

**Druckstudien zu strukturellen und magnetischen Eigenschaften
molekularer und molekülbasierter Magnete**

**Von der Fakultät für Elektrotechnik, Informationstechnik, Physik
der Technischen Universität Carolo-Wilhelmina
zu Braunschweig
zur Erlangung des Grades eines
Doktors der Naturwissenschaften
(Dr. rer. nat.)
genehmigte
Dissertation**

**von Jan Wolfgang Kreitlow
aus Walsrode**

**1. Referent: Prof. Dr. Stefan Süllow
2. Referent: Prof. Dr. Andreas Eichler
eingereicht am: 05.05.2008
mündliche Prüfung (Disputation) am: 18.07.2008**

Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis	VIII
Einleitung	1
1 Festkörper unter Druck	5
1.1 Die SQUID-Druckzelle	7
1.1.1 Die Funktionsweise eines SQUID	10
1.2 Spezifische Wärmemessungen unter Druck	13
1.2.1 Spezifische Wärmemessungen: AC-Methode	16
1.2.2 Spezifische Wärmemessungen: Relaxation	19
1.3 Druckbestimmung	21
1.4 Kenngrößen zum Vergleich von Druckuntersuchungen	23
1.4.1 Der Kompressions- oder Bulkmodul K	23
1.4.2 Der magnetische Grüneisenparameter Γ_m	24
1.5 Chemischer Druck	25
1.6 Rechnungen mit dem CRYSTAL-Code	26
2 Druckstudien an der bimetallischen Kettenverbindung	
$\text{MnNi}(\text{NO}_2)_4(\text{en})_2$	29
2.1 Strukturelle Charakterisierung	29
2.2 Physikalische Eigenschaften von $\text{MnNi}(\text{NO}_2)_4(\text{en})_2$	32
2.3 Experimente	36
3 Struktur, Grundzustandseigenschaften und Druckeffekte in $\text{XCl}_2(\text{PM})_2$	43
3.1 $\text{XCl}_2(\text{C}_4\text{H}_4\text{N}_2)_2$: Strukturelle Charakterisierung	44
3.2 Magnetische Eigenschaften von $\text{XCl}_2(\text{PM})_2$	45
3.3 $\text{XCl}_2(\text{PM})_2$: Druckexperimente	51
3.4 $\text{XCl}_2(\text{PM})_2$: Ab-initio Rechnungen	55

4	Konkurrierende Wechselwirkungen unter Druck: Eine Fallstudie zu $\text{Cu}_2\text{Te}_2\text{O}_5\text{Br}_2$	59
4.1	Grundlegende Charakterisierung: Strukturelle und magnetische Eigenschaften	60
4.2	Magnetische Suszeptibilität unter Druck	64
4.3	μ^+ SR-Spektroskopie unter Druck	70
4.4	Spezifische Wärme unter Druck	73
4.5	Diskussion und abschließende Bemerkungen	75
A	Mössbauerspektroskopie an $\text{Fe}_6(\text{tea})_6\text{MeOH}$	79
B	Druckzellen für Neutronenstreuung und μ^+ SR-Spektroskopie	85
	Literaturverzeichnis	89