

MÔ PHỎNG ẢNH HƯỞNG CỦA CÁC THÔNG SỐ ĐẾN QUÁ TRÌNH LÀM VIỆC CỦA PIN NHIÊN LIỆU TRÊN Ô TÔ

SIMULATION WITH EFFECTIVE PARAMETERS TO WORKING PROCESS OF FUEL CELL TECHNOLOGY ON AUTOMOBILE

Đỗ Khắc Sơn

Bộ môn Cơ khí Ô tô, Khoa Cơ khí, Trường Đại học Giao thông Vận tải

TÓM TẮT

Nguồn năng lượng hóa thạch trên thế giới ngày càng cạn kiệt, cho nên việc tìm ra nguồn năng lượng thay thế bền vững sử dụng trên ô tô thật sự cần thiết. Một trong các nguồn năng lượng mới đang được các nhà khoa học trên thế giới tập trung nghiên cứu đó là pin nhiên liệu (fuel cell). Bài báo trình bày một số thông số ảnh hưởng đến quá trình làm việc của pin nhiên liệu như áp suất, nhiệt độ... trên cơ sở đó sẽ đưa ra đánh giá quá trình làm việc của pin nhiên liệu với sự ảnh hưởng của các thông số đó. Tác giả đã sử dụng phần mềm mô phỏng Matlab-Simulink để mô phỏng quá trình làm việc của pin nhiên liệu.

Từ khóa: Pin nhiên liệu trên ô tô.

ABSTRACT

The world's fossil energy sources are becoming more and more scarce, hence the need for an efficient sustainable energy supply to be used in automobiles. One of the new energy sources which is being focused in current researches is on researching by the world's scientists is fuel cell. Fuel cell is not only an alternative energy source that is less polluting and independent of fossil fuel resources while being fully compatible in conventional automobiles. In addition to applications in automobiles, fuel cell allows a wide range of applications scalable from residential usage to telecommunication devices such as cell phones, notebooks.

Keywords: Fuel cell; Automobiles; Vehicle; Energy; Alternative.

1. ĐẶT VẤN ĐỀ

Trong quá trình làm việc của pin nhiên liệu có rất nhiều thông số ảnh hưởng đến hiệu quả làm việc của pin như nhiệt độ, áp suất... Pin nhiên liệu không trực tiếp đốt cháy hydro mà dùng chất xúc tác để tách các electron từ các nguyên tử hydro có trong nhiên liệu để tạo thành các ion, sau đó hướng các ion và các

electron này theo một chiều nhất định để tạo ra dòng điện. Mặt khác, sản phẩm của quá trình phản ứng chỉ là nước, hoàn toàn không gây ô nhiễm. Trong hầu hết các pin nhiên liệu, nhiệt độ hoạt động gần như không thay đổi. Để điều khiển công suất dòng điện của pin nhiên liệu, người ta chủ yếu thay đổi áp suất dòng nhiên liệu.

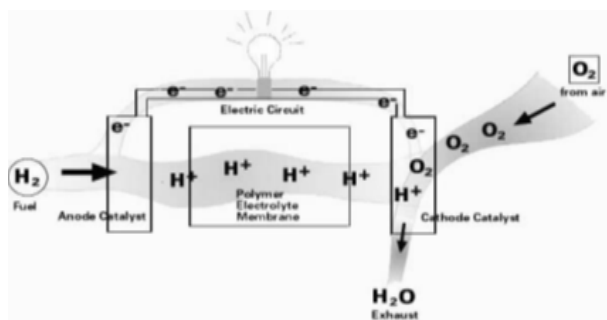
2. KHÁI NIỆM, NGUYÊN LÝ VÀ THÔNG SỐ LÀM VIỆC CỦA PIN NHIÊN LIỆU

2.1. Khái niệm pin nhiên liệu

Pin nhiên liệu là thiết bị sử dụng hydro làm nhiên liệu để sinh ra dòng điện, proton, nhiệt và nước. Công nghệ pin nhiên liệu dựa trên phản ứng cháy đơn giản sau:



Nhiên liệu hydro được nạp tới cực anot (cực âm) của pin, trong khi oxy nạp vào cực catot (cực dương) của pin. Thông qua một phản ứng hóa học, hydro sẽ được phân ly thành một electron và một proton. Các electron đi theo một chiều do đó tạo thành dòng điện cung cấp cho tải. Còn proton sẽ đi qua lớp điện phân và được tập hợp lại ở catot. Electron, proton và oxy sẽ kết hợp với nhau tạo thành nước. Quá trình được mô tả ở sơ đồ sau:



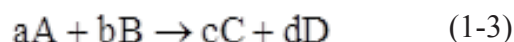
Hình 1. Nguyên lý làm việc của pin nhiên liệu

Nhiên liệu hydro có thể được nạp từ nhiều hợp chất các-bon hydro khác nhau và có khả năng tái tạo. Vì thế, hydro có thể lấy từ trong khí ga tự nhiên hay rượu methanol. Pin nhiên liệu cũng có nghĩa là cung cấp dòng điện thông qua một phản ứng hóa học, do đó nó có khí thải sạch hơn so với quá trình đốt cháy nhiên liệu trực tiếp.

2.2. Các thông số đánh giá pin nhiên liệu

Sức điện động thuận nghịch của pin:

Xét phản ứng tổng quát :



Trong đó :

- A, B là các chất tham gia phản ứng;
- C, D là các chất sản phẩm của phản ứng;
- a, b, c, d là các hệ số cân bằng phản ứng.

Sự thay đổi năng lượng tự do Gibbs của phản ứng biểu thị bằng biểu thức:

$$\Delta G = \Delta G^0 + RT \ln \frac{f_C^c \cdot f_D^d}{f_A^a \cdot f_B^b} \quad (1-4)$$

Trong đó :

- f_i là hoạt độ của chất I (I = A, B, C, D);
- R là hằng số khí lý tưởng ($R = 8,314 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$);
- T là nhiệt độ Kelvin.

Thế biểu thức (1-1) và biểu thức (1-3) vào biểu thức (1-4), ta được:

$$-nFE = -nFE^0 + RT \ln \frac{f_C^c \cdot f_D^d}{f_A^a \cdot f_B^b}$$

Suy ra:
$$E = E^0 - \frac{RT}{nF} \ln \frac{f_C^c \cdot f_D^d}{f_A^a \cdot f_B^b} \quad (1-5)$$

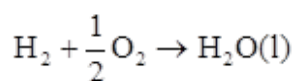
Trong tính toán, người ta thường thay các giá trị của hoạt độ của các chất A, B, C, D bằng các giá trị áp suất riêng phần (P_i) của các chất đó.

$$\text{Do đó: } E = E^0 - \frac{RT}{nF} \ln \frac{P_C^c \cdot P_D^d}{P_A^a \cdot P_B^b} \quad (1-6)$$

Biểu thức (1-5) và (1-6) xác định mối liên hệ giữa sức điện động của pin ở áp suất tiêu chuẩn (1atm) E^0 và sức điện động của pin ở áp suất bất kỳ E . Sức điện động E^0 ở một nhiệt độ nào đó có thể tính toán từ ΔG^0 của phản ứng trong pin ở nhiệt độ đó theo biểu thức (1-3).

2.3. Mô phỏng quá trình làm việc của pin nhiên liệu

Xét pin nhiên liệu dùng nhiên liệu tinh khiết và phản ứng trong pin là:



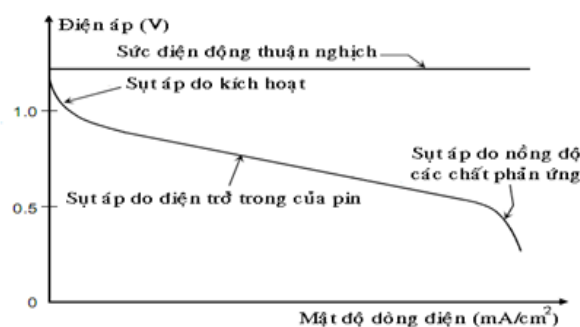
Từ biểu thức (1-3), ta có thể tính được sức điện động thuận nghịch của pin nhiên liệu ở điều kiện áp suất tiêu chuẩn (1 atm) và nhiệt độ tuyệt đối (298°K) như sau:

$$E_{298}^0 = \frac{237,3}{2.96,487} \approx 1,23\text{V}$$

Đối với phản ứng: $\text{H}_2 + \frac{1}{2} \text{O}_2 \rightarrow \text{H}_2\text{O}(\text{g})$
ta có thể tính: $E_{298}^0 = \frac{228,7}{2.96,487} \approx 1,18\text{V}$.

Từ biểu thức (1-6), ta có thể thấy sức điện động của pin ở nhiệt độ T tăng khi áp suất riêng phần của những chất tham gia phản ứng hoặc giảm áp suất riêng phần của các sản phẩm.

Sức điện động E của pin nhiên liệu tính theo biểu thức (1-5) và (1-6) chỉ là giá trị tương ứng lúc mở mạch (dòng điện do pin tạo ra bằng không). Thực tế, khi pin nhiên liệu vận hành, điện áp do nó tạo ra thường thấp hơn do sự sụt áp. Sự sụt áp chủ yếu bao gồm: Sụt áp do sự kích hoạt, sụt áp do điện trở trong của pin nhiên liệu và sụt áp do nồng độ các chất phản ứng.



Hình 2. Đồ thị biểu diễn sự sụt áp của pin nhiên liệu

Sụt áp do kích hoạt (ΔV_a):

Đây là năng lượng kích hoạt của phản ứng điện hóa tại các điện cực. Sự mất mát này phụ thuộc vào phản ứng xảy ra, vật liệu và cấu trúc của chất xúc tác điện cực, mức độ hoạt động của các chất phản ứng, mật độ dòng điện.

Độ sụt áp này thường được tính bằng phương trình Tafel:

$$\Delta V_a = \frac{RT}{\alpha.n.F} \ln \left(\frac{i}{i_0} \right) \quad (1-9)$$

$$\text{Hoặc: } \Delta V_a = a + b \ln(i) \quad (1-10)$$

Trong đó:

$$a = -\frac{RT}{\alpha.n.F} \ln(i_0) \text{ và } b = \frac{RT}{\alpha.n.F}$$

- α là hệ số di chuyển electron của phản ứng tại điện cực;

- i là mật độ dòng điện;

- i_0 là mật độ dòng điện trao đổi ở trạng thái cân bằng.

Sụt áp do điện trở trong của pin nhiên liệu (ΔV_R):

Đây là sự sụt áp do điện trở của các thành phần cấu tạo nên pin nhiên liệu (điện trở trong của pin nhiên liệu). Độ sụt áp này được xác định bằng công thức sau:

$$\Delta V_R = R_{fc} \cdot i \quad (1-11)$$

Trong đó:

- R_{fc} là điện trở trong của pin nhiên liệu;
- i là cường độ dòng điện trên một đơn vị diện tích (mật độ dòng điện).

Sụt áp do nồng độ các chất phản ứng (ΔV_c)

Đây là sự sụt áp do nồng độ các chất phản ứng giảm đi trong quá trình pin hoạt động.

Điện áp rơi bởi nồng độ các chất phản ứng không chỉ xảy ra bởi chất điện phân. Khi chất phản ứng hoặc sản phẩm ở thể khí, sự thay đổi áp suất riêng phần của các chất tại các khu vực phản ứng cũng làm thay đổi nồng độ của chúng. Khi phản ứng xảy ra, oxy (thường là oxy từ không khí) gần bề mặt điện cực bị lấy đi, áp suất riêng phần của oxy bị giảm đi so với áp suất của khối không khí đưa vào. Sự thay đổi áp suất riêng phần này cũng là nguyên nhân gây nên sự sụt áp của pin nhiên liệu. Độ sụt áp này được xác định bằng công thức:

$$\Delta V_{cg} = 4,31 \cdot 10^{-5} \cdot T [\ln(P_{H_2}) + \frac{1}{2} \ln(P_{O_2})] \quad (1-12)$$

