

CUỘC CÁCH MẠNG NĂNG LƯỢNG Ở THẾ KỈ 21: CHUYỂN NỀN KINH TẾ HOÁ THẠCH SANG NỀN KINH TẾ HYĐRÔ

TRẦN MẠNH TRÍ

1. NỀN KINH TẾ HOÁ THẠCH: NHỮNG TỒN TẠI VÀ THÁCH THỨC

Than đá, dầu mỏ, khí thiên nhiên là những tài nguyên thiên nhiên quý giá, là xương sống của **nền kinh tế hoá thạch (fossil economy)**. Nếu không có những nguồn tài nguyên hoá thạch này, chắc chắn xã hội loài người không thể phát triển và đạt những thành tựu to lớn như ngày nay. Cũng vì vậy, nền kinh tế toàn cầu của thế kỉ 20 được vận hành và chi phối bởi nền kinh tế hoá thạch.

Mặt khác, việc sử dụng những tài nguyên hoá thạch đã để lại cho con người và hành tinh chúng ta đang sống những hậu quả cũng to lớn không kém. Khí thải CO₂ khi đốt cháy nhiên liệu hoá thạch đã gây ra hiệu ứng nhà kính làm nhiệt độ bầu khí quyển của trái đất bị nóng lên, khí hậu thay đổi theo chiều hướng xấu. Băng tuyết ở hai cực trái đất tan nhanh, 30 năm qua 1/3 biển băng đã bị biến mất, mực nước các đại dương dâng cao đã xâm lấn dần diện tích lục địa. Lũ lụt, hạn hán, thiên tai, làm nhiều triệu người chết, nhà cửa, công trình xây dựng bị hư hại, mùa màng thất bát. Nhiệt độ bề mặt trái đất cũng nóng dần lên, có nơi, có năm như năm 2007, nhiệt độ lên đến 40-50°C được xem là nóng nhất kể từ năm 1880, làm hàng trăm người chết. Rừng núi, cây trồng trên cạn, động thực vật sống dưới nước bị chết vì mưa axit do các khí SO_x, NO_x, CO₂ thải liên tục ra bầu khí quyển. Sông và biển bị ô nhiễm bởi các tai nạn dầu tràn, làm hư hỏng nhiều vùng biển và hủy diệt nhiều hệ động, thực vật thủy sinh. Bầu không khí bị ô nhiễm bởi bụi, khói, các khí độc hại như CO, NO_x, SO_x, VOC từ khí xả động cơ của các phương tiện giao thông, vận tải cũng như từ khói thải của các nhà máy điện, lò nung của các nhà máy sản xuất công, nông nghiệp. Do trong than đá thường chứa những chất phóng xạ, chủ yếu là *urani* (U) và *thori* (Th), khi đốt than đá đã thải ra bầu khí quyển một lượng chất phóng xạ đáng kể. Chỉ tính trong năm 2000, trên toàn thế giới đã thải ra khoảng 12.000 tấn *Thori* và 5.000 tấn *Urani*. Riêng trong năm 1982, toàn nước Mỹ do sử dụng than đá đã thải ra một lượng chất phóng xạ *thori* và *urani* lớn gấp 155 lần chất phóng xạ toả ra trong khí quyển khi xảy ra tai nạn rò rỉ phóng xạ ở nhà máy điện nguyên tử *The Three Mile Island* (bang Pelsylvania) ngày 29-3-1979. Bầu không khí ô nhiễm ngày càng trầm trọng, là nguyên nhân trực tiếp làm cho hàng triệu người chết hàng năm. Con người phải đối mặt với nhiều bệnh tật nguy hiểm như các bệnh đường hô hấp, dị ứng, hen suyễn, bệnh ngoài da và đặc biệt, các hiểm họa về bệnh ung thư ngày một gia tăng một cách phổ biến.

Ngày nay, con người đã lệ thuộc quá nhiều vào tài nguyên hoá thạch, những cuộc khủng hoảng năng lượng trên toàn thế giới xảy ra theo chu kỳ ngày một ngắn, nhiều cuộc chiến tranh ở các khu vực chủ yếu giàu tài nguyên hoá thạch trong thế kỉ qua đều mang “mùi vị” dầu mỏ. Theo các số liệu thống kê, riêng trong năm 2005, toàn thế giới đã sản xuất 425 *quad* BTU (*quad* BTU = 10¹⁵ BTU), trong đó từ dầu mỏ chiếm 36,8%, than đá 25,2%, khí thiên nhiên 26,0%, nghĩa là gần 90% trong tổng sản lượng năng lượng [1]. Tổng dự trữ nguồn năng lượng hoá thạch trên toàn thế giới hiện nay khoảng 1.279 GTCE (Giga Tonnes Coal Equivalent – 1

GTCE tương đương 1 tỉ tấn than), trong đó dầu mỏ 329 GTCE, khí thiên nhiên 198 GTCE, than đá 697 GTCE. Như vậy, nếu mức khai thác và sử dụng hàng năm như hiện nay, dầu mỏ 5,5 GTCE/năm, khí thiên nhiên 3,0 GTCE/năm, than đá 4,1 GTCE/năm thì lượng tài nguyên hoá thạch còn lại chỉ đủ dùng cho **42 năm đối với dầu mỏ, 65 năm đối với khí thiên nhiên và 170 năm đối với than đá** được tính với mức sử dụng như hiện nay [36]. Tuy nhiên, sử dụng năng lượng không thể nào giữ nguyên mức như hiện nay mà ngày một tăng, trong khi tài nguyên hoá thạch không thể nào tăng thêm vì đó là những tài nguyên không thể tái tạo được, nên chắc chắn sự suy giảm cạn kiệt các tài nguyên này trong thế kỉ 21 là một điều đã được các nhà khoa học cảnh báo và khẳng định.

2. TRÊN ĐƯỜNG TÌM KIẾM NHỮNG NGUỒN NĂNG LƯỢNG MỚI

Những bất cập của nền kinh tế hoá thạch đã buộc nhiều nước trên thế giới, đặc biệt những nước công nghiệp phát triển phải nhanh chóng tìm kiếm nguồn năng lượng mới để vừa bảo đảm sự phát triển bền vững, ổn định cho một tương lai lâu dài của nền kinh tế thế giới, vừa khắc phục mọi hiểm họa môi trường để bảo tồn sự sống còn của hành tinh.

Vào những năm 70 của thế kỉ trước nhiều quốc gia còn cho rằng, **năng lượng hạt nhân** trên cơ sở phản ứng phân rã hạt nhân (nuclear fission) *urani* (U) và *plutoni* (Pu) sẽ là sự lựa chọn thay thế cho năng lượng từ nhiên liệu hoá thạch, ngay như *Cơ quan Năng lượng Nguyên tử Thế giới* (IAEA) cũng đã dự kiến các nhà máy điện nguyên tử trên toàn thế giới đến năm 2000 sẽ đạt công suất trên 4.000 gigawatts (gigawatt [GW] = 10^9 watts) [2]. Bước vào những năm 80, nghĩa là chỉ khoảng hơn 10 năm sau, thế giới đã chứng kiến sự thất bại của kế hoạch này. Từ năm 1987, nhiều quốc gia Châu Âu đã từ bỏ chương trình điện hạt nhân [3,4]: Áo (1978), Thụy Điển (1980), Italy (1987). Ba Lan đã dừng xây dựng nhà máy điện hạt nhân, Bỉ, Đức, Hà Lan, Tây Ban Nha và Thụy Điển quyết định không xây thêm các nhà máy điện hạt nhân mới và quyết định từ bỏ chương trình điện hạt nhân. Đức đã quyết định đóng cửa tất cả các nhà máy điện hạt nhân vào năm 2020 [4]. Ở Nhật Bản, năm 2003, 17 nhà máy điện hạt nhân của Công ty điện lực Tokyo phải đóng cửa vì phát hiện có sự cố không an toàn. Ở Mỹ, 25 năm qua không có nhà máy điện hạt nhân nào được xây thêm. Thực tế cho đến những năm đầu của thế kỉ 21, công suất các nhà máy điện hạt nhân cũng chỉ đạt 343 gigawatts, nghĩa là dưới 1/10 so với kế hoạch dự định trước đây.

Nguyên nhân phá sản của chương trình phát triển điện hạt nhân trước hết là **vấn đề an toàn của các nhà máy điện hạt nhân bị thách thức** như đã xảy ra trong nhiều năm gần đây: vụ rò rỉ phóng xạ nghiêm trọng ngày 28-3-1979 ở nhà máy *The Three-Mile Island* (bang Pennsylvania-Mỹ); vụ tai nạn nổ lò phản ứng hạt nhân tồi tệ nhất trong lịch sử nhân loại ngày 26-4-1976 ở nhà máy *Chernobyl* (Ukraine-Liên Xô trước đây); vụ sự cố ngày 30-9-1999 làm 119 người bị nhiễm phóng xạ tại nhà máy tái chế nhiên liệu phóng xạ *Tokaimura* (tỉnh Ibaraki - Nhật). Ngay những năm đầu của thế kỉ này, ngày 9-8-2004, một vụ vỡ đường ống nước và hơi nóng làm 5 công nhân thiệt mạng tại nhà máy điện hạt nhân *Mihama* (tỉnh Fukui-Nhật Bản), cũng tại nhà máy này năm 2006 lại xảy ra một vụ cháy nữa. Mới gần đây thôi, sau trận động đất *Chuetsu* 6,8 độ Richter ngày 16-7-2007, một vụ rò rỉ được đánh giá là rất nghiêm trọng đã xảy ra tại nhà máy điện hạt nhân lớn nhất thế giới *Kashiwazaki-Kariwa* (tỉnh Niigata - Nhật Bản), khoảng 400 thùng chất thải hạt nhân đã bị đổ vỡ, một số lượng chất lỏng chứa phóng xạ chảy ra biển, buộc nhà máy phải đóng cửa ngưng hoạt động ít nhất 1 năm để Cơ quan năng lượng nguyên tử quốc tế IAEA kiểm tra. Ngoài ra, nhiều vấn đề nghiêm trọng khác về chất thải hạt nhân, vấn đề thất thoát nhiên liệu hạt nhân vào tay các phần tử khủng bố, quá trình chế biến, làm giàu là công nghệ chỉ ở trong tay một số nước và không được phổ biến vì dễ dẫn đến con đường sản xuất vũ

khí hạt nhân tràn lan. Hơn nữa, quặng uranium - nguyên liệu cho ngành công nghiệp hạt nhân - là tài nguyên không tái tạo nên không phải là vô tận.

Theo tính toán, nếu đến năm 2050 dân số toàn thế giới tăng lên khoảng 10 tỉ người, để bảo đảm nhu cầu năng lượng cho mỗi đầu người ở mức gấp đôi hiện nay, đến năm 2050 phải xây dựng thêm 15.000 nhà máy điện nguyên tử mới, mỗi nhà máy công suất 1 GW ! Điều này cho thấy tính không khả thi của việc chọn điện nguyên tử làm nguồn năng lượng mang tính chiến lược để thay thế hoàn toàn nhiên liệu hoá thạch trong tương lai.

3. HYDRÔ VÀ PIN NHIÊN LIỆU HYDRÔ : NGUỒN NĂNG LƯỢNG CỦA THẾ KỈ 21

Sự tìm kiếm nguồn năng lượng mới để có thể kịp thời thay thế năng lượng hoá thạch khi nguồn năng lượng này bắt đầu suy giảm và cạn kiệt đến nay đã có được lời giải: đó là **năng lượng từ hydrô và pin nhiên liệu hydrô**, hai thành tố này sẽ là xương sống của **nền kinh tế hydrô (hydrogen economy)** thời kỳ “hậu hoá thạch” [5 - 7].

(1) Hydrô (Hydrogen)

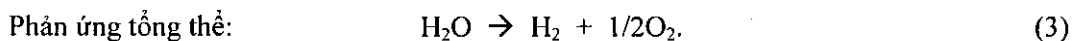
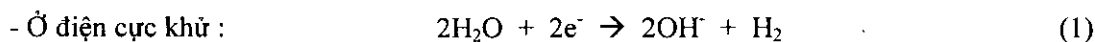
Hydrô có công thức hoá học H_2 , là một loại khí có nhiệt cháy cao nhất trong tất cả các loại nhiên liệu khí và lỏng trong thiên nhiên. Đặc điểm quan trọng của hydrô là trong phân tử không chứa bất cứ nguyên tố hoá học nào khác, như cacbon (C), lưu huỳnh (S), nitơ (N) nên sản phẩm cháy của chúng chỉ là nước (H_2O), được gọi là **nhiên liệu sạch lí tưởng**.

Hydrô là nguồn **nhiên liệu an toàn, không thể gây bất cứ sự cố môi trường** nào cho con người, không như nguồn năng lượng hạt nhân đã từng gây nhiều vụ rò rỉ phóng xạ đã nêu trên.

