

分类号：
学号：20232007061

密级：
单位代码：10759

石河子大学

硕士学位论文



MOF 衍生双金属催化剂的 CO-SCR 性能及机理研究

学位申请人	查云鹏
指导教师	刘敏敏副教授
申请学位门类级别	理学硕士
学科、专业名称	化学
研究方向	工业催化
所在学院	化学化工学院

中国·新疆·石河子
2026年6月

分类号：
学号：20232007061

密级：
单位代码：10759

石河子大学

硕士学位论文



MOF 衍生双金属催化剂的 CO-SCR 性能及机理研究

学位申请人	查云鹏
指导教师	刘敏敏副教授
申请学位门类级别	理学硕士
学科、专业名称	化学
研究方向	工业催化
所在学院	化学化工学院

中国·新疆·石河子
2026年5月

**Investigation of CO-SCR Performance and Mechanism over MOF-
Derived Bimetallic Catalysts**

A Dissertation Submitted to

Shihezi University

In Partial Fulfillment of the Requirements

for the Degree of

Master of Natural Science

By

Zha Yun-peng

Industrial Catalysis

Dissertation Supervisor: Prof. Liu MinMin

May, 2026

石河子大学学位论文独创性声明及使用授权声明

学位论文独创性声明

本人所呈交的学位论文是在我导师的指导下进行的研究工作及取得的研究成果。据我所知，除文中已经注明引用的内容外，本论文不包含其他个人已经发表或撰写过的研究成果。对本文的研究做出重要贡献的个人和集体，均已在文中作了明确的说明并表示谢意。

研究生签名：查云鹏

时间：2016年5月26日

使用授权声明

本人完全了解石河子大学有关保留、使用学位论文的规定，学校有权保留学位论文并向国家主管部门或指定机构送交论文的电子版和纸质版。有权将学位论文在学校图书馆保存并允许被查阅。有权自行或许可他人将学位论文编入有关数据库提供检索服务。有权将学位论文的标题和摘要汇编出版。保密的学位论文在解密后适用本规定。

研究生签名：查云鹏

时间：2016年5月26日

导师签名：刘淑敏

时间：2016年5月26日

摘要

传统工业（固定源和移动源）排放的 NO_x (NO , 90%) 是大气污染的重要来源，是形成酸雨、破坏臭氧层、生成光化学烟雾的前驱体，不仅造成环境污染，还严重威胁人类健康。CO 选择性催化还原 NO (CO-SCR) 技术可以同时去除 NO 和 CO 两种有害气体，且在反应过程中不易形成积碳，使得 CO-SCR 技术成为当前烟气脱硝领域的研究热点。目前应用最为广泛的是过渡金属基催化剂，因为其资源丰富，价格低廉，具有灵活的可设计性和协同效应，但过渡金属基催化剂的比表面积和孔隙率较低、金属分散度不足等限制了其进一步应用。然而，金属有机框架衍生材料的微孔/介孔和大比表面积为加速电子转移提供可及活性位点。因此，本文选用具有强氧化还原活性的过渡金属 Fe/Co/Ni-MOF 衍生催化剂进行研究，探究其在 CO-SCR 反应中的作用机制。具体研究内容如下：

(1) 双金属 MOF 衍生 $\text{MFe}_2\text{O}_4/\text{C}$ 催化剂的制备和 CO-SCR 机理研究

通过构建一系列同构尖晶石型铁基双金属催化剂 $\text{MFe}_2\text{O}_4/\text{C}$ ($\text{M}=\text{Ni}$ 、 Co 、 Zn) 模型体系，系统探究相邻 Fe-M 协同催化对 CO-SCR 性能的影响。 $\text{NiFe}_2\text{O}_4/\text{C}$ 展现出更为突出的催化效率：在 250°C 时 NO 转化率达 92.7%， 300°C 时实现完全脱硝 ($X_{\text{NO}}=100\%$)，且 N_2 选择性维持在 98% 以上。晶格中的 Ni^{2+} 有利于促进 $\text{Fe}^{2+}/\text{Ni}^{3+}$ 氧化还原循环并形成高密度表面氧空位。 Ni-O-Fe 协同表面氧空位 (SSOVs) 通过混合型 Mars-van Krevelen (MvK) 与 Langmuir-Hinshelwood (L-H) 机制显著促进晶格氧 (O_a) 活化，解释了 CO-SCR 活性增强的机理。

