

Research on the application of new catalysts in low-carbon conversion technology of coal chemical industry

Xinxu Zhang

Xinjiang Uygur Autonomous Region Coal Research Institute, Urumqi, Xinjiang, 830011, China

Abstract

In terms of realizing the clean and efficient utilization of coal resources, the key path lies in the low-carbon conversion technology of coal chemical industry, and the core of it is the development and application of new catalysts. The focus of this study is on the innovative design of catalysts in the fields of coal-to-chemicals, syngas conversion, and CO₂ recycling, with the aim of revealing the regulatory mechanisms of catalysts for reaction selectivity, energy efficiency improvement, and carbon emission reduction. Relevant studies have shown that the optimization of the distribution of active sites and the structural stability of the catalyst can significantly enhance the reaction kinetics and inhibit the formation of by-products, which provides theoretical support and technical paths for the low-carbon transformation of the coal chemical industry, which is of great practical significance for promoting the development of the entire industry in the direction of green and sustainable development.

Keywords

novel catalysts; coal chemical industry; low-carbon conversion; catalytic mechanism; Green chemical industry

新型催化剂在煤化工低碳转化技术中的应用研究

张鑫旭

新疆维吾尔自治区煤炭科学研究所, 中国·新疆 乌鲁木齐 830091

摘要

在实现煤炭资源清洁高效利用方面, 关键路径在于煤化工低碳转化技术, 而其中核心之处便是新型催化剂的开发与应用。本研究的聚焦点在于煤制化学品、合成气转化及CO₂资源化等领域里催化剂的创新设计, 目的是要揭示出催化剂针对反应选择性、能效提升以及碳排放降低所起到的调控机制。相关研究显示, 凭借对催化剂活性位点分布以及结构稳定性的优化, 能够让反应动力学得到显著增强, 并且对副产物生成起到抑制作用, 如此一来, 便为煤化工的低碳转型给予了理论方面的支撑以及技术层面的路径, 这对于推动整个行业朝着绿色可持续方向发展具备极为重要的实践意义。

关键词

新型催化剂; 煤化工; 低碳转化; 催化机理; 绿色化工

1 引言

低碳发展已成为全球共同的目标, 而煤化工行业作为能源化工领域的重要组成部分, 其碳排放量占比较大, 对全球气候变化产生重要影响。因此研究煤化工低碳技术, 对于促进全球低碳经济的发展、减缓全球气候变化具有重要意义。就化学反应来讲, 催化剂充当着核心媒介的角色, 其自身性能如何是能够直接对工艺效率以及环境友好性起到决定性作用的。当下阶段, 在煤基合成气定向转化、甲烷高效活化还有 CO₂ 协同利用等这些存在诸多难点的方面, 当进行新型催化剂设计工作的时候, 需要对活性、稳定性以及成本可控性都给予兼顾考虑。通过深入地去探究催化材料表界面所具有的特性以及相关的反应机理等内容能够为煤化工低碳

化技术所进行的革新活动提供相应科学依据, 进而有助于在“双碳”目标这样的大背景之下, 推动能源结构实现优化。

2 煤化工低碳转化技术概述

2.1 煤化工主要转化路径

煤化工低碳转化技术依托煤炭资源特性将碳基分子重构为高附加值化学品与清洁燃料, 其核心转化路径包含气化、液化还有焦化等基础工艺。借助高温条件的气化过程, 让煤与气化剂发生反应生成合成气, 以此作为下游甲醇、烯烃等化学品合成的原料; 通过加氢裂解的液化技术, 将煤大分子转化成液体燃料或者化工中间体; 侧重于高温干馏的焦化工艺, 则是用于提取焦炭与焦炉气。伴随低碳转型需求的不断升级, 合成气定向催化转化、煤基芳烃制备以及 CO₂ 耦合利用等技术渐渐变为研究热点, 精准设计的催化剂能够优化反应路径选择性, 并且降低能耗, 进而推动传统煤化工朝着低碳化、精细化的方向演进^[1]。

【作者简介】张鑫旭(1988-), 男, 中国山东阳谷人, 本科, 工程师, 从事煤化工研究。

2.2 传统煤化工技术碳排放痛点

传统煤化工技术以煤炭气化、液化和焦化等工艺为基础,其生产流程普遍有着对高温高压条件的依赖情况,由此致使能源消耗以及碳排放强度一直处在居高不下的状态。在反应体系当中,存在着对碳原子利用效率偏低的问题,部分工艺由于催化剂活性方面的不足或者选择性较差的缘故,生成了大量的副产物,进而造成了碳资源的浪费以及污染物的累积情况。在焦化过程里,焦炉气有着成分复杂的特点,并且其直接排放的比例处于较高水平,煤气净化与余热回收技术方面的不足进一步对温室气体释放压力起到了加剧的作用。除此之外,传统工艺在对废水、废气处理上精细化程度是有限的,末端治理成本与碳排放叠加起来的效应较为显著,产品结构呈现出偏向高碳化学品与燃料的态势,难以适应低碳经济所提出的清洁化、高值化这样的产业转型需求。