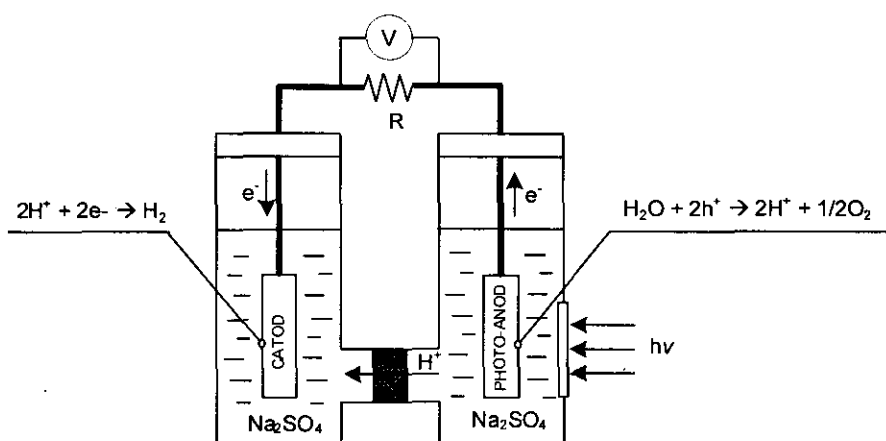
Hydrô được sản xuất từ nước và năng lượng mặt trời, và vì vậy hydrô thu được còn được gọi **hydrô nhờ năng lượng mặt trời (solar hydrogen)**. Nước và ánh nắng mặt trời có vô tận và khắp nơi trên hành tinh, năng lượng mặt trời được thiên nhiên ban cho hào phóng và vĩnh hằng, khoảng 3×10^{24} J/ngày, tức khoảng 10^4 lần năng lượng toàn thế giới tiêu thụ hàng năm. Vì vậy, hydrô nhờ năng lượng mặt trời là **nguồn nhiên liệu vô tận**, sử dụng từ thế kỉ này qua thế kỉ khác **bảo đảm an toàn năng lượng cho loài người mà không sợ cạn kiệt, không thể có khủng hoảng năng lượng và độc lập về năng lượng cho mỗi quốc gia, không một quốc gia nào độc quyền sở hữu hoặc tranh giành nguồn năng lượng hydrô** như đã từng xảy ra với năng lượng hoá thạch.

Để thu được hydrô nhờ năng lượng mặt trời, có hai phương pháp sản xuất sau đây: phương pháp **điện phân nước (water electrolysis)** nhờ năng lượng điện mặt trời thông qua các pin mặt trời (solar cell) và phương pháp **quang điện hoá phân rã nước (photoelectrochemical water splitting)** nhờ năng lượng bức xạ của ánh nắng mặt trời với sự có mặt chất xúc tác quang.

Quá trình **điện phân nước** xảy ra khi cho dòng điện một chiều đi qua hai điện cực bằng platin đặt trong nước và thu được hydro ở catốt, oxy ở anốt. Hiệu ứng này do M. Faraday phát hiện từ năm 1820. Các phản ứng xảy ra ở điện cực như sau:



Quá trình **quang điện hoá phân rã nước** xảy ra khi cho một nguồn ánh sáng mặt trời chiếu vào điện cực xúc tác quang anốt (photoanode) là titan dioxit, còn điện cực catốt đối diện là platin, hai điện cực được nhúng chìm trong dung dịch điện li và được nối nhau thành một mạch kín bên ngoài, nhận thấy ở điện cực platin có hydro thoát ra, trong khi đó ở điện cực titan dioxit có oxy thoát ra. Hiệu ứng này do hai nhà khoa học Nhật Bản phát hiện năm 1972 và được mang tên **hiệu ứng Honda-Fujishima (Honda-Fujishima Effect)**[8]:



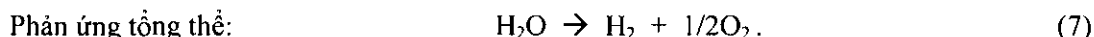
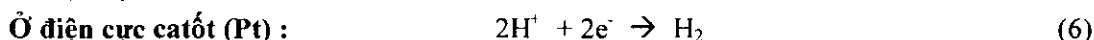
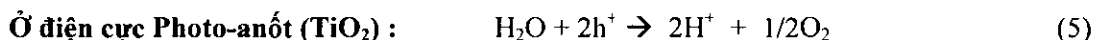
Hình 1. Sơ đồ mô tả thí nghiệm quang điện hoá phân rã nước của Honda-Fujishima [8]

Bản chất hiệu ứng *Honda-Fujishima* như sau:

- Khi có photon ánh sáng chiếu vào điện cực TiO_2 , điện tử trên vùng hoá trị (*valence band*) nhảy lên vùng dẫn (*conduction band*), để lại lỗ trống mang điện tích dương. Điện tử e^- trên vùng hoá trị được gọi là *điện tử quang sinh* (*photogenerated electron*), lỗ trống h^+ trên vùng hoá trị được gọi là *lỗ trống quang sinh* (*photogenerated hole*) :



- Các lỗ trống quang sinh di chuyển ra bề mặt tiếp giáp giữa điện cực anốt và chất điện li, trong khi đó điện tử quang sinh đi về phía điện cực catốt đối diện theo mạch nối bên ngoài. Ở điện cực photo-anốt, nước bị oxi hoá do các lỗ trống quang sinh, tạo thành ion H^+ trong dung dịch, ở điện cực catốt, các ion H^+ bị khử do các điện tử quang sinh, tạo thành H_2 thể khí thoát ra.



Các động cơ đốt trong của các phương tiện giao thông vận tải chạy bằng nhiên liệu hydro sẽ không xả ra khí thải độc hại như CO_2 , CO, SO_x , NO_x , không bụi cacbon, không làm ô nhiễm bầu không khí chúng ta đang sống, không tạo ra hiệu ứng nhà kính gây biến đổi khí hậu toàn cầu, nghĩa là sẽ không phải trả giá như khi sử dụng nhiên liệu xăng dầu hiện nay. Hiện đã có nhiều mẫu xe chạy bằng hydro (hydrogen car) và xe kết hợp giữa động cơ đốt trong bằng hydro và động cơ điện có tên gọi xe ghép lai (hybrid car) được gọi chung là *dòng xe hoàn toàn không có khói xả* (*Zero Emission Vehicle – ZEV*) của các hãng ô tô nổi tiếng như Honda, Ford, Mercedes-Benz,... trưng bày giới thiệu trong các cuộc triển lãm quốc tế về ô tô. . Nhật tuyên bố ngay trong năm 2008 các thế hệ *xe không có khói xả ZEV* sẽ ra đời và thương mại hoá với tên Toyota Prius, Toyota Camry Hybrid, Ford Escape Hybrid, Honda Insigh. Cho đến tháng 4 năm 2007, ở Mỹ đã có 200 chiếc xe ô tô và xe bus chạy bằng hydro hoạt động. Gần đây, một cuộc hành trình thử nghiệm xuyên châu Úc trong 1 ngày đường khoảng 4000 cây số bằng ô tô dùng nhiên liệu hydro cho thấy, ô tô có thể chạy an toàn đến bất cứ mọi nơi mà không cần đến xăng và hoàn toàn không xả khí độc hại gây ô nhiễm môi trường.

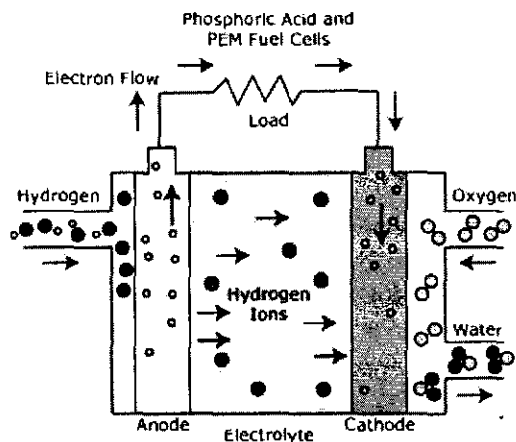
(2) Pin nhiên liệu hydro (hydrogen fuel cell)-

Một nhà khoa học người Đức *Christian Friedrich Schonbein* vào năm 1838 nêu ý tưởng cho rằng điện có thể phân rã nước thành hydro và oxy trong quá trình điện phân, như vậy nếu thực hiện ngược lại, cho hydro và oxy kết hợp bằng cách nào đó không xảy ra quá trình cháy, sẽ có thể sinh ra điện. Đó chính là nguyên lý hoạt động của **pin nhiên liệu hydro** hay gọi tắt **pin nhiên liệu**. Trên cơ sở ý tưởng này, nhà khoa học xứ Wales *Robert Grove* đã chế tạo ra pin nhiên liệu đầu tiên vào năm 1843, bằng cách trộn hydro và oxy khi có mặt chất điện li axit photphoric rất gần giống với pin nhiên liệu ngày nay, kết quả nhận thấy xuất hiện dòng điện và nước thoát ra.

Điểm giống nhau giữa Pin nhiên liệu (*Fuel Cell*) và pin điện hoá (*Galvanic Cell, Voltaic Cell, Battery*) là đều thực hiện quá trình chuyển đổi hoá năng trực tiếp thành điện năng.

Điểm khác nhau giữa Pin nhiên liệu (*Fuel Cell*) và pin điện hoá (*Galvanic Cell, Voltaic Cell, Battery*) là ở chỗ, pin nhiên liệu là một **hệ mở**, hydro và oxy được liên tục được cấp vào và sản phẩm của nó là điện và nước sẽ liên tục được sinh ra, kéo dài bao nhiêu tùy theo sự cung cấp hydro và oxy với cường độ dòng điện ổn định, còn chất điện li vẫn được giữ lại trong pin không đổi. Điều này đã làm cho pin nhiên liệu đóng vai trò như một *máy sản xuất điện* thực thụ với nguyên liệu đầu vào là hydro và oxy không khí, chất thải ra chỉ là nước. Trong khi đó, pin điện hoá là một **hệ đóng**, điện năng được tích trữ trong pin bằng các phản ứng hoá học thực hiện ở giao diện điện cực và chất điện li, các điện tử di chuyển qua giao diện này. Phản ứng sẽ ngưng lại khi không có sự di chuyển điện tử. Do đó, pin điện hoá sinh ra dòng điện với cường độ giảm dần và sau đó ngưng hẳn. Mặt khác, điện cực trong pin điện hoá phản ứng với chất điện li, trong khi đó điện cực của pin nhiên liệu rất bền, đóng vai trò xúc tác cho phản ứng.

Dưới đây là sơ đồ mô tả hoạt động của pin nhiên liệu hydro (hình 2)



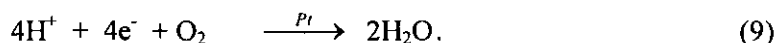
Hình 2. Sơ đồ nguyên lý hoạt động của pin nhiên liệu hydro

Hiệu suất chuyển hoá năng lượng từ hoá năng sang điện năng trong pin nhiên liệu hydro rất cao, đạt đến ~80%, trong khi hiệu suất chuyển hoá từ nhiệt năng sang cơ năng khi sử dụng hydro trong cơ đốt trong chỉ khoảng 20-30%.

Quá trình biến đổi này xảy ra trong pin nhờ cung cấp hydro (H_2) vào anốt và oxy (O_2) vào catốt, giữa catốt và anốt là chất điện li kẹp nhau như bánh sandwich. Ở anốt (điện cực âm) xảy ra quá trình oxy hoá hydro (mất điện tử). Anốt được cấu tạo bằng các hạt nhỏ platin đồng nhất, mang trên các hạt cacbon đồng nhất có độ rỗng xốp cao để hydro có thể đi qua được. Platin đóng vai trò xúc tác cho phản ứng oxy hoá hydro tạo thành proton H^+ :



Ở catốt (điện cực dương) xảy ra quá trình khử (nhận điện tử). Tương tự như anốt, catốt cũng được cấu tạo bằng các tập hợp kích thước nhỏ platin, mang trên các hạt cacbon đồng nhất có độ rỗng xốp cao để oxy có thể đi qua được. Platin đóng vai trò xúc tác cho phản ứng khử proton (H^+) khi có mặt oxy và điện tử từ anốt sang (theo dây dẫn nối bên ngoài):



Chất điện li trong pin nhiên liệu có nhiều loại khác nhau, dạng chất lỏng như dung dịch kiềm KOH, axit photphoric, muối cacbonat nấu chảy, hoặc dạng rắn, chủ yếu dưới dạng màng polyme trao đổi proton (H^+). Tùy theo loại chất điện li sử dụng trong pin, sẽ tạo ra các loại pin khác nhau: **pin nhiên liệu kiềm** (*Alkaline Fuel Cell – AFC*), **pin nhiên liệu cacbonat nấu chảy** (*Molten-carbonate Fuel cell – MCFC*), **pin nhiên liệu axit photphoric** (*Phosphoric acid Fuel Cell – PAFC*), **pin nhiên liệu màng polyme trao đổi proton** (*Polymer Exchange Membrane Fuel Cell – PEMFC*). Hiện nay, pin nhiên liệu với chất điện li là *màng polyme trao đổi proton* PEMFC là loại được sản xuất nhiều nhất để sử dụng cho các phương tiện vận tải vì công suất lớn, nhiệt độ vận hành thấp và ổn định. Màng polyme trao đổi proton là một màng mỏng (độ dày bằng khoảng 2-7 tờ giấy ghép lại), đóng chức năng như một chất điện li, chỉ cho proton (H^+) đi qua, ngăn không cho điện tử đi qua. Khởi đầu, đã sử dụng màng polystyren sulfonat hoá, sau đó, vì độ bền kém, hiệu quả trao đổi proton thấp nên vào năm 1966 đã thay thế bằng màng *Nafion ionomer* (DuPont). Gần đây đã đưa vào sử dụng *Polybenzimidazole* làm màng trao đổi proton thay cho màng *Nafion ionomer* vì có thể làm việc ở nhiệt độ cao (220°C) trong khi màng Nafion chỉ cho phép làm việc ở nhiệt độ thấp hơn (80 - 90°C).