(2) Ce 掺杂助力 FeNi 催化剂实现高效低温 CO 催化还原 NO

以 $\text{Fe}_2\text{Ni-MOF}$ 为前驱体，采用浸渍-热解法成功制备了 $\text{NiFe}_2\text{O}_4\text{-CeO}_2/\text{C}$ 复合催化剂。 CeO_2 的引入显著提升了催化剂的低温活性与选择性， $\text{NiFe}_2\text{O}_4\text{-CeO}_2/\text{C}$ 在 200°C 即可实现 NO 的完全转化与 100% 的 N_2 选择性，且活性温度窗口拓宽至 $200\text{-}500^\circ\text{C}$ 。 CeO_2 的掺杂不仅增大催化剂的比表面积与介孔比例，还促进 Fe、Ni 物种的价态升高，显著增加表面晶格氧与氧空位浓度，且揭示了反应遵循以异氰酸酯 ($-\text{NCO}$) 为关键中间体的“双位点协同”机理。

(3) Ni-Co 双位点耦合碳骨架高效促进 CO 选择性催化还原 NO

以 NiCo 双金属 MOF 为前驱体，通过可控热解构建了 Ni 配位耦合的 $\text{Co}_{3-x}\text{Ni}_x\text{O}_4/\text{C}$ 催化剂，探究 Ni 引入对 CO-SCR 性能的调控机制。Ni 的调控引起 Co_3O_4 晶格收缩，促进 Co^{3+} 含量提升和氧空位形成，并显著提高表面吸附氧比例。这些结构优化增强了催化剂的氧化还原能力与反应物吸附活化性能。 $\text{Co}_{3-x}\text{Ni}_x\text{O}_4/\text{C}$ 在 130°C 即可实现 NO 完全转化，较 $\text{Co}_3\text{O}_4/\text{C}$ (150°C) 的活性明显提升，且 N_2 选择性从 73% 提高至 95%。Ni-Co 协同作用促进了 CO 与 NO 的共吸附与转化，关键反应中间体的生成与消耗遵循 Mars-van Krevelen 机制。

关键词：金属有机框架 (MOFs) 衍生材料；催化剂；选择性催化还原；水热-热解；原位红外

Abstract

NO_x emissions (NO, 90%) from traditional industries (stationary and mobile sources) are a significant source of atmospheric pollution. They serve as precursors for acid rain formation, ozone layer depletion, and photochemical smog generation, not only causing environmental pollution but also posing serious threats to human health. The CO-selective catalytic reduction of NO (CO-SCR) technology can simultaneously remove both harmful gases, NO and CO. More importantly, it is less prone to carbon deposition during the reaction, making CO-SCR a current research hotspot in the field of flue gas denitrification. Currently, transition metal-based catalysts are the most widely used due to their abundant resources, low cost, flexible designability, and synergistic effects. However, their further application is limited by low specific surface area and porosity, as well as insufficient metal dispersion and stability. In contrast, metal-organic framework-derived materials offer micropores/mesopores and a high specific surface area, providing accessible active sites for accelerating electron transfer. Therefore, this study focuses on transition metal Fe/Co/Ni-MOF-derived catalysts with strong redox activity and thermal stability to investigate their mechanisms in the CO-SCR reaction. The specific research contents are as follows:

(1) Preparation of Bimetallic MOF-Derived $\text{MFe}_2\text{O}_4/\text{C}$ Catalysts and Study on the CO-SCR Mechanism

By constructing a series of isomorphic spinel-type iron-based bimetallic catalyst $\text{MFe}_2\text{O}_4/\text{C}$ (M=Ni, Co, Zn) model systems, the influence of adjacent Fe-M synergistic catalysis on CO-SCR performance was systematically investigated. $\text{NiFe}_2\text{O}_4/\text{C}$ exhibited superior catalytic efficiency: achieving 92.7% NO conversion at 250°C and complete denitrification ($X_{\text{NO}}=100\%$) at 300°C, with N_2 selectivity consistently maintained above 98%. The intrinsic role of Ni^{2+} in the lattice facilitated the $\text{Fe}^{2+}/\text{Ni}^{3+}$ redox cycle and the formation of high-density surface oxygen vacancies. The synergistic surface oxygen vacancies (SSOVs) in Ni-O-Fe significantly promoted lattice oxygen (O_a) activation through a hybrid Mars-van Krevelen (MvK) and Langmuir-Hinshelwood (L-H) mechanism, thereby explaining the enhanced CO-SCR activity.

