

Modellera väteabsorption i en legering

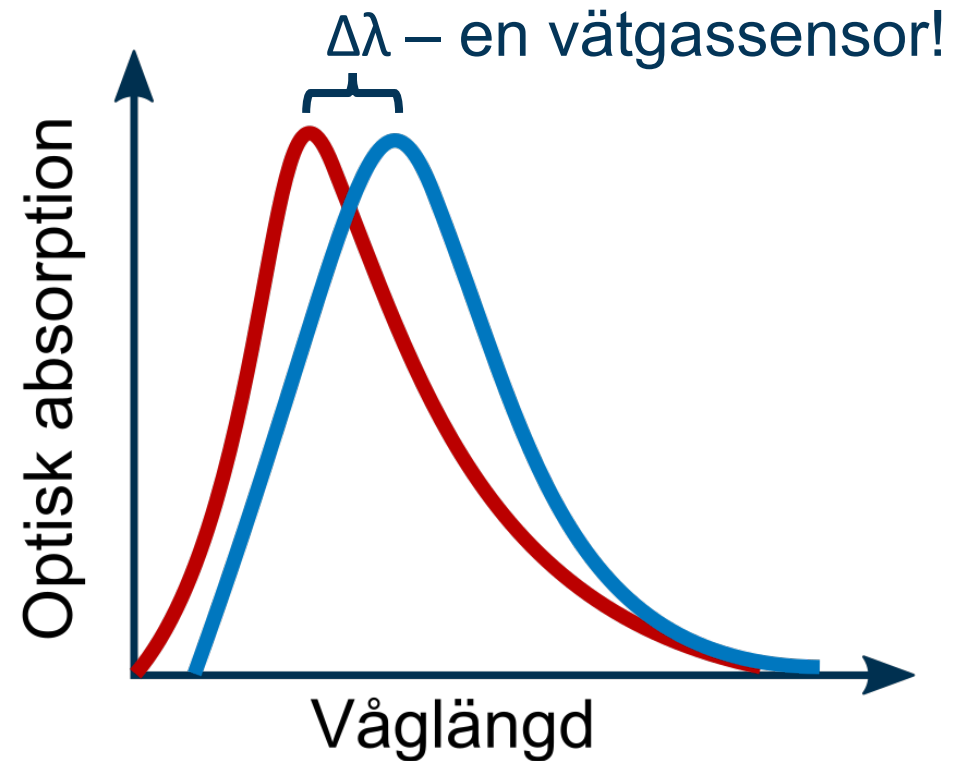
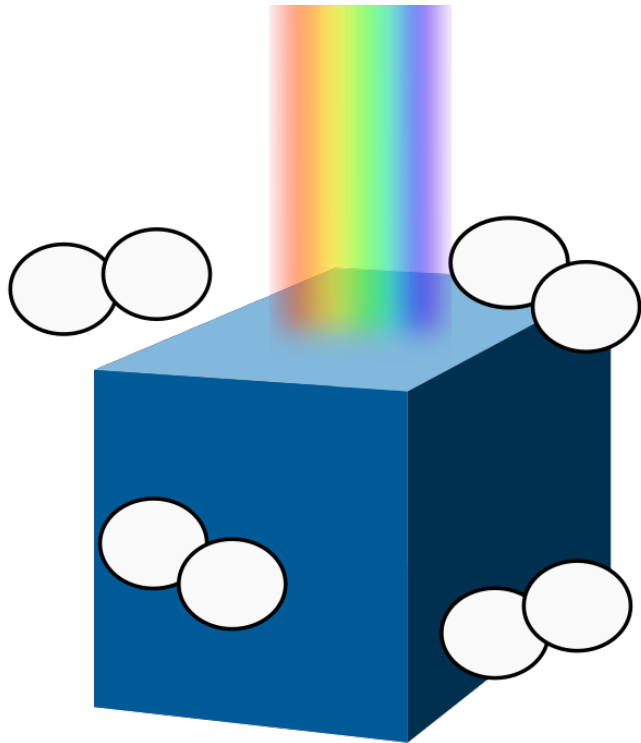
Magnus Rahm
Fysikdagarna 2022



