



Design of Heterogeneous Catalysts

Wie die Herausgeberin im Vorwort betont, wird der heterogenen Katalyse eine entscheidende Rolle hinsichtlich der sauberen Zukunft unseres Planeten, einer stabilen Wirtschaft und der Verwendung erneuerbarer Energiequellen zufallen. Das Erreichen dieser Ziele wird stark davon abhängen, ob Prozesse mit hoch aktiven und selektiven Heterogenkatalysatoren entwickelt werden können. Derzeitige Synthesemethoden für Katalysatoren ergeben jedoch noch keine Materialien, die diesen Vorgaben genügen. Ein wichtiger Zweig der Grundlagenforschung beschäftigt sich mit dem Aufstellen von Struktur-Funktions-Beziehungen, doch oft werden Katalysatormaterialien mit schlecht definierten Strukturen eingesetzt, was den Nutzen dieser Beziehungen infrage stellt. Eine wachsende Gruppe von Forschern hat erkannt, dass neue Methoden für das Design und die Synthese von Heterogenkatalysatoren erforderlich sind. Anregungen für das Katalysatordesign stammen aus vielerlei Quellen: Katalysatoren nach natürlichem Vorbild (oder biomimetische Katalysatoren), auf der Grundlage von Selbstorganisation oder ermittelt durch First-principles-Rechnungen. Die Synthesemethoden für Katalysatoren bestimmter Zusammensetzung und Struktur der aktiven Zentren sowie der lokalen Umgebung um diese aktiven Zentren werden von Experten vorgestellt.

In zwölf Kapiteln bestreicht das Buch Themen zu Synthese, Charakterisierung und Modellierung katalytischer Materialien. Die Synthese steht dabei klar im Vordergrund, doch jedes Kapitel enthält ausreichende Informationen zur Charakterisierung der Materialien sowie eine Bewertung ihrer Leistungsfähigkeit. Die Kapitel „Optimal Design of Hierarchially Structured Porous Catalysts“ und „Theory-Aided Catalyst Design“ verdeutlichen die Effizienz des computerchemischen Katalysatordesigns, während das Kapitel „Design of Bimetallic Surfaces“ belegt, dass Katalysatoren, für die nach Rechnungen eine höhere Aktivität und Selektivität vorhergesagt wurde, synthetisiert werden können und sich in Experimenten auch als besonders leistungsfähig erwiesen.

Viele Kapitel ergänzen einander gut, und es wäre von Vorteil gewesen, hätte die Herausgeberin in wichtigen Fällen auf entsprechende Verflechtungen hingewiesen. So beschreibt das Kapitel „Optimal Design of Hierarchially Structured Porous Catalysts“ das Design von Katalysatoren mit bimodaler Porengrößenverteilung, um die Effizienz diffusionskontrollierter Reaktionen zu erhöhen. In Kapitel 12 wird dann eine experimentelle Methode – die Verwendung von zwei Templaten –

für die Synthese poröser Festkörper mit bimodaler Porengrößenverteilung vorgestellt; ein Zusammenhang zwischen den beiden Kapiteln wird allerdings nicht hergestellt. In einigen Fällen enthalten verschiedene Kapitel auch identische Informationen. So beschreiben Chandler et al. die Verwendung von Dendrimeren beim Katalysatordesign, einschließlich der Fähigkeit von Dendrimeren, als Template für reduzierte Metallnanopartikel zu wirken und diese zu stabilisieren. Zhu et al. streifen im Kapitel „Self-Assembled Materials for Catalysis“ dasselbe Thema auf weniger als einer Seite, was redundant und unnötig erscheint.

Lediglich ein Kapitel befasst sich ausschließlich mit der Charakterisierung von Heterogenkatalysatoren; dies ist etwas enttäuschend, wenn man bedenkt, dass die Entwicklung der Charakterisierungsverfahren zwingend mit den Fortschritten bei der Katalysatorsynthese schritthalten muss. Solche Analysetechniken müssen energie-, zeit- und raumaufwendig sein, damit verlässliche Struktur-Funktions-Beziehungen erstellt werden können. Das Kapitel über die In-situ-Röntgenabsorptionstechniken (wie XAS) für die Charakterisierung von Katalysatoren ist dafür aber gut geschrieben; die Autoren verbinden eine Beschreibung des Wissensstands mit einem Ausblick auf die Perspektiven der XAS in der Katalysatorforschung.

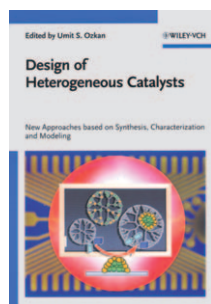
Es ist der Herausgeberin gelungen, neue Materialien und Konzepte und klassische Themen der Katalysatorsynthese gemeinsam darzustellen. Das informative Kapitel zu offenen Metallnetzwerken und deren Anwendung in der heterogenen Katalyse liefert eine gute Einführung in dieses Gebiet, ebenso das Kapitel zur Synthese katalytischer Nanostrukturen, die biologischen Nanomotoren nachempfunden sind. Aus Sicht des Rezensenten fehlt aber ein Kapitel über die Synthese molekülbasierter Heterogenkatalysatoren durch Immobilisierung von Organometallverbindungen. Ein Kapitel zu diesem weit entwickelten Gebiet des Katalysatordesigns hätte das Buch thematisch abgerundet.

Im Großen und Ganzen bietet das Buch eine ansprechende Auswahl an Kapiteln von Kennern der jeweiligen Forschungsgebiete. Es sollte einen Platz in der Bibliothek von Chemieingenieuren, Chemikern und Materialwissenschaftlern finden, zumal wenn sich diese mit der Katalysatorsynthese beschäftigen. Ich würde mich freuen, wenn Herausgeber und Verleger sich zu einer weiteren Auflage von *Design of Heterogeneous Catalysts* entschließen könnten, um die kommenden Entwicklungen in diesem schnell wachsenden Gebiet zu erfassen.

Robert M. Rioux

Department of Chemical Engineering
The Pennsylvania State University (USA)

DOI: 10.1002/ange.200902982



Design of Heterogeneous Catalysts
New Approaches based on Synthesis, Characterization, and Modeling. Herausgegeben von Umit S. Ozkan. Wiley-VCH, Weinheim 2009. 322 S., geb. 139.00 €, ISBN 978-3527320790