

绿氢驱动下新型低压氨合成反应器关键技术及过程经济性分析

张栋玮

蓝魔法绿色能源科技（南京）有限公司

摘要：本文主要针对绿氢驱动新型低压氨合成反应器的关键技术与过程经济性进行论述。首先介绍绿氢技术，包括绿氢定义、制备方法及其在氨合成中的广泛应用；其次介绍新型低压 NH_3 合成反应器的设计，包括设计原理、材料选取、压力对反应器的各方面影响等；接着重点对催化剂的研制及优化、反应动力学和热力学等方面进行技术攻关；然后介绍模拟软件的选定和应用的过程参数的优化。接着对绿氢及氨合成过程进行环评，包括碳足迹分析、持续性分析及环境效益评估等；然后对成本、投资回报率、市场竞争力及政策影响方面进行经济性分析。

关键词：绿氢；低压氨合成；反应器设计；催化剂开发；经济性分析

一、绿氢技术概述

1.1 绿氢的定义与生产方法

绿氢顾名思义是指使用可再生能源（如风能、太阳能等）生产的电力用于电解水制氢，因不产生碳排放而称绿氢。生产技术分为碱性电解水制氢、质子交换膜电解水制氢、固体氧化物电解水制氢等主要技术，各有优缺点，适用于不同场景、不同规模，有助于绿氢产业发展。

1.2 绿氢在氨合成中的应用前景

随着世界各国对清洁能源的不断需求，绿氢被广泛应用于氨合成中，作为零碳排放的清洁能源燃料，不仅能够取代化石燃料减少氨合成生产的碳排放，还能对整个化工产业实现绿色发展，尤其是低压氨合成的绿色，可以有效降低反应条件，节约能耗，降低生产成本，提升氨产品的竞争力。同时绿氢技术的发展和制备成本的降低，将会进一步拓展绿色氨合成的广度和深度，对低碳环保的化工生产系统的建立具有重要意义。

二、新型低压氨合成反应器设计

2.1 反应器设计原则与材料选择

关于反应器设计原则，第一，要确保反应器符合低压氨合成工艺特殊的要求，例如反应器的密封性要好，不能在高压的条件下泄露气体分子，对反应的进程和安全性产生影响。第二，要对反应器的结构进行改进，确保反应器能够充分实现热量传递以及物质传递的作用，让反应在均匀的温度以及浓度状态下进行，确保反应效率和合成氨产率。第三，还要考虑对反应器的操作、维护问题进行设计，便于操作、检查和更换催化剂。

在材料选择的过程中，由于绿氢参与低压氨合成的反应，可能会形成一定的腐蚀环境，因此需要选择不易腐蚀的材料。

比如不锈钢材料，不易腐蚀，可以让反应器保持长期使用，不会发生腐蚀损坏。在一些比较特殊的位置，比如反应器的内衬选陶瓷材料，陶瓷具备耐腐蚀的特点，而且耐磨性非常好，耐高温，能够适应反应过程可能出现的高压高温环境。此外，在选择材料的过程中还需要考虑到材料本身的强度和韧性等力学性能，确保反应器在内部压力和外部载荷下能够具备良好的结构和安全性能。

2.2 低压操作对反应器性能的影响

低压操作是新型低压氨合成反应器中的核心要点，低压操作对反应器有着较多的影响。首先，低压操作可减少反应器反应能耗的损耗，低压操作条件下气体分子运动缓慢，低压操作相对于高压操作可以降低因碰撞产生的损耗。其次，低压操作对反应器的结构提出了要求，要在保证反应器的强度和密封性的基础上，使反应器内部的流场分布更合理，有利于低压条件下反应物反应过程充分混和。最后，低压操作对反应器的传热也有一定的影响，要控制反应器的传热能力，防止因反应器内部过高温度导致反应器失活或者反应器损坏，合理设计反应器结构和操作条件，有利于反应器低压操作的优势，提高反应器的性能，提高反应器的稳定性。

三、关键技术研究

3.1 催化剂的开发与优化

催化剂是新型低压氨合成反应器中的核心，决定着反应效率和反应稳定性。对于催化剂的研究主要从活性、选择性、耐久性方面着手。从活性角度出发主要是从纳米结构、活性组分负载等方面出发，有效提高低压条件下活性，促使活化能被有效降低。从选择性角度出发主要是从氨合成反应催化剂的表面活性位点的分布、电子分布等方面出发，有效减少副产物的产生。从耐久性角度出发主要是从高温、高压条件

下催化剂抗烧结、抗中毒角度出发,利用稳定剂或是包覆等方法延长催化剂的使用寿命,有效提高催化剂的活性。对催化剂制备工艺进行改善,可以使用共沉淀法、溶胶-凝胶制备法等方法,将催化剂中活性组分的高比表面积进行分布。

