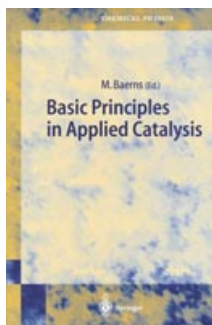




Basic Principles in Applied Catalysis



Herausgegeben von **Manfred Baerns**. Springer Verlag, Heidelberg 2004. 557 S., geb., 139,05 €.—ISBN 3-540-44135-2

Dieses gut zu lesende und nützliche Buch verschafft einen ausgezeichneten Überblick über die verschiedenen Bereiche der angewandten Katalyse und eignet sich daneben auch als Einführung in das Thema. Die Kapitel wurden von bekannten, hauptsächlich deutschen Autoren verfasst, und die einzelnen Beiträge sind hervorragend bis gut. Allerdings war man bei der Auswahl des Titels etwas zu ehrgeizig, denn er erweckt den Eindruck, dass wirklich alle Aspekte der angewandten Katalyse behandelt werden, was auch die Eigenschaften aktiver Zentren, detaillierte Reaktionsmechanismen, desaktivierende Prozesse, Massentransportphänomene und Reaktordesign einschließen würde. Tatsächlich vermittelt das Buch einen guten Eindruck von der Bedeutung der Katalyse in unserer modernen Industriegesellschaft, detaillierte Informationen zu wichtigen katalytischen Prozessen und zur Herstellung und Verwendung von Festkörperkatalysatoren in der Industrie. Von einigen wenigen Passagen abgesehen, sind die Texte leicht zu lesen, und eine Fülle von Verweisen auf weiterführende Literatur lädt zu intensiverem Studium ein. Der

Stoff wird relativ umfassend abgehandelt, d. h., die wichtigsten Typen von Katalysatoren, bedeutende katalytische Prozesse, Katalysatorsynthesen, Charakterisierungen und Desaktivierungen von Katalysatoren werden besprochen. Trotzdem fehlen einige Themen oder könnten ausführlicher sein, z. B. strukturierte Katalysatoren, Massentransfer und chemische Reaktoren.

Der erste Teil des Buches ist eindeutig der beste. In der Einführung werden die kommerzielle Bedeutung der Katalyse und wichtige Anwendungen herausgestellt. In den folgenden vier Kapiteln werden ausgewählte heterogene Katalysen besprochen. Der Leser erhält hier einen ausgezeichneten Überblick über wichtige industrielle katalytische Prozesse. Der zweite Teil ist bezüglich der Qualität etwas uneinheitlich. Die Ausführungen zur Herstellung von Katalysatoren sind hervorragend, bei der Beschreibung der In-situ-Charakterisierung von Katalysatoren gefiel uns die sehr lange Liste der gängigen Charakterisierungstechniken weniger. Für den Nichtspezialisten ist der Nutzen einer solchen tabellarischen Darreichung unseres Erachtens gering. Eine straffere Auswahl der Techniken verbunden mit einer detaillierteren Darstellung spezifischer Untersuchungen wäre geeigneter gewesen.

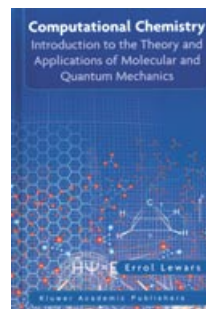
Der Abschnitt über Verfahrenstechnik enthält ein interessantes Kapitel über die Vergiftung von Katalysatoren. Dieses gerade für industrielle Prozesse überaus wichtige Thema, das die akademische Forschung oft vernachlässigt, wird hier ausgezeichnet erörtert. Die Desaktivierungsmechanismen, ihre Kinetik sowie ihre Bedeutung in wichtigen Prozessen werden eingehend besprochen. Im gleichen Abschnitt ist allerdings auch das einzige Kapitel des Buchs zu finden, das recht schwer zu verstehen ist (der Beitrag über die Kinetik heterogener Katalysen). Einerseits werden hier die Grundlagen viel zu ausführlich dargestellt, andererseits wird auf die unterschiedlichen kinetischen Eigenschaften verschiedener Reaktionstypen und die Prinzipien, die den Untersuchungen der Kinetik katalytischer Reaktionen zugrunde liegen, nicht eingegangen. Fragen zum Massentransfer, die bei kinetischen Untersuchungen katalytischer Reaktionen oft

auftauchen, werden ebenfalls nicht erörtert.

Insgesamt vermittelt das Buch in hervorragender Weise einen Eindruck von der Bedeutung der angewandten Katalyse. Die Beiträge sind im Großen und Ganzen gut geschrieben, der Stoff wird nahezu umfassend dargestellt und die 170 Abbildungen sind fast durchweg von guter Qualität. Für Spezialisten auf dem Gebiet der angewandten Katalyse sind die Ausführungen wohl zu allgemein gehalten, auch dürfte ihnen fast alles bekannt sein – aber als schnelle Hilfe bei der Recherche nach Literatur zu einem bestimmten Thema kann das Buch allemal nützen. Vorrangig ist die Lektüre Chemikern zu empfehlen, die sich allgemein für die Katalyse interessieren oder Grundlagenforschung auf diesem Gebiet betreiben.

