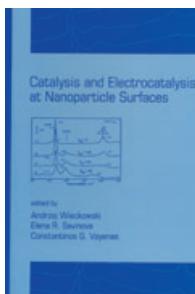


## Catalysis and Electrocatalysis at Nanoparticle Surfaces



Herausgegeben von Andrzej Wieckowski, Elena R. Savinova und Constantinos G. Vayenas. Marcel Dekker, Inc., New York 2003. 970 S., geb., 225.00 \$.—ISBN 0-8279-0879-2

Vorliegendes Werk enthält eine von führenden Experten verfasste Sammlung von Aufsätzen zu den Themen Elektrocatalyse, Trägerkatalysatoren und Nanomaterialien. Die Themen sind zeitnah und an der aktuellen Forschung orientiert. Das große Verdienst dieses Buches ist es, bislang eher separat erforschte Gebiete zusammenzuführen: die Elektrochemie mit den Oberflächenwissenschaften oder grundlagenorientierte Einkristallstudien mit anwendungsorientierten Studien zu Trägerkatalysatoren. Hauptbeweggrund für den interdisziplinären Ansatz der Forschungsprojekte war häufig das Ziel, die wissenschaftlichen Grundlagen zur Optimierung von Brennstoffzellen zu erarbeiten. Der Rahmen ist diesbezüglich weit gespannt und umfasst sowohl grundlegende (Hayden, Collins, Stimming) als auch präparative Aspekte (Bönnemann, Richards).

Der Schwerpunkt des Buches liegt auf wissenschaftlich-akademischen, weniger auf technischen Aspekten. Den Anfang macht ein ausgezeichneter Aufsatz über den Leistungsstand quantenchemischer Modellrechnungen (Koper et al.). In mehreren der folgenden Beiträge wird der große Entwicklungssprung deutlich, der in den letzten Jahren bei der Forschung zu trägerfixierten Metallkatalysatoren und Nanoteilchen gemacht wurde (Henry, Santra und Goodman, Mukerjee, Haruto und Tsubota). Mehrfach beschrieben werden die Entwicklungen bei der Anwendung relevanter Untersuchungsmethoden wie der NMR-Spektroskopie (Tong und van der Klink), der Röntgenabsorptionsspektroskopie (Mukerjee) und der Rastertunnelmikroskopie (Collins, Stimming). Eine Brücke zwischen

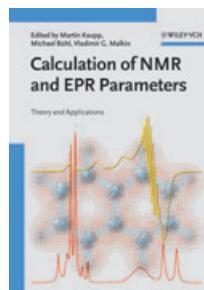
den katalytischen Eigenschaften von Trägerkatalysatoren und der an Metall/Festelektrolyt-Systemen beobachteten elektrochemischen Beschleunigung katalytischer Reaktionen schlägt Vayenas in seinem Beitrag zum Spillover-Effekt. Schuster und Ertl demonstrieren das Potenzial elektrochemischer Methoden zur Mikro- und Nanostrukturierung von Oberflächen durch Verwendung ultrakurzer Pulse auf einer Tunnelspitze.

Der Leser kann sich anhand der 790 Seiten einen hervorragenden Überblick über den aktuellen Entwicklungsstand einer Reihe wichtiger Forschungsgebiete verschaffen. Den Herausgebern dieses Buches gilt Anerkennung für eine exzellente Zusammenstellung.

Ronald Imbihl

Institut für Physikalische Chemie und Elektrochemie  
Universität Hannover

## Calculation of NMR and EPR Parameters



Herausgegeben von Martin Kaupp, Michael Bühl und Vladimir G. Malkin. Wiley-VCH, Weinheim 2004. 603 S., geb., 169.00 €.—ISBN 3-527-30779-6

Die quantenchemische Berechnung von NMR- und EPR-Parametern hat sich in den letzten Jahrzehnten zu einer wichtigen Brücke zwischen Theorie und Experiment entwickelt, sodass ein Überblick in Form eines Buches mehr als überfällig erscheint. Durch Rechnungen wird die häufig schwierige Zuordnung gemessener Daten erleichtert oder gar erst möglich, sodass neue Einblicke in Struktur und Funktion molekularer Systeme gewonnen werden können. Unterstützt durch zunehmend schnelle Computer und vor allem durch immer genauere und effizientere Methoden zur genäherten Lösung der Schrödinger-Gleichung lassen sich mittlerweile

NMR- und EPR-Spektren für eine Vielzahl von Molekülen zuverlässig ab initio vorausberechnen. Das vorliegende Buch besteht aus einer Sammlung von 36 Beiträgen von 50 Autoren, die in fünf Teile sortiert sind: Einen einleitenden Teil mit fünf Beiträgen, gefolgt von Beiträgen, die in die Bereiche NMR und EPR eingeteilt sind, wobei eine weitere Trennung in Methoden und Anwendungen gewählt wurde.

