

化工环保
Environmental Protection of Chemical Industry
ISSN 1006-1878, CN 11-2215/X

《化工环保》网络首发论文

题目：煤制合成氨碳足迹核算与减排分析
作者：李淳，孙志辉，黄湘琦，乔宁
收稿日期：2024-02-23
网络首发日期：2024-05-22
引用格式：李淳，孙志辉，黄湘琦，乔宁. 煤制合成氨碳足迹核算与减排分析[J/OL]. 化工环保. <https://link.cnki.net/urlid/11.2215.x.20240521.1645.002>



网络首发：在编辑部工作流程中，稿件从录用到出版要经历录用定稿、排版定稿、整期汇编定稿等阶段。录用定稿指内容已经确定，且通过同行评议、主编终审同意刊用的稿件。排版定稿指录用定稿按照期刊特定版式（包括网络呈现版式）排版后的稿件，可暂不确定出版年、卷、期和页码。整期汇编定稿指出版年、卷、期、页码均已确定的印刷或数字出版的整期汇编稿件。录用定稿网络首发稿件内容必须符合《出版管理条例》和《期刊出版管理规定》的有关规定；学术研究成果具有创新性、科学性和先进性，符合编辑部对刊文的录用要求，不存在学术不端行为及其他侵权行为；稿件内容应基本符合国家有关书刊编辑、出版的技术标准，正确使用和统一规范语言文字、符号、数字、外文字母、法定计量单位及地图标注等。为确保录用定稿网络首发的严肃性，录用定稿一经发布，不得修改论文题目、作者、机构名称和学术内容，只可基于编辑规范进行少量文字的修改。

出版确认：纸质期刊编辑部通过与《中国学术期刊（光盘版）》电子杂志社有限公司签约，在《中国学术期刊（网络版）》出版传播平台上创办与纸质期刊内容一致的网络版，以单篇或整期出版形式，在印刷出版之前刊发论文的录用定稿、排版定稿、整期汇编定稿。因为《中国学术期刊（网络版）》是国家新闻出版广电总局批准的网络连续型出版物（ISSN 2096-4188，CN 11-6037/Z），所以签约期刊的网络版上网络首发论文视为正式出版。

煤制合成氨碳足迹核算与减排分析

李 淳¹, 孙志辉², 黄湘琦², 乔 宁¹

(1. 北京化工大学 材料科学与工程学院, 北京 100029; 2. 方圆标志认证集团有限公司, 北京 100089)

[摘要] 采用生命周期评价方法, 以 1 t 液态合成氨为功能单位, 构建了“从摇篮到大门”的煤制合成氨碳足迹核算模型, 以调研得到的国内煤制合成氨企业生产数据为基础进行了碳足迹核算和减排措施分析。结果表明: 煤制 1 t 液态合成氨产品的碳足迹为 6 204.11 kg CO_{2e}, 其中氨合成阶段由于化学反应造成的 CO₂ 直接排放占生命周期碳足迹的 47.12%, 应作为减排的关注重点; 从提升能源效率、采用负碳技术两方面考虑, 分别采用煤化学链制氢技术和碳捕集技术降低碳排放, 与传统工艺相比, 采用煤化学链制氢技术可使碳足迹降低 27.99%, 采用碳捕集技术可使碳足迹降低 46.36%, 后者的碳减排潜力更大, 应着重发展。

[关键词] 合成氨; 生命周期评价; 碳足迹; 碳减排

[中图分类号] X511

[文献标志码] A

Carbon footprint accounting and emission reduction analysis of coal-based synthetic ammonia

LI Chun¹, SUN Zhihui², HUANG Xiangqi², QIAO Ning¹

(1. College of Materials Science and Engineering, Beijing University of Chemical Technology, Beijing 100029, China;

