

# STRUKTUR UND FORSCHUNGSKONZEPT

## Forschungsthemen im Überblick

|                       |    |
|-----------------------|----|
| Anorganische Chemie   | 12 |
| Chemische Metallkunde | 16 |
| Festkörperphysik      | 20 |

## Neue Entwicklungen

|                                                                                                                                                                    |    |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| Das Laboratorium hoher Schutzklasse                                                                                                                                | 24 |
| Spark-Plasma-Synthese in Schutzgasatmosphäre                                                                                                                       | 28 |
| Darstellung intermetallischer Clathrate und clathrat-ähnlicher Verbindungen bei Hochdruck- und Hochtemperaturbedingungen                                           | 32 |
| Tieftemperatur-Magnetisierung unter hydrostatischem Druck                                                                                                          | 34 |
| Messungen der Wärmekapazität unter hohem Druck: Neue Entwicklungen                                                                                                 | 38 |
| Aufbau von Apparaturen zur Messung der spezifischen Wärme, thermischen Leitfähigkeit und Magnetostriktion für gepulste Magnetfelder am Hochfeldlabor Dresden (HLD) | 42 |
| Thermotransport-Messungen bei tiefen Temperaturen und im Magnetfeld                                                                                                | 46 |
| Rastertunnelmikroskop für sehr tiefe Temperaturen, hohe Magnetfelder und Ultrahochvakuum                                                                           | 50 |
| Räumlich aufgelöste chemische Analyse von Feststoffen mit Laserablation ICP-MS                                                                                     | 54 |
| Breitlinien-Festkörper-NMR: Neue Spektrometer und Techniken, erste Resultate                                                                                       | 56 |
| Aufbau für die gleichzeitige Messung von Neutronenstreuung und AC-Suszeptibilität                                                                                  | 62 |
| Elektronen-Lokalisierungsfunktion in <i>full-potential</i> Darstellung für kristalline Materialien                                                                 | 66 |
| Chemische Bindung und die Korrelation der elektronischen Bewegung                                                                                                  | 74 |
| Neue Perspektiven von „In Silico Versuchen“: Theoretische Ansätze zur Untersuchung von Reaktionsmechanismen, Nukleationsereignissen und Phasenübergängen           | 78 |
| Weiterentwicklung der Finite-Temperature Lanczos Methode                                                                                                           | 82 |

## STRUCTURE AND RESEARCH CONCEPTS

| Research Topics Overview |    | Developments                                                                                                                                                          |    |
|--------------------------|----|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| Inorganic Chemistry      | 13 | Laboratory of High Safety Standard                                                                                                                                    | 25 |
| Chemical Metals Science  | 17 | Spark-Plasma Synthesis in an<br>Inert Gas Atmosphere                                                                                                                  | 29 |
| Solid State Physics      | 21 | Preparation of Intermetallic Clathrates and<br>Clathrate-like Compounds at High-Pressure<br>and High-Temperature Conditions                                           | 33 |
|                          |    | Low-Temperature Magnetization under<br>Hydrostatic Pressure                                                                                                           | 35 |
|                          |    | Heat-Capacity Measurements under<br>High Pressure: New Developments                                                                                                   | 39 |
|                          |    | Setups of Specific-Heat, Thermal-Conductivity<br>and Magnetostriction Experiments in<br>Pulsed Magnetic Fields at the Dresden<br>High Magnetic Field Laboratory (HLD) | 43 |
|                          |    | Low-Temperature Thermal Transport<br>Measurements in Magnetic Field                                                                                                   | 47 |
|                          |    | Scanning Tunneling Microscope for<br>Very Low Temperatures, High Magnetic<br>Fields and Ultra High Vacuum                                                             | 51 |
|                          |    | Spatially Resolved Chemical Analysis<br>with Laser Ablation ICP-MS                                                                                                    | 55 |
|                          |    | Broad-Line Solid-State NMR: New<br>Equipment and Techniques, First Results                                                                                            | 57 |
|                          |    | New Setup for Simultaneous Measurements<br>of Neutron Scattering and AC Susceptibility                                                                                | 63 |
|                          |    | Electron Localization Function in Full-<br>Potential Representation for<br>Crystalline Materials                                                                      | 67 |
|                          |    | Chemical Bonding and the Correlation of<br>Electronic Motion                                                                                                          | 75 |
|                          |    | Extending the Scope of “In Silico<br>Experiments”: Theoretical Approaches for<br>the Investigation of Reaction Mechanisms,<br>Nucleation Events and Phase Transitions | 79 |
|                          |    | Further Development of the<br>Finite-Temperature Lanczos Method                                                                                                       | 83 |