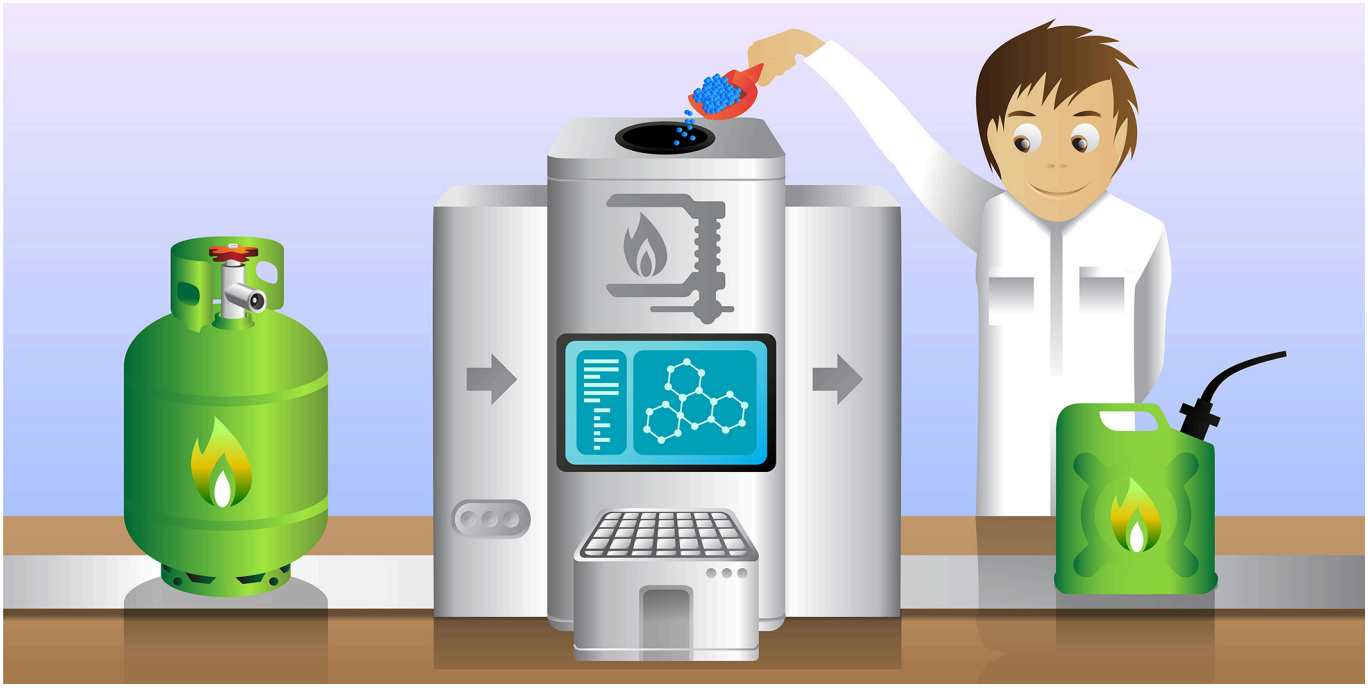
frontiers | فرونتيرز.. العلوم للعقول الشابة

الأرض ومواردها
نُشر على الإنترنت بتاريخ: 17 أكتوبر 2022
doi: 10.3389/frym.2015.00011-ar



# المحاكاة الحاسوبية: وسيلة تساعدنا على تعظيم كثافة طاقة غاز الميثان

***Cory M. Simon[1], Jihan Kim[2], Diego A. Gomez-Gualdron[3], Yongchul G. Chung[3], Richard L. Martin[4,5], Rocio Mercado[6], Michael W. Deem[7,8], Dan Gunter[4], Maciej Haranczyk[4], Randall Q. Snurr[3] and Berend Smit[1,6,9]***

[1]قسم الهندسة الكيميائية والجزيئية الحيوية، جامعة كاليفورنيا بيركلي، بيركلي، كاليفورنيا، الولايات المتحدة الأمريكية،
[2]قسم الهندسة الكيميائية والجزيئية الحيوية، المعهد الكوري المتقدم للعلوم والتكنولوجيا، دايجون، كوريا الجنوبية،
[3]قسم الهندسة الكيميائية والحيوية، جامعة نورث وسترن، إيفانستون، إلينوي، الولايات المتحدة الأمريكية،
[4]قسم البحوث الحاسوبية، مختبر لورنس بيركلي الوطني، بيركلي، كاليفورنيا، الولايات المتحدة الأمريكية،
[5]مجموعة واتسون، شركة المؤسسة الدولية للحاسبات الآلية (آي بي إم)، مركز بحوث ألمادن، سان خوسيه، كاليفورنيا، الولايات المتحدة الأمريكية،
[6]قسم الكيمياء، جامعة كاليفورنيا ببيركلي، بيركلي، كاليفورنيا، الولايات المتحدة الأمريكية،
[7]قسم الهندسة الحيوية، جامعة رايس، هيوستن، تكساس، الولايات المتحدة الأمريكية،
[8]قسم الفيزياء وعلم الفلك، جامعة رايس، هيوستن، تكساس، الولايات المتحدة الأمريكية،
[9]مختبر المحاكاة الجزيئية، ومعهد العلوم والهندسة الكيميائية (ISIC)، ومدرسة لوزان الاتحادية للفنون التطبيقية (EPFL)، سيون، سويسرا*

معظم السيارات تستخدم البنزين كوقود. لكن يمكن للسيارات أن تعمل بأنواع وقود أخرى، مثل الغاز الطبيعي (NG)، وهو الغاز نفسه المستخدم في الطهي وتدفئة منازلنا. ويعتبر الغاز الطبيعي أرخص من البنزين، وربما أقل ضررًا للبيئة أيضًا. ومع ذلك، فإن البنزين أكثر كثافة من الغاز الطبيعي، وذلك لأن البنزين سائل والغاز الطبيعي غاز. لذلك، لتشغيل سيارة بالغاز الطبيعي، نحتاج إلى زيادة كثافته حتى نتمكن من ملء خزّان الوقود بمقدار كافٍ من الغاز الطبيعي من أجل القيادة لمسافة

