

שימוש במחשבים לגילוי חומרים שמייצרים דלקים בלתי מזהמים

Santu Biswas, Maytal Caspary Toroker*

הפקולטה למדע והנדסה של חומרים ותוכנית האנרגיה על שם גרנד (GTEP), טכניון, חיפה, ישראל

דלקים בלתי מזהמים, כמו דלק מימן, נחשבים כיוון מובטח לצמצום הבעיות הסביבתיות שנגרמות על-ידי שריפת דלקי מאובנים. סימולציית מחשב מהווה כיום את הכלי החשוב ביותר בתחום הזה אשר מאפשר הבנה טובה יותר של החומרים הקיימים, וגם מסייע לעצב חומרים מסוגים חדשים. במאמר זה נסביר כיצד חומרים מסוימים יכולים לסייע בייצור מימן, שהוא דלק נקי, ממים, ונתאר את האופן שבו סימולציית מחשב מציעה דרך לגילוי של חומרים חדשים ויעילים.

מהו מקור לאנרגיה נקייה?

אנרגיה נחוצה לחיי היומיום שלנו. בעידן המודרני, אנו זקוקים לאנרגיה עבור פעילויות שונות רבות כמו למשל צריכת חשמל; נהיגה; חימום וכדומה. צריכת האנרגיה העולמית מתגברת כתוצאה מגידול האוכלוסייה. אולם בעולם לא חסרה אנרגיה, ומרבית הדרישות ממולאות על-ידי שריפת דלקי מאובנים. אלה כוללים פחם, שמן וגז טבעי. לרוע המזל, מקורות של דלק מאובנים אינם ידידותיים לסביבה. שריפת דלקי מאובנים יוצרת גזים מזהמים כמו פחמן דו-חמצני, שגורם לבעיות של זיהום סביבתי (ראו איור 1). ההשפעה העיקרית של שריפת דלקי

סוקרים צעירים

ROY

גיל: 11



YOTAM

גיל: 11

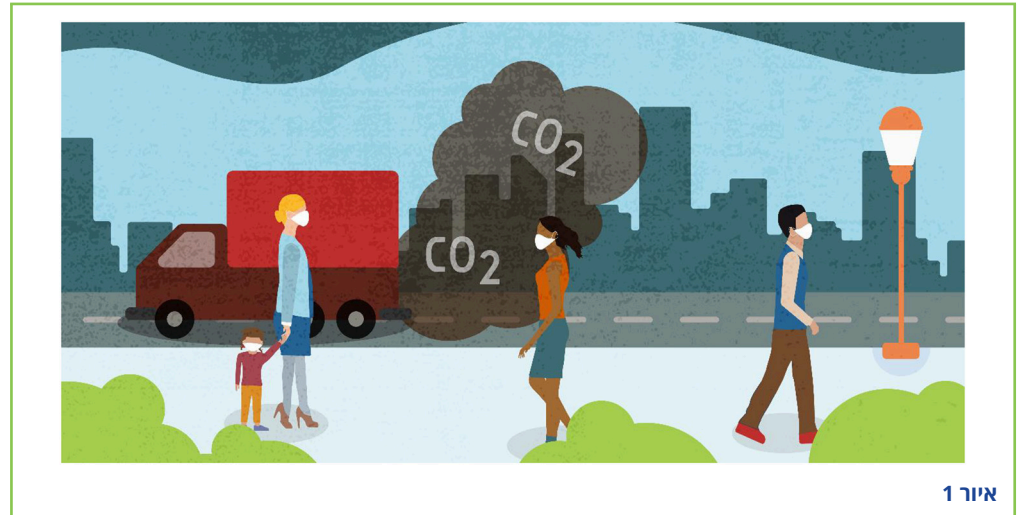


דלקי מאובנים (Fossil fuels)

דלקים שיכולים לשמש כמקור אנרגיה. נוצרים בתהליכים טבעיים כמו פירוק של צמחים ובעלי חיים קדומים לאורך מיליוני שנים.