2. China Quality Mark Certification Group, Beijing 100089, China)

Abstract: By means of the life cycle assessment, a “cradle-to-gate” accounting model of coal-based synthetic ammonia carbon footprint was constructed with 1 t liquid ammonia as the functional unit, to account carbon footprint and analyze emission reduction measures based on the production data of domestic coal-based synthetic ammonia enterprises. The results show that the carbon footprint of 1 t liquid ammonia product made from coal is 6 204.11 kg CO_{2e}, with direct CO₂ emission caused by chemical reaction in the ammonia synthesis stage accounting for 47.12% of that in the life cycle, which should be the focus of emission reduction; Considering improving energy efficiency and utilizing negative carbon technologies, the coal-fueled chemical looping technology for hydrogen production and carbon capture technology are adopted respectively to reduce carbon emissions. Compared with traditional processes, the carbon footprint can be reduced by 27.99% by using coal-fueled chemical looping technology for hydrogen technology, and by 46.36% by using carbon capture technology. The latter has greater potential for carbon emission reduction and should be developed emphatically.

Key words: synthetic ammonia; life cycle assessment; carbon footprint; carbon emission reduction

习近平主席在第七十五届联合国大会上提出: 中国二氧化碳排放力争于 2030 年前达到峰值, 努力争取 2060 年前实现碳中和。化工行业作为八大重点碳排放行业之一, 低碳发展已成为化工行业的责任和义务^[1]。合成氨作为一种重要的化工产品, 仅 2022 年国内产量就达 67.60 Mt^[2]。合成氨生产还伴有大量的能源消耗以及二氧化碳排放^[3]。因此, 开展合成氨的碳足迹研究, 寻求可行的碳减排路径, 已成为当务之急。国外关于合成氨碳足迹的研究开展较早, 如 BOERO 等^[4]和 LEE 等^[5]对比了天然气与电解水制合成氨的碳足迹, 得出了电解水制合成氨技术的碳排放较小的结论。但这些合成氨研究的能源以天然气、电为

[收稿日期] 2024-02-23; **[修订日期]** 2024-05-05。

[作者简介] 李淳 (1997—), 男, 北京市人, 硕士生, 电邮 1692646070@qq.com。通信作者: 乔宁, 电邮 Buctqiaoning@126.com。

主，与国内以煤为主的合成氨产业能源结构不同，这导致国外合成氨碳足迹研究工作的侧重点与国内实际情况差距较大，研究结果无法直接应用于国内企业。当前国内合成氨碳足迹核算研究较少，相关工作大多集中在能源效率^[6]、环境负荷^[7]和经济效益评价分析^[8]上。陈芝^[9]虽然开展了对煤制合成氨的碳足迹评价，但其工作主要集中在对水煤浆固体废弃物处置的评价上，未从生命周期角度对碳减排工作做进一步研究。

本工作以调研得到的国内煤制合成氨企业生产数据为基础，采用生命周期评价方法，建立了煤制合成氨碳足迹核算模型，核算了碳足迹，提出了合成氨产业的碳减排策略，预测分析了相关技术的碳减排潜力，助力合成氨行业的低碳发展。

1 核算目标与范围

采用生命周期评价方法，以 1 t 液态合成氨为功能单位，评价了煤制合成氨的碳足迹。系统边界为“摇篮到大门”，即涵盖了原材料和能源生产、运输以及产品生产过程。煤制合成氨的生命周期过程可划分为煤开采、煤运输、热力生产、氨合成、氨液化 5 个阶段。氨合成阶段是将原料煤进入粉碎机到氨出氨分离器作为一个整体研究。在氨合成阶段产生的滤饼及硫化氢为具有一定价值的废料，根据污染者付费原则^[10]，其处理过程不在系统边界内。煤制合成氨碳足迹评价系统边界如图 1 所示。