## المراجعون الصغار

KATE
العمر: 14

**مماثلة لخزّان البنزين. لذا يعمل الباحثون في جميع أنحاء العالم على تصنيع مواد تعمل كإسفنج يمتص الغاز الطبيعي. ومن خلال وضع هذه المواد الشبيهة بالإسفنج داخل خزان الوقود، يمكننا زيادة كثافة الغاز الطبيعي لتخزينه بكفاءة على متن السيارة. وفي دراستنا، أوضحنا كيف يمكن استخدام أجهزة الكمبيوتر للبحث عن المواد الواعدة التي تشبه الإسفنج لتخزين الغاز الطبيعي.**

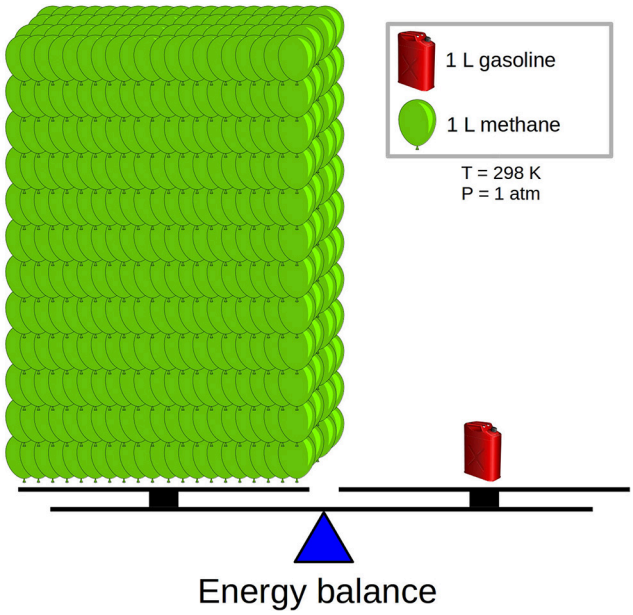
يعتبر الغاز الطبيعي وقودًا جذابًا للسيارات لكونه بديلًا للبنزين. وتمتلك الولايات المتحدة إمدادات وفيرة من الغاز الطبيعي، والكثير منها محتجز في التكوينات الصخرية العميقة تحت الأرض. والزيادة الأخيرة في استخدام التصديع الهيدروليكي (المعروف باسم "التكسير") والحفر الأفقي سمحت لنا باستخراج المزيد من هذا الغاز الطبيعي. وهذا الإمداد الوفير، الذي من المتوقع أن يستمر في المستقبل، يجعل من الغاز الطبيعي بديلًا رخيصًا نسبيًا للبنزين. وتوجد العديد من المناقشات القائمة حول تأثير التصديع الهيدروليكي على البيئة، ولكن من ناحية أخرى، قد يكون الغاز الطبيعي كوقود أقل ضررًا على البيئة من البنزين. فعلى سبيل المثال، ينتج عن حرق الغاز الطبيعي انبعاثات ثاني أكسيد كربون أقل بنسبة 25% من حرق البنزين. ويعد ثاني أكسيد الكربون من الغازات الدفيئة المسؤولة بشكل أساسي عن ظاهرة الاحتباس الحراري. ويتكون الغاز الطبيعي في الغالب من غاز الميثان، وهو في حد ذاته أحد الغازات الدفيئة القوية. لذلك، للاستفادة من الفوائد البيئية للغاز الطبيعي، يجب أن نحرص على تجنب انبعاثات غاز الميثان الإضافية الناتجة عن زيادة إنتاج الغاز الطبيعي ونقله واستخدامه كوقود للسيارات.

إذا كان للغاز الطبيعي مزايا اقتصادية وربما بيئية مقارنة بالبنزين، فلماذا لا تزال معظم السيارات تعمل بالبنزين؟ المشكلة هي أن للغاز الطبيعي كثافة طاقة منخفضة. تعتبر **كثافة الطاقة** كمية مهمة، حيث تخبرنا بمقدار الطاقة التي يمكننا الحصول عليها من حجم معين من الوقود. وكلما زادت الطاقة الموجودة في خزان الوقود، زادت المسافة التي يمكننا قيادتها قبل أن نحتاج إلى إعادة ملء خزان الوقود. دعونا الآن نقارن بين كثافات الطاقة للغاز الطبيعي والبنزين في درجة حرارة الغرفة والضغط الجوي (العادي). تعد كثافة الطاقة في البنزين أعلى بمقدار 950 مرة من كثافة الطاقة في الغاز الطبيعي. والسبب هو أن الجزيئات متباعدة للغاية في الغاز مقارنة بالسائل (أي تفصل بينها مسافة كبيرة)، مما يؤدي إلى انخفاض عدد الجزيئات لكل وحدة حجم. ويوضح الشكل 1 معنى ذلك عمليًا؛ فلقيادة المسافة نفسها باستخدام الغاز الطبيعي، علينا أخذ حجم غاز طبيعي بمقدار 950 ضعف حجم البنزين. وبما أن خزان البنزين العادي قد يحتوي على 50 لترًا؛ فتخيل كيف ستبدو السيارة بخزان أكبر بمقدار 950 مرة!

**كثافة الطاقة (ENERGY DENSITY)**

كمية الطاقة التي يمكن استخلاصها من وحدة حجمية واحدة من الوقود عن طريق حرقه. تُحدد كثافة الطاقة المسافة التي قد تقطعها السيارة بخزان وقود ممتلئ. الوحدات: الطاقة [ميجا جول (MJ)] لكل وحدة حجم [لتر (L)]، وبالتالي تكون ميجا جول/ لتر (MJ/L).

