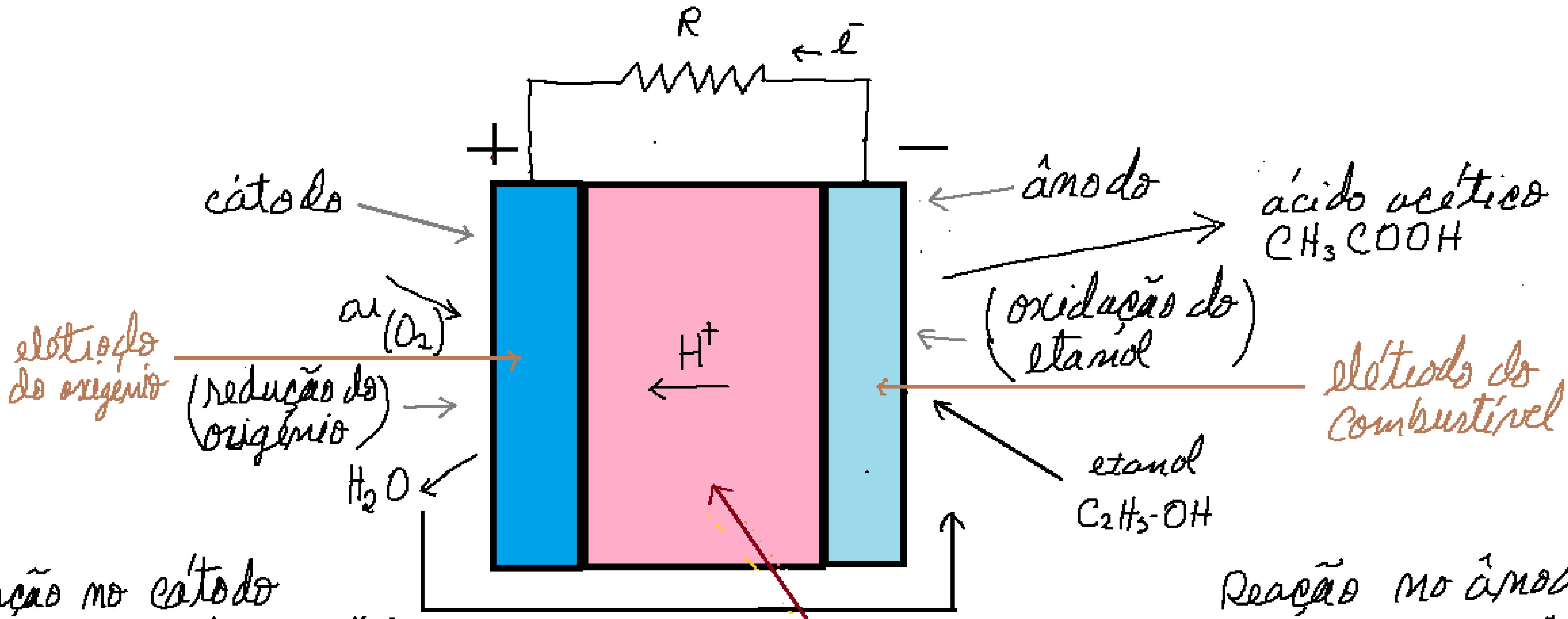
Estudo de uma célula de combustível que utiliza etanol. Determinação da carga óptima e do rendimento.

IST 2021

Sumário

- Constituição
- Reações químicas no cátodo e no ânodo
- Caraterística elétrica
- Potência elétrica e Carga ótima
- Energia libertada na reação
- Rendimento

Célula de Etanol direta
Constituição:



Reação no cátodo

(dominante) $O_2 + 4H^+ + 4e^- \rightarrow 2H_2O$

(desejável) $3O_2 + 12H^+ + 12e^- \rightarrow 6H_2O$

Reação no ânodo

(dominante) $C_2H_5 \cdot OH + H_2O \rightarrow CH_3COOH + 4H^+ + 4e^-$

(desejável) $C_2H_5\text{-}OH + 3H_2O \rightarrow 2CO_2 + 12H^+ + 12e^-$

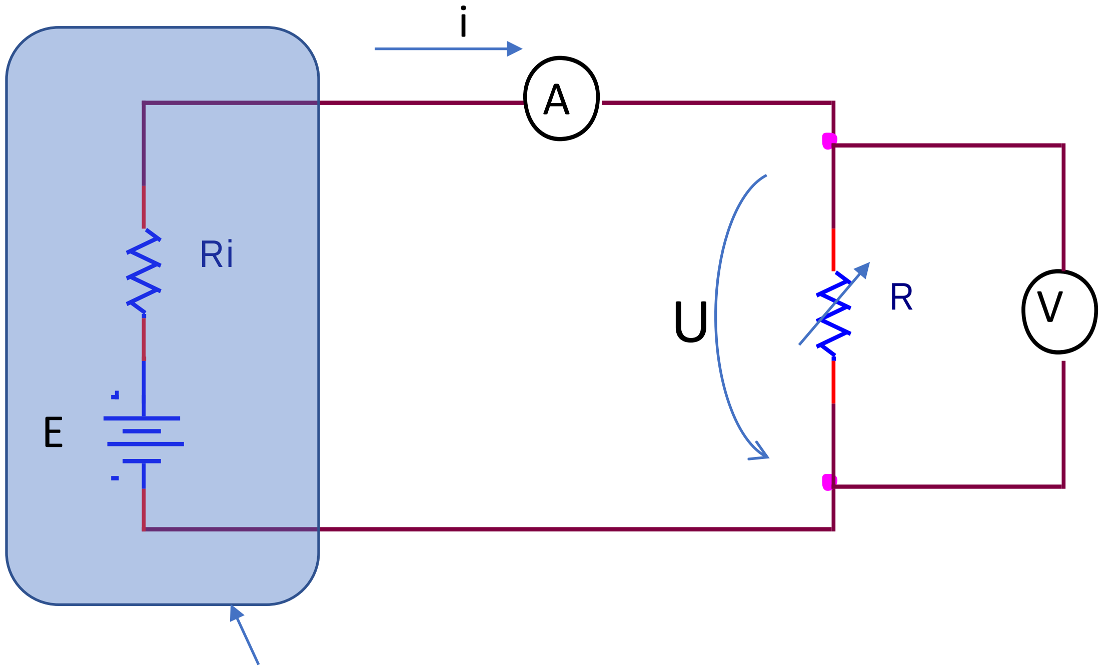
Reação global

$C_2H_5 \cdot OH + O_2 \longrightarrow CH_3COOH + H_2O$

$C_2H_5 \cdot OH + 3O_2 \rightarrow 2CO_2 + 3H_2O$

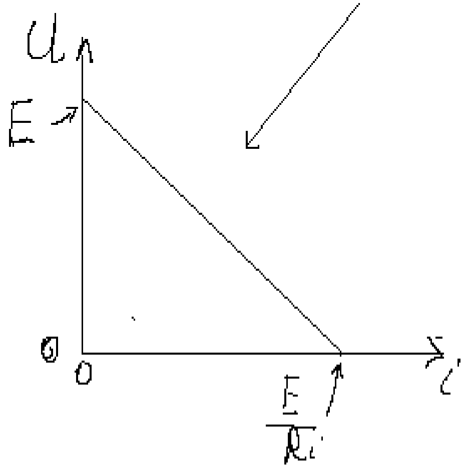
membrana de permuta de protões

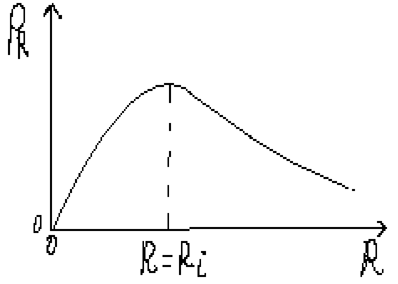
Característica tensão-corrente da célula