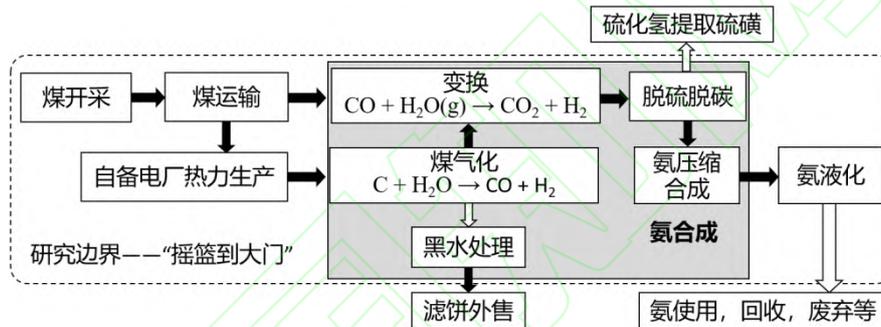


图 1 煤制合成氨碳足迹评价系统边界

2 碳足迹核算

2.1 核算方法

本研究中合成氨的碳足迹为 5 个阶段碳足迹之和。各阶段碳足迹可通过各阶段的初级活动水平数据与相对应的排放因子和全球增温潜能值相乘获得。产品碳足迹核算方法见式 (1) 和式 (2)。

$$E_{\text{煤制合成氨}} = E_{\text{煤开采}} + E_{\text{煤运输}} + E_{\text{热力生产}} + E_{\text{氨合成}} + E_{\text{氨液化}} \quad (1)$$

$$E = \sum_{i=1}^n M_i \times f_i \times GWP_i \quad (2)$$

式中： E 为合成氨各阶段的碳足迹， $\text{kg CO}_2\text{e}$ ； M 为各阶段初级活动水平数据，具体指各阶段的能源物料消耗、废气排放以及废弃物的排放处置量等； f 为排放因子，取自 Ecoinvent 数据库； GWP 为全球增温潜能值，来自于联合国政府间气候变化专门委员会 (IPCC) 方法。

2.2 清单分析

生产过程中的基础数据主要来源于国内相关煤制合成氨企业的实地调研，结合相关公开文献和数据库，根据划定的系统边界对初级活动水平数据进行收集。

2.2.1 煤开采

煤开采过程的清单数据取自 Ecoinvent 数据库。

2.2.2 煤运输

我国煤炭的主要运输方式为铁路运输。运输距离依据相关文献调研取 651 km ^[11]。结合 Ecoinvent 数据库整理得到该阶段清单数据。

2.2.3 热力生产

煤制合成氨过程虽为放热反应，但由于反应放热量不能完全满足工业所需的高品质热蒸汽的需求，因此仍需烧煤来补充热量。企业内部通常设有自备电厂，燃煤经过破碎处理后送往各锅炉，锅炉得到的热蒸汽不仅可用于生产，还可带动汽轮机发电。热力生产阶段数据取自相关企业生产数据，过程中煤、柴油燃烧以及石灰石热解产生的 CO₂ 依据国家相关标准进行估算得到^[12-13]，每生产 1 GJ 热蒸汽由于化石燃料燃烧产生 140.76 kg CO₂，石灰石热解产生 2.08 kg CO₂。整理得到该阶段清单数据。

2.2.4 氨合成

氨合成过程主要消耗煤、水、电力、热蒸汽、天然气、甲醇等。过程中由于化学反应以及火炬燃烧产生的 CO₂ 可依据国家相关标准进行估算得到^[13]，每生产 1 t 合成氨由于化学反应产生 2 892.82 kg CO₂，由于火炬燃烧产生 90.89 kg CO₂。整理得到该阶段清单数据。

