



Die folgenden Zuschriften wurden von mindestens zwei Gutachtern als sehr wichtig (very important papers) eingestuft und sind in Kürze unter www.angewandte.de verfügbar:

Y. H. Kim, S. Banta*

Complete Oxidation of Methanol in an Enzymatic Biofuel Cell by a Self-Assembling Hydrogel Created from Three Modified Dehydrogenases

P. G. Bomben, T. J. Gordon, E. Schott, C. P. Berlinguette*

A Trisheteroleptic Cyclometalated Ru(II) Sensitizer that Enables High-Power Output in a Dye-Sensitized Solar Cell

X. Xin, M. He, W. Han, J. Jung, Z. Lin*

Low-Cost Counter Electrodes for High-Efficiency Dye-Sensitized Solar Cells

K. M. Harkness, A. Balinski, J. A. McLean,* D. E. Cliffe*

Nanoscale Phase Segregation of Mixed Thiolates on Gold Nanoparticles

S. J. Zuend, O. P. Lam, F. W. Heinemann, K. Meyer*

Insertion of Carbon Dioxide into Uranium-Activated Dicarbonyl Complexes

Y. Filinchuk,* Bo Richter, T. R. Jensen,* V. Dmitriev, D. Chernyshov, H. Hagemann

Porous and Dense $\text{Mg}(\text{BH}_4)_2$ Frameworks: Synthesis, Stability, and Reversible Absorption of Guest Species

A. Ardèvol, C. Rovira*

The Molecular Mechanism of Enzymatic Glycosyl Transfer with Retention of Configuration: Evidence for a Short-Lived Oxocarbenium Ion Like Species

C. Zhang, Z. Xu, L. Zhang, N. Jiao*

Copper-Catalyzed Aerobic Oxidative Coupling of Aryl Acetaldehydes with Anilines Leading to α -Ketoamides



„Mit achtzehn wollte ich entweder Physiker oder Chemiker werden.“

Ich warte auf die Entdeckung einer zielführenden Therapie gegen Alzheimer ...“

Dies und mehr von und über Hans-Joachim (Hajo) Freund finden Sie auf Seite 10192.

Autoren-Profil

Hans-Joachim (Hajo)

Freund _____ 10192 – 10193



J. F. Hartwig



J. Rebek, Jr.



M. T. Reetz

Nachrichten

Einstein-Gastprofessur:

J. F. Hartwig _____ 10194

Nichols-Medaille:

J. Rebek, Jr. _____ 10194

Otto-Hahn-Preis und Tetrahedron-Preis:

M. T. Reetz _____ 10194

Bücher

Mössbauer Spectroscopy and Transition Metal Chemistry

Philipp Gütlisch, Eckhard Bill, Alfred X. Trautwein

rezensiert von T. Glaser _____ 10195

Chemie über den Wolken ... und darunter

Reinhard Zellner

rezensiert von G. Friedrichs _____ 10196

Fritz-Haber-Institut

Chemiegeschichte

B. Friedrich,* D. Hoffmann,
J. James — 10198 – 10225

One Hundred Years of the Fritz Haber
Institute



Ein Rückblick: Die heute Fritz-Haber-Institut genannte Einrichtung sollte das befürchtete Ende der deutschen technischen und wissenschaftlichen Überlegenheit verhindern. Seine Geschichte – von der „goldenen Ära“ in den 1920ern, über die kriegsbezogene Forschung während der Weltkriege und lähmenden Verluste infolge des Krieges, bis zu seinem beeindruckenden Wachstum in den 1950ern – ist ein Spiegel der Entwicklung Deutschlands im 20. Jahrhundert.

