

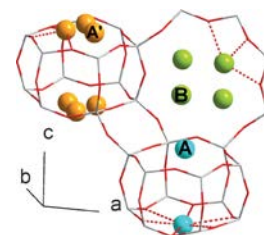


Center for Materialekrystallografi: Højdepunkter i 2017

CMC publicerede 111 fagbedømte artikler i 2017, omfattende både nye retninger og afrunding af langvarige studier inden for en række nøgleområder. CMC var involveret i tildelingen af 19 PhD grader og 11 kandidatgrader. Udvalgte videnskabelige højdepunkter angives nedenfor:

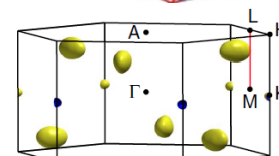
Ny indsigt i zeolit-katalysatorer

Kvasi-simultan PXRD og XANES gav den første indsigt i korrelationen mellem oxidationstrin og migration af Cu^+ -ioner i den kommercielt vigtige zeolit Cu-CHA (Andersen *et al.*, *Angew. Chem. Intl. Ed.*, 56, 2017, 10367)



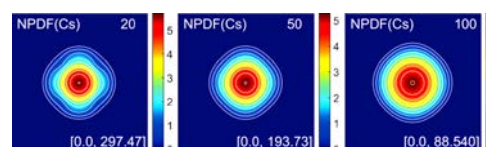
Nyt termoelektrisk materiale opdaget

“Multi-valley” båndstruktur-tilpasning blev anvendt til at udvikle Te-doteret $\text{Mg}_3\text{Sb}_{1.5}\text{Bi}_{0.5}$, et banebrydende nyt n-type termoelektrisk materiale (Zhang *et al.*, *Nature Comm.*, 2017, 8, 13901)



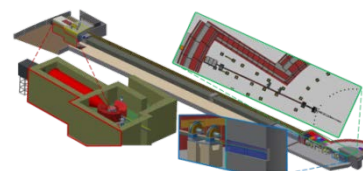
Nyheder til lærebøgerne

Den usædvanligt lave termiske ledningsevne i den simple, defekt-fri og kubiske krystalstruktur i CsCl er et stort mysterie. Særegen anharmonisk bevægelse i Cæsium blev nu opdaget ved lav temperatur (Sist *et al.*, *Angew. Chem. Intl. Ed.*, 56, 2017, 3625)



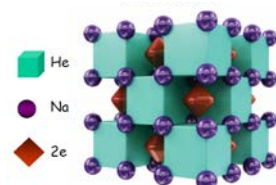
“Tollgate 2” (Kontrolpunkt 2) bestået for HEIMDAL

Mere end 250 siders dokumentation dannede grundlag for at HEIMDAL@ESS passerede “Kontrolpunkt 2”. Instrumentet er nu i “detaljeret design” fase.



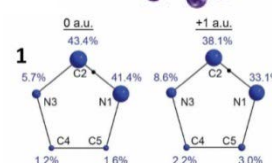
Den sidste bastion for kemisk inerthed er endelig faldet

Teoretikere fra CMC har bidraget til opdagelsen af den første stabile forbindelse af Helium og Natrium, Na_2He , som dannes ved højt tryk, >113 GPa. (Dong *et al.*, *Nature Chemistry*, 2017, 9, 440–445)



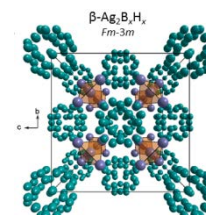
Imidazol og imidazolium under lup

Ladningstætheds-analyse og teoretiske beregninger har overbevisende påvist hvordan cyklisk π -electron delokalisering i de N-heterocykliske ringe af relaterede imidazol and imidazolium forbindelser er meget mere ens end hidtil antaget (Overgaard *et al.*, *Chem. Eur. J.*, 2018, 24; submitted 2017).



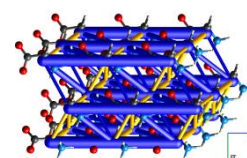
Hidtil ukendt klasse af sølv-baserede halvledere opdaget

En ny klasse af halvledende sølv-closoboraner, $\text{Ag}_2\text{B}_{10}\text{H}_{10}$ og $\text{Ag}_2\text{B}_{12}\text{H}_{12}$, med et båndgab på 2.3 eV og ekstremt høj ionledningsevne blev opdaget og strukturelt karakteriseret (Paskevicius *et al.*, *Nature Comm.*, 2017, 8, 15136, 1-6).



CrystalExplorer modellerer energier og energi-strukturer

CrystalExplorer blev udvidet til at omfatte metal-koordinerende forbindelser, solvater, organiske salte og åben-skal systemer (Mackenzie *et al.*, *IUCr J.*, 2017, 4, 575-587).



Ild og vand forenet

Det er lykkedes for CMC at syntetisere en unik, vand-stabil og dog reaktiv organokalium forbindelse, $[(18\text{-crown-}6)\text{K}\{(4,6\text{-tBu-OCNC}_6\text{H}_2)_2\text{CH}\}\bullet\text{H}_2\text{O}]$ (Koehne *et al.*, *Angew. Chem. Intl. Ed.* 2017, 56, 15141-15145)