وبالتالي، لاستخدام الغاز الطبيعي كوقود للسيارات دون الحاجة إلى خزانات وقود كبيرة غير عملية، نحتاج إلى وضع المزيد من جزيئات الميثان في خزان الوقود. يتم حاليًا استخدام استراتيجيتين لزيادة كثافة الطاقة لخزان مملوء بالغاز الطبيعي. تتمثل إحدى الاستراتيجيات في ضغط الغاز الطبيعي؛ فعند الضغط العالي، يتواجد المزيد من جزيئات الغاز في نفس وحدة الحجم. وتتمثل الاستراتيجية الأخرى في تبريد الغاز الطبيعي إلى




**شكل 1**

توازن الطاقة - يسمح كلا جانبي الميزان لنا بالقيادة لنفس المسافة (على اليسار: غاز طبيعي، وعلى اليمين: بنزين). ففي درجة حرارة الغرفة (298 كلفن) والضغط الجوي (العادي) (1 ضغط جوي)، ينتج عن حرق لتر واحد من البنزين مقدار من الطاقة يزيد بـ 950 مرة عن المقدار الناتج عن حرق لتر واحد من الغاز الطبيعي، والذي يتكون في الغالب من الميثان.

درجة حرارة منخفضة بحيث يصبح سائلًا، وتعرف هذه العملية بالإسالة. ونظرًا لأن الجزيئات في السائل تكون أقرب إلى بعضها من تلك الموجودة في الغاز، فيزيد هذا من كثافة الطاقة.

## زيادة كثافة الغاز الطبيعي

لإنتاج **الغاز الطبيعي المسال (LNG)**، يتم تبريد الغاز الطبيعي إلى درجة حرارة منخفضة للغاية، تبلغ حوالي162- درجة مئوية (260- درجة فهرنهايت)، بحيث يتكثف في صورة سائل أكثر كثافة. ويواجه الغاز الطبيعي المسال بعض المشكلات التي تمنع استخدامه في سيارات الركاب. إذ تستهلك العملية المستخدمة لتسييل الغاز الطبيعي الكثير من الطاقة. بالإضافة إلى أنه يتطلب خزانات وقود كبيرة وباهظة الثمن ومتخصصة لتخزين الغاز الطبيعي المسال في درجات الحرارة المنخفضة هذه. لسوء الحظ، لا يعد العزل الحراري في هذه الخزانات مثاليًا. لذلك، للحفاظ على برودة الغاز الطبيعي المسال، يجب تنفيس بعض الغاز الطبيعي في الغلاف الجوي. ولا يحافظ التنفيس على الغاز الطبيعي المسال باردًا فحسب، بل يهدر أيضًا الوقود، والأهم من ذلك، أنه يطلق غاز الميثان في الغلاف الجوي، مما يزيد من ظاهرة الاحتباس الحراري.

**الغاز الطبيعي المسال (LIQUEFIED NATURAL GAS (LNG))**

غاز طبيعي في صورة سائل، عند درجة حرارة 162- درجة مئوية (260- درجة فهرنهايت) والضغط الجوي المعتاد.

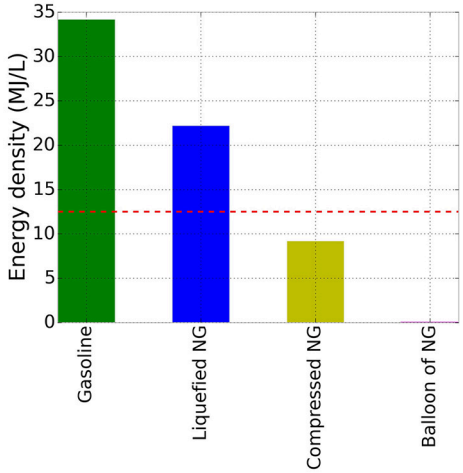
أما بالنسبة **للغاز الطبيعي المضغوط (CNG)**، فيتم ضغط الغاز الطبيعي عند درجة حرارة الغرفة حتى يصل إلى حوالي 200 مرة ضعف الضغط الجوي. وتعد مشكلة الغاز الطبيعي المضغوط أن معدات الضغط اللازمة لتحقيق مثل هذا الضغط العالي باهظة الثمن. وعلاوة على ذلك، يجب أن تتمتع خزانات الوقود في السيارات التي تستخدم الغاز الطبيعي المضغوط بجدران سميكة وشكل كروي أو أسطواني لتتحمل

**الغاز الطبيعي المضغوط (COMPRESSED NATURAL GAS (CNG))**

يتم ضغط الغاز الطبيعي إلى 200-250 مرة أكثر من الضغط الجوي وفي درجة حرارة الغرفة، بحيث يظل في شكله الغازي.

مثل هذا الضغط العالي. وهذا يعني خزانًا ثقيلًا وباهظ الثمن، وبالتالي فهو لا يتناسب مع صندوق السيارة فحسب، بل ولا يترك مساحة للأمتعة أيضًا. أما على الجانب الآخر، فقد يتخذ خزان البنزين أي شكل، وبالتالي يمكن تصميمه بشكل أكثر كفاءة، واستغلال المساحة في السيارة على نحو أفضل.

في الشكل 2، نقارن كثافة طاقة الغاز الطبيعي السائل والغاز الطبيعي المضغوط بكثافة طاقة البنزين. كما تظهر كثافة طاقة بالون مملوء بالغاز الطبيعي في درجة حرارة الغرفة والضغط الجوي، مما يدل على أن الغاز الطبيعي السائل والغاز الطبيعي المضغوط لهما كثافة طاقة أعلى بكثير من بالون الغاز الطبيعي. بينما لا تعد كثافة الغاز الطبيعي السائل أو الغاز الطبيعي المضغوط عالية مثل البنزين، إلا أنها عالية بدرجة كافية تجعل بإمكاننا القيادة لمسافة طويلة بخزان وقود يحتوي على الغاز الطبيعي المضغوط أو الغاز الطبيعي السائل.




