

Chemische Metallkunde

Prof. Dr. Yuri Grin

Der Forschungsbereich Chemische Metallkunde wurde im April 2001 eingerichtet und beschäftigt sich mit der Erforschung von Bildung, Struktur, chemischer Bindung und bindungsrelevanten Eigenschaften intermetallischer Verbindungen der Elemente der Gruppen 13, 14 und 15 des Periodischen Systems.

Besondere Aufmerksamkeit wird der Präparation von intermetallischen Phasen gewidmet. Die Arbeiten umfassen eine spezielle Reinigung der Metall-Edukte (siehe *“Reine Metalle für reine Verbindungen”*) und finden ihre Fortsetzung in der Entwicklung neuartiger Synthesewege. So wurde gezeigt, daß die sogenannte Spark-Plasma-Sinter-Technik, die bisher hauptsächlich im Bereich der Materialentwicklung eingesetzt wurde, für die festkörperchemische Synthese erfolgreich genutzt werden kann (*“Spark Plasma Synthese intermetallischer Verbindungen”*). Für synthetische Arbeiten mit Elementen und Verbindungen in feinverteilter Form wird ein spezielles Laboratorium eingerichtet (*“Aufbau eines Laboratoriums hoher Schutzklasse”*). Die ersten erfolgreichen Schritte in Richtung auf Hochdruck-Hochtemperatur-Synthesen sind erfolgt (*“Synthesen bei hohen Drücken und hohen Temperaturen”*). Schließlich werden die Techniken des Chemischen Transportes weiterentwickelt und zur Darstellung intermetallischer Verbindungen in einkristalliner Form eingesetzt (*“Chemischer Transport”, “Chemical Transport and Optical Investigation of Oxides with Complex Anions”*).

Die experimentellen und theoretischen Untersuchungen an intermetallischen Verbindungen sind in drei Hauptrichtungen orientiert:

Eine Zielrichtung, die in enger Zusammenarbeit mit dem Forschungsbereich Festkörperphysik verfolgt wird, ist Verbindungen mit besonderen physikalischen Eigenschaften gewidmet. So wurde erfolgreich die Arbeit an intermetallischen Clathraten und clathratartigen Phasen fortgesetzt (*“Progress in Clathrate Research”, “Structural Transitions in Clathrates and Clathrate-like Compounds”, “NMR*

on Alkali Metal Tin Clathrates”). Weitere neue chemische Systeme dieser Art wurden erschlossen (*“Structural and Physical Properties of New Rare Earth Compounds $RE_2Ni_3P_{15}$ ”, “Skutterudite”*).

Bei der zweiten Gruppe von Forschungsprojekten steht die Frage der Stabilität von Strukturmodulen im Brennpunkt. Hier wurde u.a. das Strukturmotiv von $CuAl_2$ sowohl experimentell als auch theoretisch am Beispiel einer Reihe binärer Verbindungen untersucht (*“Chemical Bonding in $CuAl_2$ and Isostructural Compounds”*). Dieses Strukturmodell wurde auch in der Elementstruktur einer Antimon-Hochdruckmodifikation beobachtet (*“Crystal Structure and Stability of the Modulated Composite Sb-II”*), wobei zur korrekten Beschreibung der Röntgenbeugung ein Modell der Strukturmodulation verwendet wurde (*“Modulations in Crystal Structures”*). NMR-Messungen wurden effizient eingesetzt, um wichtige Fragen des Aufbaus von Strukturmodulen zu beantworten (*“NMR Investigations on Intermetallics”*, Kooperation mit dem Forschungsbereich “Festkörperphysik”). Zu dieser Projektgruppe gehört inhaltlich auch die Weiterentwicklung von quantenchemischen Werkzeugen zur Bindungsanalyse im direkten Raum (*“Electron Localizability”*, Kooperation mit dem Forschungsbereich Anorganische Chemie).