2.2.5 氨液化

氨液化的碳排放源主要为压缩机、冷凝器、膨胀阀的电耗，参考相关文献可知 1 t 合成氨气液化消耗电力约 5.78 kW·h^[14]。

煤制合成氨生命周期各阶段清单如表 1 所示，各种排放源的排放因子如表 2 所示，各温室气体的全球增温潜能值如表 3 所示。

表 1 煤制合成氨生命周期各阶段清单

| 阶段 | 物质能量输入 | | | 物质能量输出 | | |
|------|--------|----------|----------------|------------------|----------|------|
| | 名称 | 数量 | 单位 | 名称 | 数量 | 单位 |
| 煤开采 | 煤矿 | 2 172.99 | kg | 煤 | 1 954.22 | kg |
| | 水 | 863.77 | kg | CO ₂ | 26.06 | kg |
| | 电力 | 83.05 | kW·h | CH ₄ | 25.65 | kg |
| | 热力 | 209.10 | MJ | N ₂ O | 1.35 | g |
| 煤运输 | 柴油 | 0.86 | kg | CO ₂ | 2.71 | kg |
| | 电力 | 37.66 | kW·h | CH ₄ | 0.11 | g |
| | | | | N ₂ O | 0.09 | g |
| 热力生产 | 煤 | 417.07 | kg | 电力 | 130.77 | kW·h |
| | 柴油 | 0.10 | kg | 热力 | 5 178.50 | MJ |
| | 石灰石 | 27.24 | kg | CO ₂ | 739.72 | kg |
| 氨合成 | 煤 | 1 537.15 | kg | 合成氨 | 1.00 | t |
| | 水 | 6 867.38 | kg | CO ₂ | 2 983.71 | kg |
| | 热力 | 5 178.50 | MJ | 滤饼 | 82.47 | kg |
| | 电力 | 1 754.51 | kW·h | | | |
| | 天然气 | 42.04 | m ³ | | | |
| 氨液化 | 甲醇 | 1.75 | kg | | | |
| | 氨气 | 1.00 | t | 液氨 | 1.00 | t |
| | 电力 | 5.78 | kW·h | | | |

表 2 各种排放源的排放因子

| 排放源 | 数值 | 单位 |
|-----|------|-------------------------------------|
| 柴油 | 0.75 | kg CO ₂ e/kg |
| 电力 | 0.94 | kg CO ₂ e/(kW·h) |
| 天然气 | 0.32 | kg CO ₂ e/m ³ |
| 甲醇 | 0.70 | kg CO ₂ e/kg |
| 水 | 1.01 | kg CO ₂ e/t |
| 热力 | 0.13 | kg CO ₂ e/MJ |

表 3 IPCC 中各温室气体的全球增温潜能值

| 温室气体 | 全球增温潜能值 |
|-----------------|---------|
| CO ₂ | 1 |

| | |
|------------------|------|
| CH ₄ | 29.8 |
| N ₂ O | 273 |

3 影响评价

根据核算方法和生命周期清单，使用 Simapro 软件计算得到生产 1 t 液态合成氨的碳足迹为 6 204.11 kg CO₂e，各阶段分布如图 2 所示，其中氨合成阶段碳足迹占比最高。

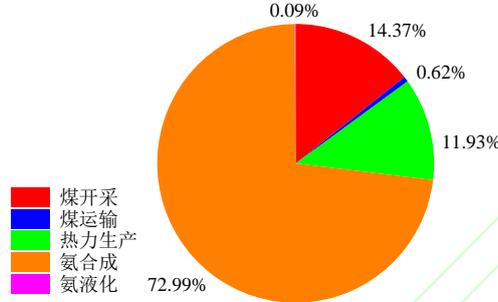


图 2 煤制合成氨生命周期各阶段的碳足迹占比

对占比较大的煤开采、热力生产、氨合成阶段进行了贡献分析，结果如图 3 所示。在煤开采阶段中煤层气逸散造成的直接排放最大。在热力生产阶段中煤燃烧产生 CO₂ 造成的碳排放影响最大。在氨合成阶段中化学反应产生 CO₂ 造成的碳排放最大，占生命周期碳足迹的 47.12%。这主要有两方面原因：一是煤气化过程需要较高的温度，部分煤作为燃料提供了反应所需的温度，致使能源使用效率不高；二是 CO₂ 产生后若后续没有相关使用场景（如硝酸生产企业），可能会做放空处理。综上，降低部分碳排放可以从提升能源效率和采用负碳技术两方面入手。

