



MAX-PLANCK-GESELLSCHAFT

Max-Planck-Institut
für Chemische Physik
fester Stoffe

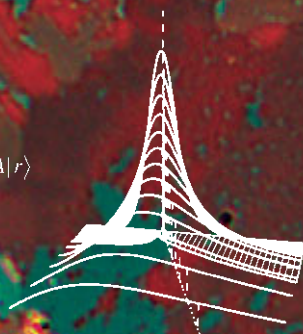
Scientific Report 2003–2005

Dresden, January 2006

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_{n=1}^{N_{\text{st}}} \langle n | e^{-\beta H} A | n \rangle}{\sum_{n=1}^{N_{\text{st}}} \langle n | e^{-\beta H} | n \rangle}$$

$$\langle A \rangle \approx \frac{N_{\text{st}}}{ZR} \sum_{i=1}^R \sum_{j=1}^M e^{-\beta \epsilon_j^i} \langle r | \Psi_j^i \rangle \langle \Psi_j^i | A | r \rangle$$

$$Z \approx \frac{N_{\text{st}}}{R} \sum_{i=1}^R \sum_{j=1}^M e^{-\beta \epsilon_j^i} |\langle r | \Psi_j^i \rangle|^2$$



Scientific Report
Wissenschaftlicher Bericht

Max-Planck-Institut für Chemische Physik fester Stoffe

Scientific Report

January 2006

Wissenschaftlicher Bericht

Januar 2006

Max-Planck-Institut für Chemische Physik fester Stoffe
Nöthnitzer Str. 40 · 01187 Dresden

Titelbild

Lichtmikroskopische Aufnahme der Mikrostruktur der intermetallischen Verbindung HfPdGe. Die Körner der HfPdGe-Phase enthalten eine große Anzahl von Domänen, die in polarisiertem Licht unterschiedlich reflektieren. Die Mikrostruktur zeigt charakteristische Merkmale für Verbindungen, die zur kristallographischen Verzwillingung neigen. So sind die einzelnen Domänen zueinander in einem Winkel von 60° angeordnet, der mit dem Zwillingsgesetz übereinstimmt, das aus der Analyse der Einkristall-Diffraktometerdaten erhalten wurde.

Die fragmentarische Darstellung unten rechts stammt aus dem Beitrag „Hall-Effect Evolution across a Heavy-Fermion Quantum Critical Point“. In dieser Darstellung werden die Ableitungen der Übergangsfunktion nach dem Magnetfeld, $d\gamma/dB$, in Abhängigkeit vom angelegten Magnetfeld bei verschiedenen tiefen Temperaturen nachempfunden. Bei tiefsten Temperaturen (diese entsprechen den steilsten Peaks) kann diese als ein Maß für die Änderung der effektiven Ladungsträgerkonzentration in YbRh_2Si_2 interpretiert werden.

Die abgebildeten Gleichungen sind aus der Finite-Temperature-Lanczos-Methode entnommen, die zur Berechnung von temperaturabhängigen Eigenschaften von Modell-Hamiltonoperatoren für stark korrelierte Elektronensysteme angewendet wird.

Front picture

Microstructure of the intermetallic compound HfPdGe (light microscopic image, polarized light). The grains of the HfPdGe phase contain a large number of domains which differ in reflectivity of polarised light. The microstructure shows characteristic features for compounds with a tendency to the crystallographic twinning. The domains are oriented each to another 60° in agreement with twinning rule estimated from X-ray single-crystal diffraction data.

The fragmentary diagram in the lower right part was extracted from the scientific contribution “Hall-Effect Evolution across a Heavy-Fermion Quantum Critical Point”. Here, the derivatives of the crossover function, $d\gamma/dB$, with respect to the magnetic field are sketched for different low temperatures. At lowest temperatures (i.e. for the steepest peaks) may be interpreted as an indication of the change of the effective carrier concentration in YbRh_2Si_2 .

The equations shown were taken from the finite-temperature Lanczos method, which is used for calculations of temperature depend properties of model Hamiltonians for strongly correlated electron systems.