在催化剂优化方面,建立从实验室小试放大到工业应用完整的考核评价机制等等,运用高通量筛选加快催化剂的开发,利用机器学习加快预测催化剂性能,在催化剂的研发方面,研发不同原料气组分不同反应条件自适应的智慧化的催化剂,通过控制活性组分分布来控制催化剂的反应性能在线控制,要注重催化剂的再生技术开发,研发高效率低成本再生技术进一步降低催化剂的使用成本,降低催化剂全氨合成的成本。

在催化剂的研发过程中,科学家也在进行各种各样的研发,如使用层原子沉积的方法将活性组分单层扩散,使用缺陷工程的方法改变载体表面的电子状态,低温下同时提高活性组分的活性和积炭的能力;或针对新能源的重复性,研究出能适应各种恶劣环境的催化剂,采用核壳达到抗硫中毒,催化活化的目的。在催化物的回收利用方面,采用等离子体非热再生的方法可以实现低温情况下催化剂表面碳沉积消除而不经高温焙烧,避免活性组分的烧结。

产业化应用研发模块化催化剂制备装置,变催化剂制备生产方式,用微反应器连续化制备催化剂前体,3D 打印制备结构化催化剂载体,提升催化剂制备重复性及催化效率。针对催化分布式合成装置,研发自支撑结构一体化催化剂,简化反应器,降低系统压降,建立催化剂全寿命周期数据库,用数字孪生技术模拟预测催化剂不同工况下的退化机制,实现精确替换和再生指导。

3.2 反应动力学与热力学分析

反应动力学反应器反应低压下合成氨反应速率的影响因素。采用试验方法和理论分析方法相结合,对催化剂的反应温度、反应压力、原料气性质等对反应率的影响进行讨论,得到反应条件。热力反应工况对平衡转化率及热量需求等热平衡、吉布斯自由能变等热力学条件进行热力分析,得到反应热力学参数,获得反应条件,为反应优化提供依据。

针对反应动力学研究,运用在线分析的技术手段,采用质谱分析仪、红外光谱分析仪等在反应中对反应组分浓度进行实时测定得到准确的反应速率,运用量子化学计算手段对催化剂表面活性的位点反应物分子进行正确的判断,对催化剂进行理性的设计。针对热量研究,建立以热力学模型为基

础的各种操作条件反应平衡的转化率预测模型,对反应热能对系统能的影响做出评估。最后针对反应器操作条件用过程模拟软件进行优化,能量利用的最大,生产成本的最低。

另外,在进行必要的反应动力学分析与热力分析的基础上,考虑到实际的工业生产中存在着复杂的情况,例如原料气体中含杂,降低了催化剂的活性,反应速率慢,在动力分析的过程中需要加入一些杂质进行实验来分析影响大小;另外热力分析中的模型设计尽量与实际状况相吻合,考虑了反应器内的传热传质的过程对热力学的平衡的影响,提升预测的准确性。综合反应动力学分析与热力分析,为优化反应器的设计提供了一定的参考,也对整个氨合成的平稳、高效运行起到了可靠的技术保障,促进了绿氢驱动新型低压氨合成工业化的应用速度。

四、过程模拟与优化

4.1 模拟软件的选择与应用

过程模拟的优化,模拟软件的选取很重要,根据反应动力学复杂程度、多相流等特点,选择不同的模拟软件,比如 Aspen Plus 模拟软件的化工流程模拟能力较强,可以对氨成反应物传质过程进行模拟,可以对氨成反应物的热量传递过程进行模拟,可以对氨成反应物中的化学反应过程进行模拟,进而为反应器优化提供依据;COMSOL Multiphysics 软件的多物理场耦合模拟能力较强,在氨成反应器的模拟上具有较好的应用优势,可以对氨成反应器温度场进行分析,可以对氨成反应器压力场进行分析,对反应器中的浓度场进行分析,为反应器的优化提供依据。应用模拟软件对模型进行验证和修正,根据实验数据,对模型进行修正。

4.2 过程参数优化策略

过程的参数优化是氨合成反应器性能和经济性改进的关键,首先进行温度参数优化,通过对温度进行模拟和研究以及实验得出反应温度区间,考虑反应速率和催化剂活性稳定,其次进行压力参数优化,低压不会限制反应速率,但不能使能耗损失过多,要通过模拟计算出不同压力下的反应平衡和动力学,选出最佳操作压力;然后进行原料气组成、空速等参数优化,结合反应效率、纯度、设备负荷等,综合考虑多因素进行过程参数优化,使氨合成反应器的性能和经济性得到提高。