CHALMERS

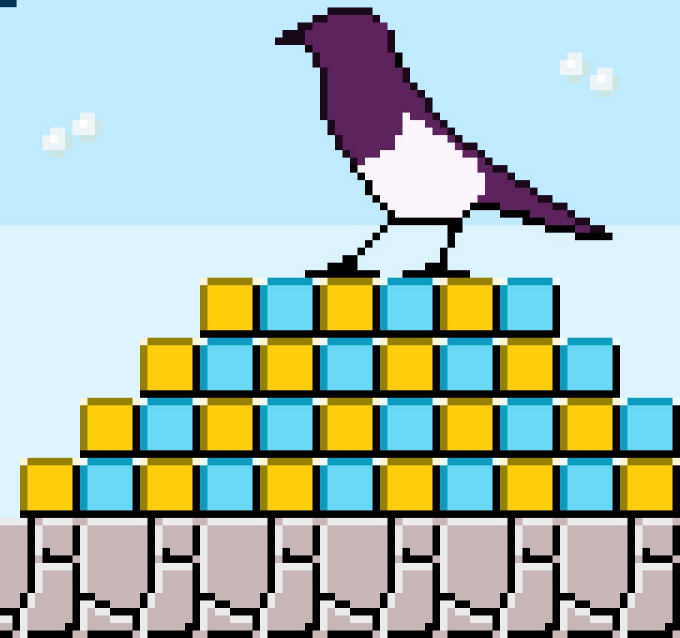


Den gemensamma nämnaren

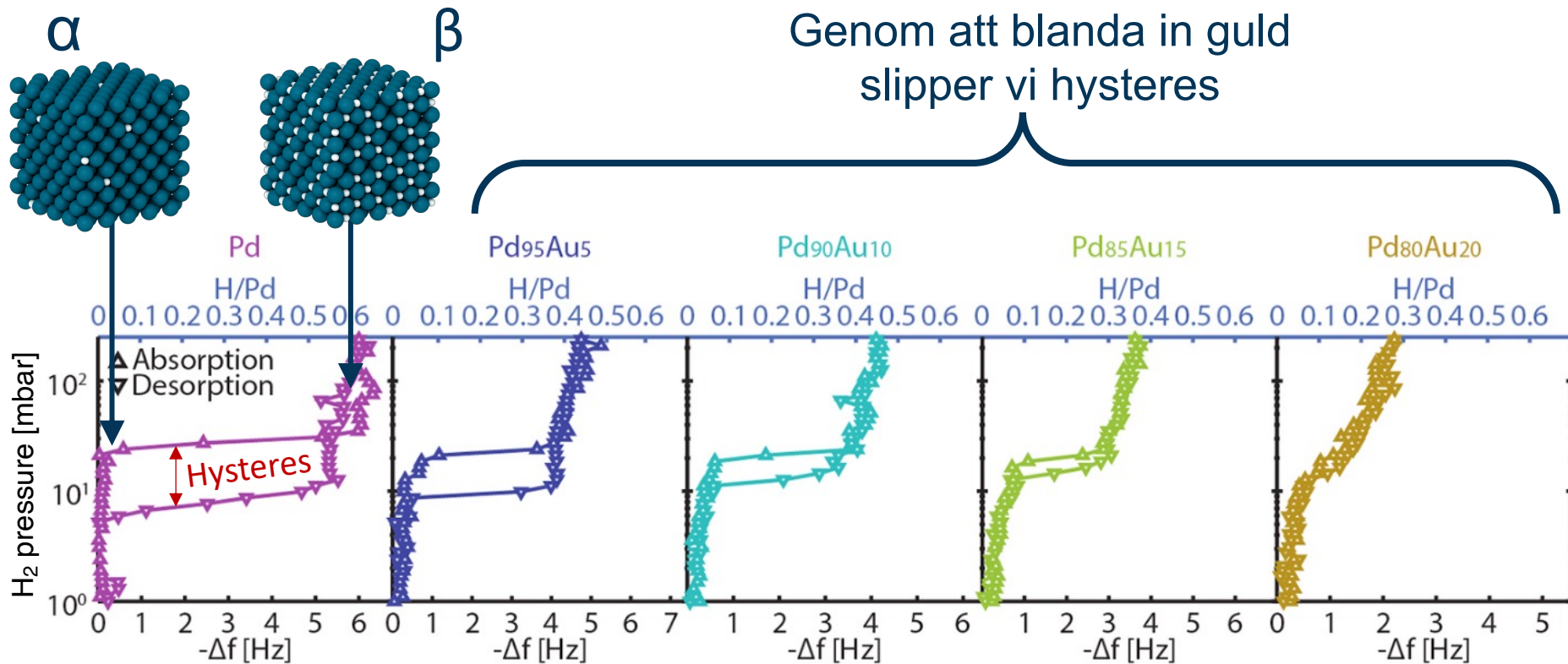


IDAG:

Termodynamiken för
väteabsorption i