Essays

Chemiegeschichte

M. Dunikowska,*
L. Turko* — 10226 – 10240

Fritz Haber – ein verfehmter Gelehrter

Immer wieder präsent und doch immer entfernter im Zeitenstrom, bewegt Fritz Haber nach wie vor die Gemüter. Unter den zahlreichen aus Breslau stammenden hochkarätigen Persönlichkeiten scheint es keine weitere so kontroverse wie ihn zu geben, den Entdecker der Ammoniaksynthese und späteren Pionier der chemischen Kriegsführung an den Fronten des Ersten Weltkrieges.

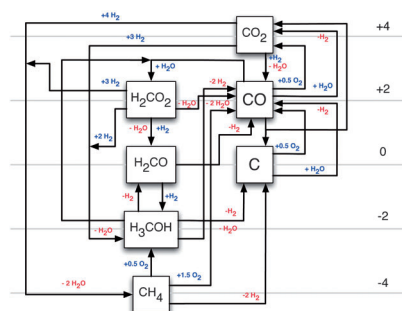


Aufsätze

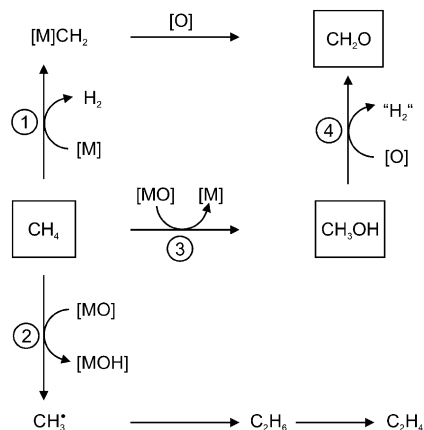
Heterogene Katalyse

H.-J. Freund,* G. Meijer,* M. Scheffler,*
R. Schlögl,* M. Wolf* — 10242 – 10275

Die CO-Oxidation als Modellreaktion für
heterogene Prozesse



Beste Referenzen: Der enorme Fortschritt im grundlegenden Verständnis heterogener Katalysen basiert zu einem erheblichen Teil auf Studien der CO-Oxidation als Beispielreaktion für heterogene Prozesse. Experimentelle und theoretische Ergebnisse zu dieser scheinbar simplen Reaktion werden vorgestellt, und es wird aufgezeigt, wie sich hieraus allgemeine Schlussfolgerungen über heterogene Reaktionen ableiten lassen.

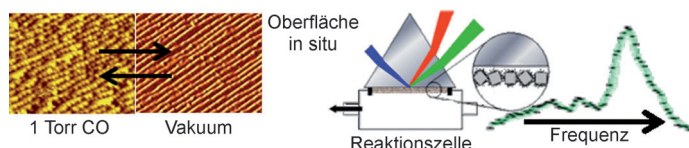


Elementarschritte in der thermischen Aktivierung von Methan werden aus experimenteller und theoretischer Sicht beleuchtet; den größten Einfluss auf die metallorganische Chemie von Methan haben relativistische Effekte, Zweizustandsreaktivität, Clustergröße und Ligandeneffekte.

Gasphasenchemie

H. Schwarz* — 10276 – 10297

Chemie mit Methan: Studieren geht über Probieren!



Mehr Realismus bitte: Unter realistischen Reaktionsbedingungen, d. h. bei hohen Drücken oder in Lösung, werden oftmals abweichende Adsorbat- und Oberflächenstrukturen, Zusammensetzungen und Dynamiken als unter Vakuumbedingungen

beobachtet. Speziell entwickelte Messinstrumente ermöglichen eine Erforschung von Grenzflächenphänomenen unter realitätsnahen Bedingungen auf molekularer Ebene.

