

Preliminary calculation of CO₂ emissions from an internal combustion engine based on the equivalent chemical formula of the fuel used

Article info

Type of article:

Original research paper

DOI:

<https://doi.org/10.58845/jstt.utt.2023.vn.3.3.18-26>

*Corresponding author:

E-mail address:

chuyenph@utt.edu.vn

Received: 22/6/2023

Accepted: 20/9/2023

Published: 27/9/2023

Pham Hong Chuyen*

Department of Chemistry – Environment, Faculty of Applied Sciences, University of Transport Technology, Ha Noi, Viet Nam

Abstract: In this paper, we presents the results of building and solving chemical exercises to calculate the amount of CO₂ emitted from an internal combustion engine when using A95 gasoline, A92-E5 gasoline, diesel fuel. The exercises are built on the amount of fuel used and on the power of the engine. The chemical composition of the fuels is assumed to be close to reality and the data about combustion heat, engine power, successful energy conversion efficiency, physicochemical parameters of the fuel, ... are obtained from reputable sources. As a result, we has built six different types of exercises and based on theoretical calculations showing that when using gasoline fuel A92-E5 gives the smallest CO₂ emissions for the same fuel volume. But with the type of engine when using A95 gasoline gives the least CO₂ emissions. Specifically, with 10 liters of A92 - E5 gasoline fuel completely burned, the amount of CO₂ emitted is about 22.41 kg, while with a gasoline engine with a capacity of 40 kW, the useful work efficiency is 30% will consume 22.27 (liters) of A95 gasoline and emit about 51.56 (kg) of CO₂.

Keywords: Calculation of CO₂ emissions, A95 gasoline, A92-E5 gasoline, diesel fuel, internal combustion engine.

Tính toán sơ bộ lượng phát thải CO₂ từ động cơ đốt trong dựa trên công thức hóa học tương đương của nhiên liệu sử dụng

Thông tin bài viết
Dạng bài viết:
Bài báo nghiên cứu

Phạm Hồng Chuyên*
Bộ môn Hóa học - Môi trường/Khoa Khoa học Ứng dụng, Trường Đại học Công nghệ Giao thông vận tải, Hà Nội, Việt Nam

DOI:
<https://doi.org/10.58845/jstt.utt.2023.vn.3.3.18-26>

*Tác giả liên hệ:
Địa chỉ E-mail:
chuyenph@utt.edu.vn

Ngày nộp bài: 22/6/2023
Ngày chấp nhận: 20/9/2023
Ngày đăng bài: 27/9/2023

Tóm tắt: Trong bài báo này, tác giả trình bày kết quả xây dựng và giải các bài toán hóa học tính lượng khí CO₂ phát thải ra ở động cơ đốt trong khi sử dụng các loại nhiên liệu xăng A95, xăng A92-E5, nhiên liệu diesel. Các bài toán được xây dựng dựa trên lượng nhiên liệu sử dụng và dựa trên công suất của động cơ. Thành phần hóa học của các loại nhiên liệu được giả định sát với thực tế và các dữ liệu về nhiệt đốt cháy, công suất động cơ, hiệu suất chuyển hóa năng lượng thành công có ích, các thông số lý hóa của nhiên liệu,... được lấy từ các nguồn có uy tín. Kết quả, tác giả đã xây dựng được 6 kiểu bài toán khác nhau và dựa vào tính toán lý thuyết cho thấy khi sử dụng nhiên liệu xăng A92-E5 cho lượng khí thải CO₂ nhỏ nhất đối với cùng thể tích nhiên liệu, nhưng cùng loại động cơ khi dùng xăng A95 lại cho lượng khí thải CO₂ ít nhất. Cụ thể với 10 lít nhiên liệu xăng A92 - E5 đốt cháy hoàn toàn thì lượng khí CO₂ phát thải ra khoảng 22,41 kg, còn với động cơ xăng có công suất 40 kW, hiệu suất tạo công có ích là 30% sẽ tiêu thụ 22,27 (lít) xăng A95 và lượng khí CO₂ sẽ phát thải ra khoảng 51,56 (kg)

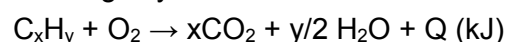
Từ khóa: Tính toán lượng phát thải khí CO₂, xăng A95, xăng A92-E5, nhiên liệu diesel, động cơ đốt trong.

