

חיפוש ממוחשב של חומרים לאחסון גז טבעי עבור כלי רכב

Cory M. Simon¹, Jihan Kim², Diego A. Gomez-Gualdron³, Yongchul G. Chung³,
Richard L. Martin^{4,5}, Rocio Mercado⁶, Michael W. Deem^{7,8}, Dan Gunter⁴, Maciej Haranczyk⁴,
Randall Q. Snurr³, Berend Smit^{1,6,9}

- ¹המחלקה להנדסה כימית וביו-מולקולורית, אוניברסיטת קליפורניה בברקלי, ברקלי, קליפורניה, ארצות הברית
²המחלקה להנדסה כימית וביו-מולקולורית, המכון המתקדם של קוריאה למדעים וטכנולוגיה, Daejeon, דרום קוריאה
³המחלקה להנדסה כימית וביו-מולקולורית, אוניברסיטת Northwestern, אוונסטון, אילינוי, ארצות הברית
⁴המחלקה למחקר חישובי, המעבדה הלאומית ע"ש לורנס ברקלי, ברקלי, קליפורניה, ארצות הברית
⁵קבוצת Watson, מרכז מחקר Almaden של IBM, סן חוזה, קליפורניה, ארצות הברית
⁶המחלקה לכימיה, אוניברסיטת קליפורניה בברקלי, ברקלי, קליפורניה, ארצות הברית
⁷המחלקה לביו-הנדסה, אוניברסיטת Rice, יוסטון, טקסס, ארצות הברית
⁸המחלקה לפיזיקה ואסטרונומיה, אוניברסיטת Rice, יוסטון, טקסס, ארצות הברית
⁹המחלקה לסימולציה מולקולרית, המכון למדע ולהנדסה כימית (ISIC), המכון הפדרלי לטכנולוגיה בלזון (EPFL), Sion, שוויץ

סוקרים צעירים

KATE

גיל: 14



מרבית המכוניות משתמשות כיום בבנזין בתור הדלק שלהן. אולם מכוניות יכולות להיות מונעות גם על-ידי דלקים אחרים, כמו למשל גז טבעי, שהוא אותו הגז אשר משמש עבור בישול וחימום בתים. גז טבעי הוא זול יותר וככל הנראה גם ידידותי יותר לסביבה מאשר בנזין. אולם בנזין דחוס הרבה יותר מאשר גז טבעי מאחר שהבנזין הוא נוזל ואילו גז טבעי הוא גז. לכן, כדי שמכונית תיסע על גז טבעי עלינו להגדיל את הצפיפות שלו כדי שנוכל למלא את מִכָּל הדלק בכמות מספיקה של גז טבעי, כך שהמכונית תוכל לנסוע את אותו המרחק שהייתה נוסעת עם מִכָּל מלא בנזין. חוקרים ברחבי העולם עובדים על סִנְתוֹז (חיבור של חומרים יחד לקבלת תרכובת אחת) של חומרים שמתפקדים כמו ספוג אשר סופג גז טבעי. באמצעות שילוב החומרים דמויי הספוג האלה בתוך מכל דלק

אנו יכולים להגדיל את צפיפות האנרגיה של גז טבעי ולאחסן אותו בצורה יעילה בתוך הרכב. במחקר שלנו אנו מראים כיצד מְחֻשְׁבִים יכולים לעזור לנו לחפש את החומרים דמויי הספוג המבטיחים ביותר לצורך אחסון גז טבעי.

גז טבעי הוא דלק אטרקטיבי לרכבים בתור חלופה לבנזין. לארצות הברית יש אספקה עשירה של גז טבעי, שרובו כולא עמוק מתחת למבנים סלעיים באדמה. לאחרונה התבצע שימוש מוגבר בטכניקות הקדיחה האופקית והסדיקה ההידראולית, המשמשות בהתאמה להגעה למאגרי הגז הטבעי התת-קרקעיים וחילוצם מבין הסלעים באמצעות הזרמת נוזל או גז בלחץ גבוה. שימוש זה אפשר להפיק כמויות גדולות של גז טבעי שלא היו נגישות לנו לפני כן. האספקה הרבה, אשר צפויה להחזיק זמן רב, הופכת את הגז הטבעי לחלופה זולה לבנזין. ישנם דיונים רבים על ההשפעה הסביבתית של הסדיקה ההידראולית, אולם מצד אחר ייתכן שגז טבעי יהווה דלק פחות מזיק לסביבה מאשר בנזין. לדוגמה, שריפת גז טבעי משחררת 25% פחות פחמן דו-חמצני מאשר שריפת בנזין. פחמן דו-חמצני הוא גז החממה העיקרי שאחראי על ההתחממות הגלובלית. גז טבעי עשוי רובו ממתאן, שהוא עצמו גז חממה חזק. אם כן, כדי לנצל את היתרונות הסביבתיים של גז טבעי עלינו להימנע מפליטות נוספות של מתאן כתוצאה מעלייה בייצור של גז טבעי, ומהשימוש הגובר בו כדלק להנעת רכבים.

אם לגז טבעי יש יתרונות כלכליים וייתכן שגם סביבתיים על פני בנזין, מדוע מרבית המכוניות עדיין נוסעות על בנזין? הבעיה היא שגז טבעי סובל מצפיפות אנרגיה נמוכה. צפיפות האנרגיה היא מדד חשוב מאחר שהיא אומרת לנו כמה אנרגיה אנו יכולים להפיק מנפח מסוים של דלק. ככל שיש לנו יותר אנרגיה במכל הדלק, כך יגדל המרחק שנוכל לנסוע לפני שנצטרך לתדלק. בואו נשווה את צפיפויות האנרגיה של הגז הטבעי ושל בנזין בטמפרטורת החדר ובתנאים של לחץ אטמוספרי סטנדרטי. צפיפות האנרגיה של בנזין גדולה פי 950 מצפיפות האנרגיה של גז טבעי. הסיבה לכך היא שבגז המולקולות רחוקות אחת מהשנייה הרבה יותר מאשר בנוזל, מה שמוביל לכמות קטנה יותר של מולקולות בכל יחידת נפח. משמעות הדבר בפועל מוצגת באיור 1; כדי לנסוע את אותו המרחק עם גז טבעי, עלינו לקחת עמנו נפח גדול פי 950 של גז טבעי מאשר הנפח שהיינו צריכים אם היינו משתמשים בבנזין. מכל בנזין טיפוסי יכול להכיל 50 ליטר; דמיינו כיצד הייתה נראית מכונית עם מכל דלק גדול פי 950!

