

Center for High Entropy Alloy Catalysis' højdepunkter fra 2022:

Danmarks Grundforskningsfond tilbyder, ny-etablerede Grundforskningscentre, den fantastiske mulighed at organisere og afholde en konference inden for centrets forskningsområde, via en tillægsbevilling. Vi havde fornøjelsen og var værter for en DG-konference 'High Entropy Electrocatalysis' i maj 2022 på Bella Sky Conference & Event. Der var 80 deltagere fra rundtomkring i Europa. Det var lige efter pandemien, og vores forskningsfelt er meget ungt, så det var første gang, for mange af deltagerne, at de mødte hinanden i den virkelige verden. Det galt både de unge, men også de mere modne forskere. Selv folk vi arbejder tæt sammen med og har flere fælles artikler med, så vi for første gang i virkeligheden. Der er ikke noget, der helt kan erstatte det at mødes rigtigt. Der var mange inspirerende foredrag fra førende forskere på alle karriere-trin, professorer, postdocs og PhD-studerende. Vores 'egne' yngre forskere repræsenterede forskningen fra CHEAC, både med foredrag og ved vores postersession. Postdoc Andrea Kirsch fra KU vandt prisen "Bedste poster".

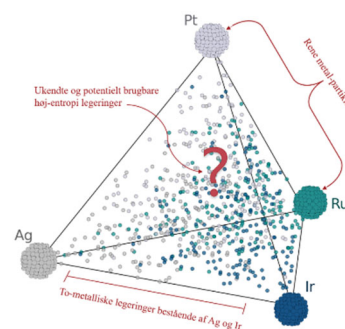


Foto: Jens-Christian Navarro Poulsen

Forskning:

Tænk på en legering bestående af fire elementer, og forestil jer det rum, der repræsenterer alle de mulige blandingsforhold, se figuren.

Hjørnerne er de rene elementer, kanterne er de binære legeringer, fladerne er legeringer af tre forskellige elementer og i midten er de legeringer, der indeholder alle fire elementer. Hvis man tilføjer et femte element bliver rummet 4-dimensionelt. Vores opgave er at udforske dette rum og finde de blandingsforhold, der giver det bedste katalysatormateriale. Man bliver nødt til at have en strategi for, hvordan man vil udforske dette rum og finde de mest interessante områder. Et givent punkt i dette rum, svarer til en måling af aktiviteten for ét specifikt blandingsforhold. I 2021 udviklede vi en søgemetode baseret på Bayesian optimering og simuleringer. Konklusionen var, at man skal have målinger i ca. 50 punkter for at have afsøgt et rum, bestående af fem forskellige elementer.



Figur af Christian M. Clausen

I 2022 gjorde vi det eksperimentelt. Det viser sig, at man kan bruge relativt få punkter til at forstå hele rummet. Dette arbejde er det første, hvor vi kan sammenligne eksperimenter og teori, hvor alt arbejdet er udført i CHEAC. [Exploring the Composition Space of High-Entropy Alloy Nanoparticles for the Electrocatalytic H₂/CO Oxidation with Bayesian Optimization, VA Mints, JK Pedersen, A Bagger, J Quinson, AS Anker, KMØ Jensen, J Rossmeisl, M Arenz, ACS Catalysis 12 (18), 11263-11271, 2022]