1. Đặt vấn đề

Hiện nay, mức độ phát thải khí CO₂ từ động cơ đốt trong ngày càng gia tăng do nhu cầu phát triển kinh tế xã hội cần nhiều phương tiện vận tải hơn [1]. Các phương tiện vận tải có nhiều hình thức, chủng loại khác nhau nhưng đều cần phải có năng lượng để hoạt động, nguồn năng lượng này chủ yếu đến từ sự đốt cháy nhiên liệu. Tính đến tháng 9 năm 2022 ở Việt Nam có gần 5 triệu ô tô đang lưu hành, so với hơn 4,5 triệu xe vào cuối tháng 12 năm 2021 thì lượng xe ô tô đã gia tăng hơn 10% [2]. Điều đó chứng tỏ lượng nhiên liệu sử dụng để tạo ra năng lượng phục vụ cho nhu cầu vận hành số phương tiện đó cũng gia tăng theo. Như vậy, lượng phát thải khí CO₂ sẽ càng tăng lên

trong thời gian tới khi số phương tiện giao thông ngày càng tăng. Từ đó, vấn đề ô nhiễm môi trường càng trở lên trầm trọng hơn.

Nhiên liệu đang được sử dụng rộng rãi ở Việt Nam cũng như trên thế giới là các loại xăng, nhiên liệu diesel, khí hóa lỏng [3]. Những loại nhiên liệu này đều có thành phần chính là các hydrocarbon được chưng cất từ dầu thô [4-5]. Năng lượng được sản sinh và chuyển hóa thành cơ năng, nhiệt năng, điện năng,... thông qua quá trình đốt cháy nhiên liệu bằng oxy không khí. Các hydrocarbon có công thức tổng quát là C_xH_y, còn thành phần không khí chủ yếu là O₂ và N₂. Khi đốt cháy hoàn toàn nhiên liệu phản ứng xảy ra như sau:



Theo phản ứng trên, năng lượng cần tiêu thụ càng lớn thì lượng nhiên liệu đốt cháy càng nhiều. Tuy nhiên lượng khí CO₂ phát thải ra, ngoài phụ thuộc vào khối lượng nhiên liệu còn phụ thuộc vào hàm lượng Cacbon trong từng loại nhiên liệu và thành phần hóa học, cấu tạo hóa học của các loại nhiên liệu đó.

Trên thị trường ở Việt Nam hiện nay, các loại nhiên liệu thương mại phổ biến dùng cho động cơ đốt trong bao gồm xăng A92 - E5, xăng A95, nhiên liệu Diesel [3]. Thành phần hóa học chính của các loại nhiên liệu này là các loại hydrocacbon, mỗi loại nhiên liệu lại có các hydrocacbon mạch hở hoặc mạch vòng khác nhau tùy theo chúng được dùng cho loại động cơ đốt trong nào [4-5]. Với động cơ chạy bằng xăng như xe máy, ô tô gia đình, ... thành phần hóa học của xăng chủ yếu là các hydrocacbon mạch hở có nhánh, mạch vòng thuộc nhóm Naphtalic, hydrocacbon thơm thuộc nhóm Aromatic. Nhưng với động cơ chạy bằng nhiên liệu diesel các hydrocacbon lại thuộc nhóm Paraphenic, đó là các hydrocacbon có mạch thẳng không nhánh [6-7]. Khi đốt cháy mỗi loại nhiên liệu trên sẽ phát thải lượng CO₂ khác nhau, để tính toán được lượng CO₂ phát thải, cần phải có công thức tính toán dựa trên lượng nhiên liệu đầu vào, hiệu suất chuyển hóa năng lượng, các thông số nhiệt động học cho từng hợp chất trong từng loại nhiên liệu. Hiện nay, việc xây dựng các công thức/mô hình tính toán lượng phát thải CO₂ và lượng phát thải các chất độc hại khác theo điều kiện vận hành của từng loại động cơ có xét đến các đặc điểm công nghệ đã được các hãng phát triển phần mềm tính toán chuyên dụng [8-9]. Tuy nhiên việc tiếp cận, khai thác và sử dụng các phần mềm này hiện đang khá khó khăn đối với nhóm đối tượng là học sinh, sinh viên vì vậy bài báo trình bày phương pháp cơ bản để tính toán sơ bộ lượng phát thải CO₂ theo tính chất và công thức hóa học tương đương của nhiên liệu.

Do đó, việc xây dựng và giải các bài toán tính lượng khí CO₂ phát thải từ quá trình đốt cháy từng loại nhiên liệu cho động cơ đốt trong là rất cần thiết cho học sinh, sinh viên khối ngành cơ khí, công

nghệ kỹ thuật môi trường tham khảo. Với tài liệu này, tác giả mong muốn thông qua kết quả giải các bài toán thể hiện được mức độ phát thải khí nhà kính từ việc sử dụng các loại nhiên liệu khác nhau.