Điện năng do pin nhiên liệu hydro sản xuất phụ thuộc nhiều yếu tố: loại pin nhiên liệu với chất điện li nào, kích thước của pin, nhiệt độ vận hành, áp suất khí hydro và oxy nạp vào pin. Nói chung, *lượng điện sinh ra của 1 đơn vị pin khoảng 1,16V. Vì vậy, thường phải ghép rất nhiều pin đơn vị thành những khối (fuel cell stack) gồm hàng trăm pin đơn vị để cho điện năng theo yêu cầu.*

Năm 1960, Công ty *General Electric* đã sản xuất hệ thống cung cấp điện trên cơ sở pin nhiên liệu với màng polyme trao đổi proton theo nguyên lý của **pin Bacon** mô tả trong bằng sáng chế của Bacon (Bacon's US Patents) để cho tàu *Apollo* của NASA, sau đó sử dụng cho tàu *Apollo-Soyuz*, *Skylab* và các tàu con thoi (*Space Shuttle*). Đây là lĩnh vực ứng dụng đầu tiên của pin nhiên liệu hydro. Ngày nay, điện năng trong các tàu con thoi và trạm nghiên cứu không gian của NASA đều được các pin nhiên liệu cung cấp, vì trên tàu không gian, hydro và oxy được mang theo sẵn. Song điều lí thú là bản thân **pin nhiên liệu không chỉ cung cấp điện mà còn cung cấp nước uống siêu sạch** cho các phi hành gia, vì nước là chất thải của pin nhiên liệu hydro.

Một lĩnh vực ứng dụng quan trọng khác là đưa pin nhiên liệu hydro vào **các phương tiện giao thông, vận tải** như xe ca, xe tải, xe bus, tàu hỏa, tàu thủy, tàu ngầm hoặc máy bay. Năm 1993, xuất hiện xe bus đầu tiên chạy bằng pin nhiên liệu hydro, đến năm 1997 *Daimler Benz* và *Toyota* đã trình làng mẫu xe ô tô chạy bằng pin nhiên liệu hydro đầu tiên. Hãng *Daimler Chrysler* đã công bố chương trình chi 1,4 tỉ USD cho phát triển công nghệ pin nhiên liệu hydro cho công nghiệp ô tô. Xe HONDA FCX thử nghiệm thực tế đã đạt được hiệu suất chuyển hoá năng lượng khoảng 60% khi sử dụng pin nhiên liệu hydro và cho biết đến năm 2008 sẽ có xe ô tô của hãng *Honda* chạy bằng pin nhiên liệu hydro xuất hiện trên thị trường. *Honda* còn cho biết đang có chương trình sản xuất pin nhiên liệu hydro cho xe mô tô, xe máy [29]. Hiện nay, rất nhiều mẫu xe ca, xe bus chạy bằng pin nhiên liệu hydro đang được nhiều hãng ô tô chế tạo và giới thiệu ở nhiều cuộc triển lãm quốc tế. Các xe hoạt động nhờ pin nhiên liệu hydro thuộc dòng

xe hoàn toàn không có khói xả ZEV. Hãng máy bay Boeing trong năm 2007 có chương trình bay thử nghiệm bằng máy bay được sử dụng hoàn toàn pin nhiên liệu hydro, loại pin nhiên liệu màng polyme trao đổi proton (Polymer Exchange Membrane Fuel Cell – PEMFC) ghép với pin lithium-ion (pin sau sử dụng có thể tái nạp điện trở lại) để cung cấp điện năng cho các động cơ cánh quạt. Thậm chí, các tàu ngầm loại 212 của hải quân Mỹ đã thử nghiệm sử dụng pin nhiên liệu hydro và cho thấy đã có khả năng ở dưới sâu trong vòng nhiều tuần lễ mà không cần nổi lên mặt nước [31].

Sản xuất điện ở các nhà máy điện bằng con đường pin nhiên liệu hydro sẽ không cần máy phát điện, không cần những tuốc bin đồ sộ, không có cả những cơ cấu chuyển động, không dầu nhớt bôi trơn, không có tiếng ồn, không khói xả. Điện từ các pin nhiên liệu hydro có thể sản xuất mọi nơi, mọi công suất từ vài watts cho đến hàng trăm KW, hiện nay đã chế tạo được pin nhiên liệu đến trăm MW cho mọi nhu cầu. Vì vậy, rất thích hợp để xây dựng các trạm phát điện cho các vùng sâu, vùng xa, hoặc trạm điện độc lập tự cung cấp cho các thành phố, các cao ốc mà không cần đến nguồn điện lưới từ trung tâm cung cấp phân phối điện quốc gia. Công ty UTC (Mỹ) là công ty đầu tiên trên thế giới đã chế tạo và đưa ra thị trường trạm điện bằng hệ thống pin nhiên liệu để hỗ trợ cùng phát điện cho các bệnh viện, trường đại học, các chung cư, cao ốc. Những hệ thống này có công suất 200 kW. Năm 2006, Công ty Angstrom Power đã bắt đầu bán các thiết bị để cho trạm điện hydro cơ động với thương hiệu “micro hydrogen”. Do đó, trong nền kinh tế hydro nhờ năng lượng mặt trời, sản xuất và phân phối điện năng không còn tập trung vào tay một vài công ty điện lực quốc gia hoặc đa quốc gia như trường hợp ở nền kinh tế hoá thạch, vì người tiêu thụ cũng vừa là người sản xuất, có thể tự sản xuất ra điện một cách không khó khăn miễn là ở đó có nước, có ánh nắng mặt trời. Đang hình thành khái niệm nền kinh tế hydro với **năng lượng tự phân phối (distributed energy)** phi tập trung hoá, ngược với nền kinh tế hoá thạch với sản xuất và phân phối năng lượng tập trung hoá cao độ hiện nay.

4. NỀN KINH TẾ HYDRO : CUỘC CÁCH MẠNG VỀ NĂNG LƯỢNG VÀ LỘ TRÌNH HIỆN THỰC HOÁ

Hydro và pin nhiên liệu là chìa khoá giải quyết vấn đề ô nhiễm bầu khí quyển và sự biến đổi khí hậu toàn cầu - mối lo của toàn thế giới hiện nay khi sử dụng nhiên liệu hoá thạch.

Sự xuất hiện nền kinh tế hydro trong đời sống loài người buộc phải tạo ra sự thay đổi tận gốc những hạ tầng cơ sở của nền kinh tế hoá thạch và các hoạt động của con người. Phương thức sản xuất nguồn năng lượng mới không còn là tìm kiếm, thăm dò, khai thác như tài nguyên hoá thạch vì ở đâu có nước và ánh nắng mặt trời, ở đó đều có thể sản xuất ra hydro để tạo ra nguồn năng lượng cho mọi nhu cầu của đời sống và sản xuất. Phương thức tồn chứa, vận chuyển, cung ứng hydro cho các nhu cầu tiêu thụ, nghĩa là hạ tầng cơ sở đã tồn tại hàng thế kỷ của nền kinh tế hoá thạch sẽ không còn thích hợp, buộc phải cấu trúc xây dựng mới, phá bỏ hạ tầng cơ sở cũ. Các phương tiện giao thông, vận tải phải được thay thế bằng động cơ chế tạo theo nguyên lý mới phù hợp nguồn năng lượng hydro, tất nhiên sẽ khác hẳn các động cơ xăng, dầu. Các tiêu chuẩn kỹ thuật, các quy định an toàn, luật lệ pháp lý khi sử dụng nguồn năng lượng mới sẽ phải xây dựng lại; việc giáo dục, đào tạo, nghiên cứu khoa học phục vụ cho nền kinh tế hydro hoàn thiện và phát triển sẽ phải có những nội dung mới, cơ sở vật chất mới, hoàn toàn khác so với nền kinh tế hoá thạch hiện nay. Những vấn đề về môi trường ô nhiễm do sử dụng năng lượng hydro gây ra sẽ không còn là đề tài nghiên cứu tiêu hao tiền của và sức lao động của các nhà khoa học, không còn là đầu đề của các hội nghị quốc tế triển miên về biến đổi khí hậu toàn cầu như khi sử dụng năng lượng hoá thạch.

Tất cả những sự thay đổi đó cho thấy đây thực sự là một cuộc cách mạng sâu sắc trong tiến trình phát triển của xã hội loài người và đã được đánh giá có ý nghĩa to lớn như cuộc cách mạng công nghiệp trước đây, khi phát minh ra đầu máy hơi nước với việc sử dụng nhiên liệu than đá [7].

Ngày nay, nền kinh tế hydro đang trở thành một xu thế không thể đảo ngược trên thế giới. Ở Mỹ, năm 2003 Tổng thống G. Bush đã công bố một chương trình được gọi là “**Sáng kiến nhiên liệu hydro**” (Hydrogen Fuel Initiative) với quyết định giành 1,2 tỉ đôla cho nghiên cứu và phát triển nhằm mục tiêu đến năm 2020 ô tô chạy bằng pin nhiên liệu hydro phải triển khai thương mại hoá thành công vào thực tế.

Lộ trình chuyển đổi sang nền kinh tế hydro ở Mỹ được chia làm 4 pha, dự tính như sau:

* **pha I (từ nay đến 2015-2020)** tiếp tục tiến hành nghiên cứu R&D để hạ giá thành hydro sản xuất từ năng lượng mặt trời, hạ giá thành pin nhiên liệu hydro so với hiện nay và nghiên cứu ứng dụng tập trung vào lĩnh vực giao thông vận tải và cung cấp điện năng, trong pha này vai trò của nhà nước có tính chất quyết định;

* **pha II (từ 2010 đến 2030)** tiến hành thương mại hoá và từng bước xâm nhập vào thị trường xe không có khói xả (ZEV) song hành với xe chạy bằng xăng dầu như hiện nay, đồng thời thương mại hoá các máy phát điện bằng pin nhiên liệu, trong pha này vai trò của các ngành công nghiệp là rất quan trọng;

* **pha III (từ 2015 đến 2035)** tiến hành đầu tư xây dựng hạ tầng cơ sở phục vụ cho nền kinh tế hydro và mở rộng thị trường hai loại hàng hoá trên;

* **pha IV (từ 2035-2040 trở đi)**, cơ sở hạ tầng của nền kinh tế hydro đã hoàn chỉnh, sẵn sàng phục vụ cho thị trường phát triển mở rộng ra mọi vùng lãnh thổ, các phương tiện giao thông vận tải bằng pin nhiên liệu hydro và các máy phát điện bằng pin nhiên liệu hydro sẽ thay thế hoàn toàn nhiên liệu hoá thạch, vào thời điểm này theo dự báo, nhiên liệu hoá thạch đi qua giai đoạn đỉnh điểm, cạn kiệt, giá xăng dầu tăng rất cao, bấy giờ nền kinh tế hydro đã sẵn sàng để hỗ trợ và thay thế cho nền kinh tế hoá thạch.

5. MỘT SỐ VẤN ĐỀ KHOA HỌC ĐÒI HỎI PHẢI GIẢI QUYẾT ĐỂ HIỆN THỰC HOÁ NỀN KINH TẾ HYDRÔ-

Hydro và pin nhiên liệu được xem là nguồn năng lượng của thế kỉ 21, nhưng để hiện thực hoá phải vượt qua nhiều thách thức lớn, trong đó mục tiêu chính là phải sản xuất được hydro, pin nhiên liệu và điện mặt trời có giá thấp, cạnh tranh với năng lượng hoá thạch đồng thời phải giải quyết các vấn đề tồn chứa, vận chuyển, phân phối hydro, những vấn đề thuộc hạ tầng cơ sở. Để góp phần thực hiện mục tiêu trên, trong lĩnh vực hoá học, vật liệu và xúc tác phải nghiên cứu và giải quyết một số nội dung khoa học như sau:

(1) Nghiên cứu hoàn thiện vật liệu điện cực và chất điện li mới trong quá trình điện phân nước để sản xuất hydro giá thành hạ hơn nữa

Quá trình điện phân nước sản xuất hydro sử dụng điện trung bình khoảng 50 kWh cho 1 kg hydro. Hiện nay, bằng cách chế tạo điện cực bằng kim loại Niken cấu trúc nano (3-50nm) đã có thể tăng hiệu suất năng lượng lên đến 81% (với mật độ dòng 0,1A/cm²), lượng điện tiêu thụ hạ thấp, còn 42kWh/kg H₂, trong khi đó lại không sử dụng platin đắt tiền, nhờ đó đã góp phần hạ giá thành hydro sản xuất bằng phương pháp điện phân [26].

