

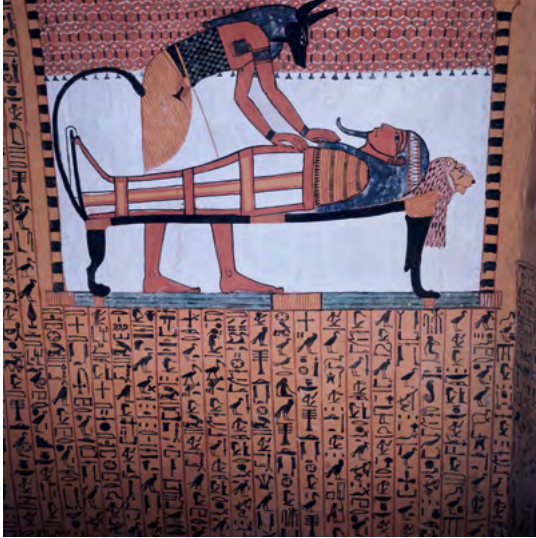
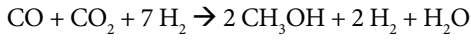
Bilgisayarda Tasarla, Laboratuvarı Hazırla

Özellikle yaz aylarında, kaçak içki tükettikleri için kör olan veya yaşamını yitiren kişilerle ilgili haberlere sıkça rastlıyoruz. Bu vakalara alkolü içkilerin temel maddesi olan etanol (etil alkol) yerine daha ucuz olduğu için tercih edilen metanol (metil alkol) neden oluyor. Stanford Üniversitesi, Stanford Doğrusal Hızlandırıcı Merkezi (SLAC) ve Danimarka Teknik Üniversitesi'nden araştırmacıların gerçekleştirdiği, Mart ayında *Nature Chemistry*'de yayımlanan bir çalışmada daha düşük maliyetle ve daha temiz şartlarda metanol üretilmesini sağlayacak bir katalizörün keşfinden bahsediliyor. Bilim adamlarının bu çalışmayı yapma nedeni elbette kaçak içki üretenleri desteklemek değil.

Araştırmanın ayrıntılarına girmeden önce metanol nedir, nasıl üretilir, ne işe yarar kısaca bir ona bakalım.

Binlerce Yıldır Kullanılıyor

Molekül formülü CH_3OH olan metanol renksiz, uçucu, kolayca alev alabilen ve zehirli bir maddedir. Metanol o derece zehirli ki 10 ml'si körlüğe, 30 ml'si ise ölüme neden olabiliyor. Yüzyıllar boyunca odunun piroliziyle -yani oksijensiz veya çok az oksijen bulunan ortamda ısıtılmasıyla- elde edilmiş. Günümüzde ise fabrikalarda karbonmonoksit, karbon dioksit ve hidrojenin uygun şartlarda tepkimeye girmesiyle sentezleniyor.



Metanol eski mısırlılar tarafından mumyalama işlemlerinde kullanılmış.

Eski Mısırlılar pirolizle elde ettikleri metanolü başka maddelerle karıştırıp mumyalama işlemlerinde kullanmış. Ancak insanoğlu yüzlerce yıl metanolü saf olarak elde edememiş. Saf metanol eldesi pek çok kişi tarafından ilk modern kimyager kabul edilen Robert Boyle tarafından 1661'de gerçekleştirilmiş. Boyle, bunu şimşiri damıtarak başarmış. 1834 yılında Fransız kimyagerler Jean-Baptiste Dumas ve Eugene Peliot metanolün hangi elementlerden meydana geldiğini tespit etmiş.

Devasa Kullanım

Tek karbonlu olduğu için en basit alkol olarak da nitelendirilen metanolün dünya genelindeki üretimi yıllık 65 milyon ton. Aslında tek başına bu devasa miktar bile onun endüstri için ne kadar önemli olduğunu ve daha ucuza üretilmesinin ne denli büyük bir ses getireceğini fazlasıyla anlatıyor. Metanol en çok başka kimyasal maddelerin eldesinde ham madde olarak kullanılıyor. Örneğin bir yılda üreti-

len metanolün %40'ı plastik eldesinde de kullanılan formaldehitin üretimi için harcanıyor. Ayrıca boyaların, pek çok polimerin, patlayıcıların, yapıştırıcıların üretiminde de metanol rol oynuyor. Metanolden dünyanın farklı bölgelerinde doğrudan yakıt veya dolaylı olarak biyodizel eldesinde de faydalanılıyor. Metanolden elde edilen dimetil eter, spreylerde kloroflorokarbonlar yerine itici gaz olarak veya LPG'yle karıştırılarak ısınma ve pişirme için kullanılıyor. Donma noktası -98°C gibi hayli düşük bir sıcaklık olduğundan antifriz üretiminde de çokça tercih ediliyor. Kampçılıkla ilgisi olan okurlarımız da kamp sobalarında metanol kullanıldığını biliyordur.



Kamp sobası

Metanolün kullanıldığı daha pek çok alan var. Sadece metanolün hangi işlerde kullanıldığı bile başlı başına uzun bir yazı konusu olabilecek kadar kapsamlı.



Metanol biyodizel üretiminde de kullanılıyor.

Küresel Isınmaya Çare Olabilir mi?

Bu denli önemli kullanım alanları olan bir madenin hızlı ve ucuz sentezlenebilmesi için pek çok çalışma yapılıyor. Yazının girişinde bahsettiğimiz araştırmayı gerçekleştiren ekipten Felix Studt, metanolün büyük fabrikalarda yüksek basınçlı ortamlarda doğalgazdan elde edilen hidrojen, karbondioksit ve karbonmonoksit kullanılarak üretildiğini, kendilerinin ise düşük basınçta çevreye zarar vermeyen kaynaklardan metanol elde etmeye çalıştıklarını söylüyor.