2. Xây dựng và giải các bài toán tính lượng khí CO₂ phát thải dựa trên lượng nhiên liệu đốt cháy

2.1. Bài toán sử dụng nhiên liệu xăng A95

Xăng A95 là loại nhiên liệu có nguồn gốc từ dầu mỏ, con số 95 có nghĩa là chỉ số octan của xăng bằng 95. Chỉ số octan hay còn gọi là chỉ số chống kích nổ của nhiên liệu được tính bằng tỉ lệ % thể tích iso-octan (2,2,4-trimethylpentan) có trong hỗn hợp với n-heptan [4,5]. Xăng là một hỗn hợp phức tạp của hơn 500 hydrocacbon có thể có từ 5 đến 12 cacbon trong phân tử. Trong đó, các hợp chất loại ankan mạch thẳng hoặc liên kết phân nhánh có mặt với số lượng lớn nhất. Ngoài ra xăng còn chứa một lượng nhỏ các hợp chất hydrocacbon thơm và xycloankan. Các anken gần như không có trong xăng [4-6]. Như vậy có thể tổng quát thành phần hóa học chính của xăng là các ankan có công thức chung C_nH_{2n+2} (với n là số nguyên tử Cacbon của các ankan có trong xăng).

Như vậy, bài toán tính lượng khí CO₂ phát thải ra khi đốt cháy một lượng xăng A95 được xây dựng như sau:

Đề bài: Giả sử xăng A95 được bán rộng rãi trên thị trường là hỗn hợp gồm iso octan và n-heptan được trộn với tỉ lệ về số mol tương ứng là 95:5. Để đi được một quãng đường s (km), trung bình một ô tô tiêu thụ khoảng a (lít) xăng A95. Tính lượng khí CO₂ phát thải ra trong quá trình xe di chuyển với quãng đường trên. Biết khối lượng riêng của xăng A95 ở 20°C là 0,75 (g/ml) và toàn bộ xăng được đốt cháy hoàn toàn thành CO₂ và H₂O.

Lời giải:

Bước 1: Lập công thức tổng quát của hydrocacbon và tính số mol

Khối lượng của a (lít) xăng A95 sẽ là 1000.a.0,75 (g)

Theo giả thuyết, xăng A95 là hỗn hợp iso

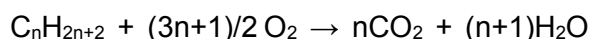
octan (C₈H₁₈) và n-heptan (C₇H₁₆) được trộn theo tỉ lệ về số mol tương ứng là 95:5, nên đặt công thức chung của hydrocacbon có trong xăng A95 là C_nH_{2n+2} thì ta có:

$$n = (95.8 + 5.7):100 = 7,95$$

Số mol C_nH_{2n+2} sẽ là: $1000.a.0,75 : (14.7,95 + 2) = 750a : 113,3$ (mol)

Bước 2: Viết phương trình phản ứng đốt cháy

Phản ứng hóa học đốt cháy xăng A95 là:



Bước 3: Tính lượng khí CO₂

Số mol CO₂ tạo ra khi đốt cháy a lít xăng là $7,95.(750a : 113,3)$ (mol)

Khối lượng CO₂ phát thải ra sẽ là: $44.7,95.(750a : 113,3)$ (g)

Như vậy, nếu một ô tô di chuyển 100km tiêu thụ 10 lít xăng thì lượng khí CO₂ sẽ phát thải ra khoảng 23,2 kg.

2.2. Bài toán sử dụng nhiên liệu xăng A92-E5

Xăng A92 - E5 là loại xăng được tạo ra từ việc trộn thêm etanol (C₂H₅OH) vào xăng A92 với hàm lượng 5% về thể tích [10]. Tức là một lít xăng A92 - E5 sẽ có 0,92 lít xăng A92 và 0,05 lít etanol. Trong đó xăng A92 là loại xăng có chỉ số octan bằng 92. Khi đốt cháy loại xăng này, lượng khí CO₂ tạo ra sẽ khác so với khi đốt cháy cùng một lượng xăng A95. Bài toán tính lượng khí CO₂ phát thải ra khi đốt cháy một lượng xăng A92 - E5 được xây dựng như sau:

Đề bài:

Xăng A92 - E5 là loại xăng được tạo ra từ việc trộn thêm etanol (C₂H₅OH) vào xăng A92 với hàm lượng 5% về thể tích. Đây là loại xăng được gọi là xăng sinh học và thân thiện môi trường do etanol được điều chế từ các nguyên liệu có nguồn gốc thực vật và được lên men bằng quá trình sinh hóa. Giả sử xăng A92 có thành phần gồm các hydrocacbon là is octan và n-heptan được trộn theo tỉ lệ tương ứng là 92:8 về số mol. Tính lượng khí CO₂ phát thải ra khi đốt cháy hoàn toàn a lít xăng này. Biết khối lượng riêng của xăng A92 là

0,74 g/ml và khối lượng riêng của etanol là 0,79 g/ml.