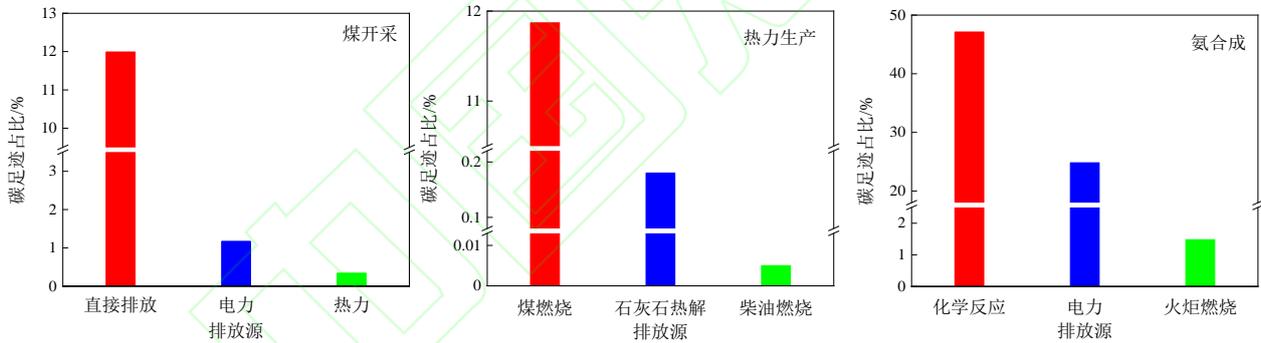


图 3 不同阶段中的碳足迹占比

4 减排措施

当前的碳减排技术集中在提升能源效率和采用负碳技术两方面^[15]。在合成氨产业中，具有影响力的碳减排技术主要有化学链制氢技术以及碳捕集技术。

4.1 化学链制氢技术

化学链制氢技术可以提升煤制氢过程的能源效率，用燃料反应器中还原出的低价态氧化物 MeO_{x-1} 或单质 Me，还原蒸汽反应器中的水蒸气获得氢气。煤化学链制氢制合成氨碳足迹评价系统边界如图 4 所示，生命周期分为煤开采、煤运输、热力生产、化学链制氢氨合成、氨液化 5 个阶段。参考相关文献可知，煤化学链的产氢效率可达 77.2%^[16]。燃煤锅炉热力生产阶段清单如表 4 所示，化学链制氢氨合成阶段清单如表 5 所示。

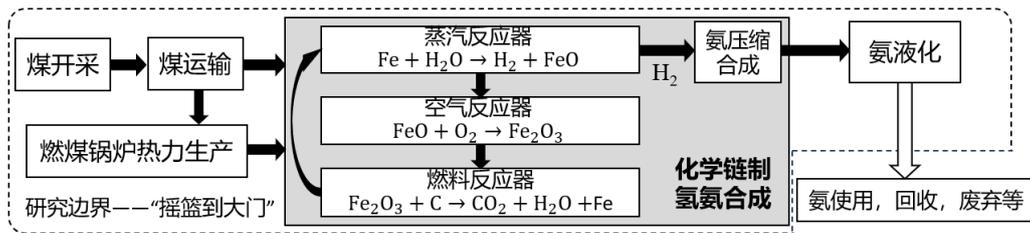


图4 煤化学链制氢制合成氨碳足迹评价系统边界

表4 燃煤锅炉热力生产阶段清单

| 物质能量输入 | | | 物质能量输出 | | |
|--------|--------|--------|-----------------|----------|----|
| 名称 | 数量 | 单位 | 名称 | 数量 | 单位 |
| 煤 | 174.85 | kg | 热蒸汽 | 2 946.89 | MJ |
| 电力 | 4.75 | kW · h | CO ₂ | 305.48 | kg |

表5 化学链制氢氨合成阶段清单

| 物质能量输入 | | | 物质能量输出 | | |
|--------|----------|--------|-----------------|----------|----|
| 名称 | 数量 | 单位 | 名称 | 数量 | 单位 |
| 煤 | 1 657.47 | kg | 合成氨 | 1.00 | t |
| 水 | 1 588.23 | kg | CO ₂ | 3 119.25 | kg |
| 热蒸汽 | 2 946.89 | MJ | 滤饼 | 88.93 | kg |
| 电力 | 148.96 | kW · h | | | |

4.2 碳捕集技术

碳捕集技术可将合成氨生产过程中排放的大量高浓度 CO₂ 经由碳捕集过程进行收集出售，以降低生产中的 CO₂ 直接排放。捕集后的液态 CO₂ 具有一定的经济价值，根据污染者付费原则其后续使用处理过程不计入系统边界。煤制合成氨（碳捕集）碳足迹评价系统边界如图 5 所示，生命周期分为煤开采、煤运输、热力生产、氨合成、氨液化、碳捕集 6 个阶段。碳捕集采用当前最成熟的化学吸收法，碳捕集率取 90%，过程能耗物耗等参数参考相关文献^[17-18]。碳捕集阶段清单如表 6 所示。