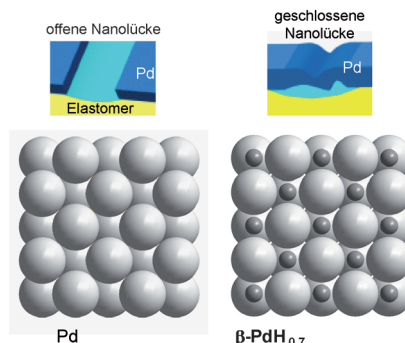
Kurzaufsätze

In-situ-Analyse von Oberflächen

G. A. Somorjai,* S. K. Beaumont,
S. Alayoglu — 10298 – 10311

Bestimmung der Struktur, Zusammensetzung und Dynamiken molekularer Oberflächen unter Reaktionsbedingungen bei hohen Drücken und an der Fest-flüssig-Phasengrenzfläche

Wasserstoffschwamm: Die reversible Ausdehnung von Palladium-Nickel-Legierungen nach Wasserstoffabsorption verschließt mechanisch die Nanolücken in rissigen Pd-Ni-Filmen auf Elastomerträgern, sodass elektrischer Strom fließen kann (siehe Bild). Wenn der Wasserstoff entfernt wird, kehrt das Elastomer in seinen Ausgangszustand zurück, und zahlreiche potenzielle Bruchkontakte öffnen sich entlang der Risse.



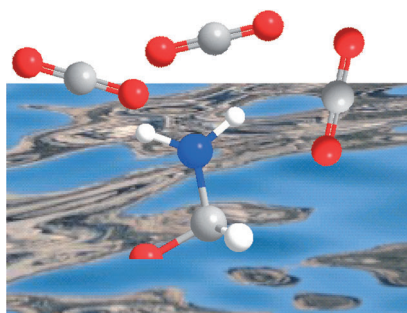
Highlights

Chemische Sensoren

A. Gurlo,* D. R. Clarke — 10312 – 10314

Hochempfindlicher Wasserstoffnachweis mithilfe von rissigen Palladiumfilmen auf nachgiebigen Substraten

Oberflächenforschung trifft auf Flüssigkeiten: Mit neuen Methoden der Photoelektronenspektroskopie sowie neuen Materialklassen wurde ein tieferer Einblick in entscheidende Vorgänge bei der Abscheidung von Kohlendioxid in Flüssigkeiten bei Prozessen der CO₂-Abscheidung und -Speicherung gewonnen, z. B. bei der selektiven CO₂-Absorption in wässrigem Monoethanolamin (siehe Bild; grau C, weiß H, blau N, rot O).



Kohlendioxid-Abscheidung

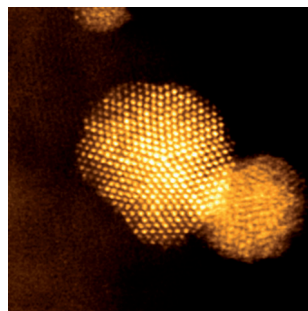
F. Maier* — 10315 – 10316

Der Kohlendioxid-Abscheidung an der Gas-flüssig-Grenzfläche auf der Spur

Zuschriften

Selektive Oxidationen

G. L. Brett, Q. He, C. Hammond,
P. J. Miedziak, N. Dimitratos, M. Sankar,
A. A. Herzing, M. Conte,
J. A. Lopez-Sanchez, C. J. Kiely,
D. W. Knight, S. H. Taylor,
G. J. Hutchings* _____ **10318–10321**



Legierte Au-Pt-Nanopartikel auf einem $\text{Mg}(\text{OH})_2$ -Träger (siehe STEM-HAADF-Bild) zeigen hohe Aktivitäten in der selektiven Oxidation von Polyolen mit molekularem Sauerstoff als Oxidationsmittel unter milden Reaktionsbedingungen und ohne Zusatz von Base.