五、环境影响评估

5.1 绿氢生产与氨合成的碳足迹分析

在绿氢生产过程中,碳足迹主要来源于电解水制氢所消

耗的电能来源。若电能来自化石燃料发电,则会产生显著的碳排放;而当电能来源于可再生能源,如太阳能、风能时,绿氢生产的碳足迹将大幅降低,甚至接近零排放。对于氨合成过程,传统的哈伯法合成氨以天然气为原料,会产生大量二氧化碳;而采用绿氢作为原料,可显著减少碳排放。通过对绿氢生产与氨合成全过程的碳足迹进行详细分析,可以明确各环节的碳排放来源及占比,为进一步优化工艺、降低碳排放提供科学依据。

5.2 可持续性与环境效益评估

可持续评估包括资源、能耗及环境效应等评估,资源评估是对绿氢工艺水耗以及合成氨原料回收使用进行评估。能耗评估是对所有生命周期的能耗评估,通过对不同能源消耗进行评估,对节省能耗潜力进行评估。环境评估是对合成氨过程中的氮氧化合物是否产生以及产生对环境的影响,绿氢工艺会对水资源环境产生一定影响。环境效益评估是对常规工艺和绿氢驱动工艺碳排放及污染物排放等评估,对改善程度进行评估。同时结合生命周期评估绿氢驱动合成氨工艺负荷和环境效益评估,为推广应用提供依据。

六、经济性分析

6.1 成本分析与投资回报率预测

成本评估应包括绿氢生产、合成氨反应器的生产、维护及操作。其中绿氢生产成本,包括电解水设备的成本、电量成本、催化剂的更新成本等,合成氨反应器的成本,包括合成氨反应器的材料成本、加工生产成本、维护检修成本等。投资收益率估算应通过调研了解,评估绿氢推动合成氨技术的产品销售市场价格、产品销售数量以及产品利润率,评估出投资回收期、内部收益率等相关指标。

在成本分析方面,电解水设备投资成本受技术路线及规模等影响,需根据不同项目具体分析计算。电力成本受当地电力市场价格、绿氢产量及能耗等影响,是成本中需要重点关注的内容。催化剂更换成本受催化剂寿命、性能、更换等影响,需根据试验数据、长期运行数据等进行分析测算。氨合成反应器用材成本受材料选择、尺寸、市场价格波动等影响,加工制造费主要受反应器复杂性、生产规模等影响。日常维护、检修费用主要受可靠性、易损件更换、维修人员等影响。投资回收期预测需对绿氢驱动氨合成的需求、竞争情况及市场价格等有所掌握,基于成本分析结果使用财务模型预测投资回收期、内部收益率、净现值等,为投资方提供全面、准确的投资依据。

6.2 市场竞争力与政策影响评估

就市场竞争力情况而言,通过与传统的氨合成技术进行比较研究,从生产成本、产品质量和生产效率等方面对绿氢驱动氨合成技术的优势与不足进行对比,关注国内外同类技术的发展动态,分析绿氢驱动氨合成技术在国外市场的竞争力情况。就政策影响情况而言,研究国家和地方对于绿氢产业和氨合成产业的相关政策,包括补贴政策、税收政策、环保政策等,分析其对绿氢驱动氨合成技术的发展支持作用,以及面临的政策风险和挑战,为技术的应用和推广提供政策保障。

结语

此次,从绿氢技术发展概况、新型低压氨合成反应器技术发展现状及过程经济性分析,绿氢推动新型低压氨合成反应器关键技术及其过程经济性分析两个方面,在采用绿氢驱动新型低压氨合成反应器关键技术及其过程经济性分析中,通过讨论,看到了在绿氢驱动新型低压氨合成反应技术具有应用前景及经济效益和环境影响,看到了推广应用中生产成本、技术成熟度、政策支持等方面的瓶颈,需要在下一步工作中加强技术开发、研究工作,减少成本,提高生产率,提供政策支持,推动绿氢驱动新型低压氨合成反应技术大面积推广应用。

参考文献

- [1] 刘晓杰;刘峻;周祖旭;韩文杰;王光春;李伟.基于新能源的绿氢制备技术当前进展与未来发展趋势[J].现代化工.2024,45 (07):33-39.
- [2] 江昆;张前;吴凯;郑元波;余秦伟;杨建明.面向循环经济发展的绿氢制备及应用技术[J].精细化工.2024:14
- [3] 马星.双碳目标下绿氢制备及应用技术发展现状[J].中国战略新兴产业,2024(24):82-84.
- [4] 李在鹏;于菲;张义军.大型 VAC 合成反应器制造关键技术的研究[J].中国化工装备,2024(03):36-39.
- [5] 张泰山.工业氨合成反应器的优化设计[J].山西化工.2022 ,41 (05):161-163.