איור 1

האפקט של זיהום סביבתי. שריפת דלקים מאובנים ליצירת אנרגיה גורמת לשחרור של כמה גזים, כולל פחמן דו חמצני, (CO₂) הגורמים לזיהום סביבתי ותורמים להתחממות כדור הארץ.



התחממות גלובלית (Global Warming)

העלייה בטמפרטורת פני השטח הממוצעת של כדור הארץ לאורך תקופה ארוכה.

מאובנים היא בעיית **ההתחממות הגלובלית** שנגרמת בעיקר על-ידי פחמן דו-חמצני אשר כולא את חום השמש באטמוספירה ומעלה את הטמפרטורה הממוצעת על פני כדור הארץ מדי שנה בשנה [1].

אנו יודעים שאנשים ובעלי-חיים נושפים פחמן דו-חמצני, אולם צמחים קולטים פחמן דו-חמצני. לכן, באופן טבעי צמחים לבדם מסוגלים להתמודד עם כמות הפחמן הדו-חמצני באטמוספירה ולהסיר אותה. אולם כיום יש עודף של פחמן דו-חמצני באטמוספירה, וצמחים כבר לא מסוגלים להתמודד איתו לבדם. לכן, אנו זקוקים לפתרון שלא מייצר זיהום אשר נגרם על-ידי פחמן דו-חמצני וגזים אחרים.

אנרגיה נקייה (Clean energy)

אנרגיה שמיוצרת באמצעים שאינם מזהמים את הסביבה.

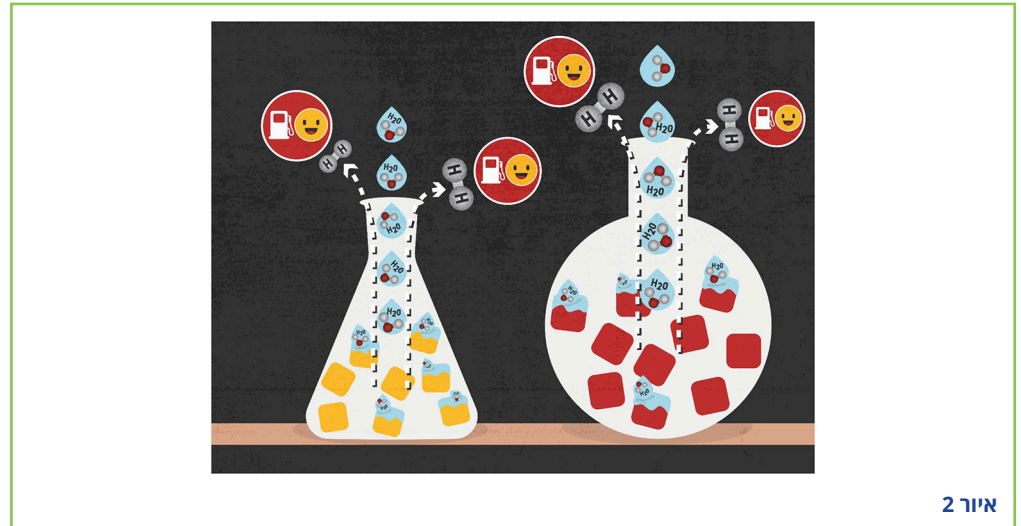
פתרון כזה עשוי להיות **אנרגיה נקייה!** אפשר להגדיר אותה כמקור אנרגיה שהוא ידידותי לסביבה, בר-קיימא יותר ומיוצר מאנרגיית שמש (אנרגיה סולרית), מאנרגיית רוח וכדומה. אנרגיה סולרית ממירה אור מהשמש כדי להפיק אנרגיה ליצירת חשמל. כוח הרוח מנצל את תנועת הרוח לייצור חשמל. קל לתפוס את היתרונות הסביבתיים של ניצול אנרגיה נקייה זו, אך עלינו להיות מודעים לחסרונות. במקרה של אנרגיה סולרית, אור שמש אינו זמין בלילה, וכיום טכנולוגיה זו יקרה יותר. במקרה של כוח רוח, אין אנרגיה כאשר הרוח לא נושבת וגם נדרש הרבה שטח אדמה. לכן יש חשיבות גבוהה לאיתור משאבי אנרגיה נקיים חלופיים, אשר יכולים לספק את דרישות האנרגיה לחיי היומיום שלנו.