3 新型催化剂的设计与制备

3.1 催化剂设计原则

新型催化剂的设计需遵循煤基反应体系特性与低碳转化目标的双重约束。对于提升催化效率而言,关键要素在于对活性位点实现原子级分散以及进行表面结构的调控。在载体材料的选择上,要兼顾化学稳定性与传质性能,其中多级孔道结构对反应物扩散以及中间产物的定向吸附转化有着促进作用。设计过程当中,需对催化剂抗积碳与抗烧结的能力加以平衡,以防在高温高压条件下出现活性组分失活或者结构坍塌的情况。从成本控制来讲,要求原料来源广泛并且制备工艺简洁,避免因过度依赖贵金属或者采用复杂合成路线而增加工业化的难度。就环境友好性的考量而言,其涵盖了催化剂的全生命周期,具体包括制备阶段的低污染、使用过程的低毒害以及废弃后易于回收处理等方面^[2]。

3.2 典型新型催化剂类型

在煤基低碳转化领域所涌现出来的典型催化剂包含了金属氧化物基、分子筛基以及碳基复合材料这几种类型。其中,凭借着可调控的晶体结构以及氧空位浓度这一优势的金属氧化物,在合成气定向转化方面展现出了活性方面的优势。依托规则孔道以及酸性位点分布的分子筛催化剂,对煤焦油轻质化以及芳烃选择性生成起到了促进的作用。因有着高比表面积与电子导电性的碳基材料,在CO₂加氢反应里表现出了独特的吸附活化能力。通过界面工程来整合金属-载体相互作用的复合型催化剂,实现了对活性组分分散度以及抗积碳性能的提升。借助核壳结构设计来隔离活性中心与反应介质的部分负载型催化剂,能够在高温水热条件下维持住催化稳定性。在工业应用当中,需要对催化性能和制备成本进行权衡,虽然部分非贵金属催化剂的活性稍微低一些,但是其具备着能够进行规模化推广的潜力。

3.3 绿色制备方法

绿色制备方法聚焦于降低催化剂合成过程的资源消耗

与环境负荷,生物质模板法利用稻壳、秸秆等可再生原料构建多孔结构载体,以此减少化学试剂使用量与废弃物排放的是生物质模板法。通过调控反应温度与压力在温和条件下生成高分散活性组分,进而避免高温煅烧带来的能源浪费与粉尘污染的是水热合成技术。作为绿色溶剂替代传统有机介质,能够精准调控金属前驱体分散状态,以提升催化剂结晶度与稳定性的是离子液体。采用工业固废或低品位矿物为原料制备复合催化剂的情况存在于部分工艺中,比如赤泥经改性后负载活性金属用于煤焦油加氢精制。结合微波或超声辅助技术以缩短反应时间并抑制副产物生成的是低温合成路径,在制备过程中,设备兼容性与规模化可行性需兼顾,而废弃物资源化与全生命周期碳排放评估已成为工艺优化的重要参考维度。

4 新型催化剂在关键反应中的应用

4.1 煤制合成气低碳转化(CO₂捕获与转化)

煤制合成气低碳转化过程中,二氧化碳的捕获与转化环节对催化剂性能提出多重挑战,新型催化体系通过优化活性组分与载体协同作用提升碳原子利用效率。铁基催化剂表面氧空位与碱性位点可增强CO₂化学吸附能力,促进合成气中CO与H₂的再分配反应生成低碳醇类或烯烃。分子筛负载的双功能催化剂在温和条件下将CO₂加氢转化为甲醇,酸性位点调控中间产物脱附速率以抑制过度裂解导致的积碳问题。部分复合型催化剂设计核壳结构隔离活性金属与反应介质,在高温水热气化环境中维持催化稳定性并延长使用寿命。工业侧线试验表明,铜锌铝催化剂在浆态床反应器中具备良好的抗硫抗烧结特性,可适应煤制气杂质含量波动对反应选择性的影响^[3]。催化工艺与膜分离技术耦合可同步实现CO₂富集与定向转化,降低后续碳捕集能耗并减少工艺环节碳排放强度。催化剂再生性能与废剂回收路径的优化需兼顾经济性与环境效益,避免二次污染抵消低碳转化技术的减排潜力。

4.2 煤直接液化提质降耗

在煤直接液化提质降耗技术方面,对于其中的催化剂而言,需在加氢活性与抗积碳性能之间达成平衡。借助高分散度的活性金属和酸性载体的协同作用,可促使重质芳烃加氢裂解转化为轻质燃料。以氧化铝或者分子筛作为载体的镍钼基催化剂,通过对其表面酸密度的调控,能够抑制沥青质的缩聚反应,进而降低结焦倾向,同时提升液体油的收率。部分催化剂通过设计梯度孔道结构,以此加速大分子反应物的扩散以及产物的脱附,减少因中间产物在孔道内滞留而引发的二次裂解与积碳沉积情况。工业侧线试验表明,添加了稀土元素的铁基催化剂,在温和的反应条件下,可实现煤液化油品氢碳比的提高,同步达成氢气消耗量的降低以及设备结焦风险的减少。微波辅助制备工艺,能够提升活性组分的分散度,并且缩短还原时间。在催化剂再生过程中,引入低