Wie es sich bei einer Sammlung von Beiträgen verschiedener Autoren meist nur schwer vermeiden lässt, unterscheiden sich die Kapitel in Schreibstil und Anspruch an den Leser zum Teil sehr deutlich: Von Beiträgen über die historische Entwicklung der Methoden und Sammlungen nützlicher Verweise in die Originalliteratur, über Artikel mit detailliertem mathematisch-physikalischem Einblick in die Methodik von Berechnungen in magnetischen Feldern, bis hin zu beispielhaften chemischen Anwendungen kann sich jeder Leser etwas herauspicken. Auch die Zahl der insgesamt über 650 Gleichungen variiert je nach Beitrag zwischen null und mehr als 200, wobei die verwendeten Notationen je nach Autor differieren können. Einige Beiträge setzen fundierte Grundlagen in Physik und Quantenchemie voraus, die selbstverständlich durch andere Lehrbücher abgedeckt werden müssen. Ebenso kann das Buch weder ein Lesen der Originalliteratur noch das Studium bereits publizierter Übersichten ersetzen. Es liefert jedoch einen sehr guten Überblick bisheriger Entwicklungen in der Berechnung von NMR- und EPR-Eigenschaften. Die variierende Darstellungsweise der Beiträge kann andererseits für den Leser auch sehr nützlich sein, da methodische Aspekte zum Teil mehrfach erklärt und so auch unterschiedliche Blickwinkel deutlich werden.

Die Berechnung von NMR- und EPR-Parametern ist eng verknüpft mit der Lösung des Eichursprungsproblems. Zwar gab es bereits recht früh nach Einführung der Schrödinger-Gleichung entscheidende methodische Arbeiten zur Theorie von Atomen und Molekülen in magnetischen Feldern, der eigentliche Durchbruch begann jedoch erst 1982 mit der Entwicklung effizienter Methoden und ihrer Umsetzung in Computerprogramme. Die sich anschließende

rasche Entwicklung immer genauerer und effizienterer Methoden wird im vorliegenden Buch umrissen, ebenso wie einige der hierfür wichtigen Grundlagen. Die Berechnung der verschiedensten NMR- und EPR-Eigenschaften wird im Rahmen der unterschiedlichsten Näherungen diskutiert: von semiempirischen Ansätzen, über Hartree-Fock- und Dichtefunktional-Methoden, bis hin zu hochgenauen Coupled-Cluster- oder auch Multireferenz-Ansätzen. Dabei wird die für die Quantenchemie so wichtige Hierarchie von Ab-initio-Methoden deutlich, die für die systematische Untersuchung der Genauigkeit genauerter Lösungen der Schrödinger-Gleichung unerlässlich ist. Zwar sind die genauesten Verfahren wegen des hohen Rechenaufwandes bislang auf kleinere Molekülsysteme beschränkt, die Hierarchie ist jedoch auch für die „Kalibrierung“ der zum Teil sehr populären Dichtefunktional-Methoden von entscheidender Bedeutung, da für diese bislang keine systematische Annäherung der exakten Lösung möglich ist. Darüber hinaus gibt das Buch einen Einblick in die Behandlung relativistischer Effekte bei der Berechnung magnetischer Eigenschaften sowie in die Berücksichtigung von Einflüssen der Moleküldynamik und des Lösungsmittels. Die meisten Beiträge des Buches befassen sich mit der Methodik der Berechnung magnetischer Eigenschaften. Zehn Artikel schildern einige Beispiele anwendungen, können aber selbstverständlich nicht als erschöpfernder Überblick über die Literatur verstanden werden, sondern eher als eine kleine Motivation für weitere spannende Forschung.

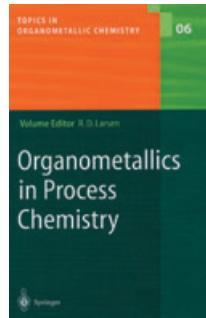
Quantenchemische Berechnungsmethoden sind zwar weit verbreitet und etabliert – auch durch die kommerziell verfügbaren Programmpakete –, jedoch ist die Quantenchemie ein sehr dynamisches und verhältnismäßig junges Gebiet. Entsprechend ist auch in Zukunft eine Vielzahl methodischer Neuerungen zu erwarten, die in Kombination mit immer schnelleren Computern ein faszinierendes Zusammenspiel von Theorie und Experiment ermöglichen werden. NMR- und EPR-Daten wird hierbei zweifellos eine bedeutende Rolle zukommen. Wer sich über Kürzel wie GIAO, IGLO, LORG, ARCS oder NICS informieren möchte, dem bietet

das Buch einen beachtlichen Einblick in die Entwicklungen bei der Berechnung von NMR- und EPR-Spektren und eine Vielzahl von Ausgangspunkten für weiteres Stöbern in der Originalliteratur.