Lời giải:

Bước 1: Lập công thức tổng quát của hydrocacbon và tính số mol

Theo giả thuyết, xăng A92 là hỗn hợp iso octan (C₈H₁₈) và n-heptan (C₇H₁₆) được trộn theo tỉ lệ về số mol tương ứng là 92:8, nên đặt công thức chung của hydrocacbon có trong xăng A92 là C_nH_{2n+2} thì ta có:

$$n = (92.8 + 8.7):100 = 7,92$$

Trong a lít xăng A92-E5 có 0,95a lít xăng A92 và 0,05a lít C₂H₅OH.

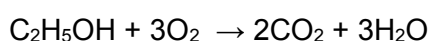
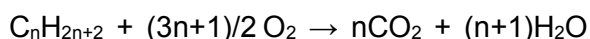
Khối lượng xăng A92 sẽ là $0,95a.0,74.1000$ (g), còn khối lượng etanol sẽ là $0,05a.0,79.1000$ (g)

Số mol hydrocacbon trong xăng là: $0,95a.0,74.1000:(14.7,92+2) = 17575a:2822$ (mol)

Số mol etanol trong xăng là: $0,05a.0,79.1000:46 = 37a:46$ (mol)

Bước 2: Viết phương trình phản ứng đốt cháy

Phản ứng đốt cháy xăng A92-E5 như sau:



Bước 3: Tính lượng khí CO₂

Số mol CO₂ phát thải ra khi đốt cháy a lít xăng A92-E5 là: $7,92.(17575a:2822) + 2.(37a:46) \approx 50,93a$ mol.

Khi a = 10 lít thì khối lượng CO₂ phát thải ra sẽ bằng khoảng 22,41 kg.

2.3. Bài toán sử dụng nhiên liệu diesel

Nhiên liệu diesel là sản phẩm thu được khi chưng cất phân đoạn dầu thô (phân đoạn gas - oil nhẹ) ở nhiệt độ khoảng 250°C - 350°C. Thành phần hóa học của nhiên liệu diesel là các hydrocacbon có số nguyên tử cacbon từ 10 đến 21 trong phân tử, các hydrocacbon chủ yếu là các n-parafin, iso-parafin [4-5]. Nhiên liệu diesel sau khi phun vào xylanh không tự cháy ngay mà phải có một thời gian để oxy hóa sâu các hydrocacbon trong nhiên

liệu, tạo hợp chất trung gian chứa oxy có khả năng tự bốc cháy [3]. Để đặc trưng cho khả năng tự bốc cháy của nhiên liệu diesel, người ta sử dụng đại lượng trị số xetan. Trị số này là đơn vị đo quy ước, đặc trưng cho khả năng tự bắt lửa của nhiên liệu, giá trị này bằng giá trị của hỗn hợp chuẩn có cùng khả năng tự bắt cháy. Hỗn hợp chuẩn này gồm hai hydrocacbon là n - xetan ($C_{16}H_{34}$) quy định là 100, có khả năng tự bắt cháy tốt và α - metylnaphtalen ($C_{11}H_{10}$) quy định là 0, có khả năng tự bốc cháy kém [4-5].

Như vậy, bài toán tính lượng khí CO_2 phát thải ra khi đốt cháy một lượng nhiên liệu diesel được xây dựng như sau:

Đề bài:

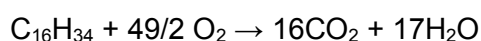
Nhiên liệu diesel là một loại nhiên liệu dùng cho động cơ đốt trong dựa trên nguyên lý nén cháy. Đây là loại nhiên liệu cho công suất động cơ lớn và gần như không phải chế biến như nhiên liệu xăng. Thành phần hóa học của nhiên liệu diesel chủ yếu là các n-parafin, iso - parafin có trị số xetan cao (trị số đặc trưng cho khả năng tự bắt lửa của nhiên liệu). Trị số xetan của nhiên liệu diesel được xác định bằng cách so sánh khả năng tự bắt cháy của nhiên liệu với khả năng tự bốc cháy của hỗn hợp chuẩn gồm hai hydrocacbon là n - xetan ($C_{16}H_{34}$) quy định là 100, có khả năng tự bắt cháy tốt và α - metylnaphtalen ($C_{11}H_{10}$) quy định là 0, có khả năng tự bốc cháy kém. Giả sử hydrocacbon có trong nhiên liệu diesel chủ yếu là n - xetan, tính khối lượng khí CO_2 phát thải ra khi đốt cháy hoàn toàn a lít nhiên liệu diesel. Biết khối lượng riêng của nhiên liệu diesel là 0,83 (g/ml) ở điều kiện $25^{\circ}C$.

