



FIZnews

ANSPRECHPARTNERIN

Dr. Babett Bolle
Kommunikation
Tel. +49 7247 808 513
babett.bolle@fiz-karlsruhe.de

Seite 1 von 3

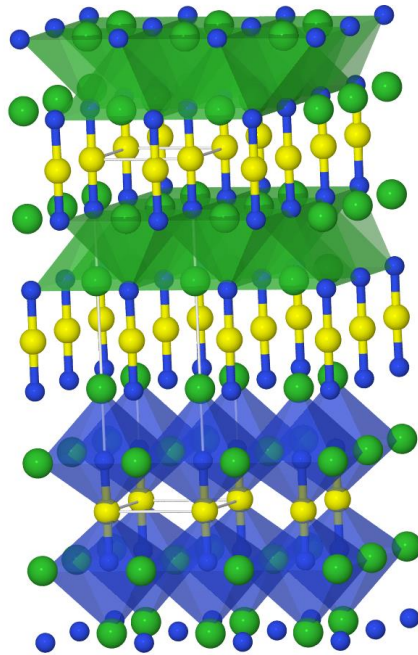
ICSD auf steilem Wachstumskurs – 300.000-Strukturen-Marke ist geknackt

300.000ste Struktur ist eine Nitridometallat-Struktur

Karlsruhe, den 23.5.2024 — Die 300.000ste Struktur in ICSD ist Ca_2NiN_2 und wurde von Simon D. Kloß und J. Paul Attfield in dem Artikel "Low-dimensional magnetism in calcium nitridonickelate(II) Ca_2NiN_2 " beschrieben (DOI: 10.1039/d1cc04001d). In Nitridometallaten ist Ni mit Oxidationsstufe +II sehr ungewöhnlich. Die Synthese der Verbindung konnte nur bei hoher Temperatur und Druck synthetisiert werden.

Das kristalline Ca_2NiN_2 kann dem Na_2HgO_2 -Strukturtyp zugeordnet werden. Interessant sind hier die Koordinationssphären der verschiedenen Elemente. So zeigt das Ni^{2+} ein lineares Komplexanion, dessen Stabilität vermutlich wesentlich durch die kovalente Ni-N-Mehrfachbindungen und die damit verbundenen kurzen Ni-N-Bindungsabstände beeinflusst ist. Die Calcium- bzw. Stickstoff-Ionen bilden jeweils Schichten von kantenverknüpften quadratischen Pyramiden (CaN_5 ; grün dargestellt im Bild) bzw. Oktaedern (NCa_5Ni ; blau dargestellt im Bild).