Ekipten bir diğer araştırmacı Jens Nørskov da “suyun güneş ışığıyla parçalanması ile elde edilebilecek hidrojenle, enerji santrallerinden veya fabrika bacalarından çıkan karbondioksitin kullanılmasıyla metanol elde ettiğinizi bir düşünsenize” diyor. Gerçekten de bu başarılabilirse hem çevre kirliliğini azaltan hem de çok daha düşük maliyetli bir yöntem hayata geçmiş olacak. Nørskov ayrıca tek karbonlu bir alkol olan metanole ek olarak iki karbonlu bir alkol olan etanol (C_2H_5OH) ve üç karbonlu bir alkol olan propanol de (C_3H_7OH) sentezlemeye çalıştıklarını söylüyor. Etanol ve propanol metanolden farklı olarak yakıtlara doğrudan eklenebildiği için böyle bir üretimle çok önemli miktarda enerji kaynağı sağlanmış olacak.



Dünya genelinde her yıl 65 milyon ton metanol üretiliyor.

Bilgisayarların Gücü

Çalışmanın dikkat çekici yönlerinden biri de harcanan zamanın büyük bir kısmının bilgisayar ortamında gerçekleşmesi. Günümüzde metanolün endüstriyel üretiminde önce doğalgaz ve su, sentez gazı denilen karbonmonoksit, karbondioksit ve hidrojene dönüştürülüyor. Daha sonra bakır, çinko ve alüminyumdan ($Cu/ZnO/Al_2O_3$) oluşan bir katalizör eşliğinde ve yüksek basınçta (50-100 bar) sentez gazından metanol elde ediliyor. Araştırmacılar önce metanolün endüstriyel sentez sürecinin nasıl gerçekleştiğini anlamak ve $Cu/ZnO/Al_2O_3$ katalizörün üzerindeki aktif bölgeleri -yani tepkimenin gerçekleştiği yerleri- belirlemek için yaklaşık üç yıl çalışmış. Metanol sentezinin moleküler seviyede nasıl gerçekleştiği anlaşıldıktan sonra hidrojen ve karbondioksit kullanarak düşük basınçta metanol sentezleyebilecek bir katalizörün keşfine odaklanılmış. Bu kısımda da laboratuvar ortamında denemeler yapmaktansa hesaplamalı malzeme tasarımı denilen bir teknikle SLAC'taki veri tabanından faydalanılmış. $Cu/ZnO/Al_2O_3$ katalizörle veri tabanındaki binlerce malzeme karşılaştırıldığında nikel-galyumdan (Ni_3Ga_3) oluşan bileşiğin en ümit verici aday olduğu ortaya çıkmış.



Bilgisayar teknolojisi sayesinde kimyagerler artık ihtiyaç duydukları özellikte pek çok maddeyi laboratuvarla sentezlemeden önce bilgisayarla yapılan hesaplarla keşfediyor.



Daha sonra Danimarka Teknik Üniversitesi'nde nikel ve galyumdan oluşan bu bileşik sentezlenmiş ve bileşiğin gerçekten de oda basıncında (1 atmosfer) metanol üretilip üretilmediği test edilmiş. Deney sonuçları bilgisayarlar ile yapılan hesapları doğrulamış, çünkü yeni katalizör hem oda sıcaklığında metanol sentezlenmesini gerçekleştirmiş hem de daha yük-

sek sıcaklıklarda $\text{Cu/ZnO/Al}_2\text{O}_3$ katalizörden daha çok metanol üretmiş. Mevcut $\text{Cu/ZnO/Al}_2\text{O}_3$ katalizör kullanılırken düşük basınçta yan ürün olarak ortaya çıkan karbonmonoksit, metanol üretimini belirgin derecede azaltırken yeni katalizör kullanılarak yapılan sentezlerde bu durum gözlenmemiş. Ayrıca testler Ni-Ga katalizörün kararlı yapıda olduğunu yani bozunmadığını da göstermiş. Bu başarılarla rağmen hâlâ aşılması gereken sorunlar var. Örneğin katalizör çok az miktarda bile saf nikel içerirse elde edilen ürün miktarı belirgin olarak düşüyor ve istenmeyen yan ürünler oluşuyor.

Ekibin gerçekleştirdiği çalışma daha sağlıklı bir dünya için önem taşımasının yanı sıra bilgisayarların bilime yardımcı olma konusunda ne kadar geliştiğini de gösteriyor. 2013 yılı Kimya Nobel Ödülü'nün de hesaplamalı kimya ile uğraşan bilim insanlarına verildiğini hatırlatalım. Belki yakın gelecekte veri tabanında en sevdiğiniz yemek tariflerini bulunduran bilgisayarınıza dolabınızda hangi malzemelerin olduğunu girdiğinizde birkaç saniye geçmeden size en seveceğiniz yemek tarifini sunacak. Kim bilir?

Kaynaklar

- Studt, F., ve ark., "Discovery of a Ni-Ga catalyst for carbon dioxide reduction to methanol", *Nature Chemistry*, Cilt 6, Sayı 4, s. 320-324, 2014.
- <http://news.stanford.edu/news/2014/march/methanol-new-catalyst-030214.html>
- <http://www.methanol.org/>



Donma sıcaklığı -98°C olan metanol otomobillerde ve pek çok makinede antifriz olarak kullanılıyor.