Xander Nijhuis, Bert Weckhuysen
Department of Inorganic Chemistry and Catalysis
Universität Utrecht (Niederlande)

Computational Chemistry



Introduction to the Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics. Von **Errol G. Lewars**. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht 2003. 471 S., Broschur, 71,00 €.—ISBN 1-4020-7422-0

Bezüglich ihrer Wirkung auf Neulinge mag es mit der Computerchemie wie mit der Fliegerei sein: Viele Novizen werden von ihr magisch angezogen, andere zollen ihr gebührenden Respekt und dritte machen lieber einen großen Bogen darum. Nur wenige der jungen Fliegereibegeisterten würden vermutlich lange genug durchhalten, um tatsächlich in den Genuss des Fliegens zu

kommen, wenn man ihnen vorher mehrjährige Studien der analytischen Mechanik, der Kartographie, der Elektrotechnik und des Maschinenbaus abverlangte und sie dann zu ersten Flugversuchen mit Papierswalben und Modellflugzeugen nötigte, bis man sie schließlich erstmalig am Höhenruder eines Kleinflugzeuges sitzen ließe. Dass man so speziell die vom Fliegen weniger beeindruckten Laien kaum zum Hobbypilotentum wird bewegen können, bedarf keiner weiteren Erwähnung.

Was aber, wenn es ein erschwingliches Buch moderaten Umfanges gäbe, das sich an den flugunerfahrenen Laien richtet, das die Begeisterung für das Fliegen zu vermitteln vermag, das die physikalischen Grundlagen auf das erforderliche Minimum reduziert und das die Pilotenaspiranten nach der Lektüre in die Lage versetzt, ein Flugzeug gängigen Typs bei Wind und Wetter zum Ziel zu bringen sowie schließlich auch sicher zu landen?

Will man den Versuch wagen, die vergleichbare Marktlücke im Bereich der Computerchemie zu schließen, so bedarf es eines Spagats, der vermutlich eher einer Zerreißprobe gleichkommt. Nichtsdestotrotz hat sich Errol Lewars genau dieser Herausforderung angenommen. In seinem Buch möchte er die grundlegenden Konzepte und die Methoden der Computerchemie vermitteln, wobei ein Publikum mit allgemeiner Chemieausbildung die erklärte Zielgruppe ist, angefangen vom Chemiestudenten im Hauptstudium zum Doktoranden bis hin zum frisch gebackenen Forscher im Bereich der Computerchemie.

Knapp 500 Seiten aufgeteilt in acht Abschnitte erwarten den Leser. Jeder Abschnitt beginnt mit einer kurzen Vorstellung des vorgesehenen „Flugplans“. Sofern neue Methoden der Computerchemie eingeführt werden, müssen sich diese auf einer vom Autor angelegten Teststrecke bewähren, die unter anderem die Bestimmung von Gleichgewichtsgeometrien, harmonischen Schwingungsfrequenzen, Dipolmomenten und chemischen Verschiebungen, Ionisierungsenergien sowie Wärmetönungen chemischer Reaktionen umfasst. Gen Ende eines Kapitels werden Vor- und Nachteile der jeweiligen Methoden einander gegenübergestellt.

Den Abschluss bildet dann eine komprimierte Zusammenfassung, die, insbesondere nach umfangreicheren Darstellungen, beim Einprägen des Erlernten behilflich ist. Anhand von Fragen unterschiedlichen Schwierigkeitsgrades kann der Leser die erworbenen Kenntnisse überprüfen und vertiefen. Besonders lobenswert sind die zahlreichen Querverweise zwischen den einzelnen Kapiteln. Die Frage „wo wurde das gleich wieder eingeführt“ wird sich folglich nur selten stellen. Wenn doch, so hilft hoffentlich das Indexregister weiter, das aber nach meinem Empfinden ruhig umfangreicher hätte ausfallen dürfen.

Die ersten „Flugstunden“ finden inhaltlich noch am Boden statt, denn auf dem Programm steht zunächst die „Kartographie“, also z. B. die Einführung in das Konzept der Potentialhyperfläche sowie die Lokalisierung und Charakterisierung stationärer Punkte auf derselben. So gerüstet können nun die verschiedenen „Maschinen“ (sprich: Methoden der Computerchemie) vorgestellt werden. Diskutiert werden zunächst die Kraftfeldmethoden, dann die Hückel-Molekülorbital-Methode und deren Erweiterung (EHT), um schließlich zu den Ab-initio-Methoden zu gelangen, von denen die Hartree-Fock-Methode und die Möller-Plesset-Störungstheorie zweiter Ordnung detaillierter besprochen werden, während die echten „Hightec-Flieger“, die mitunter vor Reglern und Kontrollleuchten nur so strotzen, recht knapp angeschnitten werden. Den Abschluss bilden die semiempirischen Methoden sowie die Dichtefunktionaltheorie.