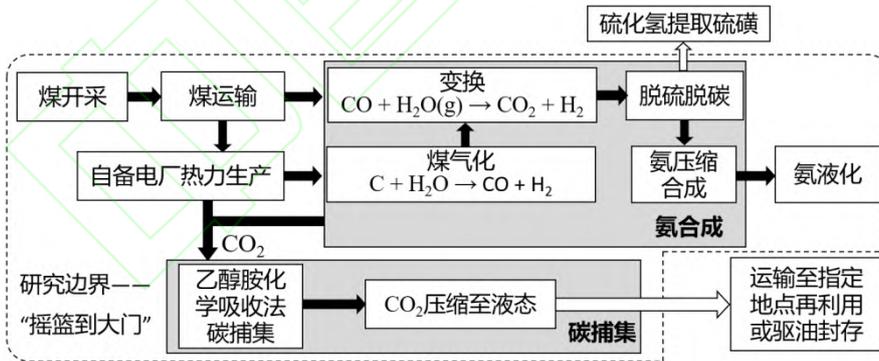


图5 煤制合成氨（碳捕集）碳足迹评价系统边界

表6 碳捕集阶段清单

| 物质能量输入 | | | 物质能量输出 | | |
|-----------------|----------|--------|--------------------|----------|----|
| 名称 | 数量 | 单位 | 名称 | 数量 | 单位 |
| CO ₂ | 3 640.37 | kg | 液态 CO ₂ | 3 640.37 | kg |
| 乙醇胺 | 1.72 | kg | | | |
| NaOH | 0.10 | kg | | | |
| 活性炭 | 0.04 | kg | | | |
| 热能 | 2.99 | GJ | | | |
| 电力（捕集） | 74.43 | kW · h | | | |
| 电力（压缩） | 268.54 | kW · h | | | |

4.3 减排效果

根据生命周期清单, 使用 Simapro 软件计算得到, 采用煤化学链制氢技术生产 1 t 液态合成氨的碳足迹为 4 467.57 kg CO₂e; 经过碳捕集技术改造后, 以煤为原料生产 1 t 液态合成氨的碳足迹为 3 327.72 kg CO₂e。将传统煤制合成氨技术与两种碳减排技术进行对比分析, 结果如图 6 所示。

与传统的煤制合成氨技术相比, 采用煤化学链制氢技术可使碳足迹降低 27.99%。该技术通过提高煤制氢效率来降低煤炭消耗量, 从而有效降低由煤炭使用引起的氨合成阶段的碳足迹。采用碳捕集技术可使碳足迹降低 46.36%。该技术能显著降低热力生产和氨合成阶段的 CO₂ 直接排放, 从而有效降低合成氨的碳足迹。将两种技术进行比较, 碳捕集技术可以带来更大的碳减排量, 尤其体现在氨合成阶段中。若两种技术同时采用, 还可以进一步增加碳减排效益。

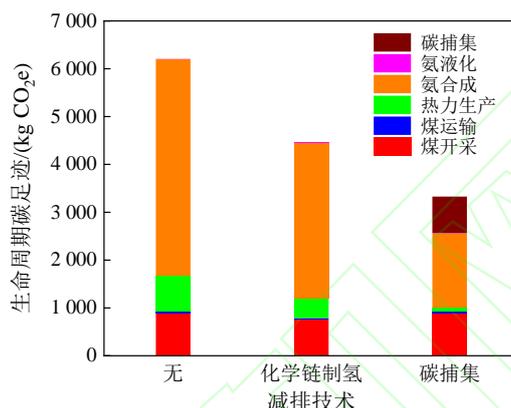


图 6 减排技术下煤制合成氨生命周期各阶段的碳足迹分布

5 结论

a) 根据调研国内相关企业数据及文献数据计算得出, 煤制 1 t 液态合成氨产品的碳足迹为 6 204.11 kg CO₂e, 其中氨合成阶段由于化学反应造成的直接碳排放占生命周期碳足迹的 47.12%, 应作为减排的关注重点。

b) 从提升能源效率和采用负碳技术两方面进行碳减排研究, 可分别采用煤化学链制氢技术和碳捕集技术降低碳排放。与传统的煤制合成氨工艺相比, 采用煤化学链制氢技术可使碳足迹降低 27.99%, 采用碳捕集技术可使碳足迹降低 46.36%, 后者可降低更多碳足迹。

