化石能源消耗。因此, 前三者均属于高耗能、高排放的合成氨路线。

在煤制氨和天然气制氨路线中, 通过热化学方式制备氢气均为碳排放和能耗最高的细分过程。结合CCS技术可有效降低55.4%~61.8%的二氧化碳排放,

但会增加额外的碳捕集能耗, 使电网隐含碳排放升高。生命周期能源效率在不结合CCS技术时分别为38.5%和48.5%, 不利于氨能源的可持续性发展。

在市电电解制氢合成氨路线中, 以全国平均电力为输入的合成氨碳排放达到了6.384 kg CO₂/kg NH₃, 生命周期能源效率仅为30.3%, 电力结构对全生命周期碳排放和能耗均起到决定性的作用。对比了安徽、四川、内蒙古和广东四个不同电力结构组成的省份发展市电制氢合成氨的潜能, 其中仅有四川省合成氨全生命周期碳排放低于目前化石能源制氨的碳排放, 仅为1.288 kg CO₂/kg NH₃, 主要归功于其电网中84.98%比例的清洁水电。

以光伏、风电为制氢、氢气压缩及合成氨工艺的输入电力, 合成氨的全生命周期碳排放分别为0.340和0.569 kg CO₂/kg NH₃, 生命周期能源效率分别为291.4%和471.8%, 单位质量产品氨的化石能源消耗量分别仅为6.576和3.992 MJ/kg。发展可再生能源电解水合成氨技术是节能减排的重要路线, 也是氨能源达到可持续性发展的主要手段。

综合来看, 目前在以煤或天然气为原料合成氨的路线中, 提高化石能源制氢效率或结合碳捕集技术均有助于降低合成氨过程的碳排放, 但会不可避免地降低生命周期能源效率, 不利于氨能源的可持续性发展。此外, 碳捕集技术的应用都会不可避免地带来成本增加、工序复杂的挑战。可再生电力制氢合成氨路线在降低碳排放和减少化石能源消耗方面均具有优势, 是