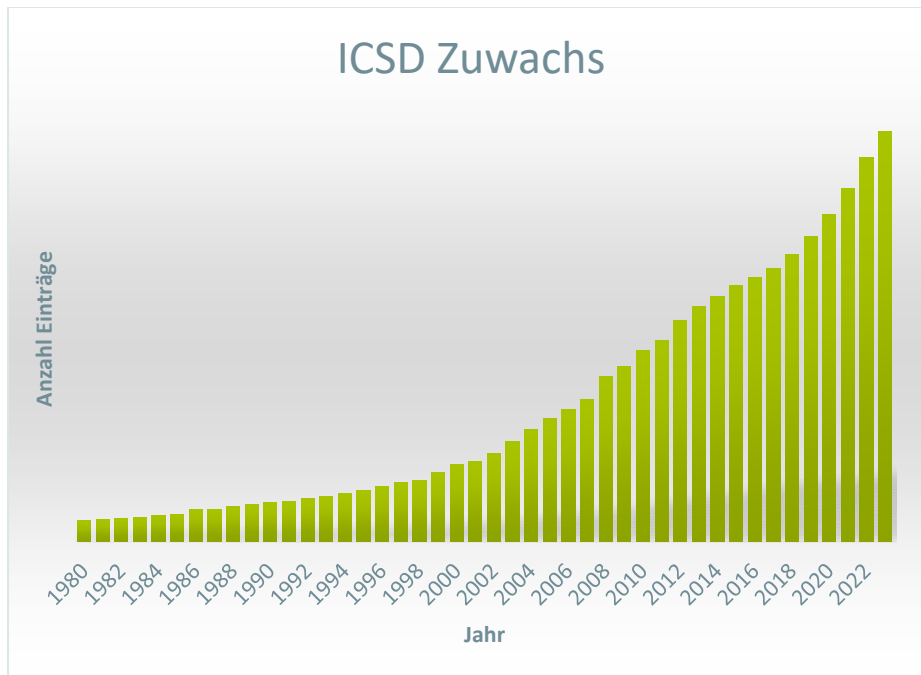


Die erfolgreiche Synthese von Ca_2NiN_2 ebnet den Weg für eine neue Klasse von späten Übergangsmetallnitriden, die interessante elektronische Eigenschaften aufweisen können. Damit ist die Verbindung ein typischer Vertreter anorganischer Verbindungen in ICSD, die potenziell in der Erforschung neuer Materialien eingesetzt werden können. Diese Verbindung wird in dem nächsten ICSD-Release 2024.2 unter dem Collection Code 149497 aufgenommen.

ICSD ist die weltweit größte Datenbank für vollständig bestimmte, anorganische Kristallstrukturen. Die qualitativ hochwertigen Daten reichen bis zu den ersten Aufzeichnungen aus dem Jahr 1913 zurück. Es werden nur Daten dokumentiert, die eine gründliche Qualitätskontrolle durchlaufen haben. Es sind alle wichtigen Kristallstrukturdaten verfügbar, sowohl experimentelle anorganische und metallorganische als auch theoretische Strukturen. Diese gründliche Datenkuratierung war einer der Gründe für die erst kürzlich erfolgte Auszeichnung mit dem Core Trust Seal.

Die ICSD wurde 1977 an der Universität Bonn gegründet; seit 1985 ist FIZ Karlsruhe maßgeblich an der Produktion und der Bereitstellung der Datenbank beteiligt. Die Marke von 100.000 Strukturen wurde erst 30 Jahre nach Gründung von ICSD im Jahr 2007 erreicht. Nur 11 Jahre später wurde im Jahr 2018 die 200.000ste Struktur in ICSD aufgenommen. Dass die ICSD bereits 6 Jahre später auf 300.000 Strukturen angewachsen ist, ist im Wesentlichen auf die Erweiterung des Inhalts durch experimentelle metallorganische Strukturen und theoretische anorganische Strukturen zurückzuführen.





Weitere Informationen finden Sie unter <https://icsd.products.fiz-karlsruhe.de/>.

FIZ Karlsruhe – Leibniz-Institut für Informationsinfrastruktur ist eine der führenden Adressen für wissenschaftliche Information und Dienstleistung und Mitglied der Leibniz-Gemeinschaft. Unsere Kernaufgaben sind die professionelle Versorgung von Wissenschaft und Wirtschaft mit Forschungs- und Patentinformation sowie die Entwicklung von innovativen Informationsinfrastrukturen, z. B. mit den Schwerpunkten Forschungsdatenmanagement, Wissensgraphen und digitale Plattformen. Dazu betreiben wir eigene Forschung, kooperieren mit renommierten Universitäten und Forschungsgesellschaften und sind international und interdisziplinär vernetzt. FIZ Karlsruhe ist eine GmbH mit gemeinnützigem Charakter und eine der größten außeruniversitären Einrichtungen ihrer Art. Für weitere Informationen besuchen Sie bitte www.fiz-karlsruhe.de

Pressekontakt

Ansprechpartnerin

Kommunikation

Dr. Babett Bolle

Tel. +49 7247 808 513

babett.bolle@fiz-karlsruhe.de

Weitere Informationen

FIZ Karlsruhe – Leibniz-Institut für
Informationsinfrastruktur

Hermann-von-Helmholtz-Platz 1
76344 Eggenstein-Leopoldshafen

Tel. +49 7247 808 0

E-Mail

contact@fiz-karlsruhe.de