לכן, כדי להשתמש בגז טבעי כדלק לכלי רכב בלי שנצטרך מכלי דלק גדולים במידה בלתי סבירה, עלינו להכניס מולקולות מתאן נוספות לתוך המכל. כיום משתמשים בשתי אסטרטגיות להגדלת צפיפות האנרגיה של מכל דלק מלא בגז טבעי. הראשונה היא דחיסת הגז הטבעי; בתנאים של לחץ גבוה יותר, ישנן יותר מולקולות גז באותה כמות נפח. השנייה היא קירור הגז הטבעי לטמפרטורה כל כך נמוכה עד שהוא הופך לנוזל, תהליך שנקרא עיבוי. מאחר שמולקולות בנוזל הרבה יותר קרובות אחת לשנייה מאשר בגז, צפיפות האנרגיה גדלה לאחר שהגז הופך לנוזל.

הגדלת הצפיפות של גז טבעי

לשם קבלת **גז טבעי נוזלי** הגז הטבעי מקורר לטמפרטורה נמוכה מאוד, בסביבות -162°C , כך שהוא מתעבה לנוזל דחוס בהרבה. לגז טבעי נוזלי ישנן כמה בעיות שמונעות ממנו להיות בשימוש עבור רכבי תחבורה לנוסעים. התהליך הדרוש לעיבוי גז טבעי מצריך אנרגיה רבה

צפיפות אנרגיה (Energy density)

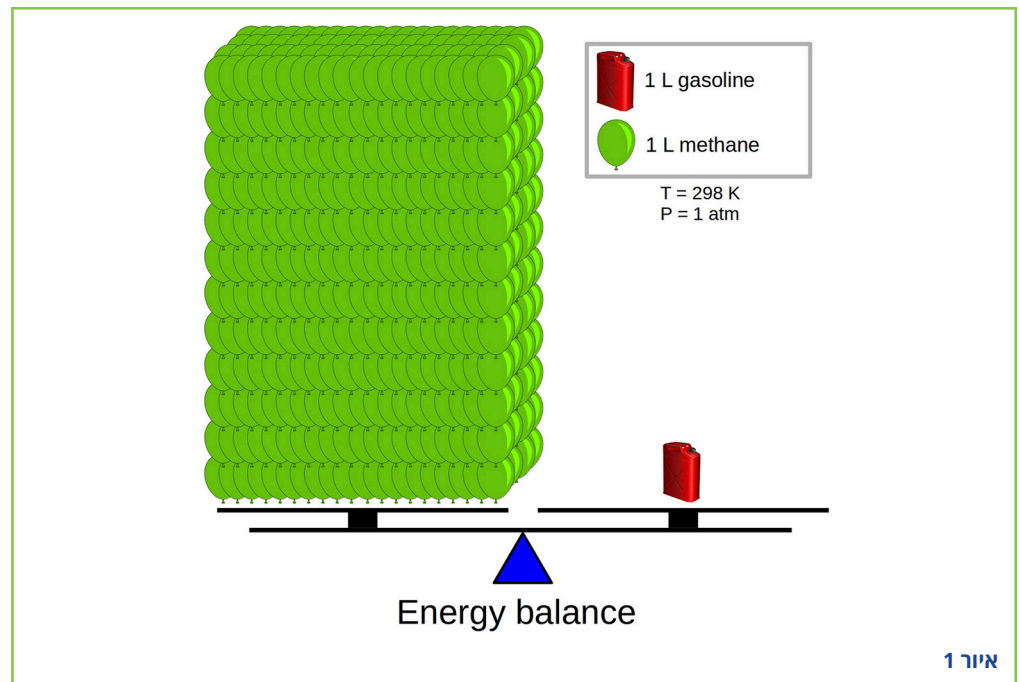
כמות האנרגיה שאפשר להפיק משריפת יחידת נפח אחת של דלק. צפיפות האנרגיה קובעת לאיזה מרחק הרכב יכול לנסוע עם מכל דלק שלם. יחידות: אנרגיה (הנמדדת במגה ג'אולים, MJ) ליחידת נפח (הנמדדת בליטרים, L), סך הכול MJ/L.

גז טבעי נוזלי (Liquefied natural gas)

גז טבעי בצורה נוזלית, המוחזק בטמפרטורה של -162°C ובלחץ אטמוספרי.

איור 1

מאזן אנרגיה – שני צידי המאזניים מאפשרים לנו לנסוע את אותו המרחק (משמאל: גז טבעי, מימין: בנזין). בטמפרטורת החדר (298K, במעלות קלווין) ובלחץ אטמוספרי סטנדרטי (1 atm), שריפת ליטר אחד של בנזין מספקת פי 950 יותר אנרגיה מאשר שריפת ליטר אחד של גז טבעי, שרובו עשוי ממתאן.



איור 1

ונדרשים מכלים גדולים, יקרים ומותאמים במיוחד כדי לאחסן גז טבעי נוזלי בטמפרטורות נמוכות שכאלה. לרוע המזל, הבידוד התרמי (כלומר המידה שבה המכל מבודד את תוכנו מהסביבה החיצונית ושומר על הטמפרטורה) של המכלים האלה אינו מושלם. לכן, כדי להשאיר את הגז הטבעי הנוזלי קר נדרש מפעם לפעם אוורור החוצה של גז טבעי נוזלי שהתחמם והתאדה חזרה למצב של גז טבעי. האוורור הזה לא רק משאיר את הגז הטבעי הנוזלי קר אלא גם מבזבז דלק, וחשוב מכך משחרר מתאן לאטמוספירה ובכך מעודד את ההתחממות הגלובלית.