参 考 文 献

- [1] 陈广卫, 张志智. 对二甲苯产品的碳足迹与减排措施[J]. 化工环保, 2021, 41(6): 774-778.
- [2] 李建华, 黄二梅. 双碳背景下合成氨的发展研究[J]. 现代化工, 2023, 43(9): 16-19, 23.
- [3] 马帅, 贺巧霞, 王森, 等. 合成氨生产过程的节能降耗分析[J]. 工业 A, 2023(9): 41-44.
- [4] BOERO A J, KARDUX K, KOVALEVA M, et al. Environmental life cycle assessment of ammonia-based electricity[J]. Energies, 2021, 14(20): 6721.
- [5] LEE K, LIU X Y, VYAWAHARE P, et al. Techno-economic performances and life cycle greenhouse gas emissions of various ammonia production pathways including conventional, carbon-capturing, nuclear-powered, and renewable production[J]. Green Chem, 2022, 24(12): 4830-4844.
- [6] ZHU R F, WANG Z H, HE Y, et al. LCA comparison analysis for two types of H₂ carriers: methanol and ammonia[J]. Int J Energy Res, 2022, 46(9): 11818-11833.
- [7] ZHANG Y L, LIU H, LI J J, et al. Life cycle assessment of ammonia synthesis in China[J]. Int J Life Cycle Assess, 2022, 27(1): 50-61.

- [8] ZANG G Y, SUN P P, ELGOWAINY A, et al. Technoeconomic and life cycle analysis of synthetic methanol production from hydrogen and industrial byproduct CO₂[J]. *Environ Sci Technol*, 2021, 55(8): 5248-5257.
- [9] 陈芝. 固废水煤浆成浆、燃烧、气化特性研究及其应用的生命周期评价[D]. 杭州: 浙江大学, 2021.
- [10] 徐峰. 谁之责任, 何种义务?——“污染者付费原则”的思与辩[J]. *自然辩证法研究*, 2014, 30(8): 75-80.
- [11] 罗仁英. 煤制氢气生命周期碳足迹研究[D]. 北京: 中国石油大学, 2020.
- [12] 中华人民共和国国家发展和改革委员会. 中国发电企业温室气体排放核算方法与报告指南(试行)[EB/OL]. (2013-11-01) [2024-05-05]. https://www.ndrc.gov.cn/xxgk/zcfb/tz/201311/t20131101_963960.html.
- [13] 中华人民共和国国家发展和改革委员会. 中国化工生产企业温室气体排放核算方法与报告指南(试行)[EB/OL]. (2013-11-01) [2024-05-05]. https://www.ndrc.gov.cn/xxgk/zcfb/tz/201311/t20131101_963960.html.
- [14] 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[J]. *油气与新能源*, 2022, 34(5): 27-33, 39.
- [15] 刘萍, 杨卫华, 张建, 等. 碳中和目标下的减排技术研究进展[J]. *现代化工*, 2021, 41(6): 6-10.
- [16] ZENG L, HE F, LI F X, et al. Coal-Direct chemical looping gasification for hydrogen production: reactor modeling and process simulation[J]. *Energy Fuels*, 2012, 26(6): 3680-3690.
- [17] 吴佳阳. 燃烧后二氧化碳捕集系统的全生命周期环境评价[D]. 杭州: 浙江大学, 2019.
- [18] 熊波, 陈健, 李克兵, 等. 工业排放气二氧化碳捕集与利用技术进展[J]. *低碳化学与化工*, 2023, 48(1): 9-18.

(编辑 魏京华)