效率提高8倍！使用量子计算来发现超级催化剂

多伦多大学工程学院和富士通研究公司的科研人员开发了一种通过“化学空间（chemical space）”搜索具有理想性能的材料的新方法。这项技术产生了一种有前途的新型催化剂材料，可以帮助降低清洁制氢的成本。

这一发现代表着朝着更可持续的能源储存方式迈出了重要一步，包括可再生但间歇性的能源，如太阳能和风能。

“扩大我们所谓的绿色氢的生产是世界各地研究人员的优先事项，因为它提供了一种无碳的方式来存储来自任何来源的电力，”Ted Sargent教授说，他是一篇发表在Matter上的新论文的高级作者。

“这项工作为克服一个关键挑战的新方法提供了概念证明，这个挑战是缺乏高活性催化剂材料来加速关键反应。”

如今，几乎所有的商用氢都是从天然气中生产的。这个过程会产生二氧化碳作为副产品：如果二氧化碳被排放到大气中，这个产品被称为“灰色氢”，但如果二氧化碳被捕获并储存起来，它就被称为“蓝色氢”。

相比之下，“绿色氢气”是一种无碳方法，它使用一种被称为电解槽的设备将水分解成氢气和氧气。氢气稍后可以燃烧或在燃料电池中反应以再生电力。然而，现有的电解槽效率很低，这意味着水分解步骤中的大部分能量都作为热量浪费了，而不是被氢捕获。

世界各地的研究人员都在竞相寻找更好的催化剂材料，以提高这种效率。但是，由于每种潜在的催化剂材料都可以由几种不同的化学元素以各种方式组合而成，因此，可能的排列的数量很快就会变得无以计数。

“一种方法是通过人类的直觉，通过研究其他团队制造的材料并尝试类似的东西，但这相当缓慢，”MSE博士候选人Jehad Abed说，他是这篇新论文的两位联合主要作者之一。

“另一种方法是使用计算机模型来模拟我们可能尝试的所有潜在材料的化学性质，从基本原理开始。但在这种情况下，计算会变得异常复杂，运行模型需要十分巨大的算力。”

为了找到解决办法，该团队转向了量子计算这一新兴领域。他们使用了数字退火器(Digital Annealer)，这是多伦多大学和富士通研究公司长期合作的结果。这种合作还促成了多伦多大学与富士通共同创造研究实验室的建立。

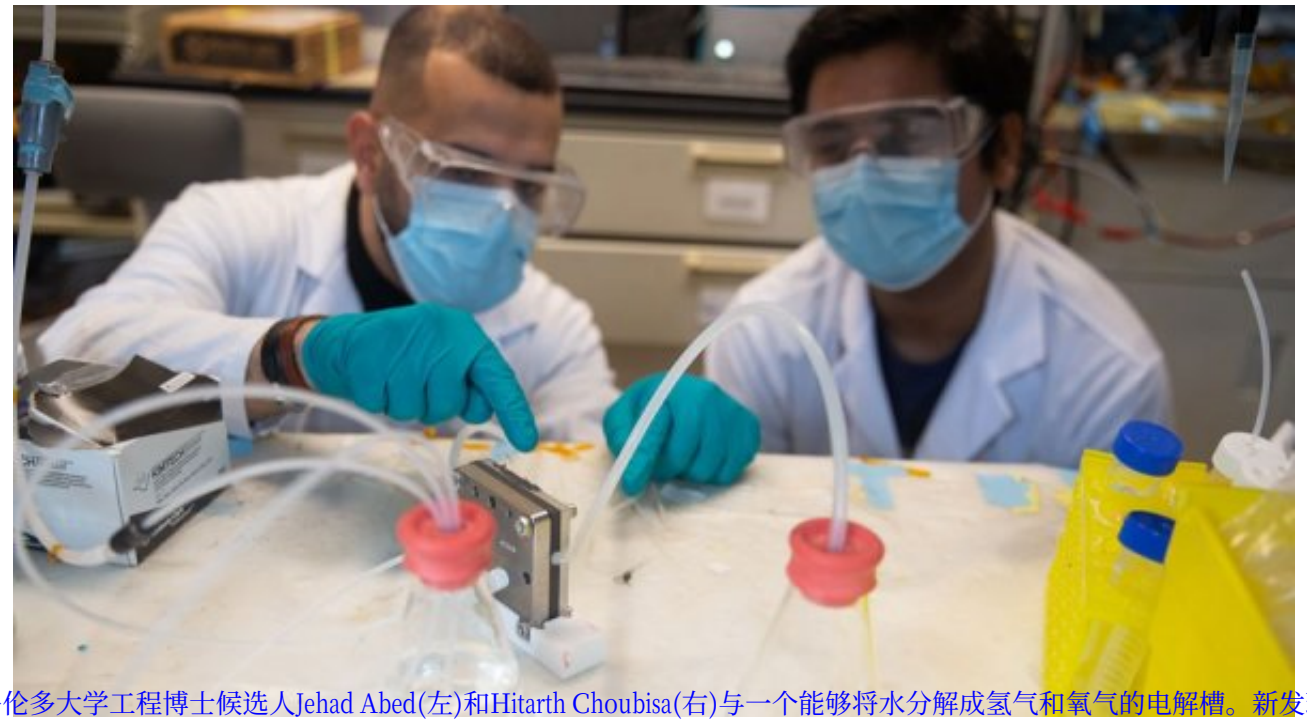
富士通咨询(加拿大)公司高级研究员Hidetoshi Matsumura说：“数字退火器是一种独特的硬件和软件的混合体，旨在高效地解决组合优化问题。”

这些问题包括在交通网络的多个地点之间找到最有效的路线，或者选择一组股票来组成一个平衡的投资组合。另一个例子是，在不同的化学元素组合中寻找具有理想性能的催化剂，这对我们的数字退火器来说是一个完美的挑战。”

在这篇论文中，研究人员使用了一种称为簇展开的技术来分析大量潜在的催化剂材料设计——他们估计总数为几万亿数量级。从另一个角度来看，一千万亿大约是3200万年所经过的秒数。

研究结果指向了一个由钌、铬、锰、锑和氧组成的有前途的材料家族，这是其他研究小组以前没有探索过的。

该团队合成了几种这样的化合物，并发现其中最好的组合表现出了质量活性(每单位质量催化剂可以产生催化反应数量的衡量标准)，大约比目前可用的一些最好的催化剂高8倍。



多伦多大学工程博士候选人Jehad Abed(左)和Hitarth Choubisa(右)与一个能够将水分解成氢气和氧气的电解槽。新发现的催化剂可以提高这个反应的效率。(图片来源：Tyler Irving)

这种新型催化剂还有其他优点：它在酸性条件下运行良好，这是目前最先进的电解槽设计的要求。当前，这些电解槽依赖于主要由铱制成的催化剂，铱是一种稀有元素，获取成本很高。相比之下，新型催化剂的主要成分钌含量更丰富，市场价格更低。

该团队还有更多的工作要做：例如，他们的目标是进一步优化新催化剂的稳定性，然后才能在电解槽中进行测试。尽管如此，最新的工作证明了寻找化学空间的新方法行之有效。

“我认为这个项目令人兴奋的地方在于，它展示了如何通过结合不同领域的专业知识来解决真正复杂而重要的问题，”该论文的另一位联合主要作者、欧洲经委会博士候选人Hitarth Choubisa说道。

（素材来自：多伦多大学/富士通研究公司 全球氢能网、新能源网综合）

原文地址：http://www.china-nengyuan.com/tech/189804.html