IMPRESSUM

Herausgeber/Published by

Max-Planck-Institut für Chemische Physik fester Stoffe
Nöthnitzer Str. 40, 01187 Dresden
Tel. (Phone): +49-351-4646-0
Fax: +49-351-4646-10
Email: schroede@cpfs.mpg.de
homepage: <http://www.cpfs.mpg.de>

Redaktion/Editorial team

Michael Baenitz	Yuri Grin
Stefan Hoffmann	Guido Kreiner
Margot Pester	Liane Schröder
Ulrich Schwarz	Oliver Stockert
Steffen Wirth	

Satz und Druck/Typeset and printed by

Typostudio SchumacherGebler
Großenhainer Str. 11, 01097 Dresden

©2006 Max-Planck-Institut für Chemische Physik
fester Stoffe
Alle Rechte vorbehalten. *All rights reserved.*



Fachbeiratssitzung am 28. und 29. April 2003

Meeting of the Scientific Advisory Board on April 28–29, 2003

Von links nach rechts (*from left to right*): Prof. Dr. R. Kniep, Prof. Dr. A. Mehlhorn, Frau C. Heel, Prof. Dr. Z. Fisk, Prof. Dr. G. Kotliar, Prof. Dr. F. Steglich, Prof. Dr. D. Vollhardt, Prof. Dr. E. V. Antipov, Prof. Dr. J. Grin, Prof. Dr. S. Lidin



3. Kuratoriumssitzung am 4. Oktober 2005

Meeting of the Board of Trustees on November 4, 2005

Von links nach rechts (*from left to right*): R. Gastl, Prof. Dr. F. Steglich, Prof. Dr. J. Grin, Prof. Dr. H. Eschrig, Frau C. Heel, Dr. W. Gawrisch, Prof. Dr. A. Mehlhorn, V. von Vogel, Prof. Dr. R. Kniep, D. Birgel

Vorwort

Die Entwicklung der Institutsorganisation zwischen 2003 und 2005 wurde durch die Vorgeschichte stark geprägt. Vor elf Jahren, im März 1995, beschloss der Senat der Max-Planck-Gesellschaft die Gründung des Max-Planck-Institutes für Chemische Physik fester Stoffe in Dresden. Schon im nächsten Jahr begann der Aufbau des Instituts im Sinne des Gründungskonzeptes und der erste Forschungsbereich Festkörperphysik (Prof. Dr. F. Steglich) nahm die Arbeit auf, 1998 wurde der Forschungsbereich Anorganische Chemie (Prof. Dr. R. Kniep) etabliert, seit 2001 arbeitet der Forschungsbereich Chemische Metallkunde (Prof. Dr. Yu. Grin). Besondere Bemühungen wurden in den folgenden Jahren (2003–2005) auf die Vollendung des Konzeptes Chemische Physik fester Stoffe und Einrichtung des fehlenden vierten, physikalisch orientierten Forschungsbereiches gerichtet.

Neben der organisatorischen Bautätigkeit haben die Forschungsbereiche weiter experimentelle und theoretische Untersuchungen zur Chemie und Physik intermetallischer Verbindungen durchgeführt. Insbesondere hat sich dabei die Strategie der Bildung von gemeinsamen Forschungsprojekten bewährt. Das historisch erste Vorhaben, Chemie und Physik von intermetallischen Clathraten zu erforschen, hat sich zu einem Forschungsschwerpunkt für das ganze Institut entwickelt. Es wurden zahlreiche Arbeiten über die Untersuchungsergebnisse in renommierten Zeitschriften publiziert. Neben dem Clathrat-Projekt haben sich inzwischen zwei weitere Vorhaben etabliert. So arbeiten die Forschungsbereiche Chemische Metallkunde und Festkörperphysik zusammen an der Erforschung von so genannten Skutteruditen, d.h. Eisen-Antimoniden von Alkali-, Erdalkali- und

Seltenerd-Metallen. Auf der anderen Seite haben die Bereiche Festkörperphysik und Anorganische Chemie Untersuchungen an Pniktid-Chalkogeniden mit der Kristallstruktur vom PbFCl-Typ begonnen. Beide Projekte entwickeln sich erfolgreich und haben bereits den Status von Gesamtinstitutsprojekten erreicht. Am letzteren Projekt arbeiten auch Wissenschaftler aus dem Partner-Institut für Strukturforschung und tiefe Temperaturen der Polnischen Akademie der Wissenschaften in Wrocław.