Lời giải:

Khối lượng của a lít nhiên liệu diesel là:
 $0,83 \cdot 1000 \cdot a = 830a$ (g)

Số mol hydrocacbon (n - xetan: $C_{16}H_{34}$) trong nhiên liệu diesel là: $830a:226$ (mol)

Phản ứng đốt cháy hoàn toàn xetan là:



Số mol CO_2 phát thải ra khi đốt cháy a lít nhiên liệu diesel là: $16 \cdot (830a:226)$ (mol)

Khối lượng CO_2 phát thải ra tương ứng sẽ là:
 $44 \cdot 16 \cdot (830a:226) \approx 2585,49a$ (g)

Như vậy khi đốt 10 lít nhiên liệu diesel sẽ phát thải ra khoảng 25,85 (kg) khí CO_2 .

3. Xây dựng và giải các bài toán tính lượng khí CO_2 phát thải dựa trên công suất của động cơ

3.1. Bài toán sử dụng nhiên liệu xăng A95

Khi một động cơ đốt trong hoạt động, nó cần năng lượng, năng lượng này được lấy từ phản ứng đốt cháy nhiên liệu. Tùy theo công suất làm việc của động cơ mà năng lượng cần là khác nhau [11]. Với một phản ứng hóa học, các chất phản ứng với nhau sinh ra sản phẩm mới và giải phóng năng lượng dưới các dạng khác nhau, đó là hiệu ứng nhiệt của phản ứng (Entanpi ΔH) và năng lượng tự do (ΔG , năng lượng tự do Gibbs). Năng lượng tự do và entanpi là hai khái niệm của nhiệt động học được sử dụng để định lượng năng lượng được giải phóng khi một phản ứng hóa học xảy ra trong một điều kiện nhất định của hệ nhiệt động [12]. Hệ nhiệt động là một không thời gian chứa đựng các dạng vật chất có giới hạn xác định [13]. Năng lượng tự do sẽ thể hiện lượng công mà hệ nhiệt động có thể thực hiện. Nói cách khác, năng lượng tự do là lượng năng lượng có trong hệ đó để thực hiện công nhiệt động lực học. Còn Entanpi là đại lượng biểu thị tổng năng lượng trong hệ nhiệt động lực học. Những khác biệt cơ bản giữa năng lượng tự do và entanpi là năng lượng tự do cho biết tổng năng lượng có sẵn để thực hiện công nhiệt động trong khi entanpi cho biết tổng năng lượng có thể chuyển thành nhiệt của hệ đó [12-13].

Như vậy, một động cơ đốt trong hoạt động sẽ cần nhiên liệu, để tính lượng nhiên liệu tiêu tốn sẽ phải dựa vào giá trị entanpi sinh ra của phản ứng đốt cháy nhiên liệu vì giá trị này sẽ bao gồm năng lượng làm cho động cơ nóng lên, sinh công và các hao phí khác. Chính vì vậy, để tính được lượng khí CO_2 phát thải dựa trên công suất của động cơ cần phải tính được hiệu ứng nhiệt của phản ứng đốt cháy nhiên liệu. Do đó, bài toán tính lượng khí CO_2 phát thải dựa trên công suất của động cơ sẽ được xây dựng như sau:

Đề bài:

Một ô tô sử dụng động cơ xăng có công suất 40 kW, hiệu suất tạo công có ích là 30%; loại xăng ô tô sử dụng là A95 (giả sử loại xăng này có thành phần hóa học gồm iso octan và n-heptan được trộn theo tỉ lệ mol tương ứng là 95 : 5). Tính lượng khí CO₂ mà ô tô này phát thải ra khi đi một quãng đường dài s (km) với vận tốc trung bình v (km/h).

Biết nhiệt đốt cháy của iso octan và n-heptan lần lượt là - 5460 (kJ/mol), - 4825 (kJ/mol); khối lượng riêng của xăng A95 ở 20°C là 750 kg/m³.

Lời giải:

Bước 1: Lập công thức tổng quát của hydrocarbon và tính số mol

Ta có 1 m³ xăng bằng 1000 lít sẽ nặng 750 kg.

Vậy, khối lượng của một lít xăng A95 là: 750 : 1000 = 0,75 (kg) = 750 (g)

Theo giả thuyết, xăng A95 là hỗn hợp iso octan (C₈H₁₈) và n - heptan (C₇H₁₆) được trộn theo tỉ lệ về số mol tương ứng là 95 : 5, nên đặt công thức chung của hydrocarbon có trong xăng A95 là C_nH_{2n+2} thì ta có:

$$n = (95.8 + 5.7) : 100 = 7,95$$

Số mol C_nH_{2n+2} trong một lít xăng A95 sẽ là: 750 : (14.7,95 + 2) = 750 : 113,3 (mol)

Suy ra, số mol C₈H₁₈ trong một lít xăng là: 0,95.(750 : 113,3);

còn của C₇H₁₆ là: 0,05.(750 : 113,3).