Alle Konzepte werden sehr behutsam eingeführt, selbst die erforderlichen Grundlagen der linearen Algebra. Für Neueinsteiger sicher sehr ansprechend ist die in kleinen Schritten entwickelte Diskussion der Funktionsweise der verschiedenen Methoden anhand numerischer Beispiele. So wird etwa an schlichten Hartree-Fock-Energien ein einfaches Kraftfeld parametrisiert und dieses dann zur Berechnung von Punkten einer Potentialhyperfläche eingesetzt. Oder es wird (dem Buch von Szabo und Ostlund folgend) das protonierte Heliumatom zur Veranschaulichung der Arbeitsweise eines Hartree-Fock-Programmes herangezogen. Anwendungen der Computerchemie in

der Thermodynamik werden ferner Schritt für Schritt erörtert, wobei auch die G1-, G2- und G3-Methoden sowie die Methoden mit vollständigem Basisatz (CBS) vorgestellt werden.

Die kurze Darstellung der historischen Entwicklung der Quantenmechanik ist sicher eine Sache des Geschmacks. Wenig gelungen ist die (ohnehin knappe) Einführung in die Grundlagen der Dichtefunktionaltheorie. Die Beschränkung der Diskussion der Basisätze auf solche vom Pople-Typ ist unerfreulich (hier ist bei triple-zeta Schluss, aber damit wird man sich nicht immer zufriedengeben wollen). Leider wird die sehr schöne Idee des Testparcours geschmälert durch einige Unstimmigkeiten, die das Bild verzerren (für gewöhnlich wird 133.6 pm und nicht 131.8 pm als experimentelle C=C-Bindungslänge im Propen zitiert; viele der Testmoleküle waren Teil der Trainingsätze zur Parametrisierung der Kraftfeld- und der semiempirischen Methoden; die als MP2-Dipolmomente angegebenen Werte sind vielmehr die an der MP2-Gleichgewichtsgeometrie berechneten HF-Dipolmomente, die „wahren“ MP2-Dipolmomente schlagen sich deutlich besser; was mögen Koopmans-Theorem-Energien, die auf dem MP2-Niveau berechnet wurden, sein?). Problematisch finde ich, speziell für Nachschlager, oftmals zunächst recht allgemeingültig klingende Aussagen. Die dann mitunter sehr viel später erfolgende Richtigstellung durch entsprechende Einschränkungen droht nämlich leicht überlesen zu werden. Viele Leser werden schließlich eine eingehende Diskussion von Übergangsmetallverbindungen und offenschaligen Systemen vermissen, ebenso wie die Diskussion von QM/MM-Hybridmethoden, welcher Couleur auch immer.

Wie schreibt Lewars so schön in seinem Vorwort? „Read the book, get some programs [warum werden kostenfreie Programme wie NWChem, NAMD und Dalton nicht erwähnt?] and go out and do computational chemistry!“ Auf die Fliegerei übertragen: Lies, kauf dir einen Jet und flieg! Nach der Lektüre des Buches wird dieses bei geringer Windstärke mit einem leicht beherrschbaren Kleinflugzeug per Autopilot wahrscheinlich sogar gutgehen – Kunststücke wird man ohnehin kaum er-

warten. Da aber viele der zahlreichen Warnsignale, die den Experten veranlassen, sich in keinen anderen als in den vorlauter Elektronik nur schwer zu überschauenden, technisch hochgerüsteten Düsenjet zu setzen, kaum Erwähnung finden oder dazu auf andere Literatur verwiesen wird, und da desweiteren der Umgang mit widrigen Winden oder gar Turbulenzen nur an wenigen Beispielen demonstriert wurde, geht es dem Leser möglicherweise eher wie dem Filmhelden Indiana Jones, der nach seinen Flugfähigkeiten befragt antwortet: „Fliegen: Ja! Landen: Nein!“ Eventuell reicht ersteres aber zunächst auch völlig aus, um von der Faszination der Fliegerei ergriffen zu werden. Für die sichere Landung wird man aber meines Erachtens zwingend ergänzende Werke benötigen.