شكل 2

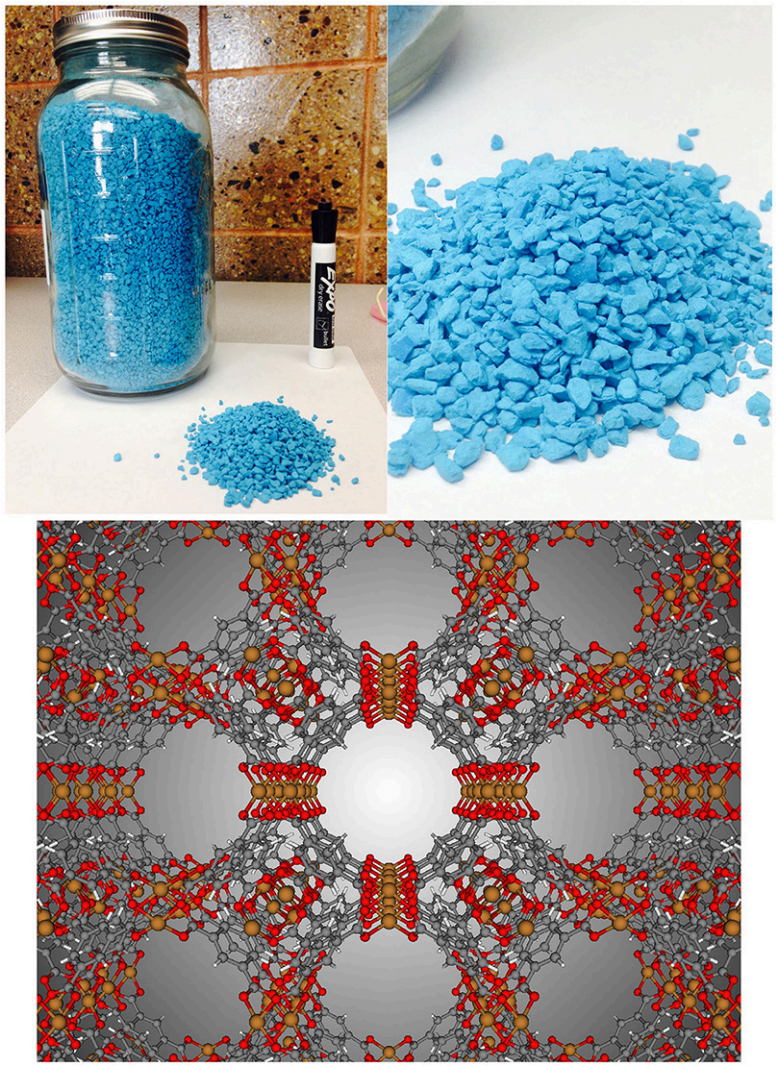
**شكل 2**

كثافة طاقة الوقود. نقارن كثافة طاقة البنزين بالغاز الطبيعي في ظروف مختلفة [1]. يحتوي البنزين على أعلى كثافة للطاقة، تبلغ حوالي 35 ميجا جول/ لتر. بينما أعلى أشكال الغاز الطبيعي من حيث كثافة الطاقة هي الغاز الطبيعي المسال، ثم الغاز الطبيعي المضغوط. في أقصى اليمين، تعد كثافة الطاقة لبالون من الغاز الطبيعي في درجة حرارة الغرفة والضغط الجوي صغيرة للغاية (0.036 ميجا جول/ لتر) لدرجة أننا نكاد نستطيع رؤية الشريط البنفسجي! يعد الخط الأحمر المتقطع هدف كثافة الطاقة الذي وضعته وكالة المشروعات البحثية المتقدمة للطاقة (ARPA-E) لتخزين الميثان في مواد نانوية مثل الإسفنج (12.5 ميجا جول/ لتر).

يسعى الباحثون إلى إيجاد استراتيجيات بديلة لزيادة كثافة الطاقة لخزان مملوء بالغاز الطبيعي بسبب هذه الصعوبات العملية التي تواجهنا مع الغاز الطبيعي المسال والغاز الطبيعي المضغوط. إحدى هذه الأفكار، والتي تعتبر محور هذا المقال، هي صنع مادة تعمل كإسفنجة تمتص غاز الميثان. ثم نضع هذه المادة داخل خزان الوقود ونأمل أن تجذب الكثير من جزيئات الميثان بحيث يمكننا تحقيق كثافة طاقة عالية مثل الغاز الطبيعي المضغوط، ولكن باستخدام ضغط أقل.

نظرًا لأن ضغط تخزين غاز الميثان في المواد الشبيهة بالإسفنج قد يكون أقل من الضغط اللازم لتخزين الغاز الطبيعي المضغوط، فيمكن صنع خزانات الوقود بحيث تكون أقل سماكة وأرخص سعرًا ومصنوعة بأي شكل لتناسب السيارة بسهولة أكبر. بالإضافة إلى ذلك، تعد الأجهزة الضاغطة المحققة لهذا الضغط المنخفض أرخص من تلك الخاصة بالغاز الطبيعي المضغوط، لذلك قد نتمكن من إعادة ملء خزاناتنا في المنزل، باستخدام الغاز نفسه الذي نستخدمه بالفعل للطهي والتدفئة.

تُعرف المواد الإسفنجية الواعدة **بالمواد النانوية المسامية**. ويوضح الشكل 3 مثالًا على هذه المادة. والمادة النانوية المسامية عبارة عن بنية ذات مسام أو أقفاص يبلغ قطرها حوالي نانومترًا واحدًا. يبلغ سمك شعرة الإنسان 80 ألف نانومتر؛ وتعد المسام ذات الحجم النانوي أصغر بكثير من شعرة الإنسان، بحيث يمكن للجزيئات فقط أن تتسع بداخلها. ويبلغ قطر جزيء الميثان 0.3 نانومتر، لذلك قد تتسع جزيئات الميثان بكل أريحية داخل المسام. وينجذب جزيء الميثان إلى جدران المادة المسامية. ونتيجةً لذلك، تلتصق جزيئات الميثان بالسطح الداخلي للمادة الصلبة. وتعرف عملية التصاق الجزيئات بالسطح الداخلي للمادة باسم **الامتزاز (الامتصاص)**. ولمعرفة عدد جزيئات الميثان التي يمكن للمادة النانوية امتصاصها، ضع في اعتبارك ما إذا كان بإمكاننا تفكيك وفرد سطح جدران هذه المسام أم لا؛ فجرام واحد من هذه المواد النانوية له مساحة سطح أكبر من ملعب كرة قدم!



شكل 3

**المواد النانوية المسامية (NANOPOROUS MATERIAL)**

مادة ذات مسام صغيرة، يقل حجمها عن 100 نانومتر.