(2) Ce Doping Enables FeNi Catalysts to Achieve Efficient Low-Temperature CO Catalytic Reduction of NO

Using Fe_2Ni -MOF as a precursor, a $\text{NiFe}_2\text{O}_4\text{-CeO}_2/\text{C}$ composite catalyst was successfully prepared via an impregnation-pyrolysis method. The introduction of CeO_2 significantly improved the catalyst's low-temperature activity and selectivity. $\text{NiFe}_2\text{O}_4\text{-CeO}_2/\text{C}$ achieved complete NO conversion and 100% N_2 selectivity at 200°C, with the active temperature window extended to 200-500°C. CeO_2 doping not only increased the catalyst's specific surface area and mesoporous ratio but also promoted the oxidation states of Fe and Ni species, significantly enhancing surface lattice oxygen and oxygen vacancy concentrations. The study revealed that the reaction follows a “dual-site synergy” mechanism with isocyanate ($-\text{NCO}$) as the key

intermediate.

(3) Ni-Co Dual Sites Coupled with Carbon Skeleton Efficiently Promote CO-Selective Catalytic Reduction of NO

A Ni-coordinated $\text{Co}_{3-x}\text{Ni}_x\text{O}_4/\text{C}$ catalyst was constructed via controlled pyrolysis using a bimetallic NiCo MOF as precursor to investigate the regulatory mechanism of Ni incorporation on CO-SCR performance. The introduction of Ni induces lattice contraction in Co_3O_4 , promotes the increase of Co^{3+} content and the formation of oxygen vacancies, and significantly enhances the proportion of surface-adsorbed oxygen. These structural optimizations improve the redox capability of the catalyst as well as its adsorption and activation performance toward reactants. $\text{Co}_{3-x}\text{Ni}_x\text{O}_4/\text{C}$ achieves complete NO conversion at 130 °C, representing a notable improvement over $\text{Co}_3\text{O}_4/\text{C}$ (150 °C), while the N_2 selectivity increases from 73% to 95%. The Ni-Co synergistic effect facilitates the co-adsorption and conversion of CO and NO, with the formation and consumption of key reaction intermediates following the Mars-van Krevelen mechanism.

Key words: Metal-organic framework (MOF)-derived materials; Catalysts; Selective catalytic reduction; Hydrothermal-pyrolysis; In situ Infrared Spectroscopy

目录

摘要.....	I
Abstract	II
第 1 章 绪论.....	1
1.1 研究背景.....	1
1.1.1 氮氧化物的主要来源.....	1
1.1.2 氮氧化物的危害.....	2
1.2 脱硝技术现状.....	3
1.2.1 吸附法、吸收法.....	4
1.2.2 选择性非催化还原 (SNCR).....	5
1.2.3 选择性催化还原 (SCR).....	6
1.3 CO-SCR 脱硝催化剂.....	10
1.3.1 贵金属基催化剂.....	10
1.3.2 过渡金属基催化剂.....	12
1.3.3 金属有机框架 (MOFs) 衍生催化剂.....	15
1.3.4 其他类型催化剂.....	17
1.4 CO-SCR 反应机理.....	18
1.4.1 Langmuir-Hinshelwood (L-H) 机理.....	18
1.4.2 Eley-Rideal (E-R) 机理.....	19
1.4.3 Mars-van Krevelen (MvK) 机理.....	20
1.4.4 共存机理.....	21
1.5 本论文的研究内容与创新点.....	21
1.5.1 研究意义与思路.....	21
1.5.2 研究内容.....	22
1.5.3 研究创新点.....	23
第 2 章 实验部分.....	25
2.1 实验仪器设备.....	25
2.2 实验原料.....	25
2.3 实验所用气体.....	26
2.4 催化剂表征.....	27
2.4.1 扫描电子显微镜 (SEM).....	27
2.4.2 透射电子显微镜 (TEM/HR-TEM).....	27