מימן: מקור לאנרגיה נקייה

מאמצים רבים הושקעו בפיתוח של מקורות אנרגיה חלופיים וידידותיים לסביבה כגון ייצור של דלק מימן ממקורות טבעיים כמו מים. מימן נחשב לדלק אידיאלי לסיפוק צרכי האנרגיה הגלובליים בעתיד. מימן הוא דלק בלתי מזהם שאפשר להשתמש בו לתחבורה, לחימום ולהפקת חשמל. נוסף על כך מימן נחשב כבעל יעילות גבוהה מאחר שהוא בעל תכולת האנרגיה הגבוהה ביותר יחסית למשקלו מכל דלק אחר.

איור 2

הוספת מים לחומר במטרה לייצור דלק מימן, תהליך הנקרא "פיצול מים" הוא דרך לייצור דלק מימן על ידי פירוק מים למימן (H_2) וחמצן (O). חומרים מסוימים הנקראים זרזים (בלוקים צהובים ואדומים) יכולים לעזור לתגובת הפיצול לקרות מהר יותר ולהפחית את כמות האנרגיה הדרושה לתגובה.



איור 2

מימן יכול להיות מיוצר ממים, שהנוסחה הכימית שלהם היא H_2O , כלומר כל מולקולה של מים מכילה שני מימנים (סמל: H_2) וחמצן אחד (סמל: O). קבלת מימן ממים, תהליך שנקרא "פיצול מים", היא תגובה כימית שבה מים מתפרקים לשני מרכיבים, מימן וחמצן, אם מסופקת מספיק אנרגיה. האנרגיה לתגובה הכימית הזו יכולה להיות מסופקת על-ידי מקורות שונים: חשמלי (זרם); תרמי (חום); או אור (קרינה אלקטרומגנטית), בעזרתם של חומרים מיוחדים הנקראים זרזים. זרזים הם כימיקלים קטנים שיכולים לעשות עבודה מצוינת ולהפחית את כמות האנרגיה שדרושה כדי "לפרק" את המים.

פיצול מים (Water splitting)

המרה של מים למרכיבים הכימיים שלהם: חמצן ומימן. במימן אפשר להשתמש כדלק.

זרז (Catalyst)

חומר שמאיץ את התגובה הכימית. התהליך של האצת התגובה נקרא זירוז כימי (קטליזה).

כיצד זרזים מסייעים להפיק מימן ממים?