Công ty sản xuất các hệ thống cấp phát năng lượng (Distributed Energy Systems Company) của Tập đoàn công nghệ hydro (Hydrogen Technology Group) đã thương mại hoá hai

loại thiết bị điện phân nước lắp gọn trên bánh xe để sản xuất hydro cho nền kinh tế hydro: *thiết bị với chất điện li là màng trao đổi proton PEM* (Proton Exchange Membrane) và *thiết bị với chất điện li là kiềm KOH* (KOH Electrolyte). Đặc điểm của chúng là sản xuất hydro sạch dưới áp suất cao mà không cần đến máy nén.

Thiết bị PEM đã sản xuất hàng loạt loại 15 bar, 13 kg H₂/ngày, sắp đến sẽ sản xuất loại 30 bar, công suất 500 kg/ngày, 980 kW, 47 kWh/kg H₂. Chương trình nghiên cứu phát triển của hệ thiết bị sản xuất hydro PEM dự kiến như sau: giai đoạn 2005-2008, sản xuất thiết bị trình diễn công suất 13 - 30 kgH₂/ngày, giai đoạn 2008 - 2013, thương mại hoá trạm sản xuất cung cấp hydro số lượng ~100 hệ thống/năm, công suất từ 40 - 120 kgH₂/ngày, giai đoạn 2013 - 2020, thương mại hoá trạm sản xuất cung cấp hydro số lượng ~500 hệ thống/năm, công suất từ 120- > 500 kgH₂/ngày.

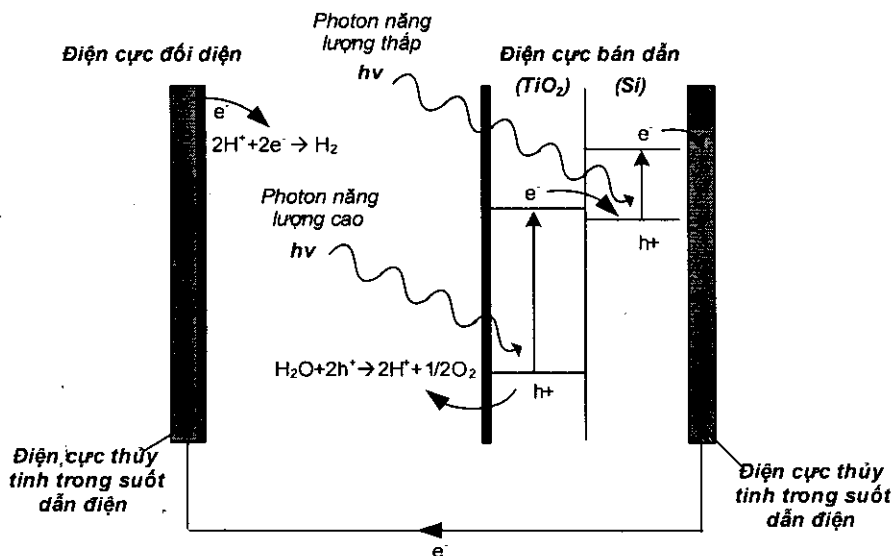
Thiết bị với chất điện li KOH có 2 loại: sản xuất hydro ở áp suất thường, công suất 100 -1056 kg H₂/ngày và loại hydro cao áp 12 - 30 bar, công suất 144 kg H₂/ngày, tiêu hao điện năng 48 - 53 kWh/kg H₂.

(2) Nghiên cứu về công nghệ và vật liệu mới để sản xuất hydro bằng quá trình quang điện hoá phân rã nước với giá thấp hơn giá sản xuất theo công nghệ hiện nay

Hiện nay giá hydro bằng phương pháp điện phân hoặc quang điện hoá xúc tác đắt hơn giá xăng gấp 4 lần (tính theo cách chuyển đổi, năng lượng 1 kg hydro tương đương năng lượng của 1 gallon xăng - *gasoline gallon equivalent - gge*), vì vậy mục tiêu đến năm 2010 giảm xuống cạnh tranh với giá xăng, giá hydro 1,5\$/kg. Để đạt mục tiêu này, cần đầu tư nghiên cứu về vật liệu điện cực, chất xúc tác quang sao cho hiệu quả thu bức xạ mặt trời cao, ngay cả trong miền ánh sáng khả kiến, vật liệu nano, vật liệu màng polymer trao đổi proton, cấu trúc thiết bị điện phân... Những hướng nghiên cứu đã và đang tiến hành hiện nay bao gồm:

• **(i) Thêm hiệu thế phụ trợ (bias) cho quá trình quang điện hoá phân rã nước bằng điện cực quang ghép lai (Hybrid Photoelectrodes)**

Khi phân rã nước bằng quá trình quang điện hoá với điện cực TiO₂, hiệu thế thu được khoảng 0,7 đến 0,9 V, trong khi điện thế cần thiết cho quá trình điện phân nước là 1,23 V. Thực tế, do *tổn thất quá thế* (overpotential loss) ở hai điện cực nên điện thế cần thiết cho điện phân phải đến 1,5 V. Như vậy, để quá trình quang điện hoá phân rã nước có hiệu quả cao, phải đưa thêm vào một *hiệu thế phụ trợ (bias)* bên ngoài vào hệ nếu sử dụng TiO₂ làm photo-anốt. *Morisaki và các cộng sự* [10] đã chế tạo điện cực quang có cấu tạo dạng *ghép lai (hybrid)* hai điện cực vào nhau, trong đó, một điện cực quang thực hiện quá trình phân rã nước là một màng mỏng TiO₂, được ghép lên một điện cực quang khác là một màng mỏng *silic p-n* đơn tinh thể như của pin mặt trời, có nhiệm vụ cung cấp hiệu thế phụ trợ cho quá trình phân rã nước chứ không thực hiện phản ứng hoá học nào khác.



Hình 3. Giản đồ mức năng lượng mô tả quá trình quang điện hoá xảy ra khi hệ điện cực ghép lai (hybrid electrode) hoạt động.

Khi hoạt động, ánh sáng mặt trời chiếu vào màng mỏng TiO_2 , chúng sẽ hấp thu các photon có năng lượng lớn hơn năng lượng vùng cấm của TiO_2 3,2 eV (tương ứng với năng lượng bức xạ tia UV A có bước sóng < 360 nm) và thực hiện quá trình quang điện hoá phân rã nước, các photon còn lại sẽ được màng silic hấp thu vì có năng lượng vùng cấm nhỏ hơn (1,1 eV) và thực hiện quá trình chuyển hoá quang-điện của pin mặt trời thành điện năng. Giản đồ mức năng lượng mô tả quá trình quang điện hoá xảy ra khi hệ điện cực ghép lai hoạt động thể hiện ở hình 3.

Bằng cách tạo ra điện cực ghép lai như trên đã có thể nâng cao được hiệu suất quá trình nhờ tạo ra trong nội bộ nguồn năng lượng phụ trợ cho quá trình điện hoá quang phân nước mà không cần cung cấp thêm hiệu thế phụ trợ (bias) từ bên ngoài.

(ii) Tăng hiệu quả sử dụng năng lượng mặt trời bằng cách giảm năng lượng vùng cấm (band gap) của điện cực quang TiO_2 để mở rộng khả năng hấp thu ánh sáng ra miền khả kiến

Điện cực quang titan dioxit chỉ hoạt động với nguồn tia tử ngoại UV-A (320 - 360 nm) vì năng lượng vùng cấm của TiO_2 là 3,2 eV, trong khi nguồn sáng này chỉ chiếm một phần rất nhỏ, khoảng 2,5% trong tổng cường độ phổ bức xạ năng lượng mặt trời chiếu trên trái đất. Vì vậy, nếu biến tính điện cực Titan Dioxit bằng các kĩ thuật khác nhau theo hướng sao cho có thể mở rộng vùng hoạt động hiệu quả cả ở vùng ánh sáng khả kiến (400 - 800 nm) của phổ ánh sáng mặt trời, nghĩa là có thể sử dụng đến ~40% năng lượng phổ ánh sáng mặt trời vào quá trình quang điện hoá thì hiệu suất thu được hydro từ năng lượng mặt trời sẽ được nâng lên.

Các vật liệu bán dẫn đều được đặc trưng bằng **năng lượng vùng cấm E_g** (band gap energy), chỉ những phần ánh sáng có cường độ lớn hơn năng lượng vùng cấm sẽ được vật liệu bán dẫn hấp thu. Điều đó có nghĩa các photon có năng lượng nhỏ hơn E_g sẽ không có tác dụng chuyển hoá năng lượng. Như vậy, vật liệu bán dẫn nào có năng lượng vùng cấm nhỏ sẽ càng tốt. Tuy vậy, năng lượng vùng cấm quá nhỏ sẽ tạo ra hiệu thế thấp và làm giảm hiệu quả của quá trình. Năng lượng tối đa của phổ ánh sáng mặt trời nằm trong miền ánh sáng khả kiến, năng

lượng photon từ 1,4 eV đến 3 eV. Vì vậy, để tăng hiệu quả của quá trình quang điện hoá, chất bán dẫn nên có năng lượng vùng cấm thấp hơn 3 eV.

Mặc dù TiO_2 có năng lượng vùng cấm khá lớn (anatase 3,2 eV, rutil 3,0 eV) nhưng vẫn được xem là vật liệu bán dẫn lí tưởng cho quá trình quang điện hoá so với các vật liệu bán dẫn khác vì vật liệu này có độ bền cao trong dung dịch nước khi làm điện cực ngoài ra không độc hại, giá lại rẻ. Do năng lượng vùng cấm của TiO_2 cao nên chỉ có khả năng hấp thụ các photon có năng lượng lớn, chủ yếu năng lượng bức xạ tử ngoại UVA có bước sóng 320 - 360 nm. Do đó, có nhiều công trình nghiên cứu đã tìm cách giảm thấp năng lượng vùng cấm sao cho mức năng lượng nhỏ nhất của vùng dẫn được hạ thấp hơn mức TiO_2 (khoảng 2 eV).

Những hướng giảm thấp năng lượng vùng cấm của điện cực quang bán dẫn được chú ý nghiên cứu như sau:

- **“cấy” (dope) ion các kim loại chuyển tiếp** như Cr, V, Fe, Mo vào mạng tinh thể TiO_2 để tạo ra các trạng thái năng lượng trung gian trong vùng cấm của TiO_2 , nhờ đó hạ thấp năng lượng vùng cấm, mở rộng khả năng hấp thụ ánh sáng về miền ánh sáng khả kiến [11]. Do tính không ổn định nhiệt của chất xúc tác thu được cũng như sự tái kết hợp của các điện tử quang sinh và lỗ trống quang sinh xảy ra dễ dàng trong trường hợp này đã làm cho phương pháp này bị hạn chế [12].

- **“cấy”(dope) anion các á kim như Nitơ (N) [13,14], Cacbon (C) [15], Bo (B) [16] vào mạng tinh thể TiO_2 .** Phương pháp này được nghiên cứu nhiều vì cho hiệu quả rõ rệt, trong đó cấy nitơ (N_2) vào TiO_2 cho thấy cải thiện tốt về khả năng hấp thụ ánh sáng khả kiến và hoạt tính quang xúc tác [13]. Nguyên nhân có thể các trạng thái p đã góp phần thu hẹp vùng cấm nhờ pha trộn trạng thái $2p$ của nitơ với trạng thái $2p$ của oxy, vân đạo $2p$ của nitơ định xứ trên đỉnh vân đạo $2p$ của oxy. Vật liệu được cấy thêm nitơ đã cho thấy nhờ thu hẹp vùng cấm của TiO_2 còn 2,5 eV thay vì 3,2 eV nên có khả năng hấp thụ miền ánh sáng khả kiến bước sóng 500 nm.

Trong khi đó, khi cấy cacbon (C) vào TiO_2 bằng phương pháp nung Titan kim loại trong ngọn lửa khí thiên nhiên, thu được vật liệu $\text{TiO}_{2-x}\text{C}_x$ với $x \sim 0,15$, vật liệu bán dẫn biến tính này đã có khả năng hấp thụ ánh sáng khả kiến với bước sóng 535 nm (tương ứng năng lượng vùng cấm 2,32 eV). Hiệu suất quá trình quang điện hoá tăng lên 8,35% [15].