2.4.3 粉末 X 射线衍射 (XRD)	27
2.4.4 全自动快速比表面与孔隙度分析 (BET)	28
2.4.5 X 射线光电子能谱 (XPS)	28
2.4.6 拉曼光谱 (Raman)	28
2.4.7 电子顺磁共振光谱 (EPR)	28
2.4.8 H ₂ -程序升温还原 (H ₂ -TPR)	29
2.4.9 NH ₃ -程序升温脱附 (NH ₃ -TPD)	29
2.4.10 CO-程序升温脱附 (CO-TPD)	29
2.4.11 NO-程序升温脱附 (NO-TPD)	30
2.4.12 原位漫反射红外傅里叶变换光谱 (In situ DRIFTS)	30
2.5 催化剂性能测试	30
第 3 章 双金属 MOF 衍生 MFe ₂ O ₄ /C 催化剂的制备和 CO-SCR 机理研究	32
3.1 引言	32
3.2 实验部分	33
3.2.1 双金属 Fe ₂ M MOF 前驱体的合成	33
3.2.2 双金属尖晶石催化剂模型体系的构建	33
3.3 结果与讨论	34
3.3.1 合成与表征	34
3.3.2 催化剂的 CO-SCR 性能评价	40
3.3.3 反应机理	45
3.4 本章小结	48
第 4 章 Ce 掺杂助力 FeNi 催化剂实现高效低温 CO 催化还原 NO	49
4.1 引言	49
4.2 实验部分	50
4.2.1 双金属 Fe ₂ M MOF 前驱体的合成	50
4.2.2 Ce 掺杂 NiFe ₂ O ₄ -CeO ₂ /C 催化剂的构筑	50
4.3 结果与讨论	51
4.3.1 结构表征	51
4.3.2 催化剂的 CO-SCR 性能测试	55
4.3.3 催化机理	58
4.4 本章小结	60
第 5 章 Ni-Co 双位点耦合碳骨架高效促进 CO 选择性催化还原 NO	62
5.1 引言	62
5.2 实验部分	63

5.2.1 Ni/Co MOF 前驱体的合成	63
5.2.2 MOF 衍生催化剂的结构调控	63
5.3 结果与讨论	64
5.3.1 催化剂表征	64
5.3.2 催化性能测试	70
5.3.3 催化机理	72
5.4 本章小结	74
第 6 章 总结与展望	75
6.1 总结	75
6.2 展望	76
参考文献	78
致谢	97

第1章 绪论

1.1 研究背景

氮氧化物 (NO_x) 主要指一氧化氮 (NO) 和二氧化氮 (NO_2)，是大气中重要的痕量污染物与关键的反应前体物^[1-5]。随着全球工业化与城市化进程的加速，人为活动排放的 NO_x 总量持续攀升，使其成为区域复合型大气污染的核心成分之一。 NO_x 不仅直接对生态环境与人体健康构成威胁，更可通过复杂的大气光化学反应参与臭氧 (O_3) 和二次细颗粒物 ($\text{PM}_{2.5}$) 的生成，进而对空气质量、气候变化及生态系统平衡产生深远影响^[6]。因此，系统探究 NO_x 的来源、环境行为及控制策略，已成为当前大气环境科学与污染治理领域的重要课题。

1.1.1 氮氧化物的主要来源

NO_x 的来源可分为自然源与人为源两大类 (图 1-1)。自然源主要包括土壤微生物活动、雷电放电、生物质自然燃烧以及平流层光化学反应注入等^[7,8]。尽管自然源排放量可观，但其时空分布相对稳定，并非近年来大气 NO_x 浓度急剧升高的主导因素。当前，人为源排放已成为大气 NO_x 负荷剧增的主要原因，且高度集中于人类活动密集区域^[9]。

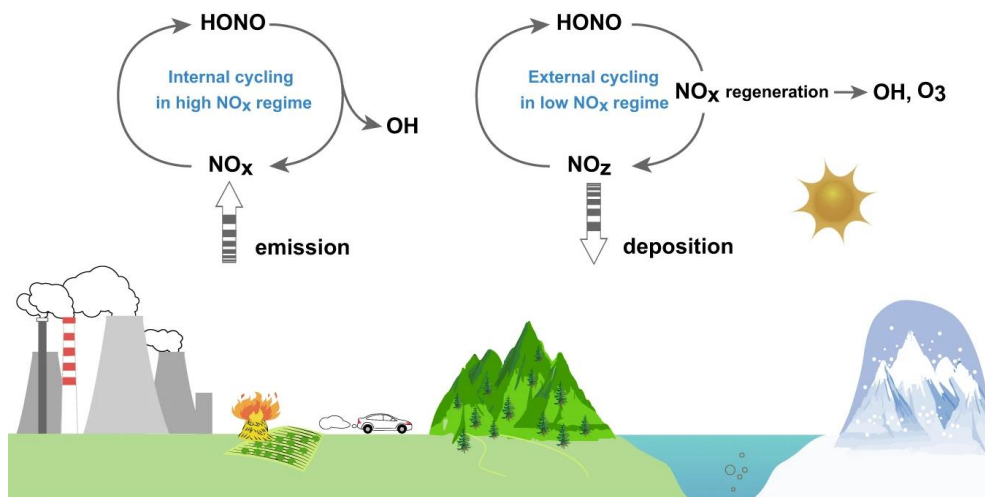


图 1-1 氮氧化物 (NO_x) 的主要来源^[18]

