Leibniz-Forschungsverbände (LFV) bearbeiten aktuelle wissenschaftlich und gesellschaftlich relevante Fragestellungen inter- und transdisziplinär.

Die Forschungsverbände sind mit einer Perspektive von fünf bis fünfzehn Jahren angelegt und offen für die Zusammenarbeit mit Universitäten, anderen außeruniversitären Forschungs- und Infrastruktureinrichtungen sowie ausländischen Forschungsgruppen.

Das HKI arbeitet entsprechend seiner wissenschaftlichen Ausrichtung in drei Leibniz-Forschungsverbänden mit.