Bước 2: Tính công thực hiện của động cơ [11], [14-15]

Vì nhiệt đốt cháy của một chất là nhiệt lượng tỏa ra khi đốt cháy hoàn toàn 1 mol chất đó thành các oxit bền [5] nên nhiệt lượng tỏa ra khi đốt cháy 1 lít xăng A95 sẽ là:

$$q = 0,95.(750 : 113,3).5460 + 0,05.(750 : 113,3).4825 \approx 35932,81 \text{ (kJ)} = 35932,81.10^3 \text{ (J)}.$$

Đổi v (km/h) thành 5.v/18 (m/s); 40 kW thành 40.10³ (J/s); s (km) thành s.10³ (m)

⇒ Công thực hiện của động cơ trong thời gian t (s) được tính theo công thức: A = P . t

Với P (J/s) là công suất động cơ, t (s) là thời gian thực hiện công.

$$\Rightarrow A = P.(s.10^3 : (5.v/18)) = (40.10^6.s) : (5.v/18) = 144.10^6.s/v \quad (\text{J})$$

Bước 3: Tính thể tích nhiên liệu

Để đi được quãng đường dài s (km), động cơ sẽ tiêu thụ hết a (lít) xăng A95.

⇒ Nhiệt lượng do a (lít) xăng khi bị đốt cháy hoàn toàn tỏa ra là: Q = 35932,81.10³.a (J)

Mặt khác hiệu suất tạo công có ích để xe chuyển động là 30% nên ta có A = 30%.Q = 0,3.35932,81.10³.a (J)

Do đó, ta có biểu thức: 144.10⁶.s/v = 0,3.35932,81.10³.a

$$\Rightarrow a \approx 13,36.s/v \text{ (lít)}.$$

Bước 4: Viết phản ứng cháy và lượng CO₂ phát thải

Phản ứng hóa học đốt cháy xăng A95 là:

C_nH_{2n+2} + (3n+1)/2 O₂ → nCO₂ + (n+1)H₂O
với n = 7,95.

Số mol CO₂ tạo ra khi đốt cháy a lít xăng là 7,95.(750a : 113,3) (mol)

Khối lượng CO₂ phát thải ra sẽ là: 44.7,95.(750a : 113,3) = 238500.a/103 (g)

Như vậy, khi ô tô di chuyển 100km với vận tốc trung bình 60 (km/h) sẽ tiêu thụ 22,27 (lít) xăng A95 và lượng khí CO₂ sẽ phát thải ra khoảng 51,56 (kg).

3.2. Bài toán sử dụng nhiên liệu xăng A92-E5

Tương tự như bài toán tính lượng khí CO₂ phát thải ra khi ô tô sử dụng nhiên liệu xăng A95, bài toán tính lượng khí CO₂ phát thải ra khi ô tô sử dụng nhiên liệu xăng A92-E5 được xây dựng như sau:

Đề bài:

Một động cơ xăng có công suất 40 kW, hiệu suất tạo công có ích là 30%; loại xăng ô tô sử dụng là A92-E5 là loại xăng được tạo ra từ việc trộn thêm etanol (C₂H₅OH) vào xăng A92 với hàm lượng 5% về thể tích (Giả sử xăng A92 có thành phần gồm các hydrocarbon là iso octan và n-heptan được

trộn theo tỉ lệ tương ứng là 92:8 về số mol). Tính lượng khí CO₂ mà động cơ này phát thải ra khi hoạt động trong thời gian t (h). Biết nhiệt đốt cháy của iso octan, n-heptan, etanol lần lượt là - 5460 (kJ/mol), - 4825 (kJ/mol), - 1235 (kJ/mol); ở 20°C khối lượng riêng của xăng A92 là 0,74 g/ml và khối lượng riêng của etanol là 0,79 g/ml.

Lời giải:

Bước 1: Lập công thức tổng quát của hydrocacbon và tính số mol

Theo giả thuyết, xăng A92 là hỗn hợp iso octan (C₈H₁₈) và n-heptan (C₇H₁₆) được trộn theo tỉ lệ về số mol tương ứng là 92:8, nên đặt công thức chung của hydrocacbon có trong xăng A92 là C_nH_{2n+2} thì ta có:

$$n = (92.8 + 8.7):100 = 7,92$$

Giả sử động cơ tiêu thụ hết a (lít) xăng A92 - E5 trong thời gian t (h). Ta tính được lượng xăng A92 là 0,95a (lít), còn lượng etanol là 0,05a (lít).

Khối lượng xăng A92 sẽ là 0,95a.0,74.10³ (g), còn khối lượng etanol sẽ là 0,05a.0,79.10³ (g)

Số mol hydrocacbon trong xăng là: 0,95a.0,74.10³:(14.7,92+2) = 17575a:2822 (mol)

Số mol etanol trong xăng là: 0,05a.0,79.10³:46 = 37a:46 (mol)

Bước 2: Tính công thực hiện của động cơ [11], [14-15]

Mặt khác, vì nhiệt đốt cháy của một chất là nhiệt lượng tỏa ra khi đốt cháy hoàn toàn 1 mol chất đó thành các oxit bền [5] nên nhiệt lượng tỏa ra khi đốt cháy a lít xăng A92-E5 sẽ là:

$$Q = 0,92.(17575a:2822).5460 + 0,08.(17575a:2822).4825 + (37a:46).1235 \approx 34681,07.a \text{ (kJ)}$$

Đổi 40 kW thành 40.103 (J/s).