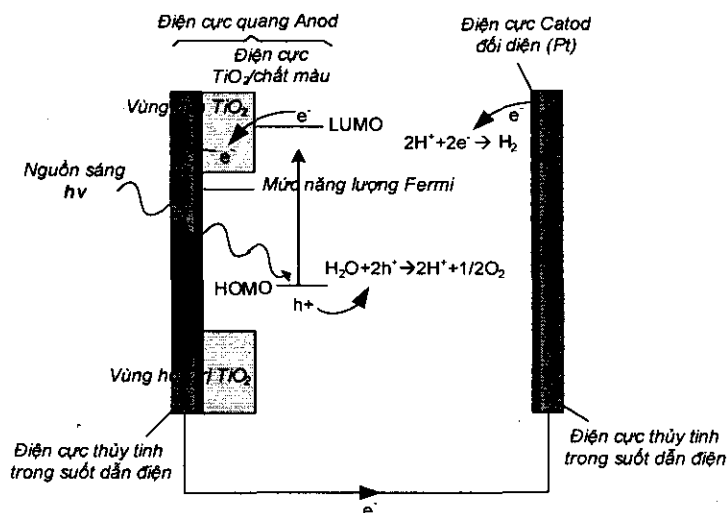
Burda [17] cấy thêm nitơ vào TiO_2 cấu trúc nano thay vì sử dụng TiO_2 Degussa P25. Kết quả cho thấy việc cấy nitơ vào TiO_2 cấu trúc nano thực hiện dễ dàng hơn, hàm lượng nitơ cấy vào đạt đến 8% so với cấy vào bột TiO_2 Degussa P25 chỉ đạt 2%. Chất xúc tác $\text{TiO}_{2-x}\text{N}_x$ cấu trúc nano 6 - 10 nm đã tổng hợp được có hoạt tính quang xúc tác cao ngay cả trong miền ánh sáng khả kiến kéo dài đến 600 nm.

Gần đây có một vài công trình thực hiện việc **“cùng cấy” (co-dope) cation kim loại và anion á kim** vào mạng tinh thể TiO_2 để cải thiện hơn nữa khả năng hấp thụ ánh sáng rộng hơn trong miền khả kiến, như cấy Cr^{3+} thêm vào TiO_2 đã cấy N, tuy miền ánh sáng hấp thụ có rộng hơn nhưng hiệu quả hoạt tính quang xúc tác lại kém hơn các xúc tác được “cấy” riêng rẽ [27].

(iii) Tăng hiệu quả sử dụng năng lượng mặt trời bằng cách phủ chất màu nhạy ánh sáng (photosensitive dye) lên bề mặt điện cực bán dẫn TiO_2 để mở rộng khả năng hấp thụ ánh sáng ra miền khả kiến

Chất màu nhạy ánh sáng sử dụng ở đây là những chất có khả năng hấp thụ ánh sáng trong miền khả kiến. Hiện nay các chất màu nhạy ánh sáng được chú ý nhiều nhất là các phức cơ-kim của Ruteni (Ru) và Osmi (Os), đặc biệt là các phức Ru-polypiridin [18]. Bằng cách này, điện cực TiO_2 trở nên có khả năng hấp thụ miền ánh sáng khả kiến của phổ ánh sáng mặt trời, được gọi là

điện cực quang nhạy ánh sáng nhờ chất màu (Dye Sensitized Photoelectrode) hay điện cực nhạy ánh sáng (Sensitized Photoelectrode) (hình 4).



Hình 4. Giải đồ mức năng lượng xảy ra khi điện cực TiO_2 được phủ lớp chất màu nhạy ánh sáng

Khi ánh sáng mặt trời chiếu lên điện cực có phủ một lớp chất màu nhạy ánh sáng, chính chất màu sẽ hấp thu photon ánh sáng có năng lượng lớn hơn hiệu số giữa mức năng lượng của vân đạo phân tử cao nhất bị chiếm chỗ HOMO (*Highest Occupied Molecular*) và vân đạo phân tử thấp nhất còn trống LUMO (*Lowest unoccupied Molecular*) của phân tử chất màu. Mức năng lượng HOMO của phân tử chất màu nằm cao hơn mức năng lượng vùng hoá trị của TiO_2 , nên khi các điện tử ở trạng thái bị kích thích của phân tử chất màu bị bắn ra sẽ nhảy xuống vùng dẫn của lớp TiO_2 ở giao diện tiếp xúc với chúng. Phân tử chất màu được khôi phục trở về trạng thái trung tính ban đầu do có sự di chuyển điện tử từ dung dịch điện li đến chất màu trong quá trình oxi hoá chất điện li và kết quả là giải phóng oxy khỏi dung dịch điện li. Các điện tử từ vùng dẫn của chất bán dẫn được di chuyển đến điện cực thủy tinh trong suốt, sau đó trở về điện cực đối diện theo mạch dẫn ở bên ngoài nối với hai điện cực. Ở điện cực này, sự khử dung dịch điện li sẽ xảy ra và kết quả tạo thành hydro.

Hiệu suất tạo thành hydro bằng điện cực nhạy ánh sáng TiO_2 nếu được cấy thêm Zr đã đạt được 4,46% [19] mà không cần đưa thêm hiệu thế phụ trợ (bias), tức gấp ~10 lần so với hiệu suất hydro trong công trình mở đường của *Honda-Fujishima*.

(iv) Chế tạo điện cực quang bằng vật liệu TiO_2 cấu trúc nano

Sự chuyển trao điện tử từ điện cực bán dẫn sang chất điện li sẽ sinh ra hydro từ dung dịch điện li. Sự chuyển trao điện tử này xảy ra trên bề mặt giao diện giữa điện cực bán dẫn và chất điện li, do đó tính chất bề mặt của điện cực đóng một vai trò rất quan trọng. Tính chất của bề mặt giao diện này có liên quan trực tiếp đến cấu trúc của vật liệu điện cực. Để nâng cao tối đa hiệu quả quá trình chuyển trao điện tử ở giao diện, bề mặt của giao diện cần lớn đến mức tối đa. Điều này có liên quan đến kích thước của các hạt TiO_2 , kích thước càng nhỏ, bề mặt càng lớn. Vì vậy, sử dụng điện cực quang chế tạo từ một màng mỏng gồm có những hạt TiO_2 cấu trúc nano (khoảng mười nano mét) với nhiều lỗ xỏ và xù xì giống như cấu trúc bọt biển, thì hiệu suất hydro sẽ cải thiện đáng kể do tăng bề mặt giao diện với chất điện li.

Tuy nhiên, khi giảm kích thước các hạt TiO_2 đến cỡ hàng chục nano mét, kèm theo sẽ xảy ra sự thay đổi mật độ trạng thái (density of states), cấu trúc vùng, các bờ rìa của các vùng (đáy của vùng dẫn và đỉnh của vùng hoá trị) chuyển dịch về phía làm tăng thế oxy hoá - khử. Tốc độ chuyển trao điện tử được tăng lên, nhờ đó làm tăng hiệu quả của quá trình vì giai đoạn này là giai đoạn chậm, hạn chế tốc độ của toàn quá trình.

Quá thế (overpotential) ở điện cực cũng là một nhân tố ảnh hưởng đến hiệu quả vì quá thế cao có nghĩa là có một lượng quang điện sinh ra đã được sử dụng để khắc phục quá thế này thay vì sử dụng nó để phân rã phân tử nước. Cấu trúc nano của điện cực đóng vai trò quan trọng trong vấn đề này, vật liệu điện cực làm từ những hạt kích thước càng nhỏ, càng phân tán cao, quá thế sẽ càng nhỏ, hiệu quả của quá trình quang điện hoá phân rã nước càng được cải thiện.

(3) Nghiên cứu sản xuất hydro từ than đá theo công nghệ mới, không thải CO_2 ra môi trường - Trong giai đoạn khi nguồn than đá dự trữ còn nhiều, có thể sử dụng cho đến thế kỉ 22, xu hướng thế giới đang tập trung nghiên cứu sản xuất hydro từ than theo công nghệ mới để phục vụ cho nền kinh tế hydro. Tuy nhiên, trong quá trình sản xuất hydro từ than, với các phương pháp cổ điển đều thải CO_2 , một loại khí thải gây hiệu ứng nhà kính nên phải nghiên cứu phương pháp sản xuất hydro không thải CO_2 , bao gồm xây dựng công nghệ *phân chia bằng màng* (membrane separation) tách CO_2 từ hỗn hợp khí H_2 , CO , CO_2 và xây dựng công nghệ *đề bắt giữ và cô lập CO_2* (CO_2 capture and sequestration), với mục tiêu ít nhất giảm được 80-90% so với công nghệ cũ, nhưng giá thành vẫn không tăng lên. Mục tiêu đến 2015, giá hydro từ than đá sẽ chỉ còn 0,54\$/kg và hoàn toàn không thải CO_2 ra môi trường. *Chương trình hydro từ than đá* (Hydrogen from Coal Program) giai đoạn 2004 đến 2015 đang được đẩy mạnh ở Mỹ với nguồn kinh phí rất lớn, trong số 1,2 tỉ USD nói trên.

(4) Nghiên cứu vật liệu mới để sản xuất pin nhiên liệu cho nguồn điện với giá rẻ hơn hiện nay.

Thực tế là pin nhiên liệu đã được chế tạo để sử dụng rất hữu hiệu vào lĩnh vực nghiên cứu không gian từ năm 1960 nhưng lĩnh vực sử dụng này không quan tâm đến giá thành mà chỉ quan tâm đến hiệu quả chuyển hoá năng lượng và tuổi thọ của pin.

Để mở rộng lĩnh vực sử dụng vào động cơ điện của các phương tiện giao thông vận tải, vấn đề giá thành được đặc biệt chú ý. Hiện nay, nếu sử dụng ô tô chạy bằng động cơ điện do pin nhiên liệu cung cấp, chi phí sẽ đắt hơn 10 lần so với sử dụng động cơ đốt trong như hiện nay. Tuy vậy, giá điện của pin nhiên liệu đã giảm nhiều so với các năm trước, pin nhiên liệu sử dụng cho ô tô là 70\$/kW, mục tiêu đến năm 2010 giảm xuống còn 45\$/kW. Để đạt mục tiêu trên, cần nghiên cứu vật liệu nano các kim loại thay thế cho platin làm điện cực, vật liệu màng polyme trao đổi proton,...Hiện nay, để chế tạo pin nhiên liệu hydro, vật liệu màng polyme trao đổi proton, điện cực xúc tác Platin, các vật liệu cacbon mang platin cấu trúc vi xốp khuếch tán khí hydro và oxy chiếm đến 70% giá thành của pin. Vì những vật liệu này rất đắt tiền nên giá thành của pin nhiên liệu hydro còn cao, ảnh hưởng đến giá thành điện sản xuất từ pin nhiên liệu hydro. Do đó, vấn đề hạ chi phí cho vật liệu kể trên có vai trò quyết định, trong đó tìm cách **giảm hoặc thay thế kim loại xúc tác platin** trong chế tạo điện cực. Hiện nay, nhờ chế tạo vật liệu điện cực xúc tác *platin phân bố trên sợi cacbon* hoặc sử dụng *nano platin*, đã có thể giảm được 30% lượng platin so với trước mà không làm giảm hiệu quả của quá trình [30]. Đã có phòng thí nghiệm *thay thế platin đắt tiền bằng hợp kim vàng-paladi*, chẳng những hạ được giá thành, mà còn kéo dài tuổi thọ của pin [31]. Một số phòng thí nghiệm khác đã thay thế platin bằng *vàng*, một kim loại ít quý hơn platin nhưng lại không có hoạt tính xúc tác như platin. Bằng công nghệ nano, đã chế tạo *nano vàng* và điều kỳ diệu là vàng có cấu trúc nano này lại thể hiện hoạt tính xúc tác như platin [23]. Nói chung, mục tiêu trước mắt về sử dụng Platin trong chế tạo pin nhiên

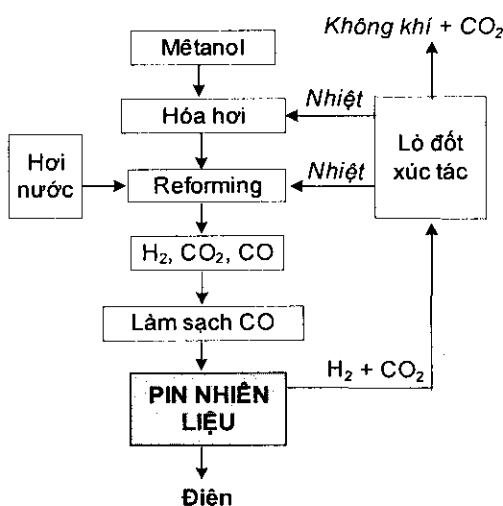
liệu hydro là phải giảm xuống còn 0,2 g/kW Pt, nếu được như vậy tức đã giảm được 5 lần so với mức sử dụng hiện nay, có nghĩa giá thành sẽ giảm xuống tương ứng.

(5) Nghiên cứu sử dụng nhiên liệu hoá thạch và nhiên liệu sinh học trong chế tạo pin nhiên liệu

Trong giai đoạn quá độ hiện nay, pin nhiên liệu có thể sử dụng cả những nguồn nhiên liệu khác như *nhiên liệu sinh học (metanol)*, *khí thiên nhiên*, *thậm chí xăng và khí ngưng tụ*.