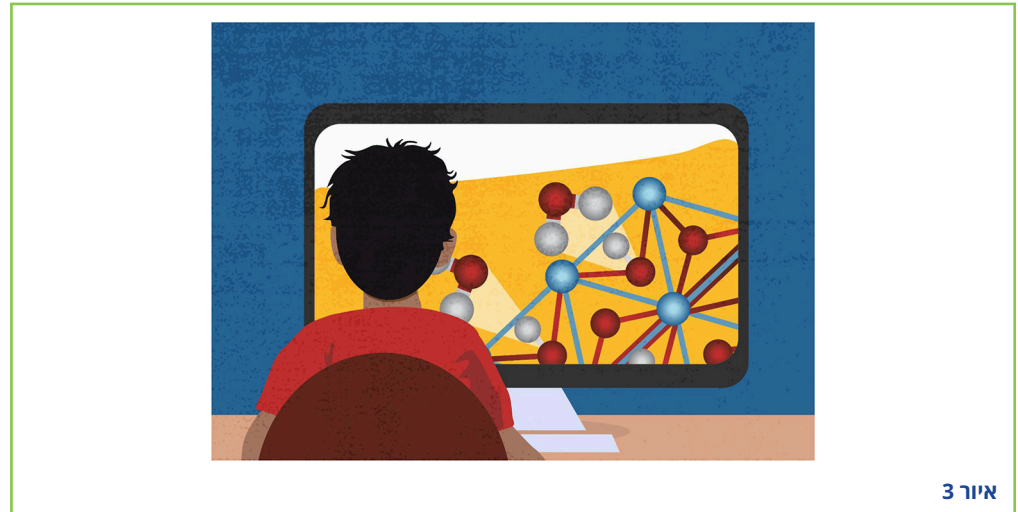
כעת, כיצד זרזים יכולים לסייע ב"פיצול" מים? תחילה, חומרים אלה יכולים להיות במגע עם מולקולת המים על פני השטח שלהם. בזמן המגע, קשר כימי נוצר בין אטום החמצן של המים והאטומים בפני השטח של הזרז. מולקולת המים מתעוותת בשל הקישור הזה, כך שקל יותר לפרק אותה לחמצן ולמימן (איור 2). באופן זה החומר מסייע "לפרק" מים ולהאיץ את התהליך, כלומר לזרז את התגובה. בעזרת סיוע מהחומר ה"זרז", מולקולות שעשויות להגיב בתוך שנים, יכולות לעשות זאת בתוך שניות בודדות.

אם כן, האנרגיה הראשונית הדרושה ליצירת מגע בין המים לחומר כמו גם האנרגיה הדרושה לפיצול מולקולת המים, הן המפתח לבחירת חומר יעיל.

בעשור הקודם חומרים רבים נחקרו עבור פיצול של מים [2]. לדוגמה, אחת ההדגמות הראשונות של פיצול מים לייצור מימן בוצעה על גבי טיטניום דו-חמצני (TiO_2). לאחר מכן, קבוצות ניסיוניות רבות ברחבי העולם ניסו לייצור ולאפיין סוגים שונים של חומרים עבור זירוז כימי של פיצול מים. אולם פיתוחם של חומרים חדשים וטובים יותר הוא מורכב מאוד וקשה להבנה. כשאנו מנסים לבנות חומר חדש אנו יכולים להשתמש בהרבה מרכיבים כימיים ובשילובים שונים שלהם. אם כן, ישנן המון אפשרויות שדורשות זמן ומאמצי מחקר רבים, כשלעיתים התוצאה אינה ידועה: החומר עלול להיות בלתי יציב או לא יעיל עבור פיצול מים. לכן אנחנו צריכים למצוא דרך יעילה יותר לזהות זרז פוטנציאלי.

איור 3

ניטור של פיצול מים באמצעות סימולציית מחשב. טכנולוגיית סימולציית מחשב יכולה לעזור לחוקרים לזהות ולפתח ביתר קלות זרחים חדשים.



איור 3

החשיבות של סימולציית מחשב

הכלי החשוב ביותר שעשוי לאפשר הבנה טובה יותר של עיצוב חומרים חדשים הוא מחשב. תוכנות מחשב כוללות קבוצות של הנחיות שמשמשות לרוב לפתרון בעיה או להפיכת בעיות גדולות לקצרות ופשוטות יותר לפתרון. במהלך השנים האחרונות, טכנולוגיה של **סימולציית מחשב** מילאה תפקיד חשוב במחקר של מדע של החומרים. לכן, בסיוען של שיטות סימולציית מחשב אנו יכולים לחפש חומרים חדשים שביכולתם לזרז פיצול מים.

המחשב יכול לשמש להדמיית תהליך של פיצול מים בעזרת חומר חדש, כדי לבחון אם החומר יעיל (ראו איור 3). סימולציות מחשב מסוגלות להראות לנו מקרוב מאוד מה קורה בפני השטח של החומר הזרז, ולחשוף את האינטראקציה שיכולה להתרחש בין החומר הזרז לבין מולקולות המים.