legeringar av
Pd och Au

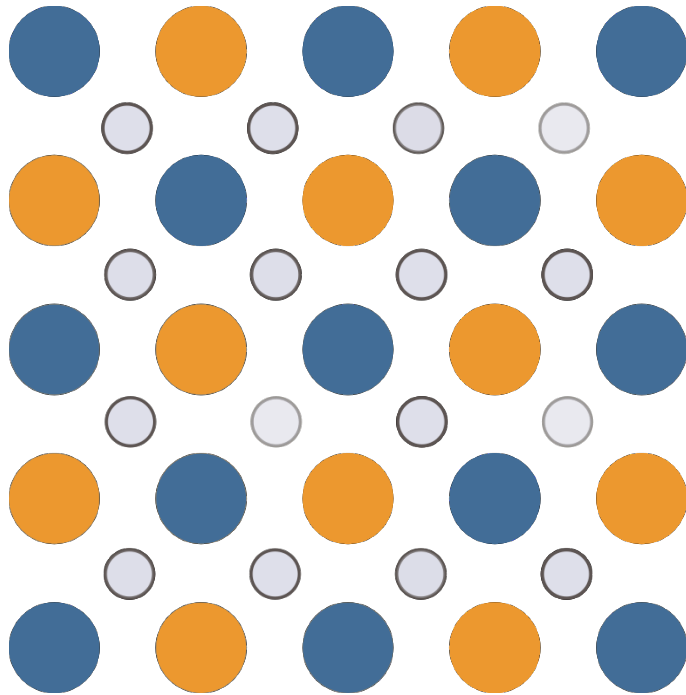


Väteabsorption och hysteres



Mätningar från Nugroho et al., *ACS Nano* **12**, 9903 (2018)

