

Karbondiyoksit-Metanol Dönüşümü

Çalışmalar Aralıksız Devam Ediyor

Dr. Tuncay Baydemir [TÜBİTAK Bilim ve Teknik Dergisi

Anahtar Kavramlar:

Kimyasal tepkime için gerekli olan aktivasyon enerjisini düşürerek tepkime hızını artıran ve tepkime sonucunda kimyasal yapısında değişiklik meydana gelmeyen maddelere **katalizör** denir. **Kataliz** ise bu işleme verilen addır. Katalizörler kimyasal tepkimeler için daha düşük aktivasyon enerjili bir rota oluşturur. Tepkimelerde enerji tasarrufu sağlayıp üretim maliyetinin düşmesini sağladıkları için endüstride büyük önem taşırlar.

Karbondiyoksitin hidrojenlenmesinin temel adım olduğu tepkimede yer alan, endüstride yaygın olarak kullanılan bakır, çinko oksit ve alüminyum oksitten (Cu/ZnO/Al₂O₃) oluşan katalizörün aktif noktası konusunda tartışmalar var.

ABD'deki Brookhaven Ulusal Laboratuvarı kimyagerleri, karbondiyoksitten metanol üretiminde yaygın olarak kullanılan katalizörün aktif noktasını kesin bir şekilde tanımlayan deneysel ve bilgisayarlı modelleme çalışmalarını yayımladı. *Science* dergisinde yayımlanan makale ile bu tepkimede kullanılan katalizörde hangi katalitik bölgenin önemli rol oynadığı ortaya kondu. Böylece tepkimenin daha etkili bir şekilde gerçekleşmesi için yapılacak çalışmaların odak noktası da belirlenmiş oldu.

Makalenin baş yazarı ve Brookhaven'da kimyager olan Ping Liu, Cu/ZnO/Al₂O₃ katalizörünün endüstride kullanıldığını, ancak seçiciliğinin ve etkinliğinin düşük olduğunu söyledi. Bu katalizörün daha düşük sıcaklık ve basınçlarda çalışacak şekilde geliştirilmesinin enerji tasarrufu sağlayacağını ekledi.

Makalenin yazarlarından Jose Rodriguez, katalizörün nasıl çalıştığını anlamak için yaptığı deneylerde farklı katalizör modelleri üzerinde çalıştı.

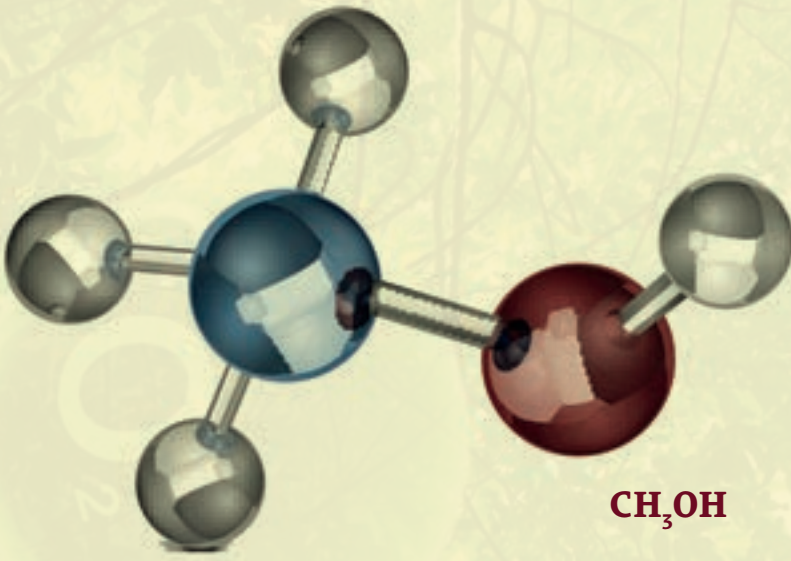
Birinci modelde bakır yüzey üzerinde çinko nano parçacıklar (Cu/Zn), ikinci modelde ise çinko oksit nano parçacıklar (Cu/ZnO) kullandı.

Karbondiyoksiti (CO₂) daha kullanışlı kimyasallara, örneğin metanole (CH₃OH) dönüştürmek hem kirliliği hem de petrol ürünlerine olan bağıllığımızı azaltabilir. Bilim insanları bu tür kimyasal dönüşümleri başarmak için uygun katalizörler üzerinde çalışıyor.

Örneklere yüksek enerjili X-ışınları uygulayarak tomaların oksitlenme seviyelerini ve elektronların kaynağının çinko mu yoksa çinko oksit mi olduğunu öğrendi.

Bu arada Liu ve çalışma arkadaşları karbondiyoksit-metanol dönüşümü için bu katalizör modelleri üzerinde bilgisayarda kuramsal çalışmalar gerçekleştirdi. Bu çalışmalar kimyasal bağ kırma ve oluşturma, bunun için gerekli olan enerji miktarı, atomların elektronik seviyeleri





Bu dönüşüm işlemi, doğadaki karbondioksit miktarının azaltılması ve kullanışlı bir madde olan metanolün elde edilmesi açısından önemli. Dünyada yıllık metanol üretimi 100 milyon tona yaklaşıyor. Kimya endüstrisinde (özellikle plastik endüstrisinde) hayli fazla kullanılan metanol, içten yanmalı motorlarda yakıt olarak da kullanılabilir. Biyodizel yakıtların da temel bileşenlerinden olan metanol fosil yakıtlara olan bağımlılığı da azalıyor. İyi bir çözücü olan metanol atık su arıtma işlemlerinde de kullanılıyor.

ve tepkime koşulları gibi temel bilgileri kullanarak, tepkime hızlarını ve hangi katalizörün dönüşüm oranının daha iyi olduğunu belirlemek üzere kullanıldı.

Kuramsal ve deneysel çalışmalarda Cu/ZnO modeli daha iyi sonuçlar verdi. Simülasyonlarda tüm ara ürünler hem bakır hem de çinko oksit yüzeye bağlandı. Rodriguez, karbondioksit-metanol kimyasal dönüşümü için bu iki madde arasındaki uyumun büyük önem taşıdığını belirtti.

Araştırmacılardan Jingguang G. Chen, kuramsal ve deneysel araştırmaların birlikte kullanılmasının endüstriyel öneme sahip katalitik sistemler üzerinde çalışırken gerekli olduğunu vurguladı.

Araştırma ekibi, ilerleyen süreçte Cu/ZnO arayüzünde farklı atom konfigürasyonları deneyerek tepkime hızının nasıl etkilendiğini araştırarak.

Kuramlarını geliştireceklerini ekleyen Liu, katalizörün etkinliğini artırmak için Cu/ZnO arayüzündeki etkileşimler üzerindeki çalışmalarına hız vereceklerini belirtti.

Ekip, geliştirecekleri son katalizör modelini ise endüstriyel ölçekte kullanılabilecek hale getirmeyi planlıyor. ■

Kaynaklar

- Kattel, S., Ramirez, P. J., Jingguang G. C., Rodriguez, J. A., Liu, P., "Active sites for CO₂ hydrogenation to methanol on Cu/ZnO catalysts", *Science*, Cilt 355, Sayı 6331, s. 1296-1299, 2017.
- <https://phys.org/news/2017-03-chemists-id-catalytic-key-co2.html>
- <http://www.essentialchemicalindustry.org/chemicals/methanol.html>