温氧化剥离技术,可在清除积碳的同时,避免对载体结构造成破坏。工艺集成方面,催化加氢单元与膜分离技术耦合可回收未反应氢气并降低循环系统能耗,副产物处理环节采用催化氧化技术降解含硫含氮废水废气,减少末端治理压力与环境风险。

4.3 焦炉煤气高效利用

焦炉煤气高效利用需破解氢气与甲烷等组分协同转化难题,镍基催化剂表面掺杂碱金属可增强CO甲烷化反应选择性,抑制积碳生成的同时提升合成气热值。分子筛负载的钴基催化剂在焦油重整环节促进多环芳烃开环裂解,酸性位点与金属活性中心耦合调控反应路径生成低碳烯烃。针对煤气中硫化物毒化问题,部分贵金属催化剂设计硫化耐受层保护活性组分,延长催化剂再生周期并降低净化单元负荷。工业侧线试验表明,铁基催化剂在固定床反应器中可适应焦炉煤气杂质波动,在适度空速下维持甲烷转化率与催化剂机械强度。工艺集成方面,催化转化单元与变压吸附技术联用可高效分离提纯氢气,支撑下游燃料电池或合成氨产业原料需求。副产物处理环节引入低温催化氧化技术降解苯系物,尾气净化后碳排放强度显著降低。催化剂再生工艺优化需平衡热冲击对载体结构的影响,废弃催化剂中金属组分回收路径开发成为资源化技术落地的关键制约因素。

4.4 煤基化学品绿色合成

煤基化学品绿色合成聚焦于提升反应路径原子经济性并减少副产物生成,分子筛负载的铜基催化剂在甲醇合成中调控表面羟基密度以抑制高级醇生成,酸性位点与金属活性中心协同作用优化中间产物脱附路径。部分双功能催化剂设计金属氧化物与酸性载体复合结构,促进煤衍生合成气一步法转化为低碳烯烃,避免传统工艺中高温高压对设备与能耗的挑战。工业试验中镍基催化剂在浆态床反应器内展现良好抗磨性能,催化煤焦油加氢脱氧生成高纯度芳烃时有效抑制胶质物聚合结焦。工艺耦合方面,催化合成单元与膜分离技术联用可原位脱除反应生成水蒸气,降低产物分离能耗并提升单程转化效率。副产物处理环节引入负载型贵金属催化剂低温分解含氧化合物,尾气净化后苯系物浓度满足环保排放标准。催化剂再生工艺开发需解决积碳与金属烧结的协同清除问题,废弃催化剂中稀土元素回收技术突破成为降低全生命周期环境成本的关键路径。

4.5 反应机理与原位表征

煤基转化反应机理解析依赖催化剂活性位点动态演变与原位表征技术深度融合,原位X射线衍射追踪钴基催化剂晶格氧迁移路径,揭示甲烷部分氧化反应中晶格重构与积碳抑制的构效关系。表面敏感的原位红外光谱识别镍基催化剂表面吸附的CO中间体构型,关联线式吸附与桥式吸附比例变化对费托合成产物链增长终止的影响规律。工业反应条件下操作的反应质谱实时监测钼基催化剂硫化态转变过程,结合密度泛函理论计算验证硫化程度对煤焦油加氢脱硫活性位点电子结构的调控机制。同步辐射X射线吸收谱解析铁基催化剂在浆态床反应器中纳米颗粒团聚行为,建立颗粒尺寸分布与合成气转化选择性衰减的定量模型。催化剂动态结构解析需突破高温高压原位电镜样品池技术瓶颈,工业装置侧线安装的在线拉曼光谱系统捕捉到分子筛催化剂酸性位点失活过程中骨架铝迁移的关键证据。理论计算与机器学习结合构建多相催化微动力学模型,指导双金属催化剂活性组分空间排布优化,平衡反应路径中氢解与芳构化竞争步骤的能垒分布^[4]。

5 结语

在煤化工低碳转化技术升级进程中,新型催化剂的研发成为了重要突破口。就优化反应路径、提升产物收率以及降低过程能耗这些方面而言,其展现出的潜力颇为显著。然而,高温失活、成本偏高以及规模化应用适配性等问题,依旧是需去攻克的瓶颈之处。对于未来的相关研究来说,应当着重于多尺度催化体系的构建以及对动态反应机制的解析工作,并且要与智能化工艺调控相结合,以此推动催化剂设计和工程实践实现深度融合,进而为构建起高效且低碳的煤化工技术体系打下坚实基础。

参考文献

- [1] 王立坡.煤化工技术的发展与新型煤化工技术探讨[J].工程技术(文摘版)·建筑, 2016(6):00272-00272.
- [2] 刘苏.合成气直接转化制低碳烯烃技术现状与展望[J].中国石化, 2024(8):47-49.
- [3] 雷以柱;李光兴.羰基合成:煤基合成气低碳化利用的绿色化工路线[J].六盘水师范学院学报, 2024(6).
- [4] 杨学萍.碳中和背景下现代煤化工技术路径探索[J].化工进展, 2022, 41(7):11.