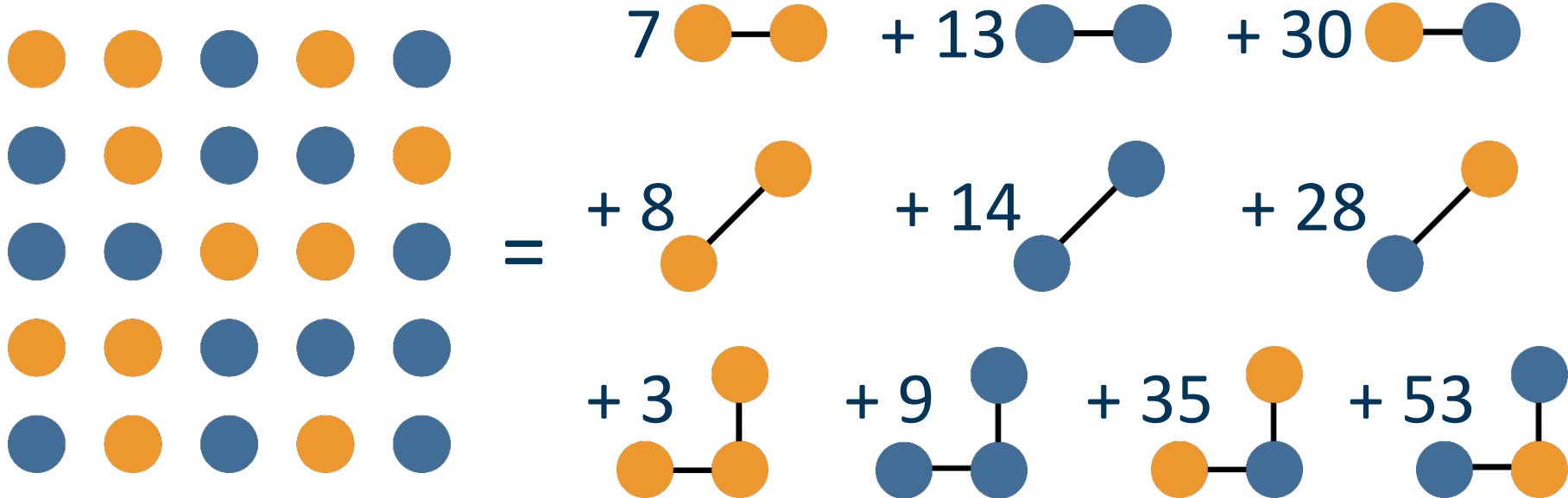
Krävs en snabb modell för legeringar



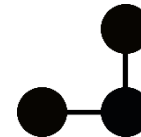
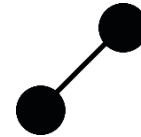
- Ordningen spelar roll!
- 2^N möjliga kombinationer
- Måste beräkna energin för $>100\,000$
- En DFT-beräkning tar timmar

→ **Behöver en snabbare modell!**

Modell: Klusterutveckling





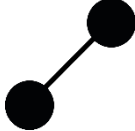
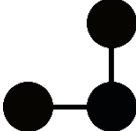





$= [1.0, 0.12, -0.2, -0.12, -0.12, \dots]$
Konstant (för att få en komplett bas) *Koncentration* *1:a par* *2:a par* *1:a triplett*



Modell: Klusterutveckling

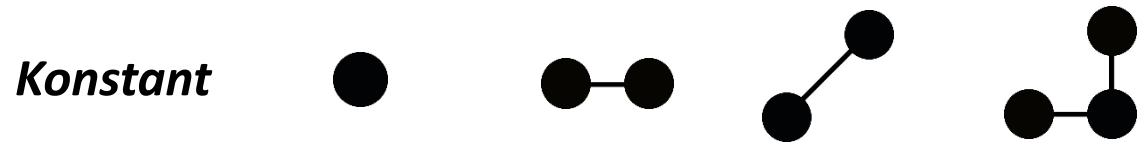


CHALMERS

	<i>Konstant</i>					J	<i>Energi (meV/atom) från DFT</i>
	1.00	0.12	-0.20	-0.12	-0.12	J_1	-35.1
	1.00	-0.60	0.60	0.20	-0.60	J_2	-60.8
	1.00	0.50	0.25	0.00	0.00	J_3	-23.2
	1.00	0.00	0.00	-0.33	0.00	J_4	-46.2
	1.00	0.60	0.52	0.44	0.44	J_5	-10.1

$=$

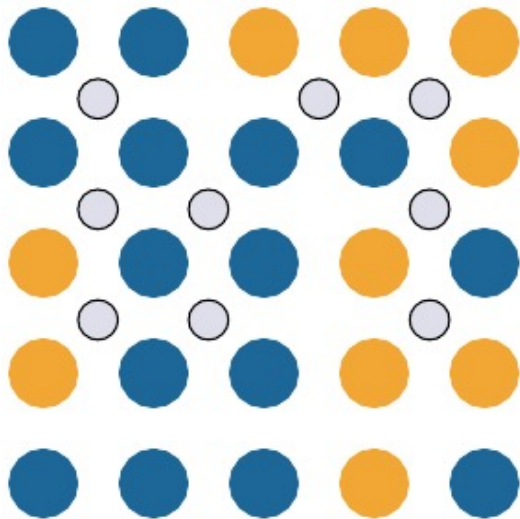
Lösning: $J^T = [-37.8, 34.1, -9.9, 25.4, 2.67]$