גז טבעי דחוס (Compressed natural gas)

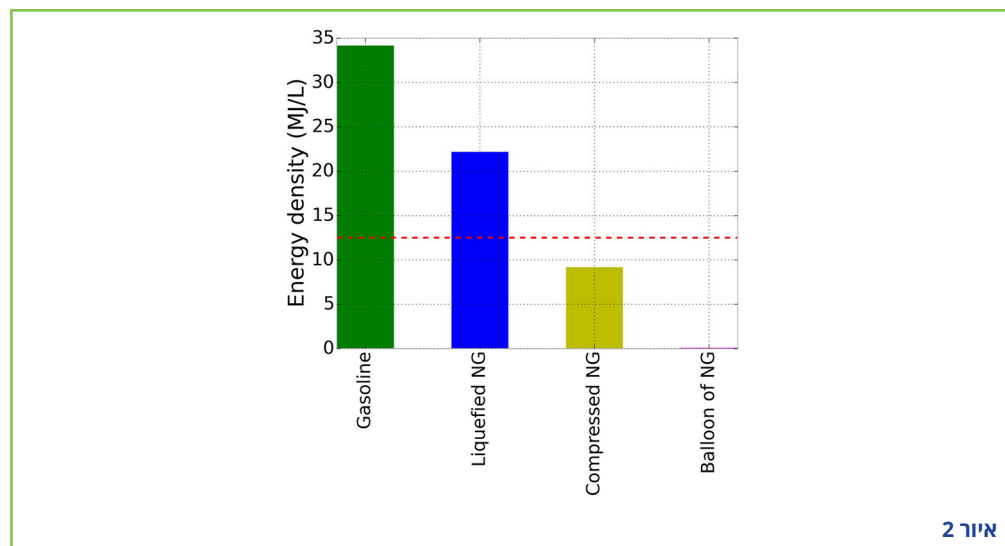
גז טבעי שדחוס בטמפרטורת החדר פי 200-250 מלחץ אטמוספרי, כך שהוא נשאר בצורתו הגזית.

לשם קבלת **גז טבעי דחוס** דוחסים את הגז הטבעי בטמפרטורת החדר עד לפי 200 בקירוב מלחץ אטמוספרי. הבעיה עם גז טבעי דחוס היא שציווד הדחיסה הדרוש להשגת לחץ כל כך גדול הוא יקר. יתרה מזו, מכלי הדלק של רכבים אשר משתמשים בגז טבעי דחוס חייבים להיות בעלי קירות עבים וצורה כדורית או גלילית כדי להכיל את הלחץ הגבוה הזה. עובדה זו גורמת למכלים להיות כבדים ויקרים, ואפשר למקם אותם רק בתא המטען של כלי הרכב, מה שלא משאיר מספיק מקום ברכב לאחסון של כבודה. מנגד, המכל שמשמש עבור בנזין יכול להיות בכל צורה שהיא, לכן הוא מעוצב וממוקם בצורה יעילה יותר בתוך הרכב. באיור 2 אנו משווים את צפיפויות האנרגיה של גז טבעי נוזלי ושל גז טבעי דחוס לצפיפויות האנרגיה של בנזין. אפשר לראות בתמונה גם את צפיפות האנרגיה של בלון מלא בגז טבעי בטמפרטורת החדר ובלחץ אטמוספרי, מה שמדגים שגז טבעי נוזלי וגז טבעי דחוס הם בעלי צפיפויות אנרגיה גבוהות הרבה יותר מאשר בלון של גז טבעי. בעוד שהצפיפות של גז טבעי דחוס ושל גז טבעי נוזלי אינה גבוהה כמו של בנזין, היא בכל זאת גבוהה מספיק כדי שנוכל לנסוע מרחקים ארוכים יחסית עם מכל דלק שמכיל גז טבעי דחוס או גז טבעי נוזלי.

בשל הקשיים הכרוכים בהפקה של גז טבעי נוזלי ושל גז טבעי דחוס, ובנשיאתם, חוקרים מחפשים אסטרטגיות חלופיות להגדלת צפיפות האנרגיה של מכל דלק מלא בגז טבעי. רעיון

איור 2

צפיפות האנרגיה של דלקים שונים. אנו משווים את צפיפות האנרגיה של בנזין לזו של גז טבעי בתנאים שונים [1]. בנזין (משמאל) הוא בעל צפיפות האנרגיה הגבוהה ביותר, כמעט 35 MJ/L. הצורה הדחוסה ביותר של גז טבעי היא גז טבעי נוזלי (השני משמאל) ואחר כך גז טבעי דחוס (השלישי משמאל). מימין אפשר לראות את צפיפות האנרגיה של בלון מלא בגז טבעי בטמפרטורת החדר ובלחץ אטמוספרי, שהיא כל כך קטנה (0.036 MJ/L) עד שכמעט אי אפשר להבחין במלבן הסגול! הקו האדום המקווקו מסמן את המטרה שהוצבה על-ידי הסוכנות הממשלתית האמריקאית לקידום טכנולוגיות אנרגיה ("הסוכנות לפרויקטי מחקר מתקדמים באנרגיה", ARPA-E), ביחס לצפיפות האנרגיה של מתאן בתוך חומרים נקבוביים דמויי-ספוג. מטרה זו עומדת על 12.5 MJ/L.



