

Neue Entwicklungen

Der Bezug des Institutsneubaus begann im Juni 2000. Damit endete die Zeit der Unterbringung der Forschungsbereiche und Kompetenzgruppen in Provisorien an voneinander getrennten Standorten in Dresden. Die neuen Laboratorien ermöglichten den optimalen Aufbau der bereits vorhandenen Apparaturen. Gleichzeitig wurden alle Möglichkeiten genutzt, das Methodenspektrum im Sinne der Zielsetzungen des Instituts zu erweitern. Dabei halfen uns die seit 1998 vor Ort gesammelten gemeinsamen Erfahrungen mit den daraus erwachsenen Synergieeffekten. Positiv bewährte sich zudem die zielorientierte Flexibilität unserer Organisationsstruktur. Entscheidend war schließlich auch, dass wir bereits im April 2001 die bestehenden Forschungsbereiche Festkörperphysik und Anorganische Chemie um den Forschungsbereich Chemische Metallkunde erweitern konnten. Ein vierter, physikalisch orientierter Forschungsbereich soll die Aufbauphase des Instituts in naher Zukunft abschließen.

Neue wissenschaftliche Entwicklungen im Berichtszeitraum betreffen alle im Institut vertretenen Sparten und sollen hier in der Reihenfolge *Synthese*, *Charakterisierung und Eigenschaften* und *Theorie* vorgestellt werden. Die Entwicklungen orientieren sich unmittelbar an den gemeinsamen Zielsetzungen des Instituts und werden durch die Notwendigkeit der Verfügbarkeit sowie die Qualität der Methoden und Verfahren bestimmt.

Eine Schlüsselstellung für unsere Arbeiten nehmen naturgemäß die *Syntheseverfahren* ein. Hier sind wir mit dem Aufbau und der Einrichtung des Laboratoriums hoher Schutzklasse weit vorangekommen. Als besondere Verfahren haben wir die Puls-Plasma-Technik und das Schmelzspinnen etabliert. Eine hydraulische 1000 t-Prozesspresse erlaubt Hochdruck-Hochtemperatursynthesen in präparativem Maßstab. Verfeinert haben wir Methoden zur Reinigung metallischer Elemente sowie unsere Ausstattung zum Chemischen Transport mit der Aussicht, Transportexperimente bei Temperaturen bis 2000 K durchführen zu können. Eine UHV-Anlage ermöglicht die Herstellung und vielfältige Charakterisierung dünner Schichten bzw. von Schichtsystemen.

Im Zuge unserer Forschungsarbeiten treten Verbindungen in den Vordergrund, die luft- und/oder feuchtigkeitsempfindlich sind. Zu ihrer *Charakterisierung* und zur Untersuchung ihrer *Eigenschaften* haben wir große Anstrengungen unternommen, um die Hand-

habung, Vorbereitung und Untersuchung von Proben unter Inertgasbedingungen zu perfektionieren. Unsere spektroskopischen Methoden (IR, EPR und NMR/NQR) wurden um besondere Messanordnungen erweitert. Verstärkt haben wir unsere Beteiligung an Großforschungseinrichtungen: Hochfeldmagnetlabor Dresden (zunächst im Vorprojekt im IFW, Dresden), HASYLAB/DESY in Hamburg sowie kalte Neutronenquelle des neuen Forschungsreaktors FRM-II in München. Im Institut steht nun auch ein 300 kV-Transmissionselektronenmikroskop mit Feldemissionskathode für höchste laterale Auflösung und chemische Analysen in kleinsten Bereichen zur Verfügung. Die chemische Analytik im Hause entwickelte eine Methode zur Stickstoff-Speziation; im Aufbau befindet sich eine Apparatur zur Laser-Ablations-ICP/MS. Weitere Neuentwicklungen betreffen ein kapazitives Dilatometer für Magnetostruktionsmessungen, eine Diamantstempel-Druckzelle (bis 25 GPa) sowie einen neuen Typ einer hydrostatischen Druckzelle zur Messung elektrischer Widerstände. Verfeinert und grundlegend erweitert wurde unsere Ausstattung zur Messung thermischer Transporteigenschaften (Wärmeleitung, Thermospannung, elektrischer Widerstand) und der Magnetisierung bei tiefsten Temperaturen (SQUID bis 2 mK).