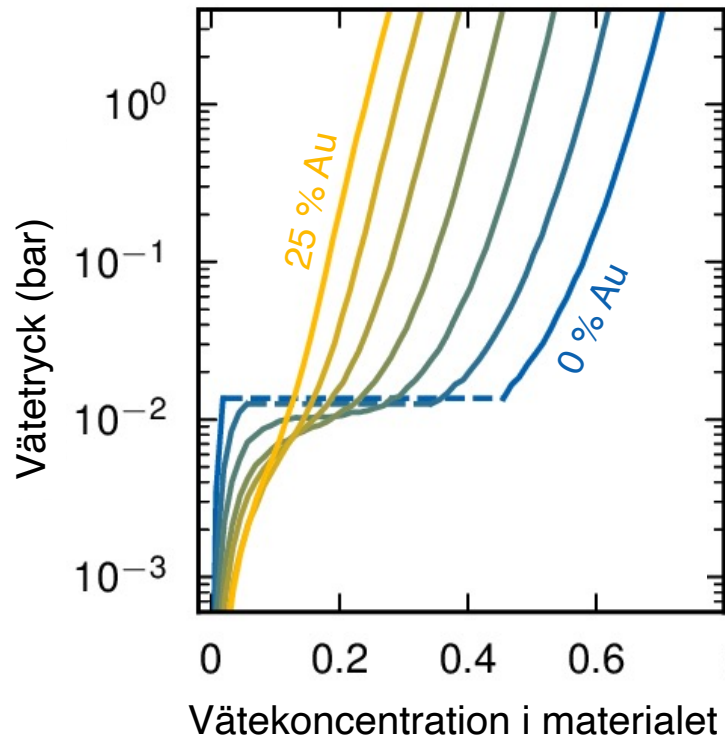
Simulera väteabsorption med Monte Carlo



CHALMERS

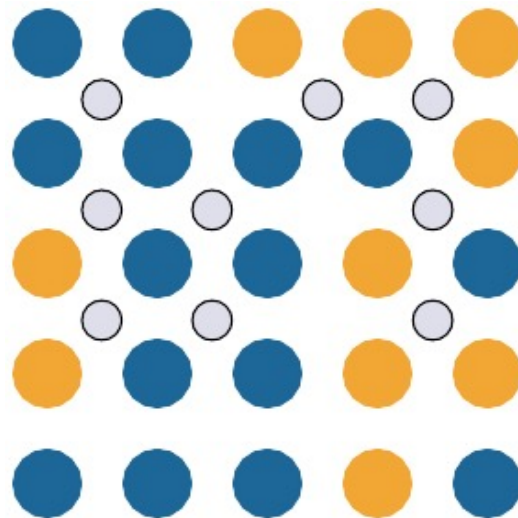


● Pd ● Au ○ H