Khi tận dụng những nguồn nhiên liệu này để sản xuất điện trong pin nhiên liệu để đưa vào các phương tiện giao thông vận tải, trong quá trình sẽ có CO_2 thoát ra, nhưng ít hơn so với khí thải từ các động cơ đốt trong khi sử dụng các nhiên liệu nói trên. Sản phẩm là hỗn hợp gồm có hydro và CO_2 nên được gọi là *nhiên liệu giàu hydro (hydrogen-rich fuel)* để phân biệt với *nhiên liệu hydro thuần khiết (pure hydrogen fuel)*, cung cấp trực tiếp cho pin nhiên liệu. Để sử dụng các nhiên liệu trên cho pin nhiên liệu, phải có bộ phận chuyển đổi hoá học chúng thành hydro theo các phản ứng reforming hơi nước (steam reforming) lắp thành một bloc đặt bên trong xe.

Sơ đồ hệ thu nhiên liệu giàu hydro từ metanol được trình bày như hình 5 dưới đây



Hình 5. Sơ đồ hệ thống chuyển đổi nhiên liệu sinh học thành nhiên liệu giàu hydro

(6) Nghiên cứu hạ giá thành điện mặt trời để sử dụng cho quá trình điện phân

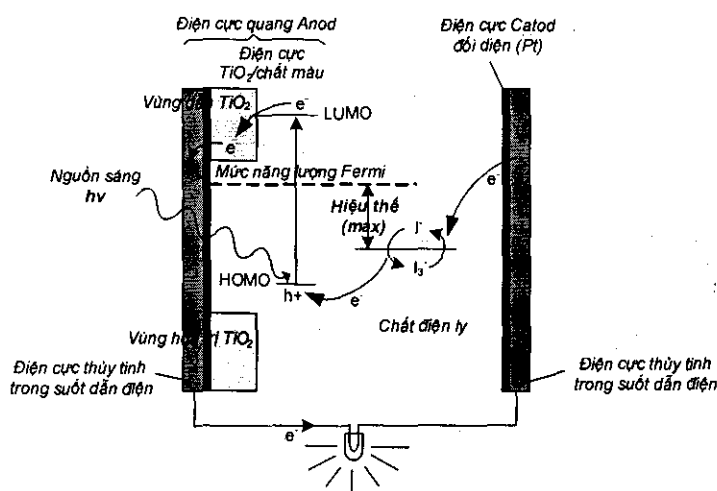
Năm 1883, pin mặt trời đầu tiên được chế tạo do *Charles Fritts*, bằng cách phủ một lớp rất mỏng kim loại vàng lên chất bán dẫn *selen* tạo ra một *mối liên kết trực tiếp (junction)*. Hiệu suất chuyển hoá năng lượng chỉ có 1%. Pin mặt trời trên cơ sở silic mở đầu cho thế hệ pin mặt trời thứ nhất do Phòng thí nghiệm *Bell* chế tạo vào năm 1954 do tình cờ phát hiện thấy silic sạch bị lẫn vào một vài nguyên tố khác (*sau này trở thành kỹ thuật "cấy" – dope – để tạo thành silic loại n và silic loại p*) trở nên rất nhạy với ánh sáng, độ dẫn điện tăng lên. Pin chế tạo bằng vật liệu trên đây đã đạt hiệu suất chuyển hoá năng lượng đạt được 6%. Đến nay, pin mặt trời silic đã hoàn thiện ở thế hệ thứ 2 với hiệu suất chuyển hoá năng lượng khá cao. Hiệu suất chuyển hoá quang năng thành điện năng của pin mặt trời trên cơ sở silic thù hình là 6%, silic đa tinh thể khoảng 14 - 16%, silic đơn tinh thể đến ~40%.

Để hạ giá thành điện mặt trời, hiện nay đã xuất hiện một thế hệ pin khác, đó là *pin quang điện hoá* và *Pin mặt trời bán dẫn hữu cơ*

(i) Pin quang điện hoá (Photoelectrochemical Cell)

Nguyên lí của *pin quang điện hoá* (photoelectrochemical cell) và *pin mặt trời silic* (Silicon Solar Cell) hoàn toàn khác nhau vì dựa vào hai quá trình khác nhau: **pin silic** dựa vào quá trình quang điện xảy ra trong mối liên kết giữa silic loại p và silic loại n, *liên kết n-p* (np-junctions), trong khi đó, **pin quang điện hoá** dựa vào quá trình quang điện hoá xảy ra trên điện cực nhạy ánh sáng (photo-sensitized anod) và chất điện li có mặt chất môi giới (mediator) oxyhoá-khử.

Pin quang điện hoá chủ yếu được chế tạo theo nguyên lí của quá trình quang điện hoá với điện cực được phủ một lớp chất màu nhạy ánh sáng nên còn được gọi là **pin mặt trời phủ chất màu nhạy ánh sáng** (Dye-sensitized Solar Cell), do Michael Graetzel và Brian O'Regan ở Trường Đại học Bách khoa Lausanne (Thụy Sĩ) sáng chế năm 1991, và vì vậy còn được mang tên **Pin Graetzel** [18] (hình 6). Graetzel đã sử dụng Titan Dioxid *cấu trúc nano* (20 nm), được phủ thêm một lớp rất mỏng (lớp đơn phân tử) chất màu hữu cơ, là các phức chất kim loại-hữu cơ nhạy ánh sáng (các phức cơ-kim của Ruteni (Ru) và Osmi (Os), đặc biệt là các phức Ru-polypyridin [18]) lên bề mặt Titan Dioxid cấu trúc nano, tạo thành điện cực nhạy ánh sáng (sensitized photoelectrode). Quá trình xảy ra tương tự như quá trình quang điện hoá để sản xuất hydro trình bày ở phần tiếp sau, tuy nhiên sự khác nhau ở chỗ dung dịch điện li pin mặt trời có chứa chất môi giới (mediator) oxyhoá-khử Iodua (KI_3/KI).



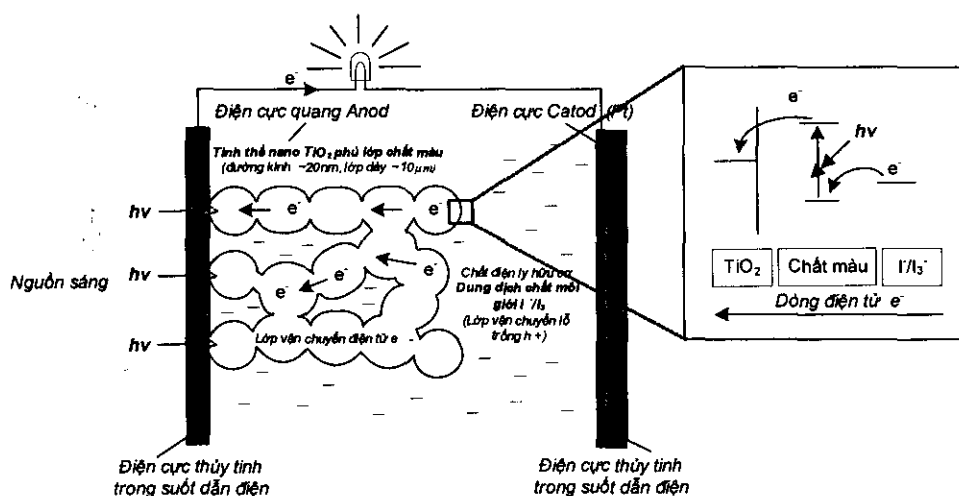
Hình 6. Sơ đồ nguyên tắc hoạt động của pin mặt trời phủ chất màu nhạy ánh sáng (pin quang điện hoá Graetzel)

Khi phân tử chất màu bị kích thích bởi các photon ánh sáng sẽ tạo ra nhiều điện tử quang sinh, các điện tử quang sinh này nhảy ngay vào vùng dẫn của chất bán dẫn nano titan dioxid, các điện tử di chuyển đến điện cực thủy tinh dẫn điện sau đó được chạy sang điện cực thủy tinh dẫn điện đối diện nhờ dây dẫn nối bên ngoài. Các lỗ trống quang sinh của chất màu sẽ lấy điện tử của chất môi giới oxyhoá-khử (KI_3/KI) trong dung dịch điện li, thực hiện phản ứng oxy hoá tạo thành I_3^- , sau đó I_3^- do sự chuyển điện tử từ điện cực đối diện đến sẽ được khử thành I^- và kết quả tạo thành một mạch điện kín. Do tốc độ di chuyển điện tử quang sinh của chất màu đến vùng dẫn của TiO_2 rất nhanh, $10^{-15} - 10^{-12}$ giây, trong khi đó tốc độ quá trình hồi phục lại chất màu xảy ra chậm hơn, $\sim 10^{-12}$ giây, nên sự trở về của các điện tử quang sinh trong vùng dẫn để tái kết hợp

với các lỗ trống quang sinh của phân tử chất màu sẽ không xảy ra, đã giúp việc tách các điện tử quang sinh không cho tái kết hợp trở lại các lỗ trống quang sinh đạt hiệu quả cao. Về lí thuyết, điện thế cực đại thu được tương ứng với hiệu số của thế oxy hoá - khử của I_3^-/I^- và mức năng lượng *Fermi* (hình 6).

Dưới đây là mô hình cấu trúc năng lượng và hình học của pin mặt trời *Graetzel* (hình 7).

Năm 1990 được xem là một cột mốc quan trọng trong lịch sử pin mặt trời nhạy ánh sáng khi *Graetzel* công bố đã đạt được hiệu suất chuyển hoá năng lượng là 11%. Tuy hiệu suất chuyển hoá năng lượng thấp hơn với pin mặt trời làm bằng màng mỏng silic đơn tinh thể, nhưng tỉ suất giá thành so với hiệu suất chuyển hoá là khá cao, cho phép cạnh tranh được với nguồn điện sản xuất từ nhiên liệu hoá thạch hiện nay. Pin *Graetzel* có triển vọng phát triển mạnh vì được sản xuất từ vật liệu rẻ tiền, không cần thiết bị chế tạo tinh vi, phức tạp nên giá thành sản phẩm rẻ. Theo dự báo, đến năm 2010, điện mặt trời sản xuất từ pin *Graetzel* sẽ đóng góp phần đáng kể vào nguồn điện từ năng lượng tái tạo của thế giới.



Hình 7. Mô hình cấu trúc năng lượng và hình học của pin mặt trời *Graetzel* [28]

(ii) Pin mặt trời bán dẫn hữu cơ (Organic Semiconductor Solar Cell)

Pin mặt trời chế tạo từ các chất bán dẫn vô cơ trên các bản đế phẳng (wafer) và chia ô vuông rất đắt tiền, dễ vỡ, mặt khác việc lắp đặt chúng đòi hỏi nhiều công nên khó triển khai trên diện rộng. Từ đó nhiều nhà nghiên cứu nảy sinh ý tưởng làm sao chế tạo được điện cực và chất bán dẫn dưới dạng các tấm cuộn tròn như cuộn phim ảnh hoặc cuộn giấy in báo và mềm dẻo, không vỡ khi lắp đặt. Pin mặt trời nếu làm được như thế chẳng những sẽ rẻ mà còn dễ dàng triển khai khi lắp đặt trên các mái nhà như các vật liệu phủ lợp thông thường, làm giảm chi phí lắp đặt và dễ triển khai trên diện rộng. Ngày nay, đã chế tạo được các vật liệu bán dẫn hữu cơ, những chất bán dẫn hữu cơ này cho hoà tan trong dung môi và sau đó phun phủ hoặc in trên các đế bằng polyme. Đây là một hướng phát triển mới rất nhiều triển vọng và được xúc tiến nghiên cứu ở nhiều phòng thí nghiệm nhằm chế tạo pin mặt trời trên cơ sở vật liệu bán dẫn hữu cơ (Organic Semiconductor-Based Solar Cell) hay còn gọi *pin mặt trời bán dẫn hữu cơ* (Organic Semiconductor Solar Cell) [21,22] với giá thành rẻ, dễ lắp đặt.