איור 2

אחד, שהוא גם מוקד המאמר הזה, הוא ליצור חומר שמתנהג כמו ספוג עבור מתאן. אנו רוצים לשים את החומר הזה בתוך מכל הדלק ולקוות שהוא ימשוך אליו כל כך הרבה מולקולות מתאן עד שנוכל להגיע לצפיפות אנרגיה גבוהה כמו זו של גז טבעי דחוס, אולם תוך שימוש בלחץ נמוך יותר. מאחר שלחץ האחסון של מתאן בתוך חומרים דמויי-ספוג יכול להיות נמוך יותר מהלחץ שנדרש כדי לאחסן גז טבעי דחוס, מכלי הדלק יכולים להיות דקים וזולים יותר, ובכל צורה שמתאימה למיקומם בתוך הרכב. נוסף על כך המדחסים שנדרשים עבור הגעה ללחץ הנמוך הדרוש לאחסון מתאן בחומרים דמויי-ספוג הם זולים יותר מאשר אלה הדרושים עבור גז טבעי דחוס, כך שיייתכן שנוכל למלא מחדש את מכלי הדלק שלנו בבית, תוך שימוש באותו הגז שאנו משתמשים בו ממילא לבישול ולחימום הבית.

החומרים שמהווים את הספוגים המבטיחים ביותר נקראים **חומרים ננו-נקבוביים**. באיור 3 אפשר לראות דוגמה של חומר כזה. חומר ננו-נקבובי הוא מבנה עם חורים או תאים בעלי קוטר אופייני של ננומטר אחד (ננומטר הוא 10^{-9} מטר, כלומר אלפית של מיליונית המטר). עובי שיערה של בן אדם הוא בערך 80,000 ננומטר; נקבובית בגודל ננומטרי היא כל כך הרבה יותר קטנה עד שרק מולקולות יכולות להיכנס לתוכה. למולקולת מתאן יש קוטר של 0.3 ננומטר כך שהיא יכולה להיכנס בנוחות אל תוך הנקבוביות. מולקולת המתאן נמשכת לקירות של החומר הנקבובי. כתוצאה מכך, מולקולות מתאן נדבקות למשטח הפנימי של החומר הנקבובי המוצק. תהליך כזה, שבו מולקולות נדבקות למשטח הפנימי של חומר אחר, נקרא **ספיחה**. כדי לקבל מושג על כמות מולקולות המתאן שחומר ננו-נקבובי יכול לספוח, דמיינו שיכולנו לפתוח את המשטח שיוצרים קירות הנקבוביות ולשטח אותו: גרם אחד של החומרים הננו-נקבוביים האלה היה תופס שטח של מגרש כדורגל שלם!

"הסוכנות לפרויקטי מחקר מתקדמים באנרגיה" (Research Projects Agency – Energy) Advanced (ARPA-E, ובקיצור ARPA-E), התחילה תוכנית של מיליוני דולרים שמטרתה למצוא חומר המתאים לאחסון גז טבעי ברכבים. כחלק מתוכנית זו קבעה ARPA-E כי צפיפות האנרגיה שהחומר הננו-נקבובי צריך להשיג היא 12.5 MJ/L (ראו את הקו האדום המקווקו באיור 2). צפיפות אנרגיה זו גדולה פי 340 מהצפיפות של גז טבעי בטמפרטורת החדר ובלחץ אטמוספרי.

חומר ננו-נקבובי (Nanoporous material)

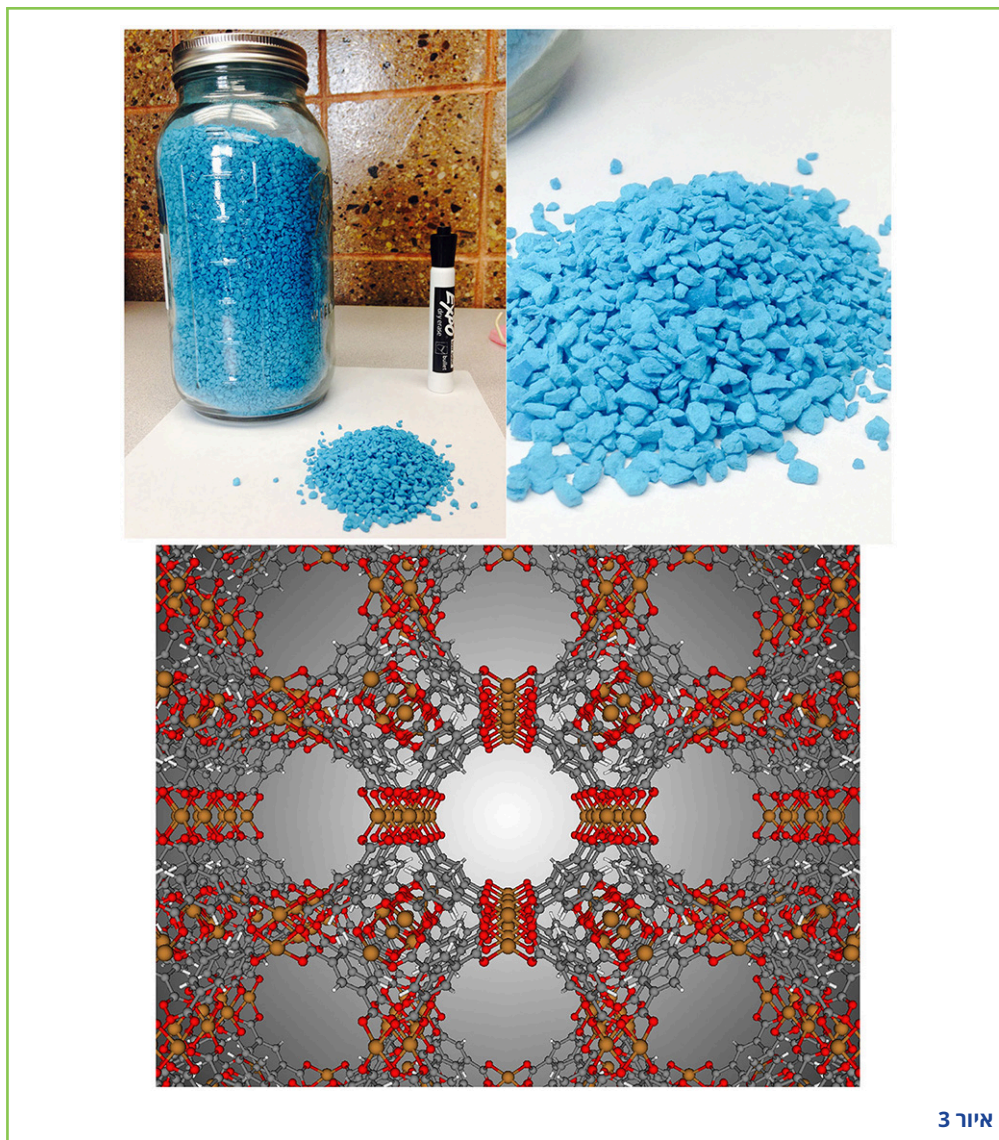
חומר בעל נקבוביות קטנות, שגודלן קטן מ-100 ננומטרים.