Do đó, điện áp thực tế của pin nhiên liệu (V) có thể được tính bằng công thức sau:

$$E_{cell} = E_0 - \Delta V_a - \Delta V_R - \Delta V_c \quad (1-13)$$

Như vậy, hiệu suất điện áp của pin nhiên liệu có thể được tính bằng công thức:

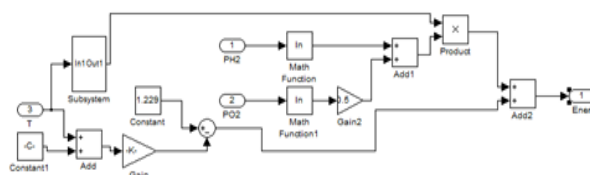
$$\eta_v = \frac{E_{cell}}{E_0} \quad (1-14)$$

Tùy theo từng loại pin nhiên liệu, hiệu suất điện áp của pin nhiên liệu khoảng 50% – 60%.

3. MÔ PHỎNG CÁC THÔNG SỐ ẢNH HƯỞNG ĐẾN QUÁ TRÌNH LÀM VIỆC CỦA PIN NHIÊN LIỆU

3.1. Sơ đồ mô phỏng

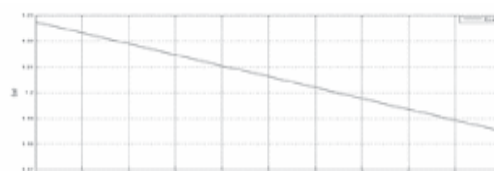
Sử dụng phần mềm Matlab-Simulink để mô phỏng quá trình làm việc của pin, ta có sơ đồ khối quá trình làm việc của pin như sau:



Hình 3. Sơ đồ khối mô phỏng pin nhiên liệu

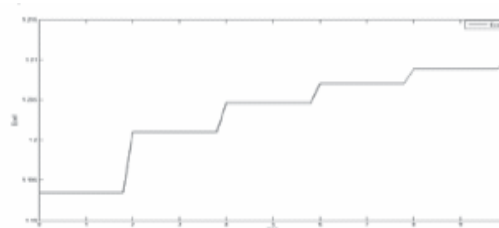
*Thuật toán:

Khi ta cho $T = (300-350)^\circ K$, $P_{H_2} = 1$ atm, $P_{O_2} = 1$ atm, chia khoảng nhiệt độ từ $T = (300-350)^\circ K$ tương ứng từ 0 đến 10 trên đồ thị, ta sẽ có đồ thị như sau:



Hình 4. Đồ thị E_{cell} và T

Khi cho $T = \text{const} = 340^\circ K$, $P_{H_2} = 1$ atm, $P_{O_2} = (1 \div 10)$ atm, với 05 mức thay đổi áp suất P_{O_2} , ta sẽ có đồ thị sau:



Hình 5. Đồ thị E_{cell} và P_{O_2}

4. KẾT LUẬN

Công nghệ pin nhiên liệu ngày càng được các nhà khoa học trong nước và trên thế giới tập trung nghiên cứu nhằm giảm thiểu tác hại môi trường do phương tiện vận tải gây ra. Bài báo tập trung đề cập đến quá trình làm việc của pin nhiên liệu, các thông số làm việc của pin cũng như mô phỏng quá trình làm việc của pin với các đồ thị mô tả một cách trực quan, dễ hiểu. ❖

Ngày nhận bài: **12/02/2024**

Ngày phản biện: **15/3/2024**

Tài liệu tham khảo:

- [1]. National Energy Technology Laboratory, “*Fuel Cell Handbook*”, 6th edition, Morgantown, WV, 2002.
- [2]. Boccaletti C., Di Grazia G., Fabbri G., Nisticò E., “*Energy models for stand alone power systems*”, EETI – 5th International Congress on Energy, Environment and Technological Innovation, Rio de Janeiro, Brazil, 2004.