大规模低碳氨合成的主要发展方向。未来随着可再生能源电解制氢及氢气储运技术的成熟化、安全化和标

准化, 合成氨过程将实现超低碳排放, 有望实现跨季广域的大规模储能应用。

补充材料

本文的补充材料见techcn.scichina.com。补充材料为作者提供的原始数据, 作者对其学术质量和内容负责。

参考文献

- 1 China Electricity Council. China Electric Power Statistics Yearbook 2021 (in Chinese). Beijing: China Statistics Press, 2021 [中国电力企业联合会. 中国电力统计年鉴2021. 北京: 中国统计出版社, 2021]
- 2 BP Statistical Review of World Energy 2022. https://www.bp.com.cn/content/dam/bp/country-sites/zh_cn/china/home/reports/statistical-review-of-world-energy/2022/bp-stats-review-2022-full-report_zh_resized.pdf
- 3 KPMG China. Carbon Sequestration, Hydrogen Storage, Shipping Fuels, Blended Power Generation—Green Ammonia Industry Overview and Outlook (in Chinese). 2022 [毕马威中国. 固碳、储氢、航运燃料、掺混发电: 绿氨行业未来应用场景展望. 2022]. <https://assets.kpmg.com/content/dam/kpmg/cn/pdf/zh/2022/12/overview-and-prospect-of-green-ammonia-industry.pdf>
- 4 Domestic ammonia market overview (in Chinese). Beijing: Chinese Nitrogen Fertilizer Industry Association [国内氨市场概况. 北京: 中国氮肥工业协会]. <http://www.cnfia.com.cn/cn/index.html>
- 5 Yu Z. Analysis of technology economy of intermittent fixed bed gasification (in Chinese). Nitro Fert Tech, 2019, 40: 1–6 [于子方. 间歇式固定床气化技术经济分析. 氮肥技术, 2019, 40: 1–6]
- 6 Zhao F, Fan Y, Zhang S, et al. Exploring pathways to deep de-carbonization and the associated environmental impact in China's ammonia industry. *Environ Res Lett*, 2022, 17: 045029
- 7 Carbon Capture, Utilisation and Storage: The Opportunity in Southeast Asia 2021. International Energy Agency. <https://www.iea.org/reports/southeast-asia-energy-outlook-2022>
- 8 Sinopec. Public Notice of Environmental Protection Acceptance for the Completion of Carbon Dioxide Recycling Project of SINOPEC Qilu Petrochemical Company. 2022. http://qlsh.sinopec.com/qlsh/news/com_notice/20220920/news_20220920_305540345353.shtml
- 9 Al-Breiki M, Bicer Y. Comparative life cycle assessment of sustainable energy carriers including production, storage, overseas transport and utilization. *J Cleaner Prod*, 2021, 279: 123481
- 10 Ozawa A, Kudoh Y, Kitagawa N, et al. Life cycle CO₂ emissions from power generation using hydrogen energy carriers. *Int J Hydrogen Energy*, 2019, 44: 11219–11232
- 11 Liu H, Lin W. Energy efficiency and carbon emission analysis of hydrogen transportation chain based on liquid hydrogen and ammonia (in Chinese). *Prog Chem Eng*, 2023, 42: 1–8 [刘洪茹, 林文胜. 基于液氢和氨的氢运输链能效和碳排放分析. 化工进展, 2023, 42: 1–8]
- 12 Zhang Y, Liu H, Li J, et al. Life cycle assessment of ammonia synthesis in China. *Int J Life Cycle Assess*, 2022, 27: 50–61
- 13 Argonne National Laboratory Anl A I U S. GREET. 2022. <https://greet.anl.gov/>
- 14 Ou X, Zhang X. Life-cycle fossil energy consumption and carbon intensity analysis of end-use energy in China (in Chinese). *China Soft Science Supplement*. 2009, S2: 208–214 [欧训民, 张希良. 中国终端能源的全生命周期化石能耗及碳强度分析. 中国软科学, 2009, S2: 208–214]
- 15 China Machinery Industry Federation, Technical Committee for Standardization of Gas Separation and Liquefaction Equipment of Machinery Industry. Variable pressure adsorption oxygen and nitrogen equipment (in Chinese). Beijing: Machinery Industry Publishing House, 2002: 2002-06-01 [中国机械工业联合会, 全国气体分离与液化设备标准化技术委员会. 变压吸附制氧、制氮设备. 北京: 机械工业出版社, 2002: 2002-06-01]
- 16 Liu X, Elgowainy A, Wang M. Life cycle energy use and greenhouse gas emissions of ammonia production from renewable resources and industrial by-products. *Green Chem*, 2020, 22: 5751–5761
- 17 Chu K, Pan Y. Economic analysis of fixed-bed pressurized continuous gasification as an alternative to UGI. *Coal Chem*, 2018, 46: 5–9
- 18 Lampert D, Cai H, Wang Z, et al. Development of a life cycle inventory of water consumption associated with the production of transportation fuels, 2014. <https://greet.es.anl.gov/publication-water-lca>