⇒ Công thực hiện của động cơ trong thời gian t (h) được tính theo công thức: A = P . t .3600 (J)

Với P (J/s) là công suất động cơ, t (h) là thời gian thực hiện công.

$$\Rightarrow A = 144.106.t \quad (\text{J})$$

Bước 3: Tính thể tích nhiên liệu

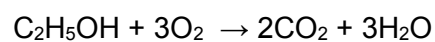
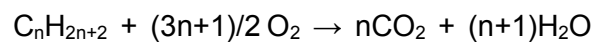
Mặt khác hiệu suất tạo công có ích để xe chuyển động là 30% nên ta có A = 30%.Q = 0,3.34681,07.103.a (J)

Do đó, ta có biểu thức: 144.106.t = 0,3.34681,07.103.a

$$\Rightarrow a \approx 13,84.t \quad (\text{lít})$$

Bước 4: Viết phản ứng cháy và lượng CO₂ phát thải

Phản ứng đốt cháy xăng A92-E5 như sau:



⇒ số mol CO₂ phát thải ra khi đốt cháy a lít xăng A92-E5 là: 7,92.(17575a:2822) + 2.(37a:46) ≈ 50,93a (mol).

Như vậy, khi động cơ làm việc với thời gian là 100/60 (h) thì lượng khí CO₂ phát thải ra sẽ khoảng 51,69 (kg).

3.3. Bài toán sử dụng nhiên liệu diesel

Tương tự như bài toán tính lượng khí CO₂ phát thải ra khi ô tô sử dụng nhiên liệu xăng A95 và A92-E5, bài toán tính lượng khí CO₂ phát thải ra khi ô tô sử dụng nhiên liệu diesel được xây dựng như sau:

Đề bài:

Một loại động cơ đốt trong có công suất 400 kW chạy bằng nhiên liệu diesel. Thành phần hóa học của nhiên liệu diesel chủ yếu là các n-parafin, iso - parafin có trị số xetan cao (trị số đặc trưng cho khả năng tự bắt lửa của nhiên liệu). Giả sử hydrocacbon có trong nhiên liệu diesel chủ yếu là n - xetan (C₁₆H₃₄), tính khối lượng khí CO₂ phát thải ra khi động cơ hoạt động trong thời gian t (h). Biết khối lượng riêng của nhiên liệu diesel là 0,83 (g/ml) ở điều kiện 25°C, hiệu suất chuyển hóa năng lượng thành công có ích của động cơ là 30%, nhiệt đốt cháy của n - xetan là - 10821,5 (kJ/mol).

Lời giải:

Bước 1: Lập công thức tổng quát của hydrocacbon và tính số mol

Giả sử khi hoạt động trong thời gian t (h)

động cơ tiêu thụ hết a (lít) nhiên liệu diesel.

Khối lượng của a (lít) nhiên liệu diesel là:
 $0,83.1000.a = 830a$ (g)

Số mol hydrocacbon (n - xetan: $C_{16}H_{34}$) trong nhiên liệu diesel là: $830a:226$ (mol)

Suy ra, nhiệt lượng tỏa ra khi đốt cháy hết a (lít) nhiên liệu diesel là: $(830a:226).10821,5$ (kJ) $\approx 39742,68.a.10^3$ (J).

Bước 2: Tính công thực hiện của động cơ [11], [14-15]

Mặt khác, hiệu suất tạo công có ích của động cơ là 30% nên công sinh ra là: $A = 0,3.39742,68.a.10^3$ (J).

Đổi 40 kW thành 40.10^3 (J/s).

\Rightarrow Công thực hiện của động cơ trong thời gian t (h) được tính theo công thức: $A = P. t .3600$ (J)

Với P (J/s) là công suất động cơ, t (h) là thời gian thực hiện công.

$\Rightarrow A = 144.10^6.t$ (J)

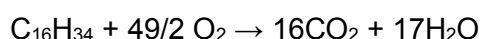
Bước 3: Tính thể tích nhiên liệu

Do đó, ta có biểu thức: $144.10^6.t = 0,3.39742,68.a.10^3$

$\Rightarrow a \approx 12,08.t$ (lít).

Bước 4: Viết phản ứng cháy và lượng CO_2 phát thải

Phản ứng đốt cháy hoàn toàn xetan là:



Số mol CO_2 phát thải ra khi đốt cháy a lít nhiên liệu diesel là: $16.(830a:226) = 6640a/113$ (mol)

Như vậy, khi động cơ làm việc với thời gian là 100/60 (h) thì lượng khí CO_2 phát thải ra sẽ khoảng 51,97 (kg).