Figure 1-1 The main sources of nitrogen oxides (NO_x)^[18]

其主要产生途径包括：（1）化石燃料的高温燃烧：此为最大的人为排放源。在电站锅炉、工业窑炉、内燃机等高温燃烧装置中，空气中的氮气与氧气在高温下反应生成热力型 NO_x ，其生成量随燃烧温度升高而显著增加^[10-12]。（2）移动源排放：以汽油和柴油为燃料的道路机动车、船舶、非道路工程机械及航空器是重要的移动排放源。特别是柴油车，因其燃烧特性， NO_x 排放强度尤为突出^[13-15]。（3）工业生产过程：硝酸、化肥、炸药等化工生产，冶金、玻璃制造等高温工业过程，会直接释放大量的工艺过程型 NO_x ^[16]。（4）生物质燃料燃烧：在部分区域，居民生活、农业废弃物等生物质的不完全燃烧也是不可忽视的排放贡献者^[17]。人为排放的 NO_x 具有明显的点源（如大型电厂）与面源（如城市交通网）分布特征，且排放强度与能源结构、工业布局、交通密度及污染控制技术水平密切相关。

1.1.2 氮氧化物的危害

NO_x 的危害具有多维度、链条式的特点（图 1-2），主要体现在以下方面：（1）对人体健康的直接危害^[19,20]： NO_2 是一种具有强烈刺激性和腐蚀性的红棕色气体。短期暴露可刺激呼吸道，加剧哮喘、支气管炎等呼吸系统疾病；长期暴露则可能导致肺功能下降，增加呼吸道感染风险。流行病学研究亦提示其与心血管疾病发病率升高存在关联。

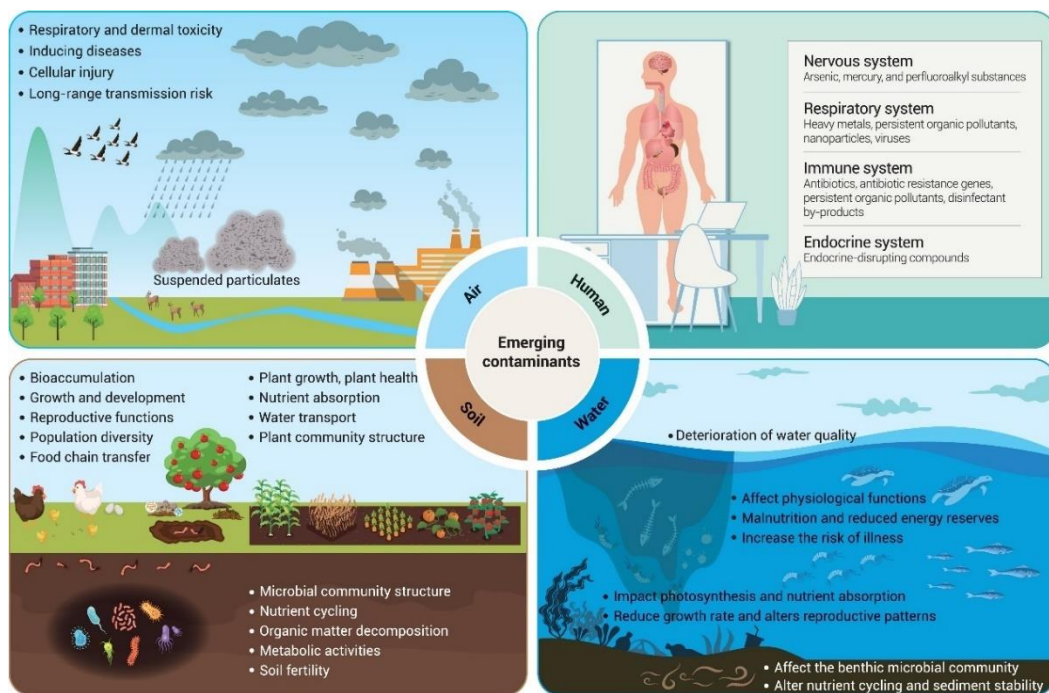


图 1-2 污染物（包括 NO_x ）对土壤、水、大气和人类健康的影响^[27]

