

Düzensiz Ortamlarda Reaksiyon Dinamiği Teorisi: BiNiX Üçlü Metal Alaşımları Kullanılarak CH₄ gazından H₂ eldesi

H. Toffoli¹, A. Erbasan¹, U. Sökmen², E. Eroğlu³, R. N. Mutlu³, G. Kardaş⁴, İ. Gökalp³, G. Çelik²

1 Orta Doğu Teknik Üniversitesi, Fizik Bölümü, 06800, Çankaya, Ankara

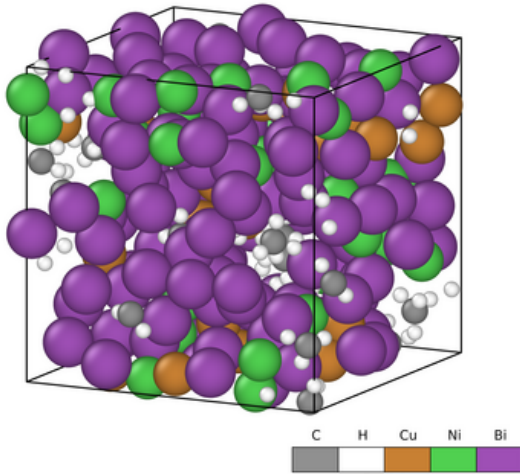
2 Orta Doğu Teknik Üniversitesi, Kimya Mühendisliği Bölümü, 06800, Çankaya, Ankara

3 Orta Doğu Teknik Üniversitesi, Makina Mühendisliği Bölümü, 06800, Çankaya, Ankara

4 Çukurova Üniversitesi, Kimya Bölümü, 01330, Sarıçam, Adana

Hidrojen ekonomisinin enerji politikaları yönünden giderek önem kazandığı günümüzde verimli, geri dönüştürülebilir, çevre dostu ve düşük maliyetli katalizörlerin geliştirilmesi bilim dünyasının önceliklerinden biri haline gelmiştir[1].

Endüstriyel olarak önemli olan kimyasal reaksiyonlarda katalizör olarak eriyik metallerin kullanılması fikri bir süre önce literatüre sunulmuştur [2]. CH₄ özelinde amaç CO ve CO₂ gazlarının açığa çıkmasına engel olarak, sadece karbon yan ürünlerinin elde edildiği çevre dostu bir katalizör geliştirmektir. etalin erime sıcaklığı, H₂ dönüşümünün verimi, karbon materyalin metale bağlanma enerjisi gibi çok geniş bir parametre listesi ortaya çıkmaktadır. Tüm bu parametrelerin deneysel metodlarla optimizasyonu olanaksızdır. Bu sunumda aktarılacak olan çalışmanın dayandığı projemizde, ekibimiz hem deneysel hem de teorik modelleme (Ab Initio Molecular Dynamics, AIMD) metodları kullanarak her açıdan en verimli ve az masraflı olan katalizöre ulaşmayı hedeflemektedir.



Şekil 1: AIMD için kullanılan ve 200 metal atomu ve 20 CH₄ molekülü içeren simülasyon hücresi

Metaller arasında en reaktif olanlardan biri nikel (Ni). Birçok kataliz uygulamasında halihazırda kullanımda olan Ni, yüksek erime sıcaklığı ve getirdiği ekonomik yük nedeniyle ekibimizin hedeflediği reaktörler için tek başına uygun değildir. Erime sıcaklığı düşük olan Bizmut (Bi) ile alaşımları benzer sistemlerde kullanılmıştır. Projemizde NiBi alaşımlarının üçüncü bir metal ile katıldığı üçlü alaşımların incelenmesi hedeflenmiştir. Yük yoğunluğu fonksiyoneli teorisi (Density Functional Theory, DFT) kullanılarak taranması sonucunda Al, Cu, Ga, In başta olmak üzere üçüncü metal adayları bulunmuştur. Öncelikli olarak, değişik kompozisyonlarda NiBiCu ve NiBiAl üçlü alaşımları teorik ve deneysel olarak ele alınmıştır. Teorik modelleme literatüründe reaksiyon dinamiği denildiğinde ilk akla gelen Elastik Bant metodudur (Nudged Elastic Bands, NEB). Ancak çalışmalarımızın daha ilk aşamalarında basit NEB hesaplarının bu yüksek entropi ve yüksek sıcaklık ortamında sağlıklı sonuçlar vermediği görülmüştür. Böyle ortamlarda reaktif metal atomunun komşuluğu, molekülün titreşim modu, H atomu kopması sonrası izlenen yol gibi birçok ilave faktör mevcuttur. Tüm bunların sağlıklı bir analizinin yapılması için yüksek sayıda AIMD hesapları yapılmış ve istatistiksel bir inceleme gerçekleştirilmiştir. Sunumda öncelikle ekibimizin geliştirdiği bu yenilikçi metodlardan söz edilecektir. Bu bölümü takiben hangi alaşımların daha verimli olduğu kompozisyon açısından ele alınacaktır. Deneylerle son derece uyumlu olduğu görülen teorik sonuçlarımız karşılaştırmalı olarak incelenecek ve daha sonraki aşamada yapılması planlanan çalışmalardan bahsedilecektir.

Bu araştırma TÜBİTAK tarafından desteklenmiştir (Proje No: 121M443). hesaplamalar TÜBİTAK ULAKBİM, Yüksek Başarım ve Grid Hesaplama Merkezi'nde (TRUBA kaynaklarında) gerçekleştirilmiştir.

Kaynakça

1. J. O. Abe, A. P. I. Poopola, E. Ajenifuja, O. Poopola, "Hydrogen Energy, Economy and Storage: Review and Recommendation", International Journal of Hydrogen Energy, **44**, 15072-15086 (2019).
2. D. C. Upham *et al.* "Catalytic molten metals for the direct conversion of methane to hydrogen and separable carbon", Science, **358**, 917-921 (2017).