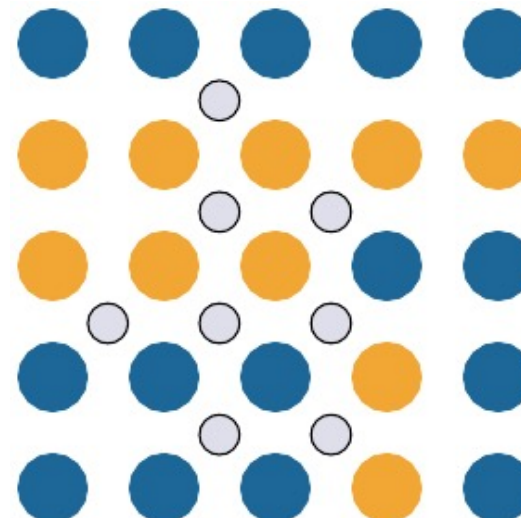


Jämvikt på olika tidsskalor

Para-jämvikt



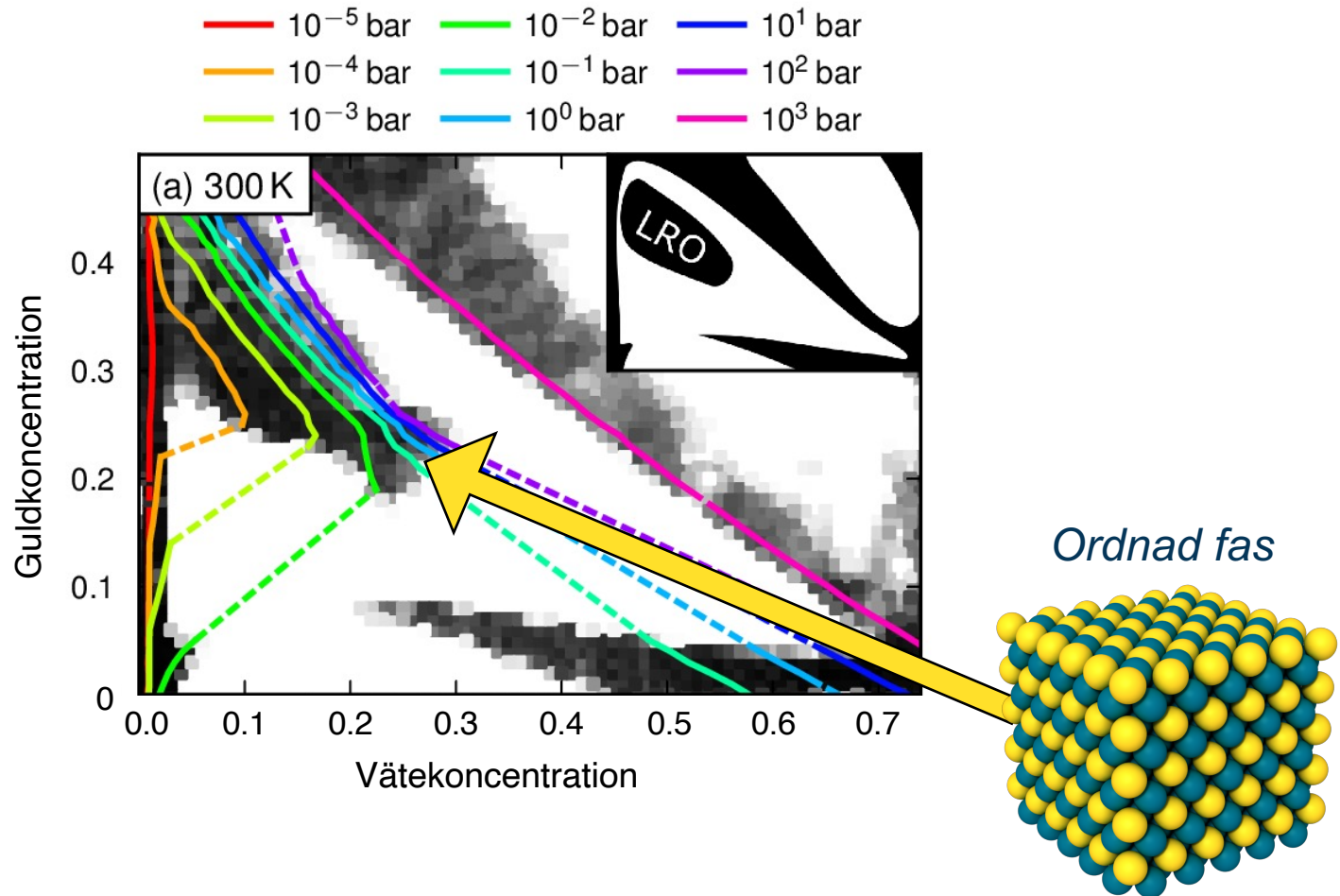
Fullständig jämvikt