Figure 1-2 The impact of pollutants (including NO_x) on soil, water, the atmosphere, and human health^[27]

(2) 对大气环境的复合污染效应^[21,22]: NO_x 是光化学烟雾形成的关键前体物。在紫外线照射下, NO_x 与挥发性有机物 (VOCs) 发生一系列光化学反应, 生成臭氧 (O_3)、过氧乙酰硝酸酯 (PAN) 等强氧化性二次污染物, 是近地面夏季臭氧污染的主因。同时, NO_x 可经气相和液相反应转化为硝酸盐, 是 $\text{PM}_{2.5}$ 中二次无机盐的重要组成部分, 导致大气能见度下降。(3) 对生态系统的破坏^[23,24]: NO_x 通过干湿沉降 (主要为硝酸盐形式) 进入土壤和水体。过量氮沉降会导致土壤酸化、养分失衡, 影响植物生长与森林健康。进入水体则可能引起富营养化, 破坏水生生态系统平衡。此外, NO_x 对某些植物叶片具有直接毒害作用。(4) 对物质材料的损害^[25]: NO_2 及其衍生的硝酸具有较强的腐蚀性, 能加速金属、纺织品、建筑材料 (特别是历史建筑和文物) 的老化与损坏。(5) 对全球气候的间接影响^[26]: NO_x 本身是间接温室气体。一方面, 其参与生成的臭氧是对流层重要的温室气体; 另一方面, 其形成的硝酸盐气溶胶可通过散射阳光产生冷却效应, 但其生命周期较短, 区域影响复杂。此外, NO_x 排放会改变大气氧化性, 从而影响甲烷等其他温室气体的寿命。

综上所述, NO_x 的排放控制不仅关乎局部空气质量改善与公众健康保护, 也是应对区域光化学污染、治理 $\text{PM}_{2.5}$ 以及协同应对气候变化的重要切入点, 具有紧迫的现实意义与长远的战略价值。

1.2 脱硝技术现状

为有效控制氮氧化物排放, 研究人员将目光投向不同种类的脱硝技术研发, 目前多数已经被应用于工业及能源生产领域。

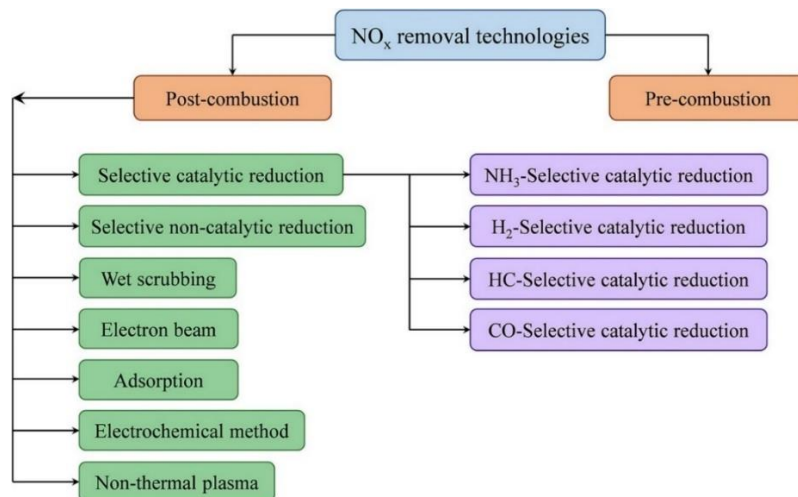


图 1-3 控制氮氧化物 (NO_x) 的主流技术^[28]

Figure 1-3 Mainstream technologies for controlling nitrogen oxides (NO_x)^[28]

根据反应原理与工艺特征,主要有选择性催化还原、选择性非催化还原、湿法洗涤、电子束、吸附、电化学方法和非热等离子体等(图 1-3)。各类技术在脱硝效率、适用条件、投资与运行成本等方面存在显著差异,其选择与应用需紧密结合具体的排放标准、烟气条件及经济成本进行综合考量。文献调研发现,应用较为广泛的为选择性非催化还原(Selective Non-Catalytic Reduction, SNCR)、吸附与吸收法(Adsorption and Absorption Method)以及选择性催化还原(Selective Catalytic Reduction, SCR),其中 SCR 应用最为广泛。