Pin mặt trời bán dẫn hữu cơ xuất hiện lần đầu tiên vào cuối những năm 70 của thế kỉ trước, dựa trên những chất bán dẫn hữu cơ thay cho chất bán dẫn vô cơ. Vì các liên kết trong chất bán dẫn vô cơ khác với trong chất bán dẫn hữu cơ nên pin mặt trời hữu cơ vận hành theo một cách khác hẳn. Các chất bán dẫn vô cơ gắn kết nhau bằng các liên kết đồng hoá trị rất mạnh, phát triển mạng 3 chiều, tạo ra các tính chất bán dẫn trong các vùng điện tử. Trong khi đó, liên kết nội phân tử trong các chất bán dẫn hữu cơ cũng là các liên kết đồng hoá trị nhưng các phân tử gắn kết nhau chỉ bằng lực tương tác Van der Waals yếu ớt. Tính dẫn điện của các chất bán dẫn hữu cơ dựa vào các điện tử π của các nối đôi liên hợp, sự liên kết yếu của các điện tử π là nguyên nhân của các sự di chuyển điện tử cũng như các tính chất quang trong chất bán dẫn hữu cơ. Các điện tử có thể di chuyển dọc theo các vân đạo π nhờ hiện tượng cộng hưởng và sự che phủ lên nhau các vân đạo giúp cho sự di chuyển điện tử dễ dàng hơn, dễ dẫn điện hơn. Sự chuyển dịch điện tử từ vân đạo π (vân đạo liên kết) lên vân đạo π^* (vân đạo phản liên kết) trong các chất bán dẫn hữu cơ có năng lượng khoảng 1,4 - 2,5 eV, tức che phủ hầu hết phổ ánh nắng mặt trời. Điều này là cơ sở để sử dụng chất bán dẫn hữu cơ vào mục đích chế tạo pin mặt trời. Hiện nay, các chất bán dẫn hữu cơ không chỉ là các polyme (phân tử trên 10.000 nguyên tử) mà còn có những phân tử nhỏ hơn (nhỏ hơn vài ngàn nguyên tử). Những polyme bán dẫn được sử dụng trong pin mặt trời hữu cơ là *polyphenylen vinylen*, *phthalocyanin đồng* (loại picmen màu xanh hoặc xanh lá cây).

Hiệu suất chuyển hoá năng lượng đạt được còn thấp, khoảng 4 - 5%, nhưng nhiều nhà khoa học lạc quan cho rằng có thể đạt đến 20% trong vài năm tới [24]. Tuy nhiên, giá thành chế tạo pin mặt trời hữu cơ lại rất thấp, dễ sử dụng và lắp đặt, giá thành có thể giảm từ 10-20 lần so với pin mặt trời silic. Nếu so sánh giá một panen pin mặt trời silic 350\$/m² với hiệu suất chuyển hoá năng lượng 10%, thì pin mặt trời hữu cơ giá chỉ có 30\$/m² với hiệu suất chuyển hoá năng lượng chỉ đạt 4 - 5%, vẫn có ý nghĩa thương mại.

Tuy nhiên, nhược điểm của tất cả các pin mặt trời bán dẫn hữu cơ được chế tạo hiện nay nói chung đều bị giảm cấp khi bị tác dụng của tia UV trong ánh sáng mặt trời, vì vậy thời gian hoạt động bị rút ngắn. Hơn nữa, các hệ nối đôi liên hợp trong polyme thường rất dễ bị bề gãy khi bị bức xạ của các bước sóng ngắn, hầu hết các polyme dẫn điện đều là những hợp chất không no, rất nhạy với môi trường ẩm và oxi hoá, vì vậy ít bền, độ ổn định kém gây khó khăn khi đưa vào thương mại hoá sản phẩm. Việc tìm các giải pháp nâng cao độ bền và tuổi thọ của pin mặt trời bán dẫn hữu cơ là mục tiêu các nội dung nghiên cứu hiện nay trong lĩnh vực pin mặt trời bán dẫn hữu cơ.

Chương trình nghiên cứu và phát triển pin mặt trời đã được Mỹ khởi động từ giữa năm 1950, và tăng tốc vào những năm 60 do yêu cầu của chương trình không gian. Trong giai đoạn 27 năm đầu của công nghiệp pin mặt trời, tổng sản lượng điện mặt trời trên thế giới chỉ đạt được 1 gigawatts (10⁹ watts), nhưng chỉ 4 năm sau đó, đã đạt được 2 gigawatts. Sản lượng pin mặt trời sản xuất từ năm 1994 đến 1997 tăng lên gấp đôi, và từ 1997-2000 đã tăng lên gấp 3! [9]. Trong số này, chỉ 25% sản lượng pin mặt trời cung cấp cho mục đích dân dụng ở những vùng sâu, vùng xa không có điện lưới, còn lại cung cấp cho mục đích quân sự và không gian.

Năm 1972 đã thương mại hoá sản xuất pin mặt trời, nhưng giá thành lên đến 500\$/watt. Đến năm 1980, giá thành giảm còn 100\$/watt và đến năm 2005, giá thành đã hạ được 6-8\$/watt. Giá 1kWh điện mặt trời ở trung tâm Châu Âu là 0,60\$/kWh (0,5 €/kWh), ở vùng nắng nhiều Châu Âu ~0,3\$/kWh (0,25€/kWh), trong khi đó, giá điện từ các nhà máy điện chạy bằng nhiên liệu hoá thạch ở Mỹ trung bình là 0,06\$/kW-h [9].

Như vậy, pin mặt trời còn phải cải tiến hoàn thiện để hạ giá thành xuống thấp hơn nữa mới có thể sử dụng vào sản xuất hydro bằng quá trình điện phân. Quá trình hoàn thiện pin mặt trời để

nâng cao hiệu suất và hạ giá thành đang được xúc tiến nghiên cứu mạnh mẽ ở nhiều phòng thí nghiệm trên thế giới.

(7) Nghiên cứu phương thức tồn chứa, vận chuyển, cung cấp hydro

Bằng cách nào đó tăng khả năng tồn chứa hydro ít nhất là sử dụng cho được một hành trình trên 500 km mới nạp lại. Tồn chứa hydro là vấn đề khó khăn về mặt kĩ thuật được quan tâm nhất hiện nay, vì hydro không giống như các khí hydrocacbon hoặc nhiên liệu xăng dầu. Mặc dù phân tử hydro có mật độ năng lượng rất cao tính cho một đơn vị trọng lượng, nhưng khí hydro ở điều kiện nhiệt độ thường lại có mật độ năng lượng rất thấp tính cho một đơn vị thể tích do trọng lượng phân tử của hydro thấp, nên nếu tồn chứa ở nhiệt độ thường đòi hỏi dung chứa thiết bị phải rất lớn. Do đó, nếu hydro sử dụng cho các phương tiện vận tải có không gian thiết kế rất hạn chế, hydro cần phải nén hoặc hoá lỏng mới đủ lượng hydro cho một hành trình cần thiết. Tuy nhiên, việc hoá lỏng hydro là rất khó khăn, vừa nén dưới áp suất cao, vừa phải làm lạnh đến -252°C , tiêu hao năng lượng rất lớn. Hydro lỏng lại có mật độ năng lượng tính theo thể tích rất kém, thấp hơn xăng đến 4 lần. Mặt khác, việc chứa hydro hoá lỏng phải trong các bình chứa chịu áp cao, lại phải cách nhiệt tốt để ngăn sự bốc hơi trong bình chứa. Do đó, giải pháp này không thể thực hiện được. Giải pháp hiện nay là sử dụng hydro dưới dạng khí nén dưới áp suất tương đối cao, khoảng 700 bar (70 MPa) để trang bị cho các phương tiện vận tải. Bằng cách tồn chứa hydro như trên, theo tính toán năng lượng sử dụng cho vận tải chỉ có 30%, còn lại là năng lượng dành vào cho tồn chứa dưới dạng khí nén.

Giải pháp tồn chứa khác được chú ý hiện nay là chuyển hydro sang dạng hydrua kim loại làm thành viên hạt hoặc một số hợp chất chứa hydro khác. Hydro có khả năng phản ứng với một số kim loại tạo ra hydrua như với kim loại *magiê* (Mg), *natri* (Na), *lithi* (Li), *canxi* (Ca), *nhôm* (Al), *bo* (B). Bằng cách sản xuất dưới dạng viên hạt hydrua nên việc tồn chứa, vận chuyển và sử dụng hydro thuận lợi. Tại nơi sử dụng, có thể phân hủy hydrua kim loại bằng nhiệt, cho hydro thoát ra, và kim loại lại được tái sử dụng để tồn chứa hydro. Tuy nhiên, một số hydrua hoạt tính rất cao, có thể bốc cháy mạnh khi tiếp xúc với không khí ẩm. Vì vậy, hiện nay thường sử dụng những dạng hoạt tính kém hơn nhưng an toàn hơn như *natri borohydrua*, *lithi nhômhydrua*.

Với sự xuất hiện công nghệ nano, gần đây việc tồn chứa hydro đã được thực hiện bằng cách cho hấp thu trên vật liệu cacbon cấu trúc nano như *cacbon buckyballs* hoặc *cacbon dạng ống nano* (*nanotube carbon*) đạt hiệu quả rất cao, được xem là giải pháp khả thi cho trang bị các phương tiện vận tải hiện nay.

Việc nghiên cứu các giải pháp tồn chứa hydro vẫn đang được tiếp tục nghiên cứu để đạt mức độ hoàn chỉnh.

(8) Nghiên cứu giải pháp khác phục sự phụ thuộc vào thời tiết

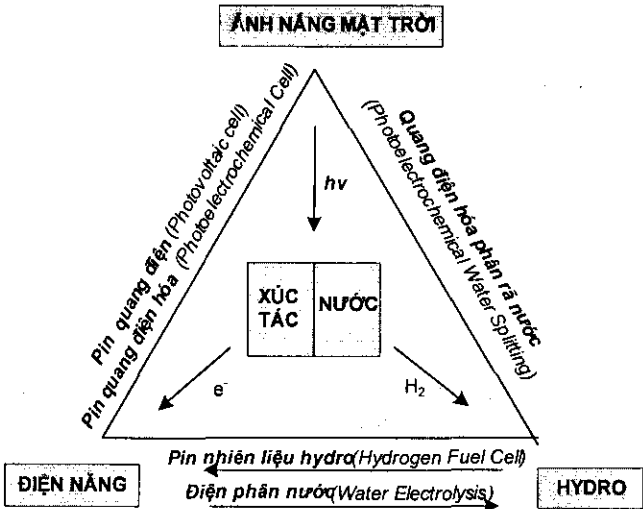
Nền kinh tế hydro nhờ năng lượng mặt trời sẽ gặp phải sự phụ thuộc vào ánh nắng mặt trời vì năng lượng mặt trời chỉ có thể cung cấp ánh nắng vào ban ngày, nghĩa là có thể làm gián đoạn quá trình sản xuất hydro và điện năng vào ban đêm hoặc những ngày mùa đông không có ánh nắng.

Tuy nhiên, trở ngại này cũng đã được tính đến bằng giải pháp trên cơ sở mối liên quan giữa ánh nắng mặt trời, nước, xúc tác và các dạng sản phẩm năng lượng (hydro, điện) trong sơ đồ tam giác năng lượng như sau (hình 8):

Vào *ban ngày*, nhờ có ánh nắng mặt trời sẽ tiến hành *quá trình quang điện hoá phân rã nước* để sản xuất hydro đồng thời sử dụng *hệ thống pin quang điện (pin mặt trời)* hoặc *pin quang điện hoá* để sản xuất điện mặt trời (theo các quá trình thể hiện ở hai cạnh nghiêng của tam giác năng lượng - hình 8). *Hydro* sản xuất ra ban ngày có thể sử dụng trực tiếp, hoặc có thể tích

trữ lại nhờ các vật liệu hấp phụ như ống nano cacbon (carbon nanotube), hoặc dưới dạng hydrua kim loại, như kim loại magiê (Mg), natri (Na), lithi (Li), canxi (Ca), nhôm (Al), bo (B), hoặc dưới dạng hydro nén dưới áp suất cao. Điện năng sản xuất ra ban ngày có thể sử dụng trực tiếp, hoặc có thể tích trữ lại trong các ắc quy hoặc pin tái nạp điện (rechargeable battery) như pin Li-ion, pin Li-polyme.

Vào ban đêm, hoặc khi gặp thời tiết xấu, không có ánh nắng mặt trời, vẫn có thể sản xuất điện bằng hệ thống pin nhiên liệu hydro nhờ có hydro đã tích giữ lại trong vật liệu hấp phụ như ống nano cacbon (carbon nanotube), hoặc dưới dạng hydrua kim loại, như kim loại magiê (Mg), natri (Na), lithi (Li), canxi (Ca), nhôm (Al), bo (B), hoặc dưới dạng hydro nén dưới áp suất cao. Mặt khác, vào ban đêm hoặc khi gặp thời tiết xấu, không có ánh nắng mặt trời cũng có thể sản xuất hydro bằng con đường điện phân nhờ điện mặt trời đã tích trữ được trong ắc quy hoặc pin tái nạp điện như pin Li-ion, pin Li-polyme (theo các quá trình thể hiện ở cạnh đáy tam giác năng lượng – hình 8).



Hình 8. Sơ đồ tam giác năng lượng của nền kinh tế hydro nhờ năng lượng mặt trời

6. KẾT LUẬN

Ở các nước châu Á, Nhật Bản, Trung Quốc, Hàn Quốc, Đài Loan đều có chương trình nghiên cứu phục vụ cho nền kinh tế hydro tương lai, trong đó Nhật Bản là nước tiên phong trong chương trình hiện thực hoá nền kinh tế hydro. Ở Mỹ, Năm 2003 Tổng thống Bush đã công bố một chương trình được gọi là Sáng kiến nhiên liệu hydro (Hydrogen Fuel Initiative) và đã được quốc hội Mỹ thông qua thành đạo luật về Chính sách năng lượng (Energy Policy) của Mỹ vào năm 2005, với quyết định giành 1,2 tỉ đôla cho nghiên cứu và phát triển nhằm mục tiêu đến năm 2020 ô tô chạy bằng hydro phải triển khai thương mại hoá thành công vào thực tế với hiệu quả và giá thành cạnh tranh [23]. Ở châu Âu, Hãng Daimler Chrysler đã công bố chương trình chi 1,4 tỉ USD để phát triển công nghệ pin nhiên liệu hydro cho công nghiệp ô tô.