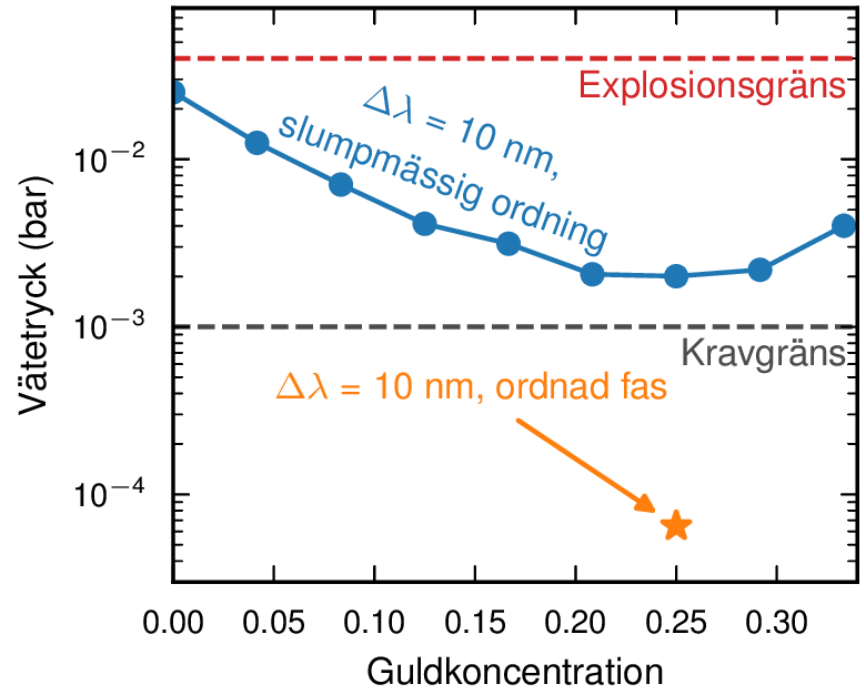
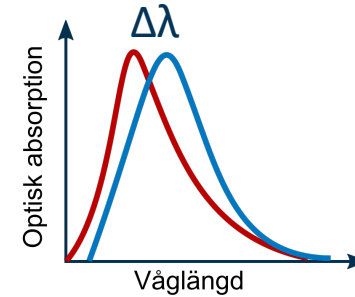
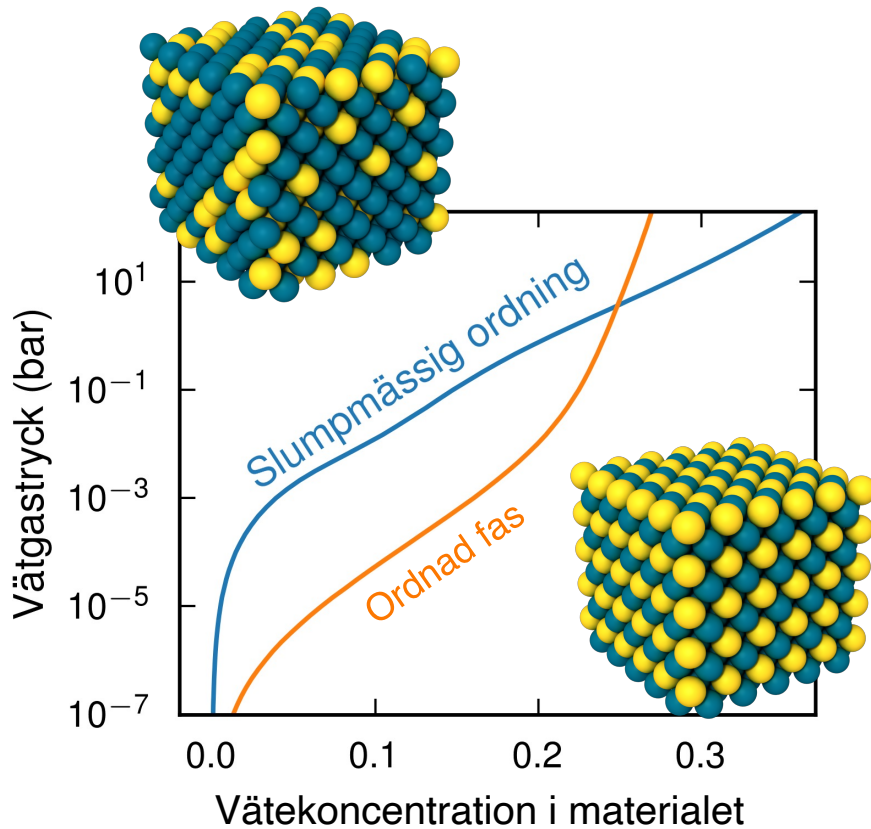
Fasdiagrammet i fullständig jämvikt



