

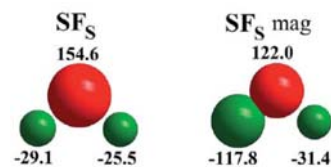
Center for Materialekrystallografi: Højdepunkter i 2015

CMC publicerede 99 artikler med peer-review i 2015, og ligesom i foregående år blev mange udgivet i internationale toptidsskrifter. CMCs langtidseffekt blev yderligere styrket med tildeling af 1 doktorgrad, 9 PhD grader og 22 kandidatgrader. Det samlede antal for 2010-2015 er hermed 626 publikationer, 3 doktor, 52 PhD og 87 kandidatgrader.

Udvalgte videnskabelige højdepunkter:

Indsigt I spin-polarisering via spintætheds-Sourcefunktionen

Indenfor avanceret materialeforskning er det essentielt at forstå overførsel af spin-information fra paramagnetiske til ikke-magnetiske centre. Et nyt værktøj er blevet udviklet til f.eks. at kvantificere atomare bidrag til spinpolarisering (Gatti *et al.*, *Chem. Sci.* **2015**, 6, 3845-3852).



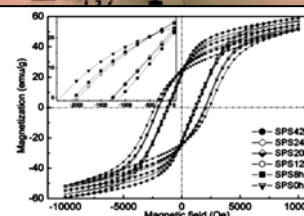
Instrumentel til *in situ* røntgendiffraction på højtryks-reaktioner

Nyt eksperimentelt udstyr designet specielt til *in situ* pulver-røntgendiffraction op til 1.000 bar er blevet udviklet. Reaktorerne kan udnyttes til en lang række formål indenfor adskillige forskningsområder (Hansen *et al.*, *J. Appl. Cryst.* **2015**, 48, 1234).



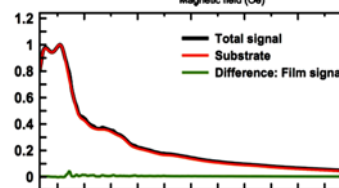
Stærk ordning af magnetiske SrFe₁₂O₁₉ nanopartikler via Spark Plasma Sintering

Spark plasma sintering har været udnyttet til at komprimere SrFe₁₂O₁₉ pulvere til kvasi-ekrystaller med en næsten perfekt orienteret c-akse, karakteriseret ved måling af magnetiske egenskaber og pol-figurer fra røntgendiffraction (Stingaciu *et al.*, *Sci. Rep.* **2015**, 5, 14112; Saura-Múzquiz *et al.*, *Nanoscale* **2016**, DOI: 10.1039/C5NR07854G).



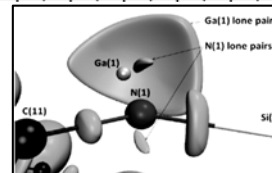
Første demonstration af PDF-analyse på tynd-film

Lokal atomar struktur er for første gang blevet bestemt i amorge og krystallinske tyndfilm via PDF-analyse. Gennembrudet skete ved anvendelse af transmissionsgeometri, der tillader analyse af selv meget svage intensiteter (Jensen *et al.*, *IUCR-J* **2015**, 2, 481-489; Bauers *et al.*, *J. Am. Chem. Soc.* **2015**, 137, 9652-9658).



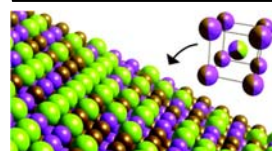
Kemisk binding og elektron-lokalisering i et Ga^I Amid kompleks

Elektrontætheden i et [GaIn(SiMe₃)R] kompleks er blevet bestemt via *ab initio* metoder og multipol-modellering af diffraktionsdata optaget ved 90 K. Elektrontæthedsanalyse antyder en invers binding med et elektron-donerende metal (Thomsen *et al.*, *Chem. Eur. J.* **2015**, 21, 14460-14470).



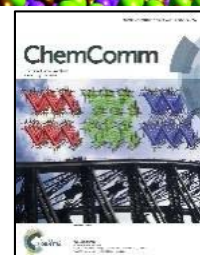
Højtryks-faseomlejring I ordnet og uordnet Bi₂Te₂Se

Højtryks-pulverdiffraktionsstudier af den topologiske isolator og termoelektriske materiale Bi₂Te₂Se afslørede en elektronisk overgang efterfulgt af to strukturelle omlejring, førende til en usædvanlig, uordnet legering (Nielsen *et al.*, *Dalton Trans.* **2015**, 44, 14077-14084).



En ny metode til at estimere kernetætheder fra røntgendata – NXMEM

En metode til at udlede kerne-vægtede MEM elektrontætheder fra røntgendata er blevet udviklet og testet på højeffektive termoelektrika der indeholder subtile grader af uorden. Den generelle metode er en meget betydelig forbedring af normal MEM-analyse (Christensen *et al.*, *Acta Crystallogr. Sect. A* **2015**, 71, 9-19).



Rationalisering af den mekaniske opførsel af molekulære krystaller på molekylniveau

Kombination af interaktions-energi fra modellering med nye grafiske repræsentationer af deres styrke – *energy frameworks* – adresserer interessante spørgsmål vedrørende den mekaniske opførsel af krystaller (Turner *et al.*, *Chem. Commun.* **2015**, 51, 3735).

DOSY-NMR anvendt til at undersøge opførslen af organometallisk aggregering

Lithium diisopropyl amid er en af de mest almindelige non-nukleofile Brønsted-baser i industrien, men stoffets aggregering i donorbase-frie solventer har været uklar. En ny DOSY-NMR metode kvantificerer aggregerings-opførslen i opløsningen (Neufeld *et al.*, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2015**, 54, 6994-6998).