**الامتزاز أو الامتصاص (ADSORPTION)**

العملية التي بموجبها تلتصق الجزيئات بالسطح. في حالة المواد النانوية، تشكل جدران المسام السطح الذي يتم جذب جزيئات الغاز إليه.

**شكل 3**

مثال على مادة نانوية مسامية، ألا وهي طلاء **الأطر الفلزية العضوية** (Cu-BTC). تُظهر الأشكال العلوية مادة نانوية مسامية، وهي إطار فلزي عضوي (MOF) يطلق عليه اسم Cu-BTC [2]. يعد السبب وراء هذا اللون أزرق هو محتوى النحاس في Cu-BTC. يمكننا تحقيق كثافة طاقة أعلى من خلال وضع هذه المادة داخل خزان الوقود، لأن هذه المادة تسلك كإسفنجة تمتص جزيئات الغاز الطبيعي. يوضح الشكل السفلي التركيب الجزيئي Cu-BTC. تمثل الكرات الذرات، وتوضح العصا كيفية ربط الذرات ببعضها البعض؛ وتستخدم ألوان مختلفة للتعبير عن عناصر مختلفة (برتقالي: النحاس، أحمر: أكسجين، رمادي: كربون، أبيض: هيدروجين). تشكل جدران المسام الشبيهة بالثقب في هذه المادة سطحًا داخليًا تلتصق به جزيئات الغاز، مما يمنحها سلوكًا يشبه الإسفنج. يبلغ قطر هذه المسام حوالي 0.7 نانومتر.

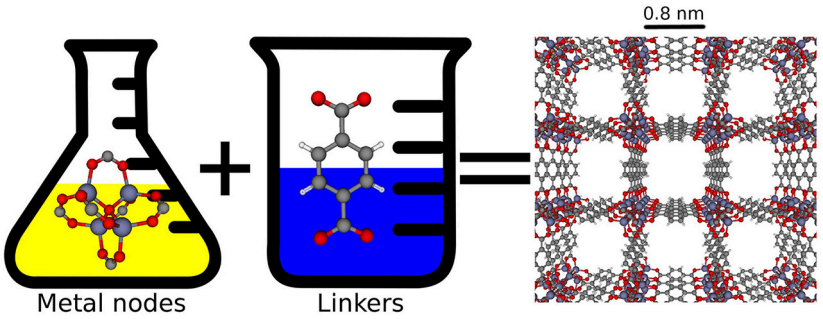
**الإطار الفلزي العضوي (MOF) (METAL-ORGANIC FRAMEWORK)**

نوع من المواد النانوية يتم فيها دمج العقد أو الكتل المعدنية مع جزيئات عضوية تسمى الجزيئات الرابطة لتشكيل بنية المادة.

قد بدأت وكالة حكومية أمريكية تُعرف بوكالة المشاريع البحثية المتقدمة للطاقة (ARPA-E) برنامجًا بملايين الدولارات لدفع تكاليف الأبحاث الهادفة إلى إيجاد مادة تصلح لتخزين الغاز الطبيعي لكي يتم استخدامه في السيارات. في هذا البرنامج، حددت هذه الوكالة هدفًا يتمثل في أن أي مادة نانوية المسام يجب أن تحقق كثافة طاقة تبلغ 12.5 ميجا جول/ لتر (انظر الخط الأحمر المتقطع في الشكل 2). ويزيد هدف كثافة الطاقة هذا عن كثافة طاقة الغاز الطبيعي عند درجة حرارة الغرفة والضغط الجوي الطبيعي بمقدار 340 مرة. وتسمح المواد التي تحتوي على هذه الخصائص باستخدام صهاريج تخزين أخف وزنًا وأقل سمكًا ومعدات ضغط أرخص. ويسعى الباحثون في جميع أنحاء العالم إلى اكتشاف مواد جديدة تحقق هدف تخزين الميثان الذي حددته الوكالة.

## العثور على أفضل مواد نانوية مسامية

يتمثل أحد الجوانب المثيرة للاهتمام للمواد النانوية المسامية الحديثة في إمكانية تصميمها على المستوى الجزيئي من قبل الكيميائيين، وبالتالي ضبط مسامها لتحسين أدائها. قد يُصنع الكيميائيون ملايين من المواد المختلفة المكنة عن طريق خلط مختلف وحدات البناء الجزيئية معًا (انظر الشكل 4).




شكل 4

**شكل 4**

التناغم الكيميائي للمواد النانوية المتقدمة. يوجد على اليمين هيكل إطار فلزي عضوي (MOF) يسمى 1-IRMOF [3]. تم تصنيع 1-IRMOF في المختبر من خلال الجمع بين كتلتين جزيئيتين مختلفتين: العقد الفلزية والمواد الرابطة العضوية. تتجمع هذه الروابط والعقد في محلول لتشكيل البنية البلورية النانوية المتكررة 1-IRMOF J. يمكن إنشاء ملايين من الإطارات الفلزية العضوية المختلفة من خلال تغيير الروابط والعقد الفلزية (مفهوم الصورة بواسطة Katie Deeg).

يستغرق الأمر بضعة أسابيع في المختبر لتصنيع مادة جديدة واختبارها. بينما قد يستغرق الأمر وقتًا طويلًا لتصنيع ملايين المواد المختلفة واختبارها جميعًا لمعرفة أي منها يجتذب معظم الغاز الطبيعي. ويطرح ذلك أسئلة بحثية مهمة: فمن بين ملايين الاحتمالات، كيف يمكن للباحثين معرفة أي مجموعة من الكتل الجزيئية تنتج مادة تحقق هدف سعة التخزين الذي حددته الوكالة؟ كيف نعرف حتى أن هذا الهدف قابلًا للتحقيق؟ توجد بالتأكيد حدود لكمية الغاز الطبيعي الذي يمكن أن تخزنها المادة.

## تصنيع المواد واختبارها بالحواسيب

يعمل الباحثون أيضًا على إيجاد طريقة لنمذجة المواد على أجهزة الكمبيوتر. فمن خلال تجميع كتل بناء جزيئية مختلفة، على غرار قطع الليجو أو K'NEX، يمكن للباحثين

صنع نماذج حاسوبية لهذه المواد. ونظرًا لأن صنع المواد النموذجية على الكمبيوتر يتم بشكل أسرع بكثير من صنع مواد حقيقية في المختبر، فيمكن صنع العديد من النماذج في وقت وجيز.