ספיחה (Adsorption)

התהליך שבו מולקולות נספחות ("נדבקות") למשטח. במקרה של חומרים ננו-נקבוביים, קירות הנקבוביות הם שיוצרים את המשטח שאליו מולקולות הגז נספחות.

איור 3

דוגמה לחומר ננו-נקבובי המורכב מנחושת (Copper) ובנזן (Benzene) ומסומן בתור Cu-BTC. התמונות שלמעלה מראות חומר ננו-נקבובי שנקרא Cu-BTC [2], אשר שייך לקבוצת תרכובות שנקראת **מסגרת מתכתית-אורגנית**. צבעו של ה-Cu-BTC הוא כחול בשל נוכחות הנחושת בתוכו. כשאנו שמים את החומר הזה בתוך מכל הדלק אנו יכולים להגדיל את צפיפות האנרגיה בתוך המכל מאחר שחומר זה מתפקד כמו ספוג עבור מולקולות גז טבעי. בתמונה התחתונה אפשר לראות את המבנה המולקולרי של ה-Cu-BTC. הכדורים מייצגים את האטומים והמקלות מראים כיצד האטומים קשורים ביניהם: צבעים שונים מייצגים אטומים שונים (בכתום: נחושת, באדום: חמצן, באפור: פחמן, בלבן: מימן). הקירות של הנקבוביות דמויות-החור בחומר זה יוצרים משטח פנימי שאליו נדבקות מולקולות הגז, מה שגורם לו להתנהג כמו ספוג. הקוטר של הנקבוביות האלה הוא 0.7 ננומטרים בקירוב.



איור 3

חומר בעל התכונות האלה יוכל לאפשר לנו להשתמש במכלי אחסון קלים וזקים יותר ובציוד דחיסה זול יותר. חוקרים בכל רחבי העולם מנסים לגלות את החומר החדש שיענה על מטרת האחסון ש-ARPA-E הציבה.

מציאת החומרים הננו-נקבוביים המוצלחים ביותר

היבט מלהיב של חומרים ננו-נקבוביים מתקדמים הוא שכימאים יכולים לעצב אותם ברמה המולקולרית ועל כן לכוונן את הנקבוביות שלהם באופן שיספר את ביצועיהן. כימאים מסוגלים לסנתז מיליוני חומרים שונים באמצעות ערבוב של אבני בניין מולקולריות שונות (ראו איור 4).

במעבדה לוקח כמה שבועות לסנתז חומר חדש ולבדוק אותו. סנתוז ובדיקה של מיליוני חומרים שונים במעבדה, לצורך בחינת החומר המתאים ביותר לספיחת גז טבעי, היו לוקחים זמן רב מדי. לכן, אנו נדרשים לחשוב על כמה שאלות מחקריות חשובות: מתוך מיליוני האפשרויות הקיימות, כיצד חוקרים יכולים לדעת אלה שילובים של אבני בניין מולקולריות

מסגרת

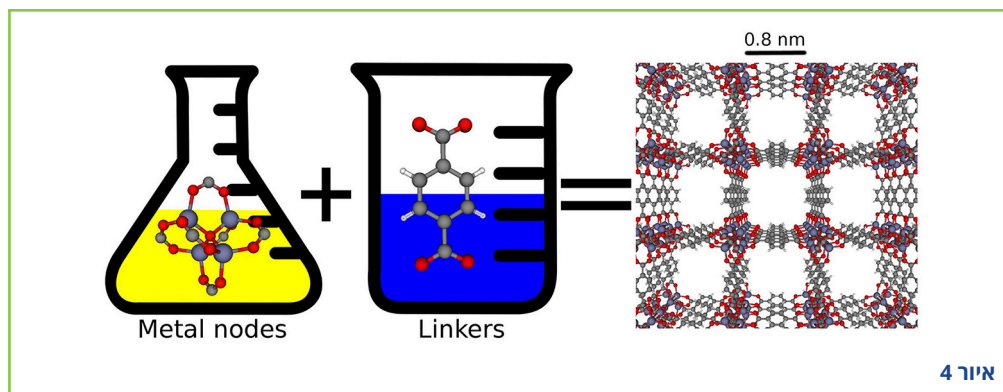
מתכתית-אורגנית

(Metal-Organic Framework, MOF) בקיצור

מסגרת מתכתית-אורגנית היא סוג של חומר ננו-נקבובי שמכיל צמתים או צבירים מתכתיים המשולבים עם מולקולות אורגניות אשר מכנות מולקולות מקשרות. הקשרים בין המתכות לבין המולקולות האורגניות הם שקובעים את מבנה החומר.

איור 4

כוונן כימי של חומרים ננו-נקבוביים מתקדמים. מימין מוצג המבנה של חומר ממשפחת שנקרא MOF) IRMOF-1 [3]. IRMOF-1 מורכב במעבדה על-ידי שילוב בין שתי אבני בניין מולקולריות: צמתים מתכתיים ומולקולות מקשרות אורגניות. המולקולות המקשרות והצמתים מתארגנים בעצמם בתמיסה בצורת גביש מחזורי בעל מבנה ננו-נקבובי. על-ידי שינוי המולקולות המקשרות והצמתים המתכתיים אפשר ליצור מיליוני חומרים שונים ממסגרת מתכתית-אורגנית (קונספט התמונה נמסר על-ידי Katie Deeg).