Circuito equivalente
da célula de etanol

$$U = Ri = E - iR_i$$





$$i = \frac{E}{R_i + R}$$

$$P_R = Ui = Ri^2 = R\frac{E^2}{(R+R_i)^2}$$

$$\frac{dP_R}{dR} = \frac{E^2}{(R+R_i)^2} - \frac{2RE^2}{(R+R_i)^3} = \frac{E^2(R_i - R)}{(R+R_i)^3}$$

$$\frac{dP}{dR} = 0 \Rightarrow R = R_i \qquad P_R\Big|_{R=R_i} = \frac{E^2}{4R_i}$$

Energia libertada na reação

$$C_2H_5OH + O_2 \rightarrow CH_3COOH + H_2O$$

$$\Delta H = \Delta H^{f}_{CH_3COOH} + \Delta H^{f}_{H_2O} - \Delta H^{f}_{C_2H_5OH}(sol.) = -483.66 - 285.8 - (-277 - 0.35) = -492.11\ kJ/mol$$

$$P_{EQ\ libertada} = 492.11 \times 10^{3} \frac{\Delta m_{C_2H_5OH}}{\Delta t} \times f_c$$

$f_c \rightarrow$ fator de conversão do etanol (determinado a partir do pH do efluente)

Determinação de $\frac{\Delta m_{C_2H_5OH}}{\Delta t}$:

$$n_{C_2H_5OH} = \frac{m_{C_2H_5OH}}{46} \qquad m_{comb} = m_{H_2O} + m_{C_2H_5OH}$$

Na solução que constitui o combustível

$$\begin{cases} r_m \equiv \dfrac{m_{C_2H_5OH}}{m_{H_2O}} = \dfrac{\rho_{C_2H_5OH}}{\rho_{H_2O}} \times \dfrac{V_{C_2H_5OH}}{V_{H_2O}} = \dfrac{789}{1000} \times \dfrac{1}{9} = 0.08767 \\ \lambda_m = \dfrac{46}{18} \dfrac{m_{C_2H_5OH}}{m_{H_2O}} \end{cases}$$

$$m_{comb.} = \left(\frac{1}{\lambda_m} + 1\right) m_{C_2H_5OH}$$

$$m_{comb} = (1 + \lambda_m)\, m_{H_2O}$$

$$n_{C_2H_5OH} = \frac{1}{46} \frac{m_{comb.}}{1 + 1/\lambda_m}$$

$$P_{EQ} = 492.11 \times 10^{3} f_c \frac{1}{46} \frac{1}{1 + 1/\lambda_m} \frac{\Delta m_{comb}}{\Delta t}$$

Relação entre m_{comb} e $m_{efluente}$

$$m_{efluente} = m_{H_2O} + (1-f_c)\, m_{C_2H_5OH} + m_{CH_3COOH} + m_{H_2O\ reação}$$

$$m_{CH_3COOH} = 60 f_c\, n_{C_2H_5OH} = f_c \frac{60}{46} m_{C_2H_5OH} = f_c \frac{60}{46} \frac{m_{comb}}{1+\frac{1}{\lambda m}} \quad , \quad m_{H_2O\ reação} = 18 f_c\, n_{C_2H_5OH} = f_c \frac{18}{46} \frac{m_{comb}}{1+\frac{1}{\lambda m}}$$

$$m_{efluente} = \frac{m_{comb}}{1+\lambda m} + (1-f_c) \frac{m_{comb}}{1+\frac{1}{\lambda m}} + \frac{60}{46} \frac{m_{comb}}{1+1/\lambda m} f_c + \frac{18}{46} \frac{m_{comb}}{1+1/\lambda m} f_c$$

$$m_{comb} = m_{efluente} \times \frac{1}{\frac{1}{1+\lambda m} + (1-f_c)\frac{1}{1+\frac{1}{\lambda m}} + \frac{60}{46} f_c \frac{1}{1+\frac{1}{\lambda m}} + \frac{18}{46} f_c \frac{1}{1+\frac{1}{\lambda m}}}$$

$$P_{EQ} = 492.11 \times 10^3 f_c \frac{1}{46} \frac{1}{1+1/\lambda m} \frac{\Delta m_{comb}}{\Delta t} = 862.3 \frac{f_c}{1+0.056 f_c} \frac{\Delta m_{efluente}}{\Delta t} \quad W$$

Rendimento: $\eta = \frac{P_{Elétrica}}{P_{EQ}}$

FIM