

Center for High Entropy Alloy Catalysis' højdepunkter fra 2023

Sommerskole:

Mange forskere betragter sommerskoler som et af årets højdepunkter. Ved sommerskoler er præsentationerne ofte længere, mere inspirerende og mere lærerige sammenlignet med dem på konferencer. Afholdelsesstederne er ofte skønne, afsides beliggende steder, svære at komme til og fra. Derfor har de studerende mulighed for at møde forskere, der deler den samme passion og tale med nogle af de "videnskabelige rockstjerner" for at opdage, at de kan være ganske tilgængelige.

Vi var værter for en fire-dages sommerskole om Høj-Entropi Materialer i august 2023 på Metalskolen i Jørlunde. Der var ca. 65 deltagere fra forskellige lande. Programmet startede med en inspirerende hovedtale af Brian Cantor, der er en af pionererne inden for Høj-Entropi Legeringer. Der var foredrag fra både erfarne og nye forskere fra USA, Indien og Europa, så det var ligesom en sommerskole bør være. Vores håb er, at denne begivenhed bliver et godt minde for deltagerne, ligesom det har været for os.



Forskning:

The more the better: on the formation of single-phase high entropy alloy nanoparticles as catalysts for the oxygen reduction reaction

Rebecca K. Pittkowski, Christian M. Clausen, Qinyi Chen, Dragos Stoian, Wouter van Beek, Jan Bucher, Rahel L. Welten, Nicolas Schlegel, Jette K. Mathiesen, Tobias M. Nielsen, Jia Du, Asger W. Rosenkranz, Espen D. Bøjesen, Jan Rossmeisl, Kirsten M. Ø. Jensen and Matthias Arenz. EES. Catal., 2023, 1, 950-960.

Dette arbejde er et eksempel på et betydeligt samarbejde i CHEAC, der integrerer syntese og karakterisering – både diffraktion og mikroskopi – og simuleringer for at klarlægge dannelsen for HEA nanopartikler. Konventionelle metoder til fremstilling af MEA materialer involverer typisk høje temperaturer og kontrolleret nedkøling, hvilket ofte resulterer i partikler, som er for store til effektiv katalyse. I dette arbejde har vi udforsket lav-temperatur-syntese strategier til legering med fem forskellige ædelmetaller. Ved brug af avanceret diffraktion- og mikroskopiteknikker, har vi bekræftet opblandingen af elementerne i nanopartiklerne. Vores fund afslører at tilfældige begivenheder spiller en afgørende rolle i denne proces, hvilket viser at systemer med et større antal atomtyper og begrænset atommobilitet under syntesen, er mere disponerede for at danne tilfældige legeringer. Studiet understreger betydningen af at forstå dannelsesmekanismer for at udvikle lavtemperaturmetoder til syntetisering af små HEA nanopartikler.

A Flexible Theory for Catalysis: Learning Alkaline Oxygen Reduction on Complex Solid Solutions within the Ag-Pd-Pt-Ru Composition Space.

Christian M Clausen, Olga A Krysiak, Lars Banko, Jack K Pedersen, Wolfgang Schuhmann, Alfred Ludwig, Jan Rossmeisl, Angewandte Chemie International Edition 62 (39), e202307187.

Dette samarbejde involverede to forskergrupper i Bochum, som vi har opdyrket et produktivt samarbejde med gennem de sidste 4-5 år. Det primære formål med denne artikel var at 'lære' en teoretisk model for en reaktion direkte fra eksperimentelle data. Vi kunne opnå dette ved at sammenligne high-throughput eksperimenter med beregninger. Vores resultater viser, at den teoretiske model, vi tidligere har udviklet til reaktionen (ORR), skiller sig ud som en af de mest bedste modeller til at repræsentere dataene. Derudover tyder vores sammenligning på, at den målte sammensætning af HEA-filmen ikke altid stemmer overens med den sammensætning, der ville give den bedste sammenligning mellem teori og eksperimenter. Dvs. først bruger vi eksperimenter til at lære en teoretisk model og derefter bruger vi modellen til at få nye informationer om den sammensætning der rent faktisk er i eksperimenterne.