4. Kết luận

Với việc xây dựng và giải các bài toán tính lượng phát thải khí CO_2 khi sử dụng các loại nhiên liệu xăng A95, xăng A92-E5, nhiên liệu diesel dựa trên lượng nhiên liệu tiêu hao và dựa trên công suất của động cơ chúng ta có thể thấy mỗi loại nhiên liệu sẽ cho lượng khí CO_2 khác nhau. Cụ thể,

khi sử dụng cùng thể tích nhiên liệu như nhau thì nhiên liệu xăng A92-E5 phát thải ra ít CO_2 hơn so với 2 loại nhiên liệu còn lại. Nhưng với cùng công suất động cơ và hiệu suất như nhau, khi sử dụng nhiên liệu xăng A95 lại cho lượng khí CO_2 là ít nhất. Cụ thể với 10 lít nhiên liệu xăng A92 - E5 đốt cháy hoàn toàn thì lượng khí CO_2 phát thải ra khoảng 22,41 kg, còn với động cơ xăng có công suất 40 kW, hiệu suất tạo công có ích là 30% sẽ tiêu thụ 22,27 (lít) xăng A95 và lượng khí CO_2 sẽ phát thải ra khoảng 51,56 (kg)

Các kết quả tính toán thu được hoàn toàn dựa vào lý thuyết và các giả định thành phần hóa học của nhiên liệu ở một điều kiện nhất định. Tuy nhiên, các kết quả thu được có thể làm tư liệu tham khảo cho sinh viên làm bài tập tính toán liên quan đến việc tính lượng khí CO_2 phát thải khi động cơ đốt trong sử dụng các loại nhiên liệu khác nhau

Tài liệu tham khảo

- [1] 72% khí thải CO_2 đến từ vận tải đường bộ. [online] Available at: <http://vlr.vn/van-tai/72-khi-thai-CO2-den-tu-van-tai-duong-bo-4833.vlr>.
- [2] Tổng hợp số liệu phương tiện giao thông trên cả nước. [online] Available at: <http://www.vr.org.vn/thong-ke/Pages/tong-hop-so-lieu-phuong-tien-giao-thong-trong-ca-nuoc.aspx>.
- [3] H.Phan. (2005). Giáo trình Động cơ đốt trong. NXB Nông nghiệp Hà Nội.
- [4] T.T.Ngo. (2002). Hóa học dầu mỏ và khí. NXB Đại học Quốc gia Hà Nội.
- [5] N.T.Đình. (2006). Hóa học dầu mỏ và khí. NXB Khoa học và kỹ thuật Hà Nội.
- [6] Xăng A92 và A95 có công dụng khác nhau như thế nào? [online] Available at: <https://pvchem.com.vn/goc-tu-van/xang-a92-va-95.html>.
- [7] Dầu diesel là gì? Quy trình sản xuất dầu diesel sinh học. [online] Available at: <https://vietchem.com.vn/tin-tuc/dau-diesel-la-gi.html>.
- [8] X.-H.T.Nguyen, N.-U.T.Nguyen, T.T.T.Pham.

- (2019). Tính toán lượng phát thải CO₂ trong một số hoạt động tại trường Đại học Thủ Dầu Một, số 3 (42), 49-56.
- [9] R.Kawamoto, H.Mochizuki, Y.Moriguchi, T.Nakano, M.Motohashi, Y.Sakai, A.Inaba. (2019). Estimation of CO₂ Emissions of Internal Combustion Engine Vehicle and Battery Electric Vehicle Using LCA. Sustainability. doi:10.3390/su11092690.
- [10] Xăng sinh học E5 có tốt không? Cần lưu ý những gì khi sử dụng xăng E5 cho động cơ xe máy. [online] Available at: <https://vietchem.com.vn/tin-tuc/xang-sinh-hoc-e5.html>
- [11] N.Naser, A.G.A.Jameel, A-H.Emwas, E.Singh. (2019). The influence of chemical composition on ignition delay times of gasoline fractions. Combustion and Flame, 209, 418-429.
- [12] S.H.Nguyen. (2015). Giáo trình Vật lý đại cương nhiệt động học và vật lý phân tử. NXB Đại học Quốc gia Hà Nội.
- [13] H.D.Nguyen. (2000). Giáo trình Hóa lý - Tập 1. NXB Giáo dục. Hà Nội.
- [14] T.D.Nguyen. (2007). Nguyên lý động cơ đốt trong. NXB Giao thông vận tải.
- [15] A.Alagumalai. (2014). Internal combustion engines: Progress and prospects. Renewable and Sustainable Energy Reviews, 38, 561-571