1.2.1 吸附法、吸收法

许多氧化吸收技术由于工艺流程相对简单、脱氮效率较高、便于实现资源回收以及不易产生二次污染等优势,受到广泛研究与应用。例如,已将 NaClO_2 、 $\text{KMnO}_4/\text{NaOH}$ 、 Fe(II)EDTA (乙二胺四乙酸)、尿素、臭氧和 UV (紫外可见吸收)/ H_2O_2 等作为氧化吸收剂引入水溶液以去除 $\text{NO}^{[29-33]}$ 。此外,光催化氧化技术^[34,35]和低温等离子体技术^[36,37]也在该领域得到探索。在燃煤烟气等典型排放源中, NO 占 NO_x 总量的 90%以上^[38],而 NO 难以直接通过水或碱液吸收^[39]。因此,在湿式氧化吸收工艺中,将 NO 氧化为更高价态氮氧化物成为提升整体脱硝效率的关键环节。目前,湿法氧化吸收脱硝技术主要可分为直接氧化吸收法、催化氧化吸收法以及高能离子氧化吸收法三类(图 1-4)。

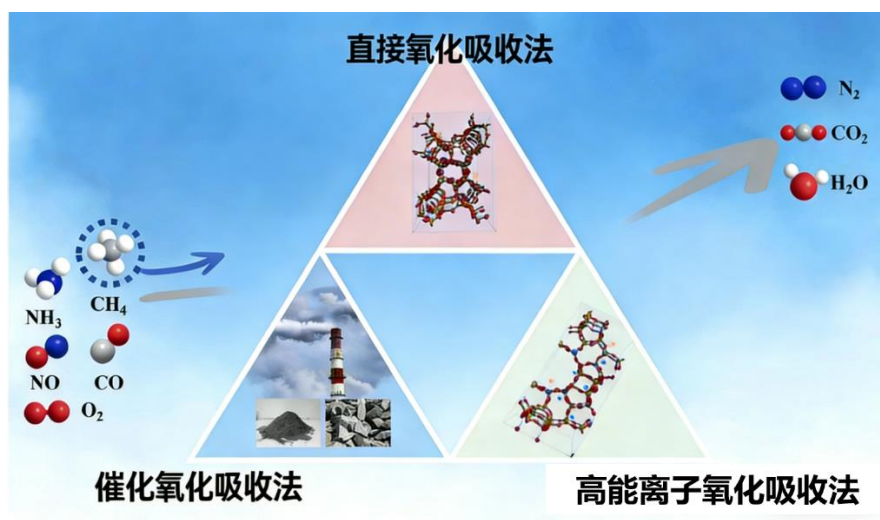


图 1-4 湿法氧化吸收脱硝技术分类

Figure 1-4 Classification of Wet Oxidation Absorption Denitrification Technologies

(1) 直接氧化吸收法主要包括“氧化-吸收”和“吸收-氧化”两种途径^[40]。“氧化-吸收”指先在气相中将 NO 氧化为高价态 NO_x (如 NO_2 、 N_2O_5 等),再通过吸收装置去除;“吸收-氧化”则是将 NO 直接通入含氧化性吸收剂的液相中,在液相传质过程中

实现氧化与吸收。常用氧化剂包括 O_3 、 ClO_2 、 $NaClO_2$ 、 $NaClO$ 、 $KMnO_4$ 、 H_2O_2 及高铁酸盐等。

(2) 催化氧化吸附技术：对于常规催化剂来说，引入催化剂可显著提升 NO 的氧化效率。岑可法等^[41]制备了球形氧化铝负载的 MnO_x 催化剂，用于催化臭氧深度氧化 NO 。研究表明，该催化剂能有效促进 NO 向 N_2O_5 的转化，脱硝效率可达 95% 以上，同时具备良好的稳定性与抗 SO_2 性能，并能在一定程度上降低所需停留时间、臭氧投加浓度及臭氧逃逸量。

(3) 高能离子氧化吸收技术是一种具有前景的多污染物协同脱除方式^[42-44]。该方法通过高能电子激发烟气分子，产生自由基（如 $\cdot OH$ 、 $\cdot O$ 、 $HO_2\cdot$ 等）与活性粒子，进而将 NO 氧化为易被湿法吸收的高价态氮氧化物，最终经吸收装置去除^[45]。目前常见的等离子体脱硝技术包括电子束法（EB）、脉冲电晕等离子体法（PPCP）及介质阻挡放电法（DBD）。