יניבו חומר שיענה על מטרת אחסון האנרגיה של ARPA-E? כיצד אנו בכלל יכולים לדעת שמטרת אחסון האנרגיה היא ישימה? ודאי ישנן מגבלות לכמות הגז הטבעי שחומר כלשהו יכול לאחסן.

יצירה של חומרים במחשב ובדיקתם

חוקרים עובדים בשנים האחרונות גם על שיטה לייצור מודלים (מדול) של חומרים על גבי מחשב. על-ידי חיבור של אבני בניין העשויות ממולקולות שונות, ממש כמו יחידות של לגו, חוקרים יכולים למדל את החומרים האלה במחשב. מאחר שמידול של חומרים במחשב מהיר הרבה יותר מהכנת חומרים אמיתיים במעבדה, אפשר בזמן קצר יחסית לייצור מודלים של חומרים רבים.

לאחר שיצרנו "חומר" על המחשב אנו יכולים להריץ הדמיות (סימולציות) ממוחשבות של ספיחת מתאן לתוך נקבוביות החומר. הדמיה ממוחשבת זו דומה למדקה (סימולטור) טיסה, רק עבור מולקולות; האלגוריתם (כלומר, אוסף הפעולות שמוגדר בתוכנה) מכניס, מוחק ומזיז את מולקולות המתאן בתוך נקבוביות החומר כדי לבחון את התצורות (קונפיגורציות) המועדפות ביותר. באמצעות הדמיות מולקולריות ועל בסיס המבנים שאנו יוצרים במחשב, אנו יכולים לחזות כמה מולקולות מתאן חומר מסוים יוכל לספוח.

חוקרים בנו עד כה במחשב יותר מ-650,000 חומרים ננו-נקבוביים שונים. הם עשו זאת באמצעות בחירת אבני בניין מולקולריות שונות ושילובן בהתאם לחוקים שמבוססים על ידע מעבדתי, ביחס לאופן שבו צריך לסנתז את החומרים האלה. באמצעות שימוש בקוד הדמיה מולקולרי ממוחשב שכתבנו [4] יצרנו הדמיה של ספיחת מתאן, ובעזרתה חיזנו איזו כמות של מתאן כל אחד מ-650,000 החומרים הננו-נקבוביים האלה יכול לספוח.

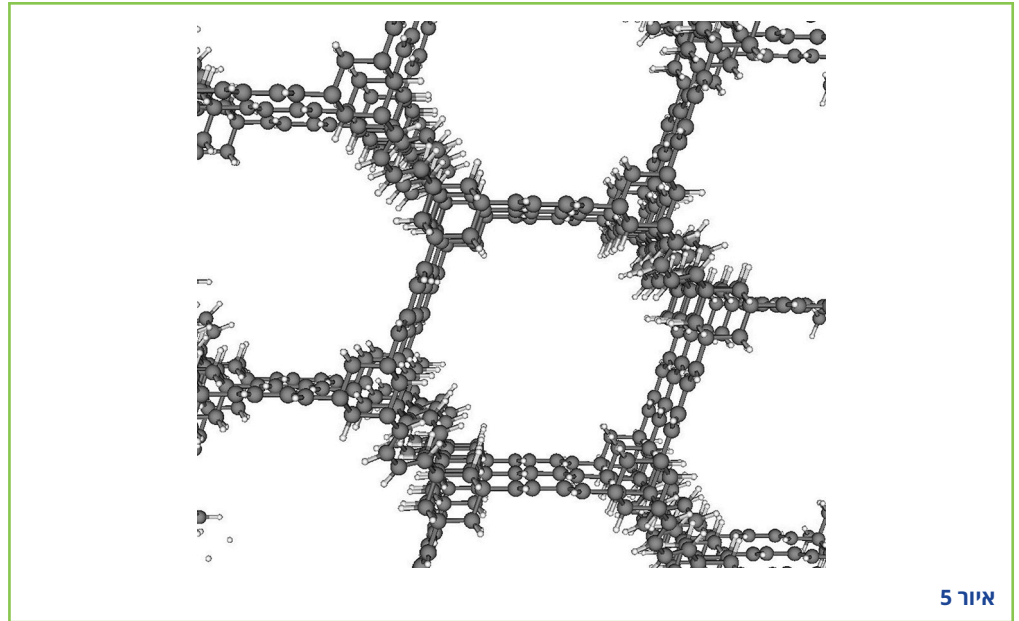
מתוך מאגר הנתונים שלנו, של יותר מ-650,000 חומרים, המבנה שחזינו ששיגי את צפיפות האנרגיה הגבוהה ביותר של מתאן מוצג באיור 5. ההדמיות שלנו חזו שהחומר המובחר הזה יכול להגיע לצפיפות אנרגיית מתאן של 7.8 MJ/L. אנו מקווים שהתחזית הזו תעודד את הסנתוז והבדיקה של המבנה יציר המחשב הזה [4]. עדיין, מבנה זה משיג רק 62% ממטרת האחסון של ARPA-E שעומדת כאמור על 12.5 MJ/L. מאחר שהחומר הטוב ביותר במאגר

הדמיה (סימולציה) ממוחשבת (Computer simulation)

הרצה של תוכנת מחשב שמתוכנתת לחקות את ההתנהגות של מערכת מסוימת ולשחזר אותה. במקרה הזה, תוכנת המחשב שלנו מחקה את כניסתן, יציאתן ותנועתן של מולקולות המתאן בנקבוביות החומר הננו-נקבובי.

איור 5

המבנה המובחר. זה המבנה אשר משיג את צפיפות האנרגיה החזויה הגבוהה ביותר של מתאן – 7.8 MJ/L. הכדורים האפורים הם פחמן; הכדורים הלבנים הם אטומי מימן. מבנה זה יוצר על-ידי מחשב וטרם סונתז במעבדה [5].