Großen Wert legen alle drei bereits etablierten Bereiche auf die Neuentwicklung und Erweiterung von vorhandenen Präparations- und Untersuchungsmethoden. Unter anderem wurde im Herbst 2005 der Aufbau eines speziellen Laboratoriums hoher Schutzklasse für präparative Arbeiten mit Substanzen in feinverteilter Form erfolgreich abgeschlossen. Eine Reihe von neuen Messanlagen für physikalische Experimente unter hydrostatischem Druck wurde aufgebaut. Das Spektrum der Analysetechniken wurde durch eine Kombination von Laser-Ablation mit Massenspektrometrie erweitert. Schließlich wurden neue theoretische „Werkzeuge“ zur Untersuchung von Reaktionsmechanismen, Phasenumwandlungen und der chemischen Bindung entwickelt.

Detaillierte Informationen zu den bereits erwähnten und zahlreichen anderen Forschungsprojekten sind in diesem Bericht zusammengestellt. Die präsentierten Beiträge fassen die breite Forschungspalette des Instituts zusammen.

Dresden, im Januar 2006

Preface

The organizational development of the Institute between 2003 and 2005 was strongly affected by its history. Eleven years ago, in March 1995, the Council of the Max Planck Society took the decision of founding the Max-Planck-Institut für Chemische Physik fester Stoffe in Dresden. The formation of the institute according to its founding concept started immediately, and already in the next year the research field Solid State Physics (Prof. Dr. F. Steglich) began its work, 1998 the research field Inorganic Chemistry (Prof. Dr. R. Kniep) was established, and since 2001 the research field Chemical Metals Science is in operation (Prof. Dr. Yu. Grin). Particular endeavours in the following years 2003–2005 were focussed on the complete realization of the concept Chemical Physics of Solids and establishing the missing fourth, physically oriented research field.

Apart from the organizational work, the research fields continued the experimental and theoretical studies on the chemistry and physics of intermetallic compounds. Here, the strategy of constituting common projects between the research fields stands the test. The historically first project on chemistry and physics of intermetallic clathrates blossomed into a research focus for the whole institute. Several articles with reporting the results of this successful research were published in high-ranking journals. In addition to the clathrate project, two further joint research initiatives were established recently. The research fields Solid State Physics and Chemical Metals Science cooperate on studying of so-called skutterudites, i.e. iron anti-

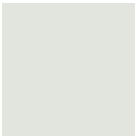
monides of alkali, alkaline-earth and rare-earth metals. On the other hand, the fields Inorganic Chemistry and Solid State Physics started investigations on non-magnetic pnictide chalcogenides. Both initiatives grow very successfully and achieved already the status of whole-institute projects. In the latter project, also researchers from the partner Institute of Structure Research and Low Temperatures of the Polish Academy of Science in Wrocław participate.

Considerable efforts of the established research fields were targeted at the development and improvement of synthesis and measurement techniques. As one major achievement, the construction of the special laboratory with high safety standards for preparative work with fine dispersed materials was successfully finished in autumn 2005. In addition, new setups for physical experiments under hydrostatic pressure were developed. The spectrum of the analysis techniques was enhanced by a combination of laser ablation with mass spectrometry. And finally, new theoretical 'tools' were implemented for studies of mechanisms of chemical reactions, phase transformations and chemical bonding.

More details about the mentioned above and several further projects are summarized in the present Report. The contributions reflect the wide research palette of the Institute.

Dresden, January 2006

INHALT/CONTENT

	Struktur und Forschungskonzept	10
	<i>Structure and Research Concepts</i>	11
	Ausgewählte Forschungsergebnisse	93
	<i>Selected Research Reports</i>	
	Addendum: Akademische und wissenschaftliche Interaktionen; Öffentlichkeitsarbeit und Haushalt	295
	<i>Academic and Scientific Interactions; Public Relations and Budget</i>	