מחשבים יכולים לחשב את חוזק הקישור ואת התאמתן של מולקולות המים לזרז הפוטנציאלי. תחילה, החוקרים מספקים למחשב מידע על הרכב חומר הזרז הפוטנציאלי. המחשב שוקל את כל המיקומים האפשריים שבהם מולקולות המים עשויות להיצמד לפני השטח של החומר הזרז. לאחר מכן, המחשב מחשב את סכום כל החיבורים הכימיים בין המים לחומר, ואז מנבא את המיקום הסביר ביותר שבו המים יקשרו לפני השטח של החומר. המחשב מספק לחוקרים נתונים רבים על המבנה של מולקולות המים כשהיא מתחברת לפני השטח של הזרז, וכן על המבנה של המים כשהם מפוצלים ליצירת מימן. כמו כן המחשב יכול לחשב את האנרגיה הדרושה לפיצול מים.

זרז יעיל צריך להיות במגע עם מולקולות המים המגיבות באופן מספיק חזק כדי שהן יקשרו, אולם לא חזק מדי כך שהתוצרים, מימן וחמצן, לא ידבקו למשטח באופן תמידי לאחר פיצול המים. זרז טוב הוא כזה שמאיץ את התהליך ועושה אותו יעיל יותר. לדוגמה, כסף אינו זרז טוב מאחר שיש מגע חלש מאוד בין הכסף לבין מולקולות המים המגיבות. מצד אחר גם טונגסטן אינו זרז טוב מאחר שהוא מייצר מגע חזק מדי. פלטינה וניקל הם זרחים טובים מאחר שהם מייצרים מגע חזק מספיק (אולם לא חזק מדי), שמחזיק את מולקולות המים המגיבות קרוב לפני

סימולציה (Simulation)

טכניקת מחשב המשתמשת בכללים מתמטיים ומדעיים במטרה לחקות מצבים בחיים האמיתיים.

שטח החומר, ומפעיל אותן בתהליך יצירת התוצרים. בעשורים האחרונים נמצאו סוגים שונים של חומרים שהם פחות יקרים ויציבים יותר. ברזל, קובלט, וניקל מבוססי תחמוצת, סולפיד, סלניד ופוספיד כולם חומרים שנמצאו כטובים ליצירת מימן ממים [3].

בין החומרים השונים שהוצעו כזרים טובים, תחמוצת של ניקל אוקסידהידרוקסיד (סמל: NiFeOOH) היא אחד החומרים היעילים ביותר לפיצול מים. לאחרונה, הקבוצה שלנו, המתמחה באפיון חומרים באמצעות מחשב [4], גילתה מדוע NiFeOOH מסוגל לפרק מים ביעילות: זאת כיוון שהוא מְקַשֵּׁר מים לאזורים שבהם החומר מכיל ברזל [5]. סימולציית המחשב מראה שברזל הוא חלק חשוב מאוד בחומר מאחר שהוא מאפשר למים להתפרק בלי שנדרשת אנרגיה רבה.

סיכום

פיצול מים הוא גישה מבטיחה לייצור של דלק מימן נקי. אנו מספקים מסגרת תיאורטית להבנת תהליך התגובה של מולקולות מים עם זרזים שונים, ודנים ביעילות של סימולציית מחשב בהקשר הזה.

באמצעות ההבנה הזו, אנו יכולים לתכנן ולפתח חומרים נוספים ליצירת מקורות אנרגיה נקיים שאינם מזיקים לסביבה. תהליך זה יסייע להפחית את השפעת ההתחממות הגלובלית, לטובת החברה.

תודות

מחקר זה נתמך על-ידי תוכנית האנרגיה של הטכניון על שם ננסי וסטפן גרנד (GTEP), והקרן הישראלית למדעים (מענק מספר 880/20).