- 19 General Administration of Quality Supervision, Inspection and Quarantine of the People's Republic of China. Energy efficiency limit values and energy efficiency levels for water electrolysis hydrogen production systems (in Chinese). Beijing: China Quality Inspection Press, 2015: 2015-12-10 [中华人民共和国国家质量监督检验检疫总局. 水电解制氢系统能效限定值及能效等级. 北京: 中国质量检验出版社]
- 20 Lu C, Wang J, Zhu W, et al. Research progress and energy consumption analysis of hydrogen liquefaction technology (in Chinese). *Cryogenics and Supercon*, 2019, 47: 11–18 [吕翠, 王金阵, 朱伟平, 等. 氢液化技术研究进展及能耗分析. 低温与超导, 2019, 47: 11–18]
- 21 Coal 2021: Analysis and forecast to 2024. International Energy Agency. <https://www.iea.org/reports/coal-2021>
- 22 An energy sector roadmap to carbon neutrality in China. International Energy Agency, 2021. <https://www.iea.org/reports/an-energy-sector-roadmap-to-carbon-neutrality-in-china>
- 23 Xue B, Ma Z, Geng Y, et al. A life cycle co-benefits assessment of wind power in China. *Renew Sustain Energy Rev*, 2015, 41: 338–346
- 24 Shen Z, Ma L, Yang Y, et al. A life cycle assessment of hydropower-silicon-photovoltaic industrial chain in China. *J Cleaner Prod*, 2022, 362: 132411
- 25 Liszka M, Malik T, Manfrida G. Energy and exergy analysis of hydrogen-oriented coal gasification with CO₂ capture. *Energy*, 2012, 45: 142–150
- 26 Midilli A, Kucuk H, Topal M E, et al. A comprehensive review on hydrogen production from coal gasification: Challenges and opportunities. *Int J Hydrogen Energy*, 2021, 46: 25385–25412
- 27 Boretta A, Banik B K. Advances in hydrogen production from natural gas reforming. *Adv Energy Sustain Res*, 2021, 2: 2100097
- 28 Kothari R, Buddhi D, Sawhney R L. Comparison of environmental and economic aspects of various hydrogen production methods. *Renew Sustain Energy Rev*, 2008, 12: 553–563
- 29 Hnát J, Paidar M, Bouzek K. Hydrogen production by electrolysis. In: Iulianelli A, Basile A, eds. *Current Trends and Future Developments on (Bio-) Membranes*. Gliwice: Elsevier, 2020. 91–117
- 30 Kuleshov N V, Kuleshov V N, Dovbysh S A, et al. Development and performances of a 0.5 kW high-pressure alkaline water electrolyser. *Int J Hydrogen Energy*, 2019, 44: 29441–29449
- 31 Brandl P, Bui M, Hallett J P, et al. Beyond 90% capture: Possible, but at what cost? *Int J Greenh Gas Control*, 2021, 105: 103239
- 32 Damen K, Troost M, Faaij A, et al. A comparison of electricity and hydrogen production systems with CO₂ capture and storage. Part A: Review and selection of promising conversion and capture technologies. *Prog Energy Combust Sci*, 2006, 32: 215–246
- 33 Becattini V, Gabrielli P, Antonini C, et al. Carbon dioxide capture, transport and storage supply chains: Optimal economic and environmental performance of infrastructure rollout. *Int J Greenh Gas Control*, 2022, 117: 103635
- 34 Roussanaly S, Ouassou J A, Anantharaman R, et al. Impact of uncertainties on the design and cost of CCS from a waste-to-energy plant. *Front Energy Res*, 2020, 8: 17
- 35 Aspelund A, Jordal K. Gas conditioning—The interface between CO₂ capture and transport. *Int J Greenh Gas Control*, 2007, 1: 343–354
- 36 Peng S, Lu S. Methodological modeling of net carbon emission reductions from CCS-EOR projects (in Chinese). *Oil Gas Field Surf Eng*, 2015, 34: 9–11 [彭松水, 陆诗建. CCS-EOR项目碳净减排量方法学模型. 油气田地面工程, 2015, 34: 9–11]
- 37 Hou G, Sun H, Jiang Z, et al. Life cycle assessment of grid-connected photovoltaic power generation from crystalline silicon solar modules in China. *Appl Energy*, 2016, 164: 882–890
- 38 Muteri V, Cellura M, Curto D, et al. Review on life cycle assessment of solar photovoltaic panels. *Energies*, 2020, 13: 252
- 39 Rabaia M K H, Abdelkareem M A, Sayed E T, et al. Environmental impacts of solar energy systems: A review. *Sci Total Environ*, 2021, 754: 141989
- 40 Wind Energy. Center for Systems Integration and Sustainability. Michigan State University, 2022. <https://www.canr.msu.edu/csis/>
- 41 Ministry of Coal Industry, Ministry of Railway, Ministry of Transportation. Rules for the Implementation of Coal Delivery Measures. Beijing, 1965
- 42 Wu Q, Shen J, Yu L, et al. Analysis of hydrogen-ammonia storage and transportation technology and economy in dual-carbon society (in Chinese). *Oil Gas New Energy*, 2022, 34: 27–33 [吴全, 沈珏新, 余磊, 等. “双碳”背景下氢-氨储运技术与经济性浅析. 油气与新能源, 2022, 34: 27–33]
- 43 Kool A, Marinussen M, Blonk H, et al. LCI data for the calculation tool Feedprint for greenhouse gas emissions of feed production and utilization. 2012. <https://blonksustainability.nl/>
- 44 Li J, Liu L, Li X, et al. A study on the cost and carbon footprint of hydrogen production from coal in China (in Chinese). *China Energy*, 2021, 43: 51–54 [李家全, 刘兰翠, 李小裕, 等. 中国煤炭制氢成本及碳足迹研究. 中国能源, 2021, 43: 51–54]

