

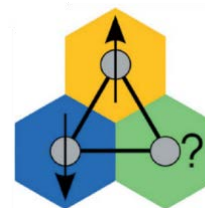


Center for Materialekrystallografi: Højdepunkter i 2018

CMC udgav 104 fagbedømte artikler i 2018, i high-impact tidsskrifter over såvel brede generelle studier som mere nicheprægede emner. CMC var involveret i tildelingen af 8 Ph.D.-grader og 20 kandidatgrader. Udvalgte videnskabelige højdepunkter præsenteres herunder:

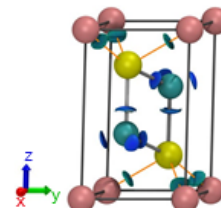
Forløsning af frustrationer over frustrerede magneter

Teknikken 3D-m Δ PDF blev anvendt til at bestemme de magnetiske korrelationer direkte i Bixbyit fra eksperimentelle data. For første gang nogensinde demonstrerede vi den kvantitative bestemmelse af magnetiske egenskaber i frustrerede magneter uden at nogen form for antagelser blev gjort omkring strukturen. (Roth et al., *IUCr-J*, 5, 2018, 410)



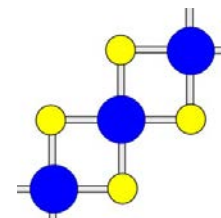
Fremtidens termoelektrika

Det lykkedes at vise at den manglende anisotropi i de termoelektriske egenskaber i Mg₃Sb₂ opstår som følge af krystalstrukturen gennem et studie der har vist sig at sætte spørgsmålstegn ved den veletablerede Zintl model. I stedet har interaktionerne mellem lagene vist sig at være ioniske med en delvis kovalent natur. (Zhang et al., *Nature Comm.*, 9, 2018, 4716)



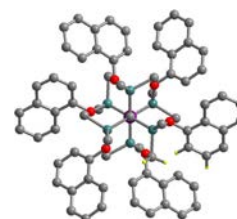
En standardiseret metode til Van der Waals forbindelser

Svage interaktioner mellem lagene i TiS₂ har gennem Röntgen-diffraktion vist sig at indeholde en større elektronforvrængning end teoretisk forventeligt. Det er en vigtig udvikling i forståelsen for denne type materialer, hvor viden om de svage bindingsinteraktioner fra eksperimentelle data byder på indsigt i ydeevnen for virkelige materialer. (Kasai et al., *Nature Materials* 2018, 17, 249)



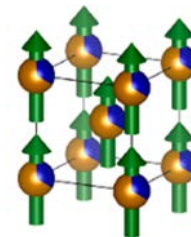
Designer-molekylære-magneter

Et ekstremt koordineringsmiljø viste sig at give ophav til et lineært kobolt-II-kompleks, hvilket afslørede en metode med hvilken magnetisk koercivitet kan være forstærket i overgangsmetalkomplekser. (Bunting et al. *Science*, 2018, 362, 1378)



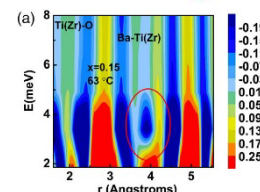
Nanomagneter

Gennem brugen af flere teknikker kunne en analyse af magnetiske nanokompositter vise hvordan reduktionen af en-fase CoFe₂O₄ spinel til den rene metalliske legering går gennem en Co-rig fase, hvilket efterlader en overskydende CO-fattig spinel. Fremstilling ved lavere temperatur viste sig yderligere at lede til mindre dannelse af den Co-fattige fase og dermed at hæmme magnetisk blødgørelse. (Granados Miralles et al., *ACS Appl. Nano Mater.* 2018, 1, 3693)



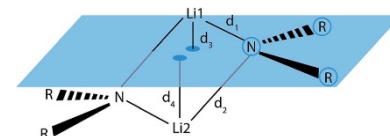
Uorden i funktionelle ferroelektriske materialer

Pb-frie ferroelektriske materialer undersøgte med parfordelingsfunktionen med henblik på at opnå en dybere forståelse for lokale dipol-dipol korrelationer i polære nanoregioner, hvilket udgør et vigtigt strukturelt fænomen med indflydelse på funktionaliteten. (Pramanick et al. *Physical Review Letters*, 2018, 120, 207603)



Amid vs. Amin

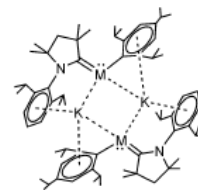
Den ioniske (71-72%) og kovalente (25-26 %) karakter i Li-N-bindingen viste sig at stå i skærende kontrast til den tidligere dikotomi på 95-5% gennem et grundigt eksperimentelt og teoretisk studie af [(Me₂NCH₂)₂(C₄H₂N)]Li₂. (Engelhardt, et al. *Chem. Sci.* 2018, 9, 3111-3121)





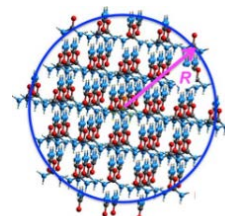
Isolerende anioner

Isolering af cAAC-stabiliserede silanyliden (II) og germanyliden (III) anioner blev for første gang udført og påvist på baggrund af både eksperimentel analyse og teoretiske undersøgelser af strukturen og bindingen. (Siddiqui et al., *Angew. Chem. Int. Ed.* **2018**, 57, 11776-11780)



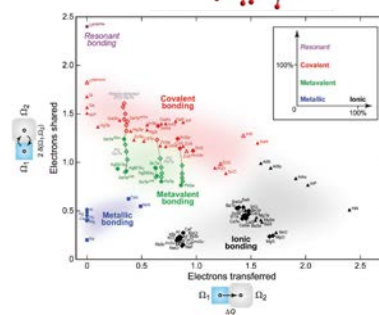
Konfidens i gitterenergi forudsigelser

En kombination af CE-B3LYP model energier og eksperimentelle krystal strukturer blev brugt til at klarlægge konfidensniveauet for gitterenergiene. På baggrund af dette arbejde noteredes det at fortolkningen af beregningerne gennem forskellige metoder fra forskellige krystal/molekylegeometrier bør håndteres med omhyggelighed. Manglen på standard reference datasæt blev desuden belyst, særligt for organiske molekyler. (Thomas et al., *J. Chem. Theory Comput.* **2018**, 14, 1614-1623)



Kortlægning af materialer

2D kort over faste stoffer blev genereret fra kvantemekaniske beskrivelser af elektron deling og overførsel. Det demonstreredes desuden hvordan en tredje dimension (de fysiske egenskaber) kan bruges til at skræddersy materialeegenskaber. (Raty et al. *Adv. Mater.* **2018**, 1806280)



Inflydelsen af ansigt-til-ansigt monomer π - π overlap i heterocykliske systemer

Optisk biaksiale enkeltkrystaller af det heterocykliske system 5,6,10b-triazaacephenanthrylen (TAAP) viste sig at udvise absorptions- og fluorescensanisotropi ved JH-aggregering med ansigt-til-ansigt koordinering af monomerer i centrosymmetriske dimerer. Denne interaktion viste sig at være bestemmende for pakningen og orienteringen af absorptions og emissions overgangsdipolmomenter. (Ostrowska et al., *IUCr* **2018** 5, 335-347)