Christian Ochsenfeld  
Theoretische Chemie  
Universität Tübingen

DOI: [10.1002/ange.200485224](https://doi.org/10.1002/ange.200485224)

### Organometallics in Process Chemistry



Band 6 der Reihe  
Topics in Organometallic Chemistry.  
Herausgegeben  
von Robert D.  
Larsen. Springer  
Verlag, Heidelberg  
2004. 295 S., geb.,  
213.95 €.—ISBN  
3-540-01603-1

Aus den Forschungslabors pharmazeutischer Unternehmen sind metallorganische Synthesen heute nicht mehr wegzudenken. Insbesondere die vergangenen Jahre haben eine sprunghafte Entwicklung hin zu einer kaum mehr überschaubaren Zahl an Anwendungen metallorganischer Reagentien gesehen, und die Vergabe des Nobelpreises an Knowles, Noyori und Sharpless 2001 unterstreicht nachdrücklich die immense Bedeutung metallorganischer Transformationen in der modernen organischen Synthesechemie. Die Entwicklung hat zudem längst Einzug in die Präparation von Pharmaka im technischen Maßstab gehalten, was einen Überblick über dieses sich rasant entwickelnde Gebiet dringend erforderlich machte. Hier setzt vorliegendes Buch an.

Die einzelnen Kapitel, von führenden Industriechemikern kompetent verfasst, geben jeweils den aktuellen Entwicklungsstand wieder. Der Fokus liegt entweder auf einem bestimmten Metall (Li, Ti, Rh, Ru, Pd) oder Liganden für hochselektive technische Prozesse oder auf der Erzeugung spezieller Zielstrukturen durch metallhaltige Reagentien. Abgerundet wird das Buch mit einem

Kapitel über die Entfernung von Metallen nach abgeschlossener Reaktion aus einem technischen Prozess.

Bei nur 295 Seiten mit zehn in ihrer Bedeutung gut zusammengestellten Einzelaufsätzen sollte jeder Interessierte schnell und zuverlässig finden können, was er sucht. Das Buch eignet sich als Nachschlagewerk und kann neue Ideen anregen. Es liefert dem Industriechemiker rasch mögliche Lösungsansätze für ein bestimmtes Syntheseproblem und dem akademischen Forscher Daten über die geschichtliche Entwicklung einzelner Reaktionen sowie das ein oder andere aktuelle Anwendungsbeispiel für die Lehre. Die Aufgliederung der Inhaltsverzeichnisse in eine kurze Übersicht zu Beginn des Buchs und zusätzliche Untergliederungen am Anfang jedes Kapitels erleichtert die Suche nach der gewünschten Information. Dies kommt einer Verwendung als schnelles Nachschlagewerk entgegen.

Das Buch ist hinsichtlich der Auswahl der Beispiele klar für eine industrielle Klientel ausgelegt und reicht naturgemäß als Highlight-Sammlung in seiner Breite nicht an Lehrstandards wie das allseits bekannte „Schlosser-Manual“ heran (siehe Rezension in *Angew. Chem.* **2003**, 115, 504). Dennoch wird in den einzelnen Kapiteln vornehmlich auf wissenschaftliche Originalliteratur und auf spezielle Monographien verwiesen (bis 2001, z.T. auch 2002). Die für die industrielle Anwendung wohl ebenso wichtige Patentliteratur steht demgegenüber zurück, an dieser Stelle besteht Verbesserungsbedarf.

*Organometallics in Process Chemistry* ermöglicht ohne Anspruch auf Vollständigkeit, einen schnellen und gezielten Einstieg in pharmazeutisch-industriell wichtige metallorganische Reaktionen. Damit gehört es in jedem Fall in einschlägige Firmenbibliotheken. Darüber hinaus kann es auch Hochschullehrern wertvolle Informationen liefern, sodass es – insbesondere als Teil der Reihe „Topics in Organometallic Chemistry“ – auch in den Universitäten nicht fehlen sollte.

Martin Bröring  
Fachbereich Chemie  
Universität Marburg