بمجرد صنع مادة على جهاز كمبيوتر، يمكننا تشغيل **محاكاة حاسوبية** عن غاز الميثان المنجذب إلى مسام المادة. تشبه هذه المحاكاة الحاسوبية محاكي طيران لكن خاص بالجزيئات؛ حيث تقوم الخوارزمية الحاسوبية بإدراج جزيئات الميثان وحذفها وتبديل بينها داخل مسام المادة لاستكشاف التكوينات الأكثر ملاءمة. فمن خلال عمليات المحاكاة الجزيئية، يمكننا التنبؤ بعدد جزيئات الميثان التي ستجذبها مادة معينة على أساس الهياكل التي تم إنشاؤها بواسطة الكمبيوتر.

**المحاكاة الحاسوبية (COMPUTER SIMULATION)**

تشغيل برنامج حاسوبي مصمم لتقليد سلوك نظام معين وإعادة إنتاجه. يحاكي برنامج الحاسوب الخاص بنا جزيئات الميثان التي تدخل وتخرج وتتحرك في مسام المادة النانوية.

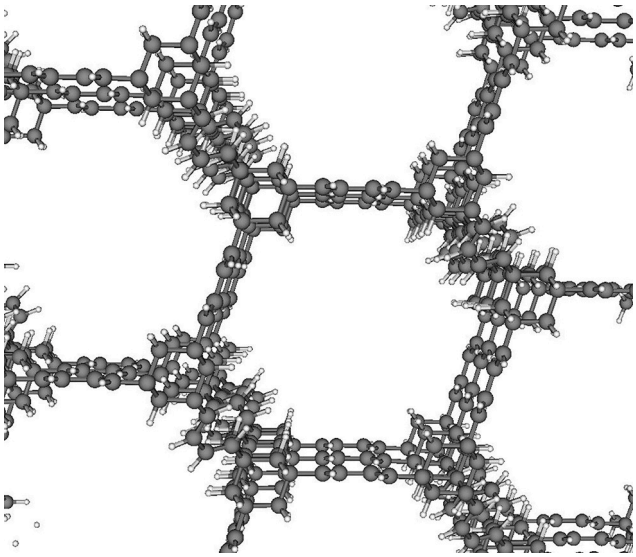
لقد قام الباحثون ببناء أكثر من 650 ألف مادة نانوية مختلفة على أجهزة الكمبيوتر حتى الآن. وفعلوا ذلك عن طريق اختيار كتل بناء جزيئية مختلفة ودمجها معًا وفقًا لقواعد تستند إلى ما هو معروف من المختبر حول كيفية تصنيع هذه المواد. وباستخدام الكود الحاسوبي الخاص بالمحاكاة الجزيئية الذي كتبناه [4]، قمنا بمحاكاة امتزاز الميثان، وبالتالي، توقعنا كمية الميثان التي تجذبها كل مادة من هذه المواد النانوية البالغ عددها 650 ألف مادة.

ومن بين قاعدة بياناتنا التي تضم أكثر من 650 ألف مادة، يظهر الهيكل الذي توقعناه أن يُحقق أعلى كثافة لطاقة الميثان في الشكل 5. وتتنبأ عمليات المحاكاة التي أجريناها بأن هذه المادة الأمثل يمكنها تحقيق كثافة طاقة للميثان تبلغ 7.8 ميجا جول/لتر. ونأمل أن يحفز هذا التنبؤ تصنيع واختبار هذه البنية المصنوعة بواسطة الحاسوب [4]. ولكن، لا يحقق هذا الهيكل إلا 62% فقط من هدف التخزين الخاص بوكالة المشاريع البحثية المتقدمة للطاقة (ARPA-E) البالغ 12.5 ميجا جول/لتر. ونظرًا لأن أفضل المواد في قاعدة البيانات الخاصة بنا بعيدة تمامًا عن تحقيق هدف التخزين الذي وضعته الوكالة، فيبدو أنه من غير المحتمل تحقيق هدف التخزين الذي وضعته الوكالة.

الأرقام الأعلى من حيث كثافة طاقة ميثان والمحققة بالفعل في المختبر حتى الآن كانت من نصيب البنية Cu-BTC (الشكل 3)، وIRMOF-1 (الشكل 4)، عند 7.4 ميجا جول/ لتر [6]. ومقارنةً بأفضل المواد في قاعدة بياناتنا، والتي تحقق كثافة طاقة تبلغ 7.8 ميجا جول/ لتر، تشير النتائج التي توصلنا إليها أيضًا إلى أنه لا يوجد مجال كبير لتحسين المواد الحالية.

## الخُلاصة

يوضح عملنا كيفية بناء نماذج حاسوبية للمواد واستخدام المحاكاة الحاسوبية لتحسين عملية امتصاص غاز الميثان في المسام، وذلك لتحديد المواد النانوية الواعدة الصالحة لتخزين الغاز الطبيعي بسرعة وفعالية من حيث التكلفة. ومن خلال تقييم هذا العدد الكبير من المواد (650 ألف مادة)، وهو أمر غير عملي في المختبر، تمكنا بسرعة من



**شكل 5**

**شكل 5**
أفضل هيكل لتخزين الميثان. يظهر في الشكل الهيكل الذي يحقق أعلى كثافة طاقة متوقعة للميثان - 7.8 ميجا جول/ لتر. الكرات الرمادية عبارة عن ذرات كربون؛ بينما الكرات البيضاء ذرات هيدروجين. هذا هيكل تم إنشاؤه بواسطة الحاسوب ولم يتم تصنيعه [5].

التوصل إلى خُلاصة مفادها أنه من غير المحتمل تحقيق هدف تخزين الطاقة الذي وضعته وكالة المشروعات البحثية المتقدمة للطاقة (ARPA-E).