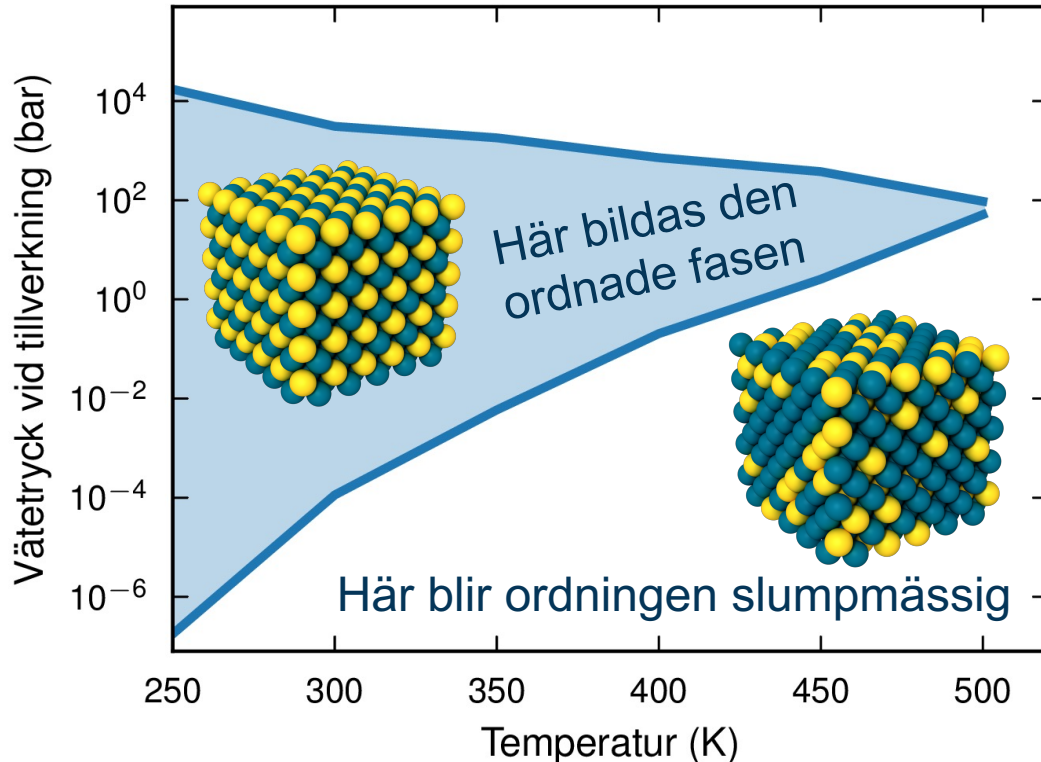
CHALMERS



Den ordnade fasen absorberar mer väte



Ett recept för den ordnade fasen



RECEPT

1. Förbered en sats med Pd-Au-nanopartiklar (25 % Au)
2. Sätt ugnen på 450 K
3. Fyll ugnen med 100 bar H_2
4. Sätt in nanopartiklarna i ugnen och vänta några timmar

Tack!



CHALMERS

- Paul Erhart (handledare)
- Göran Wahnström (examinator)
- Mattias Ångqvist, Erik Fransson,
- Joakim Löfgren, William Armando Muñoz, Pernilla Tanner och övriga medlemmar av Kondenserad materie- och materialteori
- Christoph Langhammer och övriga medlemmar av Plastic Plasmonics-projektet



SWEDISH FOUNDATION *for*
STRATEGIC RESEARCH



Swedish
Research
Council