

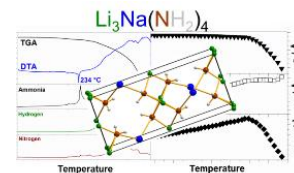
## Center for Materialekrystallografi: Højdepunkter i 2016

CMC publicerede 127 peer-review artikler i 2016 der dækkede både nye retninger og resultater fra lang tids forskning inden for nøgleområder. CMC har medført 12 PhD grader og 17 kandidatgrader, hvilket bringer summen for 2010-2016 op til 753 publikationer, 3 doktorgrader, 63 PhD and 94 kandidatgrader.

### Udvalgte videnskabelige højdepunkter:

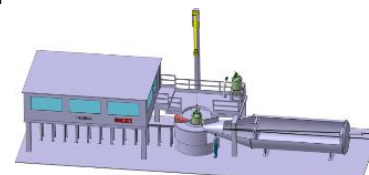
#### Opdagelse af nye alkali-metal amider ud fra lette grundstoffer

Disse materialer er relevante for direkte energilagring i form af hydrogen eller ammoniak, ammoniak-cracking eller som ion-ledere til batterier. *In-situ* PXRD har vist at  $\text{Li}_3\text{Na}(\text{NH}_2)_4$  frigør  $\text{NaNH}_2$  og danner ikke-støkiometrisk  $\text{Li}_{3+x}\text{Na}_{1-x}(\text{NH}_2)_4$  før smeltning ved  $234^\circ\text{C}$  (Jepsen *et al.*, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2016**, 18, 1735-1742).



#### ESS-instrumentet HEIMDAL programlagt med et budget på 13.55 M€

HEIMDAL: Det termiske neutron-pulverdiffraktometer med høj og fleksibel opløsning kombineret med SANS og neutron-imaging der er designet til materialestudier ved ESS. (Holm *et al.*, *Nuclear Inst. and Methods in Physics Research A* **2016**, 828, 229-241).



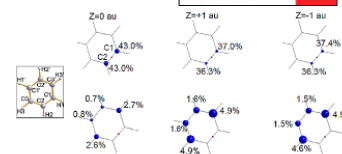
#### Kilde-funktionen afslører fine elektron-delokaliseringseffekter

Kortlægning af molekulære krystaller med den eksperimentelle kildefunktion ("source function") detekterer fine elektron-delokaliseringseffekter og bestemmer deres overførsels-egenskaber. Overensstemmelsen med kortlægning fra krystal-periodiske *ab initio* bølgefunktioner er imponerende (Gatti *et al.*, *Acta Crystallographica B* **2016**, 72, 180-193, inviteret Feature artikel).



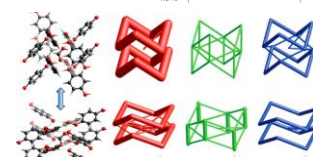
#### ECC DOSY NMR åbner op for studier af aggregering/deaggregering i opløsninger

Studier har afdækket bl.a. om hvorvidt organometallisk katalyse formidlet mononukleart eller polynukleart, samt om de svage interaktioner robuste nok til at kunne opretholdes i et givent solvent for en given reaktion (Neufeld *et al.*, *J. Am. Chem. Soc.* **2016**, 138, 4796-4806; *Chem. Eur. J.* **2016**, 22, 12624-12628).



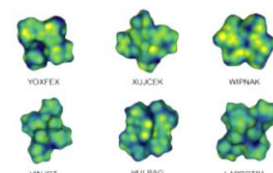
#### Energy frameworks anvendt til at rationalisere gæst-vært interaktioner

Intermolekulære interaktionsenergier i hydroquinon-methansyre klatrasil bidrager til forklaring af trends i gæstatom-inklusion og oprindelsen af en trykmedie-afhængig faseovergang (Eikeland *et al.*, *Chem. Eur. J.* **2016**, 22, 4061-4069).



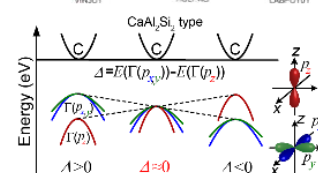
#### Profilering af molekyl-former i krystaller

Den rotations-invariante beskrivelse af molekulære former, f.eks. Hirschfeld-overflader via sfærisk-harmoniske funktioner, udgør en effektiv teknik til at inkorporere molekylær facon i den statistiske/kvantitative analyse af eksperimentelle krystalstrukturer (Spackman *et al.*, *Sci. Rep.* **2016**, 6:22204).



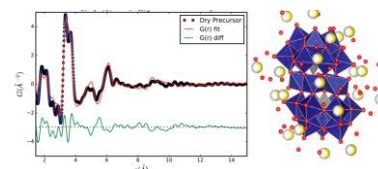
#### Design af højtydende termoelektriske materialer gennem orbital engineering

Teoretisk forudsigelse af lagdelte termoelektriske materialer er gjort mulig gennem en ny tilgang baseret på orbital-degenerering. Dette skaber en tydelig forbindelse mellem egenskaber og krystalstruktur (Zhang *et al.*, *Nature Commun.* **2016**, 7, 10892).



#### Ny indsigt i nukleationskemi

Atomar-skala indsigt i krystallers nukleation er nødvendig for at skabe et paradigmeskift i nukleationsteori. Omfattende *in situ* PDF analyse har afsløret at en stor Tourne-type lagdelt kompleks er det sande ophav til  $\text{ZnWO}_4$  nanokrystal-dannelse (Bøjesen *et al.*, *Chem. Sci.* **2016**, 7, 6394 - 6406).



#### Krystalstrukturen af termoelektrisk SnTe løst

Tin- og bly-chalkogenider udviser de bedste termoelektriske egenskaber blandt alle materialer. Anharmonicitet i SnTe blev studeret med NXMEM-analyse (udviklet i foregående år), og eksistensen af en længe debateret lavtemperatur-faseovergang blev forkastet baseret på synkrotron-røntgendiffraction (Sist *et al.*, *IUCr-J* **2016**, 3, 377-388).