Die *Theorie* im Hause beschäftigt sich mit der Entwicklung von Modellen und Methoden sowie deren Umsetzung in Software. Auch hier sind entscheidende Fortschritte erzielt worden, die sich an den Fragestellungen des Instituts orientieren. So wurde eine Methode zur Berechnung temperaturabhängiger Eigenschaften stark korrelierter Elektronensysteme in kleinen Clustern implementiert. Andere Fragestellungen betreffen Modulationen in Kristallstrukturen (z.B. in sog. Chimney-Ladder-Phasen) sowie die Modellierung von Approximanten ikosaedrischer Quasikristalle. Fragen zur chemischen Bindung behandelt eine Gruppe von Theoretikern mit folgenden methodischen Aktivitäten: Elektronenlokalisierungsfunktion (Weiterentwicklung von Algorithmen sowie Ableitung klarer physikalischer Grundlagen), Molekulardynamische Simulationen (Modellierung zeitabhängiger Prozesse) und Substitutionelle Fehlordnung (Behandlung auf CPA-Basis).

Die wissenschaftliche Entwicklung des Instituts wurde entscheidend gestärkt durch den qualifizierten Ausbau der *Infrastruktur* mit Daten-Netzwerk, Bibliothek und Werkstätten. *Rüdiger Kniep (GD)*

New Developments

Moving into the new building of the Institute started in June 2000. This ended the period of accommodating the research fields and competence groups provisionally and at locally separated sites in Dresden. The new laboratories enabled an optimal arrangement of the already existing equipment. At the same time all possibilities to extend the spectrum of methods according to the Institute's objectives were seized. This was supported by the experiences jointly gathered since 1998 with the resulting synergy effects. Additionally, the target-oriented flexibility of our organizational structure proved to be successful. Finally, it was decisive that, in April 2001, we were able to extend the existing research fields of Solid State Physics and Inorganic Chemistry by the research field of Chemical Metals Science. A fourth research field in the area of physics shall finalize the establishment of the Institute in the near future.

New scientific developments within the reporting period relate to all of the branches represented at the institute and shall be introduced here in the sequential order of *Synthesis*, *Characterization and Properties*, and *Theory*. The developments are directly guided by the joint objectives of the Institute and are determined by the necessities arising from the availability as well as the quality of methods and procedures.

A key position in our work is naturally occupied by the *Synthesis Procedures*. In this respect, we have come far in the setup and equipment of the laboratory of high safety standards. As specific procedures, we have established Pulse-Plasma Technology and Melt Spinning. A hydraulic 1000 t process press enables high-pressure/high-temperature syntheses on a preparative scale. We have fine-tuned methods for purifying metallic elements as well as our equipment for Chemical Transport with the prospect of being able to carry out transport experiments at temperatures of up to 2000 K. A UHV facility enables the fabrication and a varied characterization of thin layers or layer systems.

Along with our research work, compounds come into the focus of interest which are sensitive to air and/or moisture. For their *Characterization* and the investigation of their *Properties* we have made great efforts in order to perfect handling, preparation and investigation of samples under inert gas conditions.

Our spectroscopic methods (IR, EPR and NMR/NQR) have been extended by special measurement arrangements. We have strengthened our participation in major research facilities: Hochfeldmagnetlabor Dresden (High-Field Magnet Laboratory Dresden; preliminary in the pilot project at IFW, Dresden), Hasylab/DESY in Hamburg as well as in the cold neutron source of the new research reactor FRM-II in Munich. At the Institute, there is now available a 300 kV transmission electron microscope equipped with a field emission cathode for highest lateral resolution and chemical analyses in tiniest areas. The chemical analytics in our facility has developed a method for nitrogen speciation; an equipment for laser ablation ICP/MS is currently being set up. Additional new developments at the Institute are: a capacitive dilatometer for magnetostriction measurements, a diamond anvil cell (up to 25 GPa) as well as a new type of a hydrostatic pressure cell for measuring electric resistance. Our equipment for measuring thermal transport properties (heat conductivity, thermal power, electrical resistance) and magnetization at lowest temperatures (SQUID down to 2 mK) has been refined and substantially expanded.

The *Theory* in our house deals with the development of models and methods as well as with their transfer into software. In addition, decisive progress has been made relating to the issues of the Institute. For example, a method for calculating temperature-dependent properties of strongly correlated electron systems in small clusters has been implemented. Other issues refer to modulations in crystal structures (e.g., in so-called Chimney-Ladder-Phases) as well as to the modeling of approximants for icosahedral quasi-crystals. On the issue of chemical bonds, a group of theoreticians was constituted dealing with the following methodological activities: Electron Localization Function (the advancement of algorithms as well as the derivation of a clear physical basis), Molecular-Dynamics Simulations (the modeling of time-dependent processes) and substitutional disorder (treatment on CPA basis).

Scientific research at the Institute has been improved decisively by the qualified completion of the *Infrastructure* including data network, library and workshops.

Rüdiger Kniep (MD)