

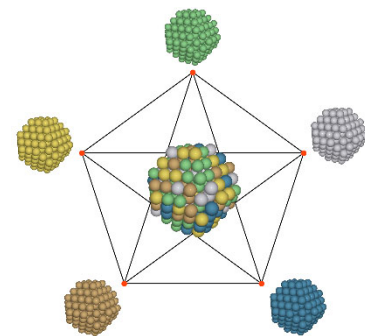
Center for High Entropy Alloy Catalysis' højdepunkter i 2021:

Katalyse er nøglen til udvikling af, og overgang til grøn kemi og produktion af bæredygtige kemikalier og brændstoffer. Denne overgang kræver nye katalysatorer, da centrale kemiske reaktioner ikke kan katalyseres med de eksisterende materialer. Udfordringen er at opdage nye katalytiske materialer, som er både stabile og aktive. Basal set er der uendeligt mange High Entropy Alloy (HEA) materialer, som endnu ikke er opdaget. Det er dog nødvendigt at vi udvikler intelligente måder at afsøge HEA materialerummet på og identificere de interessante materialer blandt alle de øvrige.

[What Makes High-Entropy Alloys Exceptional Electrocatalysts?, *Angewandte Chemie*, 2021 - <https://doi.org/10.1002/anie.202109212>]

Forestil dig en legering bestående af fem forskellige elementer; opdeling af denne legering i 5% fraktioner vil aflede over 10.000 forskellige, mulige sammensætninger (kompositioner). Dette antal af kompositioner er praktisk talt umuligt at teste med eksperimenter, og vi har derfor udviklet en søge-algoritme til hurtig afsøgning af HEA materialerummet, for at finde de mest lovende katalysatorer.

Algoritmen foreslår en prøve til en ny komposition, baseret på dataene fra de tidligere prøver, og med det nye resultat opdaterer algoritmen sin forståelse af rummet og foreslår nye kompositioner til test. Vi har fundet, at med kun 50 prøve-kompositioner, har algoritmen identificeret de mest aktive kompositioner. Aktiviteten af de 50 kompositioner er baseret på simuleringer, men vi har testet de mest lovende legeringer eksperimentelt og fået bekræftet, at deres aktivitet faktisk er højere end de rene metaller's aktivitet. Nogle af disse materialekompositioner har tidligere været foreslået i litteraturen, andre har ikke.



Figur: En illustration af et 4D kompositionsrum for en legering bestående af fem forskellige elementer. HEA'en i midten er endnu ikke blevet undersøgt, hvilket betyder der er et enormt uudnyttet rum til opdagelse af nye katalytiske materialer.

[Bayesian Optimazation of High-Entropy Alloy Compositions for Electrocatalytic Oxygen Reduction, *Angewandte Chemie*, 2021 - <https://doi.org/10.1002/anie.202108116>]

Dette giver os en forhåbning om, at vi i fremtiden, med et begrænset antal rigtige eksperimenter, kan afsøge et HEA kompositionsrummet og opdage nye interessante materiale-kandidater.

Vi er begyndt at sammenligne teori (simuleringer) og eksperimenter af katalysen på HEA overflader. Tidligere har der ikke været studier, som kombinerer simuleringer og eksperimenter. Vores eksterne samarbejdspartnere kan lave materialer, hvor materiale sammensætningen (kompositionen) gradvist ændrer sig over en plade. Pladen er fremstillet af fem metalkilder, og kompositionen i et givet punkt afhænger af afstanden til kilderne. Parallelt bliver pladens katalytiske aktivitet screenet via en high-throughput metode, således at de mange forskellige kompositioner kan sammenlignes med vores simuleringer. Kombinationen af parallel screening og simuleringer er ideel for forståelsen af tendenser, og kan dermed afsløre forholdet mellem metalkomposition og katalytisk aktivitet.

[Complex-Solid-Solution Electrocatalyst Discovery by Computational Prediction and High-Throughput Experimentation, *Angewandte Chemie*, 2021 - <https://doi.org/10.1002/anie.202014374>].

Selv med alle disse eksperimenter er kun en lille brøkdel af alle kompositioner testet, derfor behøver vi simuleringer for at afsøge alle muligheder, og for at forstå hvor vi skal lede efter nye katalysatorer til produktionen af bæredygtige kemikalier.