尽管湿法氧化吸收技术在烟气脱硝中显示出良好潜力，但仍需进一步优化与完善。未来研究应着重于降低氧化剂及高活性催化剂的使用成本，并加强多污染物协同脱除的综合研究，以推动该技术向低成本、高效率、环境友好的方向发展。

1.2.2 选择性非催化还原（SNCR）

SNCR 是一种经过验证的、具有成本效益的二次脱硝技术，广泛应用于发电厂、焚烧炉、工业锅炉和水泥焙烧炉等大型固定污染源的 NO_x 排放控制（图 1-5）。



图 1-5 选择性非催化还原（SNCR）脱硝技术介绍

Figure 1-5 Introduction to Selective Non-Catalytic Reduction (SNCR) Denitrification Technology

该技术通过向烟气中喷入氨或尿素^[46]等还原剂，在适宜温度下将 NO_x 还原为 N_2 和 H_2O 。SNCR 过程的脱硝效率受多种操作参数的影响，主要包括还原剂停留时间、反应区温度分布、试剂与烟气的混合质量、 NO_x 气体浓度、氨逃逸和归一化化学计量比等^[47]。停留时间是指还原剂在有效温度区间内与烟气接触的反应时间，其长短主要取决于反应区内的流场几何结构与流速分布。延长停留时间有助于提升还原剂与 NO_x 的反应程度。大多数研究人员一致认为，SNCR 过程的最佳反应温度范围相对较窄，通常介于 800°C 至 1100°C 之间^[48]。当温度高于此范围时，氨易被氧化为 NO ；而低于 800°C 时，还原反应速率显著下降，不利于 NO_x 的高效脱除。试剂和废气的混合质量主要由反应区内的流速、湍流强度及喷射条件共同决定。此外，烟气中的初始 NO_x 浓度会受到前期初级脱硝措施的影响，并因应用场景（如电站锅炉、垃圾焚烧炉等）的不同而存在差异。归一化化学计量比（NSR）指实际喷入还原剂与 NO_x 的摩尔比。尽管提高 NSR 通常有助于提升脱硝效率，但需兼顾氨逃逸带来的环境影响，其排放受到严格法规限制。已有文献指出，在兼顾脱硝效率与控制氨逃逸的前提下，NSR 的最佳取值范围一般为 1.5-2.0^[49]。

这些操作参数之间相互关联、彼此制约，表明尽管 SNCR 工艺原理相对简单，但其在实际工程中的优化设计及现有设施的改造仍面临显著挑战。在 SNCR 应用中使用计算流体动力学有几个论点。首先，考虑到缩短开发周期和降低开发成本，对不同设置和各种设计参数的性能进行早期评估变得非常重要^[50,51]。此外，在实际中，由于实验手段的限制，直接通过测量来研究大型电站锅炉的 SNCR 过程是非常困难的。大空间和强湍流导致精度很差，阻碍了基本的操作特性。最后，由于严格的排放法规和降低 NO_x 排放控制系统价格的要求，需要改进的计算设计工具来设计和优化 SNCR 性能^[52]。

1.2.3 选择性催化还原（SCR）

SCR 技术是当前工业烟气氮氧化物（ NO_x ）净化的主流技术之一（图 1-6）。其核心原理是在催化剂作用下，利用还原剂选择性地将烟气中的 NO_x 还原为无害的氮气（ N_2 ）和水（ H_2O ）。相较于其他 NO_x 控制技术，SCR 技术具有脱硝效率高（通常可达 80%-90%以上）、选择性好、二次污染小、技术成熟可靠等显著优点，因此在电力、冶金、化工等行业的燃煤、燃气锅炉及工业窑炉烟气治理中得到了广泛应用^[53-58]。根据所采用还原剂的不同，SCR 技术主要可分为氨气选择性催化还原（ $\text{NH}_3\text{-SCR}$ ）^[59]、氢气选择性催化还原（ $\text{H}_2\text{-SCR}$ ）^[60]、碳氢化合物选择性催化还原（ $\text{CH}_x\text{-SCR}$ ）^[61]以及一氧化碳选择性催化还原（ CO-SCR ）^[62]等体系。不同还原剂体系在反应机理、催化剂设计、操作条件及适用场景上各具特点。