هل يمكننا الآن استنتاج استحالة العثور على مادة تحقق هدف تخزين الطاقة المذكور؟ أولًا، من الضروري أن ندرك أنه لا يسعنا صنع نماذج حاسوبية إلا للمواد التي نفهمها حاليًا جيدًا من التجارب المعملية. ولكن، في المستقبل، قد يتمكن الكيميائيون من ابتكار فئات جديدة تمامًا من المواد، يمكنها الوصول إلى هدف التخزين المعني.

على الرغم من عدم عثورنا على مادة مسامية نانوية تحقق هدف تخزين طاقة الميثان المرغوب، فإن دراسة تخزين الغاز الطبيعي باستخدام مواد نانوية لم تكن هدرًا للوقت. فلقد أشارت النتائج إلى ضرورة التفكير في استخدام أفضل المواد المسامية النانوية المتاحة حاليًا. فالمادة التي يمكنها تحقيق كثافة طاقة تبلغ 8 ميجا جول/ لتر ما زالت تعد تقدمًا كبيرًا مقارنة باستخدام خزان فارغ عند الضغط نفسه، والذي تبلغ كثافة الطاقة فيه 2.5 ميجا جول/لتر فقط.

وبالتالي، فإن تعبئة خزان الوقود بمواد نانوية مسامية يسمح لنا بتخزين ثلاثة أمثال كمية الغاز الطبيعي فيه مقارنة بما هو الحال دون استخدام هذه المواد. بالطبع سنحتاج إلى خزان أكبر قليلًا للقيادة للمسافة نفسها التي نقطعها بالغاز الطبيعي المضغوط، ولكن سيفي ذلك بالغرض، وسيكون حلًا مقبولًا!

## مقال المصدر الأصلي

هذا المقال نسخة معدلة للعقول الشابة من النسخة الأولية التي نُشرت في مجلة Energy and Environmental Science [6]. يمكنك مطالعة بيانات المحاكاة

التي أجريناها من خلال هذا الرابط: https://materialsproject.org/#search/porous.

## المراجع


1. Makal, T., Li, J. R., Lu, W., and Zhou, H. C. 2012. Methane storage in advanced porous materials. *Chem. Soc. Rev.* 41:7761–79. doi: 10.1039/C2CS35251F
2. Chui, S. S. Y., Lo, S. M. F., Charmant, J. P., Orpen, A. G., and Williams, I. D. 1999. A chemically functionalizable nanoporous material [Cu3(TMA)2(H2O)3]. *Science* 283(5405):1148–50. doi: 10.1126/science.283.5405.1148
3. Eddaoudi, M., Kim, J., Rosi, N., Vodak, D., Wachter, J., O'Keeffe, M., et al. 2002. Systematic design of pore size and functionality in isoreticular MOFs and their application in methane storage. *Science* 295(5554):469–72. doi: 10.1126/ science.1067208
4. Kim, J., Martin, R. L., Rübel, O., Haranczyk, M., and Smit, B. 2012. High-throughput characterization of porous materials using graphics processing units. *J. Chem. Theory Comput.* 8(5):1684–93. doi: 10.1021/ct200787v
5. Martin, R. L., Simon, C. M., Smit, B., and Haranczyk, M. 2014. In silico design of porous polymer networks: high-throughput screening for methane storage materials. *J. Am. Chem. Soc.* 136(13):5006–22. doi: 10.1021/ja4123939
6. Simon, C. M., Kim, J., Gomez-Gualdron, D., Camp, J., Chung, Y., Martin, R. L., et al. 2015. The materials genome in action: identifying the performance limits to methane storage. *Energy Environ. Sci.* 8(4):1190–9. doi: 10.1039/C4EE03515A


**نُشر على الإنترنت بتاريخ:** 17 أكتوبر 2022

**حرره:** Ah-Hyung Park

**مرشدو العلوم:** Dina DeCaro

**الاقتباس:** Simon CM, Kim J, Gomez-Gualdron DA, Chung YG, Martin RL, Mercado R, Deem MW, Gunter D, Haranczyk M, Snurr RQ and Smit B (2022) المحاكاة الحاسوبية: وسيلة تساعدنا على تعظيم كثافة طاقة غاز الميثان. Front. Young Minds doi: 10.3389/frym.2015.00011-ar

**مُترجَم ومقتبس من:** Simon CM, Kim J, Gomez-Gualdron DA, Chung YG, Martin RL, Mercado R, Deem MW, Gunter D, Haranczyk M, Snurr RQ and Smit B (2015) Computer-aided search for materials to store natural gas for vehicles. Front. Young Minds 3:11. doi: 10.3389/frym.2015.00011

**إقرار تضارب المصالح:** يعلن المؤلفون أن البحث قد أُجري في غياب أي علاقات تجارية أو مالية يمكن تفسيرها على أنها تضارب محتمل في المصالح.

**COPYRIGHT** © 2015 © Simon, Kim, Gomez-Gualdron, Chung, 2022 .Martin, Mercado, Deem, Gunter, Haranczyk, Snurr and Smit
هذا مقال مفتوح الوصول يتم توزيعه بموجب شروط ترخيص المشاركة الإبداعية Creative Commons Attribution License (CC BY). يُسمح بالاستخدام أو التوزيع أو الاستنساخ في منتديات أخرى، شريطة أن يكون المؤلف (المؤلفون) الأصلي أو مالك (مالكو) حقوق النشر مقيدًا وأن يتم الرجوع إلى المنشور الأصلي في هذه المجلة وفقًا للممارسات الأكاديمية المقبولة. لا يُسمح بأي استخدام أو توزيع أو إعادة إنتاج لا يتوافق مع هذه الشروط.

## المراجعون الصغار

**KATE، العمر: 14**
مرحبًا، اسمي كيت وأنا حاليًا في الصف العاشر. بدءًا من سن مبكرة، أعربت عن اهتمامي الكبير بمجال العلوم. ففي سن الرابعة، كنت أتجول في منزلي وأقيس ضغط الدم لأسرتي، وإذا شعروا بالتعب، أحاول تشخيص مرضهم. دفعني شغفي القوي بممارسة مهنة ما في المجال الطبي إلى إتمام دراستي في الأوساط الأكاديمية، وسُمح لي بإكمال الصفين الثامن والتاسع في 3 أشهر فقط. عندما أتقدم في العمر، أتمنى أن أصبح عالمة متخصصة في مجال علم الأوبئة.