- 45 Opportunities for hydrogen production with CCUS in China. International Energy Agency, 2021. <https://www.iea.org/reports/opportunities-for-hydrogen-production-with-ccus-in-china>
- 46 Ren K, Zhang T, Tan X, et al. Life cycle assessment of ammonia synthesis based on pulverized coal entrained flow gasification technology in China. *J Cleaner Prod*, 2021, 328: 129658
- 47 Verma A, Kumar A. Life cycle assessment of hydrogen production from underground coal gasification. *Appl Energy*, 2015, 147: 556–568
- 48 Li H, Jiang H D, Dong K Y, et al. A comparative analysis of the life cycle environmental emissions from wind and coal power: Evidence from China. *J Cleaner Prod*, 2020, 248: 119192
- 49 China Industry-University-Research Cooperation Association. Standards and evaluation of low-carbon hydrogen, clean hydrogen and renewable hydrogen (in Chinese). Beijing: China Hydrogen Energy Alliance, 2020 [中国产学研合作协会. 低碳氢、清洁氢及可再生氢标准及评价. 北京: 中国氢能联盟, 2020]

Carbon emission and energy efficiency analysis of ammonia production routes in China from life-cycle perspective and prospects

LIU MengHua^{1,3}, HUANG Xiao², LI Shuang^{1,3}, SHI YiXiang^{1,3},
YU ChaoQing² & CAI NingSheng^{1,3}

¹ Department of Energy and Power Engineering, Tsinghua University, Beijing 100084, China;

² School of Ecology and Environment, Hainan University, Haikou 570228, China;

³ Shanxi Research Institute for Clean Energy, Tsinghua University, Taiyuan 030032, China

The cornerstone of China's dual-carbon goal lies in the decarbonization and cleansing of the energy system. In the future, with wind power, photovoltaic power and other primary energy crowding into the grid, the volatility and intermittency force cross-seasonal wide-area energy storage technology becoming a pressing need. The characteristics of ammonia, such as stability, susceptibility to storage, and integrity of transmission and storage facilities, enable it to become a highly competitive chemical energy storage media, which is promising to break the current hydrogen storage and transportation challenges, and help realize the dual-carbon goal. Little work has been done on the life cycle assessment of ammonia pathway for large-scale application in China, lacking the assessment and analysis of carbon emission and energy efficiency indexes of the whole life cycle of ammonia pathway taking into account the subsections. Aiming at the above opportunities and challenges in the development of ammonia energy storage technology, we establish a life cycle assessment (LCA) integrated model of ammonia production at each major stage, evaluate and analyze the primary energy input and carbon emission of different ammonia production routes during their life cycle by combining with low carbon emission technology. This work identifies the key stages and factors contributing to carbon emissions and proposes technological improvements to reduce them, mainly through accounting for carbon emissions and energy efficiency of four technology routes, namely, ammonia from coal (R1), ammonia from natural gas (R2), ammonia from hydrogen driven by utility power (R3), and ammonia from hydrogen driven by renewable electricity (R4), and sensitivity analyses of the key parameters. It is found that the carbon emissions of the coal-to-ammonia (R1-w/o CCS) and natural gas-to-ammonia (R2-w/o CCS) routes without CCS are as high as 4.190 and 2.356 kg CO₂/kg NH₃, respectively, with the R3 route emitting 6.384, and 0.569 and 0.335 kg CO₂/kg NH₃ for the renewable power hydrogen to ammonia route with photovoltaic power plant (R4-PV) and wind power plant (R4-Wind) as the power inputs, respectively. This work provides a reliable analysis of process improvement scenarios for different ammonia production pathways by defining uniform system boundaries to improve the accuracy and comparability of the model in terms of carbon emissions and energy efficiency throughout the life cycle.

ammonia, life cycle assessment, energy efficiency analysis, energy consumption, CO₂ emissions

doi: [10.1360/SST-2023-0197](https://doi.org/10.1360/SST-2023-0197)