איור 5

הנתונים שלנו עדיין די רחוק מעמידה במטרה של ARPA-E, עושה רושם שהסבירות שנגיע אל מטרת האחסון של ARPA-E היא נמוכה.

ערך השיא של צפיפות האנרגיה של מתאן שהושג עד כה במעבדות עומד על 7.4 MJ/L [6], והוא שייך לחומרים Cu-BTC (איור 3) ו-IRMOF-1 (איור 4). בהשוואה לחומר המובחר במאגר הנתונים שלנו, שמשיג כאמור צפיפות אנרגיה של 7.8 MJ/L, הממצאים שלנו מחזקים את הסברה שאין עוד מקום רב לשיפור החומרים הקיימים ביחס לספיחת מתאן.

מסקנות

עבודתנו מדגימה כיצד אנו יכולים לבנות מודלים ממוחשבים של חומרים ולהשתמש בהדמיות ממוחשבות של ספיחת מתאן אל תוך הנקבוביות כדי לזהות בצורה מהירה וזולה את החומרים הננו-נקבוביים המבטיחים ביותר לאחסון גז טבעי. על-ידי הערכה ממוחשבת של כמות גדולה של חומרים (650,000), שאיננה מעשית במעבדה, אנו מסוגלים להגיע במהירות למסקנה שמטרת האחסון של ARPA-E כנראה לא תהיה ברת מימוש.

האם אנו יכולים להסיק כעת שאין זה אפשרי למצוא חומר שעומד במטרה של ARPA-E? ראשית, חשוב להבין שאנו יכולים ליצור מודלים ממוחשבים רק של חומרים שאנו מבינים כיום מניסויי מעבדה. אולם בעתיד כימאים יוכלו להמציא קבוצות חדשות לגמרי של חומרים אשר ייתכן שיהיו מסוגלים להשיג את מטרת האחסון.

אף על פי שלא מצאנו חומר ננו-נקבובי שעומד בדרישת אחסון המתאן של ARPA-E, אין זה בזבוז של זמן לחקור את אחסון הגז הטבעי באמצעות חומרים ננו-נקבוביים. להיפך, התוצאות מציעות שעלינו לשקול את השימוש בחומרים הננו-נקבוביים המוצלחים ביותר שמקרים כיום. חומר שיכול להשיג צפיפות אנרגיה של 8 MJ/L מהווה שיפור גדול ביחס לשימוש במכל ללא החומר הנקבובי ובאותו הלחץ, אשר צפיפות האנרגיה שלו עומדת על 2.5 MJ/L בלבד. אם כן, מילוי מכל הדלק בחומרים ננו-נקבוביים מאפשר לנו לאחסן כמות גדולה פי שלושה של גז

טבעי מאשר שהיינו מקבלים בלעדיהם. במקרה כזה נדרש אמנם מכל דלק קצת יותר גדול כדי לנסוע את אותו המרחק כמו עם גז טבעי דחוס, אולם ייתכן שזה טוב מספיק עבור צרכינו.

מאמר המקור

מאמר זה הוא גרסת Young Minds של מאמר פרספקטיבה שפרסמנו בעיתון "מדעי אנרגיה וסביבה" (Energy and Environmental Science) [6]. את הנתונים והסימולציות שלנו אפשר למצוא בקישור הזה: <https://materialsproject.org/#search/porous>

מקורות

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., Rübél, 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-Gualdrón, 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

פורסם אונליין: 25 בינואר 2019

ציטוט: Martin RL, Mercado R, Deem MW, Gunter D, Haranczyk M, Snurr RQ and Smit B (2019) חיפוש ממוחשב של חומרים לאחסון גז טבעי עבור כלי רכב. *Front. Young Minds.* doi: 10.3389/frym.2015.00011-he

תורגם והותאם:

Simon CM, Kim J, Gomez-Gualdrón 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

הצהרת ניגוד אינטרסים: המחברים מצהירים כי המחקר נערך בהעדר כל קשר מסחרי או פיננסי שיכול להתפרש כניגוד אינטרסים פוטנציאלי.

Martin, Mercado, Deem, Gunter, Haranczyk, Snurr and Smit 2015 © **COPYRIGHT** Simon, Kim, Gomez-Gualdrón, Chung, Creative Commons Attribution License (CC BY). זהו מאמר בגישה פתוחה שמופץ תחת תנאי רישיון השימוש, ההפצה או ההעתקה מותרים לשימוש בפורומים אחרים ובלבד שיינתן קרדיט למחבר(ים) המקוריים ולבעל זכויות היוצרים, ושהפרסום המקורי בעיתון זה מצוטט בהתאם למקובל באקדמיה. השימוש, ההפצה או ההעתקה אינם מותרים אם הם אינם עומדים בתנאים אלה.

סוקרים צעירים

KATE, גיל: 14

שמי Kate ואני תלמידת כיתה י'. מגיל צעיר הבעתי עניין גדול בתחום המדע. בגיל 4 נהגתי להסתובב בבית שלי ולמדוד לחץ דם לחברי המשפחה אם הם היו חולים, ואפילו אבחנתי את המחלות שלהם. התשוקה החזקה שלי לבניית קריירה בתחום הרפואה דחפה את הבחירות הלימודיות שלי, ואפשרה לי להשלים את כיתות ח' ו-ט' בשלושה חודשים בלבד. כשאגדל אני מקווה להיות מדענית שמתמחה בתחום האפידמיולוגיה (תחום ברפואה העוסק בחקר מחלות).

הכותבים

CORY M. SIMON

אני דוקטורנט להנדסה כימית וביומולקולרית באוניברסיטת קליפורניה בברקלי. יום עבודה טיפוסי שלי כולל שתית קפה, שרבוט משוואות על לוח מחיק וכתובת תוכנות מחשב. מחוץ לעבודה אני נהנה לטייל, לרוץ, לצלול עם שנורקל ולנגן בגיטרה.

