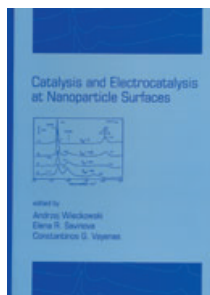


### Catalysis and Electrocatalysis at Nanoparticle Surfaces



Herausgegeben von *Andrzej Wiekowski, 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 Elektrokatalyse, 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 ausgezeichnete 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 Nanoteilen 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.

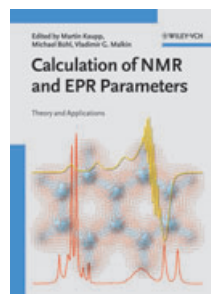
Der Leser kann sich anhand der 790 Seiten einen hervorragenden Überblick über den aktuellen Entwicklungsstand einer Reihe wichtiger Forschungsgebiete verschaffen. Den Herausgebern dieses Buches gilt Anerkennung für eine exzellente Zusammenstellung.

Ronald Imbühl

Institut für Physikalische Chemie und Elektrochemie  
Universität Hannover

DOI: 10.1002/ange.200385166

### 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 Eichsprungsproblems. 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