Ở nước ta, nói đến nền kinh tế hydro có vẻ vẫn còn xa lạ và phù phiếm, không liên quan gì đến đời sống và xã hội chúng ta. Nhà nước chưa có chương trình quốc gia trọng điểm nào liên quan đến việc chuẩn bị cho thời kỳ “hậu hoá thạch” có lẽ nghĩ rằng nước ta dồi dào tài nguyên dầu, khí và than đá, tuy nhiên việc chuẩn bị cho nền kinh tế hydro ở nước ta ngay từ bây giờ

không phải là quá sớm. Không lẽ chúng ta đứng ngoài cuộc chơi của thế giới trong vấn đề này. Trong khi đó, xu hướng lựa chọn nguồn năng lượng hạt nhân để phát triển thành nguồn năng lượng chủ đạo của nước ta trong vài thập kỉ tới đang được đề cập khá nhiều. Theo *TS Đinh Hữu Đức*, Chủ tịch kiêm Tổng giám đốc Công ty American Technologies, Inc (ATI), nguyên Giám đốc điều hành nhà máy điện nguyên tử Water Ford III, bang Louisiana (Mỹ) cho rằng, **trong 2 năm tới Việt Nam phải cần ít nhất 20 nhà máy điện nguyên tử** mới bảo đảm đủ điện năng cho phát triển kinh tế, và đây là **thời cơ vàng cho Điện nguyên tử Việt Nam** (báo *Nhân Dân điện* ngày 8-8-2007) ! Thật khó hình dung tính khả thi của chương trình điện nguyên tử như vậy, nếu biết rằng vốn đầu tư cho nhà máy điện nguyên tử đầu tiên ở Việt Nam công suất 2.000 MW khoảng trên 4 tỉ USD và phải xây dựng trong vòng 13-15 năm nếu đúng tiến độ. Nhà máy lò dầu Dung Quất đơn giản hơn, đầu tư trên 2 tỉ USD, thời hạn hoàn thành đã phải gần 10 năm nhưng vẫn chưa đưa vào vận hành !

Tuy nhiên, vấn đề năng lượng hạt nhân không phải không lưu tâm đến, mà thật ra rất cần để bảo đảm an toàn năng lượng cho nền kinh tế. Vấn đề là có nên tiếp tục đi theo hướng xây dựng nhà máy điện nguyên tử trên cơ sở *phản ứng phân rã hạt nhân (nuclear fission)* với nguyên liệu là Urani và Plutoni có nhiều nguy cơ rò rỉ phóng xạ và bế tắc trong xử lí rác thải hạt nhân như hiện nay, hay nên theo xu hướng mới của thế giới xây dựng nhà máy điện nguyên tử trên cơ sở *phản ứng tổng hợp nhiệt hạch (Nuclear Fusion)* với nguyên liệu là hydro (Hydrogen Fusion) hoặc đồng vị của hydro là Deuteri (D) và Triti (T). Quá trình tổng hợp nhiệt hạch với nguyên liệu hydro và đồng vị của hydro sẽ an toàn, không có nguy cơ rò rỉ phóng xạ, không có rác thải hạt nhân, hơn nữa nguồn nguyên liệu hydro và các đồng vị rất phong phú (deuteri tách ra từ nước biển), năng lượng sinh ra lại lớn hơn so với phản ứng phân rã hạt nhân (3,5 MeV/nucleon so với 1 MeV/nucleon) [34, 35].

Trong thế kỉ 21 chúng ta sẽ được chứng kiến một sự thay đổi sâu sắc trong nền kinh tế thế giới và các sinh hoạt xã hội : **sự chuyển đổi từ nền kinh tế dựa vào nhiên liệu hoá thạch sang nền kinh tế dựa vào nhiên liệu hydro nhờ năng lượng mặt trời**. Nền kinh tế hydro nhờ năng lượng mặt trời không còn là ý tưởng mơ hồ hoặc chỉ là viễn tưởng khoa học, khả năng hiện thực hoá nền kinh tế hydro chỉ khoảng 25-35 năm thôi ! Như Tổng thống Mỹ G. Bush đã hy vọng “*chiếc xe ô tô đầu tiên trong đời của những trẻ mới sinh hôm nay ngồi cầm lái, sẽ là xe hydro dòng ZEV*”.

Sự suy thoái môi trường sống ngày một trầm trọng, sự biến đổi khí hậu ngày càng thường, thiên tai, lũ lụt, hạn hán hoành hành khắp nơi, thêm vào đó tài nguyên hoá thạch không còn nhiều, là những nhân tố tạo ra áp lực lớn buộc phải nhanh chóng hiện thực hoá nền kinh tế hydro.

Với nguồn nguyên liệu thiên nhiên phong phú là nước, với nguồn năng lượng dồi dào quanh năm là ánh nắng mặt trời, ngày nay con người đã chứng minh được là có thể sản xuất ra **nguồn năng lượng vô tận** một cách thuyết phục, **bảo đảm an toàn năng lượng cho loài người và độc lập về năng lượng cho mỗi quốc gia**, mặt khác sử dụng chúng không gây ô nhiễm môi trường, không gây nguy cơ sự cố môi trường, không làm biến đổi khí hậu của hành tinh. Nguồn năng lượng này có thể sản xuất mọi nơi, có thể sản xuất tập trung hoặc phân tán, không lệ thuộc nguồn cung cấp nguyên liệu như dầu, khí, than đá, miễn là ở đó có nước và có ánh nắng mặt trời. Nhờ đó, hy vọng ở thế kỉ 21 và các thế kỉ sau đó, khi nguồn tài nguyên hoá thạch cạn kiệt ở thời kỳ “**hậu hoá thạch**” sẽ được thay thế bằng nguồn năng lượng mới sạch, bền vững, phong phú và an toàn cho con người và hành tinh chúng ta đang sống : **đó là hydro nhờ năng lượng mặt trời**.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. Energy Consumption by Source 2005 - Report International Energy Association; www.earthtrends.wri.org.
2. Christopher Flavin – Energy for the 21st Century: The decline of Nuclear Power, bài diễn văn trước Quốc hội Phần Lan ngày 4/4/1999
3. Greepeace International - A Farewell to Nuclear Power, 1990.
4. Nuclear Power Phase-Out, <http://en.wikipedia.org>
5. Warren D. Reynolds – Why we need the Solar-Hydrogen Economy now – <http://www.hydrogennow.org>
6. Ty Cashman, Bret Logue – The coming Hydrogen Economy – <http://www.yesmagazine.org>
7. Jeremy Rifkin – A Hydrogen Economy : The power to change the world – <http://www.commondreams.org>
8. A. Fujishima, K. Honda - Electrochemical photolysis of water at a semiconductor electrode - Nature (1972), 238 (5358) 37-38
9. J. Johnson - U.S. Photovoltaic Exports Jump, Chemical and Engineering News, 9 October, 2000, p. 45.
10. H. Morisaki, T. Watanabe, M. Iwase, K. Yazawa - Photoelectrolysis of water with TiO₂-covered solar-cell electrodes, Applied Physic Letters 29 (6) (1976) 338-340.
11. A. K. Ghosh, H.P. Maruska – Photoelectrolysis of water in sunlight with sensitized semiconductor electrodes – Journal of the Electrochemical Society (1977), 124(10),1516
12. W. Choi, A. Termin, MR. Hoffman – The role of Metal-ion dopants in quantum-sized TiO₂: correlation between photoreactivity and charge carrier recombination dynamics – Journal of Physical Chemistry,(1994), 98(51), 13669-13679
13. R. Asahi, T. Morikawa, T. Ohwaki, K. Aoki, Y. Taga – Visible-light photocatalysis in nitrogen-doped titanium oxides – Science, (2001), 293(5528), 269-271
14. H. Irie, Y. Watanabe, K. Hashimoto – Nitrogen-concentration dependence on photocatalytic activity of TiO_{2-x}N_x powder- Journal of Physical Chemistry B,(2003), 107(23), 5483-5486
15. S. Khan, M. Al-Shahry, W.B.Jr. Ingler – Efficient photochemical water splitting by a chemical modified n-TiO₂- Science, (2002), 297(5590), 2243-2245
16. SC. Moon, H. Mametsuka, S. Tabata, E. Suzuki – Photocatalytic production of hydrogen from water using TiO₂ and B/TiO₂- Catalysis Today, (2000), 58(2-3),125-132
17. C. Burda, Y.B. Lou, X.B. Chen, A.C.S. Samia, J. Stout, J.L. Gole – Enhanced Nitrogen Doping in TiO₂ Nanoparticles, Nano Letters (2003), 3(8), 1049-1051
18. M. Graetzel, B. O'Regan – A low-cost, high-efficiency solar cell based on dye-sensitized colloidal TiO₂ films – Nature, 353(24), 737-740
19. M.Y. El Zayat, A.O. Saed, M.S. El-Dessouki – Photoelectrochemical properties of dye-sensitized Zr-doped SrTiO₃ electrodes , Intrenational Journal of Hydrogen Energy (1998), 23(4), 259-266
20. Solar Cell – http://en.wikipedia.org/wiki/Solar_cell
21. K.M. Coakley, M.D. McGehee – Conjugated polymer photovoltaic cells – Chemistry Of Materials. (2004) 16(23), 4533-4542
22. M.K. Granstrom, K. Petritsh, A.C. Arias, A. Lux, M.R. Anderson, R.H. Friend – Laminated fabrication of polymeric photovoltaic diodes – Nature (1998) 395,257-260
23. K.Nice, J. Strickland - How Fuel Cells Work - <http://howstuffworks.com/>

24. C. Goh, M. D. McGehee – Organic Semiconductors for Low-Cost Solar Cells – <http://www.nae.edu/NAE/bridgecom.nsf/>
25. Hydrogen Economy - http://en.wikipedia.org/wiki/Hydrogen_economy
26. R.B. Dopp, K. McGrath – Highly efficient Hydrogen generation via water electrolysis using Nanometal Electrodes – www.qsinano.com
27. Chien-Cheng Pan, Jeffrey C.S. Wu – Visible light response Cr-doped $\text{TiO}_{2-x}\text{N}_x$ photocatalysts – Material Chemistry and Physics (2006), 100, 102-107
28. M. Kanelo, I. Okura – Photocatalysis – Science and Technology – Kodanka Spriger, NewYork, 2003
29. <http://www.vasanth.in/2005/07/23/HondaFuelcellMotorcycle.aspx>
30. <http://www.llnl.gov/ipac/technology/profile/transportation>
31. Fuel Cell – http://en.wikipedia.org/wiki/Fuel_cell
32. A. Luzzi - Hydrogen production by water photolysis ? Clefs CEA , (2004-2005), N.50/51
33. J.R. Bolton – Sol. Energy (1996), 57 (37)
34. Hydrogen fusion best hope for future energy – <http://www.smh.com.au/letters/>
35. Fusion – The future of electricity generation – A report of a policy seminar organised by The Institute of Physics held on Tuesday 11 June 2002 - Institute of Physics , London, August 2002
36. Fossil Fuel – http://en.wikipedia.org/wiki/Fossil_fuel

SUMMARY

THE ENERGY REVOLUTION IN THE 21st CENTURY: THE CHANGE FROM THE FOSSIL ECONOMY TO THE SOLAR-HYDROGEN ECONOMY

The current economy is dependent on fossil fuels such as oil, gas, coal which are integral to industry, transport and every day life. The use of fossil fuels creates global warming, melting the Arctic ice cap, degradation of forests, agricultural, environmental damage, such as air pollution, oil spills, human health and mortality.

Nuclear fission is not energy option for the 21st century due to the safety and nuclear waste problems, security from terrorists, limited reserve of uranium mining.

The Solar Hydrogen- hydrogen produced from water and solar energy- is the choice of energy option for the 21st century. A solar hydrogen economy is proposed to solve the ill effects of using hydrocarbon fuels in transportation and other end-use applications where the carbon is released to the atmosphere. In the Solar Hydrogen Economy, the sun generates electricity by solar cells or solar photoelectrochemical cells, hydrogen can be obtained electrolytically (water electrolysis) or photoelectrochemically (solar photoelectrochemical splitting of water). The hydrogen would be utilized either by direct combustion in internal combustion engines or as fuel in proton exchange membrane fuel cells, which will become the best source of energy in the 21st century.

In the report a review is given for the role of catalysis and new materials science in the Energy Revolution in the 21st century: the change from the Fossil Economy to the Hydrogen Economy.

Địa chỉ:

Nhận bài ngày 10 tháng 3 năm 2007

Trung tâm Công nghệ hoá học và Môi trường (ECHEMTECH).