JIHAN KIM

אני פרופסור משנה במחלקה להנדסה כימית וביומולקולרית במכון המתקדם של קוריאה למדעים וטכנולוגיה (KAIST) בדרום קוריאה. קבוצת המחקר שלנו מתמקדת בשימוש בהדמיות מחשב כדי לאפיין ננוחומרים ולפתח אותם. מחוץ לעבודה אני נהנה להקשיב למוזיקה ולצפות בסרטים.

DIEGO A. GOMEZ-GUALDRON

אני פוסט דוקטורנט במחלקה להנדסה כימית וביולוגית באוניברסיטת נורת'ווסטרן. השלמתי את הדוקטורט שלי במדע והנדסה של חומרים באוניברסיטת טקסס (Texas A&M University), ואת התואר הבוגר בהנדסה כימית באוניברסיטה התעשייתית של סנטנדר (Universidad Industrial de Santander) בקולומביה. מאז שלמדתי על ננוטכנולוגיה, הייתי מרותק מהאופן שבו שינויים במבנה של החומר בקנה המידה הננומטרי יכולים לשנות את התכונות שלו. המומחיות שלי בהדמיות מולקולריות מאפשר לי להשתמש במחשבים בכדי לחקור כיצד אנחנו יכולים לנצל את העובדה הזאת ולעצב ננוחומרים חדשניים עבור יישומים טכנולוגיים שונים. מחוץ למעבדה אני נהנה לבשל, לעשות ספורט ולבלות עם המשפחה שלי.

YONGCHUL G. CHUNG

אני פוסט דוקטורנט במחלקה להנדסה כימית וביולוגית באוניברסיטת Northwestern. אני מתעניין בשימוש במדע הנתונים ובמדול מולקולרי לַשם גילוי חומרים חדשים שיכולים לעזור לנו לטפל בבעיות שקשורות באנרגיה, בסביבה ובבריאות. מחוץ לעבודה אני נהנה לשחק טניס, גולף ו"ליגת האגדות" (משחק וידיאו אינטרנטי רב-משתתפים).



**RICHARD L. MARTIN**

אני מדען חוקר בקבוצת Watson ב-IBM. השלמתי את הדוקטורט שלי בכימיה אנרגטית (אחד מענפי הכימיה התיאורטית אשר משלב כמה דיסציפלינות ממדעי המחשב ומתורת המידע לצורך פתרון בעיות בכימיה) ב-Sheffield, בריטניה. אני מתעניין בשימוש בתורת המידע ומדעי המחשב לשם האצת גילויים בתחומים שונים בכימיה ובחומרים. אני נהנה גם מעבודות אומנות מדעיות, מכדורגל וממשחקי אסטרטגיה.

**ROCIO MERCADO**

אני כימאית שמתעניין בשימוש בהדמיות מחשב כדי לתכנן חומרים ננו-נקבוביים ולגלותם לצורך אחסון דלקים חלופיים ולכידת מזהמים סביבתיים. כאשר אינני עובד על המחשב שלי אני נהנה לקרוא רומנים אפיים, ללמוד שפות זרות ולשוטט באזור מפרץ סן פרנסיסקו.

**MICHAEL W. DEEM**

ראש המחלקה לביו-הנדסה באוניברסיטת Rice. מבצע מחקר בתחומי האבולוציה, האימונולוגיה, הפיזיולוגיה והחומרים. בתחום החומרים הוא מתעניין במבנה, בתהליך הנוקליאציה (היווצרות הגרעין) ובתפקודים של זאוליטים (מינרלים העשויים מסיליקון, אלומיניום וחמצן) ושל חומרים ממסגרת מתכתית-אורגנית (MOF). פיתח שתי שיטות שנמצאות בשימוש נרחב בתחום החומרים, אשר נקראות DIFFAX ו-ZEFA. הוא חבר במכון האמריקאי להנדסה רפואית וביולוגיה, בארגון להנדסה ביו-רפואית (Society of Biomedical Engineering - BMES), באיגוד האמריקאי לקידום המדע ובארגון הפיזיקאים האמריקאי (American Physical Society - APS).

**DAN GUNTER**

אני מדען מחשבים במעבדה הלאומית על שם Lawrence Berkeley. אני מפתח תוכנות מחשב שתומכות בתחומי מדע שונים רבים, החל מביולוגיה ועד לפיזיקה. אני נהנה ממוזיקה, מרכיבה על אופניים בהרים, מלשחק עם הילדים שלי ומלחכות בצפייה לפרק הבא של "משחקי הכס" (סדרת פנטזיה טלוויזיונית).

**MACIEJ HARANCZYK**

אני מדען חבר סגל במעבדה הלאומית על שם Lawrence Berkeley. אני מפתח אלגוריתמים ותוכנות שעוזרים לתכנן חומרים חדשים וטובים יותר למגוון יישומים הקשורים באנרגיה. מחוץ לעבודה אני נהנה ממחנאות ומרכיבה על אופנוע.

**RANDALL Q. SNURR**

אני פרופסור להנדסה כימית באוניברסיטת Northwestern. אני מלמד שיעורים שקשורים באנרגיה ובעיבוד חומרים, והמחקר שלי מתמקד בפיתוח חומרים במטרה לעזור לפתור בעיות אנרגטיות וסביבתיות. כשאני לא עובד אני נהנה ממוזיקה, מטוילים ומסרטים.

**BEREND SMIT**

אני פרופסור להנדסה כימית באוניברסיטת קליפורניה בברקלי ובמכון הפדרלי לטכנולוגיה בלזון (EPFL). במחקר שלי אני מנסה להבין כיצד להשתמש בחומרים ליישומים שקשורים באנרגיה. כאשר ההבנה הזו אינה צולחת, אני נהנה ממוזיקה ומטיול בהרים השווייצריים.

Hebrew version
provided by

מזיאון המדע ע"ש בלומפילד ירושלים (ער.)
متحف العلوم على اسم بلومفيلد القدس
Bloomfield Science Museum Jerusalem