מקורות

1. Mardani, A., Streimikiene, D., Cavallaro, F., Loganathan, N., and Khoshnoudi, M. 2019. Carbon dioxide (CO_2) emissions and economic growth: a systematic review of two decades of research from 1995 to 2017. *Sci. Total Environ.* 649:31–49. doi: 10.1016/j.scitotenv.2018.08.229
2. Chen, S., Thind, S. S., and Chen, A. 2016. Nanostructured materials for water splitting—state of the art and future needs: a mini-review. *Electrochem. Commun.* 63:10–7. doi: 10.1016/j.elecom.2015.12.003
3. Anantharaj, S., Ede, S. R., Sakthikumar, K., Karthick, K., Mishra, S., and Kundu, S. 2016. Recent trends and perspectives in electrochemical water splitting with an emphasis on sulfide, selenide, and phosphide catalysts of Fe, Co, and Ni: a review. *ACS Catal.* 6:8069–97. doi: 10.1021/acscatal.6b02479
4. Snir, N., Yatom, N., and Caspary Toroker, M. 2019. Progress in understanding hematite electrochemistry through computational modeling. *Comput. Mater. Sci.* 160:411–9. doi: 10.1016/j.commatsci.2019.01.001

5. Fidelsky, V., and Toroker, M. 2017. The secret behind the success of doping nickel oxyhydroxide with iron. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 19:7491–7. doi: 10.1039/C6CP08590C

פורסם אונליין: 09 בנובמבר 2021

נערך על ידי: Idan Segev, Hebrew University of Jerusalem, Israel

ציטוט: Biswas S and Caspary Toroker M (2021) שימוש במחשבים לגילוי חומרים שמייצרים דלקים בלתי מזהמים. *Front. Young Minds.* doi: 10.3389/frym.2021.648750-he

Biswas S and Caspary Toroker M (2021) Using Computers to Discover **הותאם:** Materials That Generate Non-polluting Fuels. *Front. Young Minds* 9:648750. doi: 10.3389/frym.2021.648750

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

COPYRIGHT © 2021 © Biswas and Caspary Toroker 2021. זהו מאמר בגישה פתוחה שמופץ תחת תנאי רישיון Creative Commons Attribution License (CC BY). השימוש, ההפצה או ההעתקה מותרים לשימוש בפורומים אחרים ובלבד שיינתן קרדיט למחברים (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

ROY, גיל: 11

אני לומד בכיתה ו, אוהב שחמט, קריאה ואת המחזמר המילטון. אני גם משחק טניס.

YOTAM, גיל: 11

שמי יותם, אני בכיתה ו' בתכנית המחוננים והמתמטיקה בבר אילן. אני אוהב לשחק משחקי מחשב, רכיבה על אופניים ופוקימון. תחומי הלימוד האהובים עליי הם מדעים ומתמטיקה. אני הבכור מבין שלושה אחים.

הכותבים

SANTU BISWAS

אני פוסט-דוקטורנט בטכניון, שם אני עושה את המחקר שלי. נכון לעכשיו העבודה שלי מתמקדת באלקטרוליזה של CO₂, פיצול מים עם תחמוצת מתכת וזירוז כימי עם מתכות אורגניות (MOF). את הדוקטורט קיבלתי מאוניברסיטת ויסבה-בהראטי, הודו. אני אוהב לשחק קריקט וחשוב לי מאוד לבלות עם המשפחה והחברים שלי.





MAYTAL CASPARY TOROKER

אני פרופסורית בפקולטה למדע והנדסה של חומרים בטכניון. המחקר במעבדה שלי עוסק בחישוב תיאורטי של תכונות חומרים, בעיקר תכונות ההולכה האלקטרונית דרך חומרים. אנו משתמשים בכלי מחשב המבוססים על אלגוריתמים מפיזיקה קוונטית במטרה להבין כיצד חומרים מתנהגים ברמה האטומית. בעזרת הבנה זו ניתן להנדס חומרים חדשים שיוכלו לשמש לבניית התקנים אלקטרוניים כמו סוללות, טרנזיסטורים ותאים סולריים. *maytalc@technion.ac.il

Hebrew version
provided by

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