Eine Verknüpfung zwischen den beiden erstgenannten Forschungsvorhaben bilden die Untersuchungen zur Valenzinstabilität von Ytterbium in intermetallischen Verbindungen, die Strukturänderungen begleiten (*“Pressure and Temperature Instability of Ytterbium in Ternary Compounds with Transition Metals and Gallium”, “Heavy-Fermion Behaviour in a Heussler-Type Compound $YbPd_2Sb?$ ”*). Dabei wurden besonders intensiv spektroskopische Methoden (siehe *“XAS”*) angewendet.

Der Forschungsbereich Chemische Metallkunde arbeitet eng mit den Kompetenzgruppen Struktur und Metallographie zusammen und begleitet deren Entwicklung. Die Kompetenzgruppe Theorie wird personell unterstützt.

Chemical Metals Science

Prof. Dr. Yuri Grin

The research field Chemical Metals Science was established in April 2001 and is engaged in research on formation, structure, chemical bonding and bonding-relevant properties of intermetallic compounds of group 13, 14 and 15 elements.

A special interest is directed to the preparation of intermetallic phases. It starts with the purification of metal educts (see *“Pure Metals for Pure Compounds”*) and continues in exploring new kinds of synthesis routes. As an example, the so-called Spark-Plasma-Sintering technique which is usually applied in materials design was successfully introduced for the preparation of intermetallic compounds (*“Spark Plasma Synthesis of Intermetallic Compounds”*). A special laboratory is build-up for preparative work on elements and compounds in fine-dispersed form (*“Laboratory of High Safety Standards”*). The first successful attempts in high-pressure high-temperature synthesis were performed (*“Syntheses at High Pressures and High Temperatures”*). Finally, chemical transport techniques were improved and applied for the preparation of single-crystalline intermetallic materials (*“Chemical Transport”*, *“Chemical Transport and Optical Investigation of Oxides with Complex Anions”*).

Experimental and theoretical research on intermetallic compounds is performed in three main directions:

The first group of scientific projects is dedicated to compounds with distinct physical properties. These projects were realized in a close cooperation with the research field Solid State Physics. The work on intermetallic clathrates and clathrate-like phases was successfully continued (*“Progress in Clathrate Research”*, *“Structural Transitions in Clathrates and Clathrate-like Compounds”*, *“NMR on Alkali Metal Tin Clathrates”*). New chemical systems of this kind were described and

characterized (*“Structural and Physical Properties of New Rare Earth Compounds $RE_2Ni_{36}P_{15}$ ”*, *“Skutterudite”*).

The next group of scientific projects focusses on the problem of stability of structural patterns. Here, the structure motif of $CuAl_2$ was intensively studied both experimentally and theoretically on a series of binary compounds (*“Chemical Bonding in $CuAl_2$ and Isostructural Compounds”*). This pattern was also found in the high-pressure modification of antimony (*“Crystal Structure and Stability of the Modulated Composite Sb-II”*). For the correct interpretation of the X-ray diffraction in this case, the model of structure modulation was applied (*“Modulations in Crystal Structures”*). NMR-Measurements were efficiently used for clarifying important questions concerning the formation of structural patterns (*“NMR Investigations on Intermetallics”*, in cooperation with the research field Solid State Physics). The development of quantum chemical tools for bonding analysis in direct space (*“Electron Localizability”*, in cooperation with research field Inorganic Chemistry) belongs to the same group of projects.

A link between the two mentioned groups of projects forms the investigation on the valence instability of ytterbium which may accompany structural transitions (*“Pressure and Temperature Instability of Ytterbium in Ternary Compounds with Transition Metals and Gallium”*, *“Heavy-Fermion Behaviour in a Heussler-Type Compound $YbPd_2Sb?$ ”*). Here, spectroscopic methods were intensively applied (see *“XAS”*).

The research field Chemical Metals Sciences cooperates strongly with the competence groups Structure and Metallography and accompanies their development. The competence group Theory is supported with personal.