## المؤلفون

**CORY M. SIMON**
أنا مرشح لنيل درجة الدكتوراة في الهندسة الكيميائية والجزيئية الحيوية بجامعة كاليفورنيا في بيركلي. يشمل يوم عملي المعتاد شرب القهوة، وتدوين المعادلات بسرعة على السبورة قابلة المسح، وكتابة برامج الكمبيوتر. خارج العمل، أستمتع بالسير لمسافات طويلة، والركض، والغطس، ولعب الجيتار.

**JIHAN KIM**
أنا أستاذ مساعد في قسم الهندسة الكيميائية والجزيئية الحيوية بالمعهد الكوري المتقدم للعلوم والتقنية في كوريا الجنوبية. تركز مجموعتنا البحثية على استخدام المحاكاة الحاسوبية لتطوير المواد النانوية وتعزيز قدراتها. خارج العمل، أستمتع بالاستماع إلى الموسيقى ومشاهدة الأفلام.

**DIEGO A. GOMEZ-GUALDRON**
أنا زميل في مرحلة ما بعد الدكتوراة في قسم الهندسة الكيميائية والبيولوجية بجامعة نورث وسترن. حصلت على درجة الدكتوراة في علوم وهندسة المواد من جامعة تكساس إيه آند إم، وشهادة البكالوريوس في الهندسة الكيميائية من جامعة سانتاندير الصناعية في كولومبيا. منذ أن علمت بتقنية النانو، أصبحت مفتونًا بالطريقة التي يمكن من خلالها للتغييرات في بنية المادة على المستوى النانوي أن تغير خصائصها. تسمح لي خبرتي في المحاكاة الجزيئية باستخدام أجهزة الكمبيوتر لاستكشاف كيفية الاستفادة منه لتصميم مواد نانوية جديدة لإنشاء تطبيقات تكنولوجية مختلفة. خارج المختبر، أستمتع بالطهي، وممارسة الرياضة، وقضاء الوقت مع عائلتي.

**YONGCHUL G. CHUNG**
أنا زميل في مرحلة ما بعد الدكتوراة في قسم الهندسة الكيميائية والبيولوجية بجامعة نورث

وسترن. أنا مهتم باستخدام علم البيانات والنمذجة الجزيئية لاكتشاف مواد جديدة قد تساعد في معالجة مشكلات الطاقة والبيئة وصحة الإنسان. خارج العمل، أستمتع بلعب التنس، والجولف، و"ليج أوف ليجيندز".

**RICHARD L. MARTIN**

أنا عالم أبحاث في مجموعة واتسون (Watson) في شركة آي بي إم (IBM). وحصلت على درجة الدكتوراة في المعلوماتية الكيميائية، من شيفيلد في المملكة المتحدة. أهتم باستخدام المعلوماتية وعلوم الكمبيوتر لتسريع الاكتشاف في مجالات الكيمياء والمواد. كما أستمتع بالأعمال الفنية العلمية، وكرة القدم، والألعاب الاستراتيجية.

**ROCIO MERCADO**

أنا عالمة كيمياء مهتمة باستخدام المحاكاة الحاسوبية لتصميم واكتشاف مواد نانوية لتخزين الوقود البديل والسيطرة على الملوثات البيئية. عندما لا أستخدم جهاز الحاسوب الخاص بي، أستمتع بقراءة الروايات الملحمية ودراسة اللغات الأجنبية واستكشاف منطقة الخليج.

**MICHAEL W. DEEM**

هو رئيس قسم الهندسة الحيوية بجامعة رايس ويعمل في مجال التطور، وعلم المناعة، وعلم وظائف الأعضاء (الفسيولوجيا)، وعلم المواد. في مجال المواد، يهتم بعلم البنية، وظاهرة التنوي، وخواص الزيوليتات، والأطر الفلزية العضوية. أعدَّ مايكل أساليب DIFFAX وZEFSA المستخدمة على نطاق واسع في هذا المجال. فهو زميل في المعهد الأمريكي للهندسة الطبية والبيولوجية، وجمعية الهندسة الطبية الحيوية، والجمعية الأمريكية لتقدم العلوم، والجمعية الفيزيائية الأمريكية.

**DAN GUNTER**

أنا عالم كمبيوتر في مختبر لورنس بيركلي الوطني. أقوم بتطوير برامج الحاسوب الداعمة للعديد من أنواع العلوم المختلفة، من علم الأحياء إلى الفيزياء. أستمتع بالموسيقى، وركوب الدراجات في الجبال، واللعب مع أطفالي، والانتظار بفارغ الصبر الحلقة التالية من مسلسل لعبة العروش.

**MACIEJ HARANCZYK**

أنا عالم في مختبر لورنس بيركلي الوطني. أطور الخوارزميات والبرامج التي تساعد في تصميم مواد جديدة ومواد أفضل لمختلف التطبيقات المتعلقة بالطاقة. خارج العمل، أستمتع بالتخييم وركوب الدراجات النارية.

**RANDALL Q. SNURR**

أنا أستاذ في الهندسة الكيميائية في جامعة نورث وسترن. أقوم بتدريس المواد المتعلقة بالطاقة ومعالجة المواد، ويركز بحثي على تطوير المواد للمساعدة في حل مشكلات الطاقة والبيئة. عندما أتوقف عن العمل، أستمتع بالموسيقى، والمشي لمسافات طويلة، والأفلام.

**BEREND SMIT**

أنا أستاذ في الهندسة الكيميائية والكيمياء بجامعة كاليفورنيا في بيركلي وفي مدرسة لوزان الاتحادية للفنون التطبيقية (EPFL). في بحثي، أحاول فهم كيفية استخدام المواد في التطبيقات

المتعلقة بالطاقة. عندما أعجز عن فهمها، أستمتع بالموسيقى، والمشي لمسافات طويلة في الجبال السويسرية

**النسخة العربية مقدمة من**
Arabic version provided by

جامعة الملك عبدالله للعلوم والتقنية
King Abdullah University of Science and Technology