Robert Berger
Institut für Chemie
Technische Universität Berlin

DOI: 10.1002/ange.200485057

Kristalle: Spielfeld der Elektronen



Von Halbleitern und Supraleitern. Von Rudolf Huebener. Wiley-VCH, Weinheim 2003. 162 S., Broschur, 29.90 €.—ISBN 3-527-40431-7

Schmökern Sie gerne? Wollten Sie schon immer einmal mit klaren Worten erklärt bekommen, wie man geringste elektrische Ströme im menschlichen Gehirn messen kann oder was ein Riesenmagnetwiderstand oder etwa ein Spinventil ist? Wenn dem so ist, und Sie sich von elektronischen und quantenmechanischen Phänomenen faszinie-

ren lassen, dann wird Ihnen dieses Buch kurzweilige Lesestunden bereiten – und keine Angst, hier lauern keine abschreckenden, komplizierten mathematischen Formeln.

In *Kristalle: Spielfeld der Elektronen* lädt Rudolf Huebener einen weiten Leserkreis ein, sich von Festkörpern und ihren elektronischen Eigenschaften begeistern zu lassen. Diese Faszination packt auch Leser ohne detaillierte Fachkenntnisse – der Autor lässt Raum für Erklärungen und Bilder und macht so die entscheidenden Punkte zum Greifen deutlich. Rudolf Huebener schreibt eine einfache und direkte Sprache und lockert die Materie mit zahlreichen Kurzbiographien auf, die einem auch die persönlichen Wege und Schicksale einzelner Pioniere der Festkörperforschung nahebringen. Man fühlt sich dann bisweilen an das Buch *Out of the Crystal Maze* von Lillian Hoddeson, Ernest Braun, Jürgen Teichmann und Spencer Weart erinnert, doch Rudolf Huebener geht nicht zuletzt zeitlich weiter, indem er dem Leser auch die technischen Konsequenzen der zahlreichen Entdeckungen nahebringt.

Die zwölf Kapitel des Buches umfassen bedeutend mehr als der Untertitel „Von Halbleitern und Supraleitern“ ahnen lässt: die rasante Entwicklung der Instrumententechnik, Gitterstrukturen und Gitterschwingungen, Typen von elektrischen Leitern, die Wechselwirkung zwischen Elektronen und Magnetfeldern, Supraleiter und Hochtemperatursupraleiter, kollektive magnetische Effekte und Spinventile, Nanostrukturen, Quantendrähte und Quantenpunkte bis hin zu Fehlern und Versetzungen in Kristallen und ihren katastrophalen oder gewinnbringenden Folgen. Ein kurzer Anhang, der die Nobelpreise in Chemie und Physik mit engem Bezug zur Festkörperforschung auflistet, rundet das Buch ab. Zu all diesen Themen werden bereits bestehende technische Anwendungen erörtert und mögliche Perspektiven aufgezeigt. Somit bleiben die elektronischen Quantenphänomene nichts Esoterisches, sondern nehmen für den Leser Gestalt an.

Dieses Buch ist ein weiterer Schritt in eine richtige Richtung. Es ist allgemeinverständlich geschrieben, und jedermann wird es lesen können. Es wendet sich an den interessierten Laien ohne Fachkenntnisse, an Schüler, Lehrer, Vertreter aus Wirtschaft und Politik. Es führt ein, erklärt, fasziniert und bringt ein enorm wichtiges Feld der Wissenschaft nahe. Es kann als Einführung dienen oder auch zum Rekapitulieren und Vertiefen einst gelernter Studieninhalte. Wer dann vielleicht doch noch mehr möchte, dem steht die Fachliteratur offen, oder er kann sich ähnlich gut verständlichen Büchern wie Jürgen Audretschs *Verschränkte Welt* widmen.

Ein paar kleine Ungereimtheiten und unglückliche Formulierungen finden sich leider dennoch: z.B. auf S. 21 die Erklärung, dass die Zentralkraft, die ein Elektron im Synchrotron auf eine Kreisbahn zwingt, im Gleichgewicht durch eine Zentrifugalkraft kompensiert würde; das Bändermodell eines Halbleiters, jedoch mit teilgefülltem Leitungsband auf S. 34; oder das Vertauschen der Bilder b und c in Abbildung 2.6. Den Abbildungen hätte zudem ein einheitliches Layout (Schriftbild und -größe) sicher gut getan. Ein interessierter Leser wird ebenso eine kurz kommentierte Bibliographie vermissen – schade, dass dies ausgelassen wurde. Dagegen ist das geometrische Konzept der Fermi-Oberfläche im Impulsraum, auf das im Laufe des Textes an mehreren Stellen immer wieder zurückgegriffen wird, wunderbar erklärt.

Zwölf Kapitel, rund 150 Seiten und etwa 100 Abbildungen für knapp 30 Euro machen Lust auf mehr. Ich jedenfalls habe das Buch gerne zweimal durchgelesen und mich zweimal von seinem Inhalt begeistern lassen. Als Lektüre generell empfehlenswert – für alle.

Peter Kroll
Institut für Anorganische Chemie
Technische Hochschule Aachen