Selective Oxidation of Glycerol by Highly Active Bimetallic Catalysts at Ambient Temperature under Base-Free Conditions

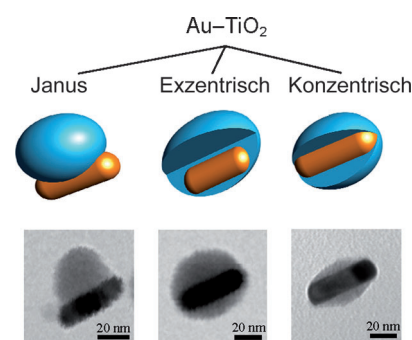
Nanostrukturen

Z. W. Seh, S. H. Liu, S. Y. Zhang,
M. S. Bharathi, H. Ramanarayan, M. Low,
K. W. Shah, Y. W. Zhang,*
M. Y. Han* _____ **10322–10325**



Anisotropic Growth of Titania onto Various Gold Nanostructures: Synthesis, Theoretical Understanding, and Optimization for Catalysis

Wachstumsschub: Ein einfacher Weg wurde gefunden, um das anisotrope Wachstum von TiO_2 auf unterschiedlich geformten Goldnanopartikeln in Richtung Janus-, exzentrischer oder konzentrischer Geometrie zu steuern (siehe Bild). Die Au-TiO_2 -Janus-Nanostrukturen sind nach Berechnungen energetisch stabil, und sie sind dank des auf einer Seite gut zugänglichen exponierten Goldkerns die katalytisch aktivsten unter den drei Formen.

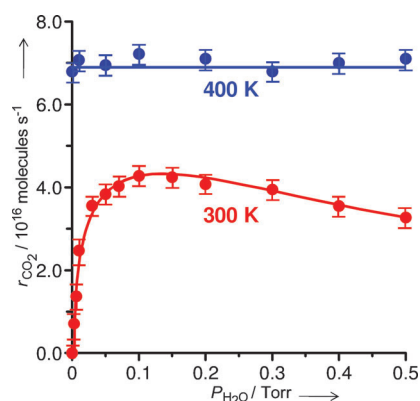


Goldkatalyse

T. Fujitani,* I. Nakamura _____ **10326–10329**



Mechanism and Active Sites of the Oxidation of CO over Au/TiO_2



Bei niedrigen Reaktionstemperaturen ($< 320 \text{ K}$) spielt Feuchtigkeit eine wichtige Rolle für die Oxidation von CO auf $\text{Au/TiO}_2(110)$ -Oberflächen, da sie die Reaktion vorantreibt, wohingegen bei hohen Temperaturen ($> 320 \text{ K}$) ein derartiger Effekt nicht auftritt. Dies lässt vermuten, dass sich der Reaktionsmechanismus und die aktiven Zentren mit der Temperatur verändern (siehe Bild; r_{CO_2} = Anteil an gebildetem CO_2 und $p_{\text{H}_2\text{O}}$ = Wasserdampfdruck)

Heterogene Katalyse

S. D. M. Jacques,* M. Di Michiel,
A. M. Beale,* T. Sochi, M. G. O'Brien,
L. Espinosa-Alonso, B. M. Weckhuysen,
P. Barnes _____ **10330–10334**

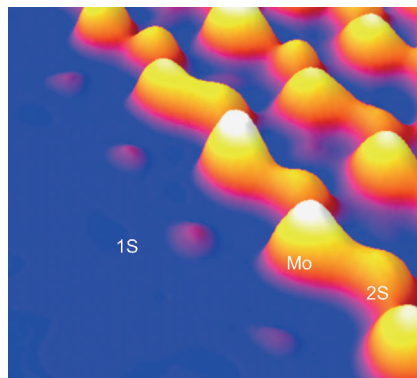


Dynamic X-Ray Diffraction Computed Tomography Reveals Real-Time Insight into Catalyst Active Phase Evolution



Farbenspiel: Die erste Dynamikstudie mit röntgenbeugungsgestützter Computertomographie erfasste die Strukturänderungen während der Präparation millimetergroßer industrieller Hydrierungskatalysatorkörper (siehe Bild; zeitlicher Verlauf von links nach rechts, Farben geben unterschiedliche Katalysatorphasen wieder). Die Methode hat das Potenzial zur chemischen Bildgebung makroskopischer Objekte, die physikochemischen Änderungen unterliegen.

Atome am Rande: Die atomaren Kanten des industriellen MoS₂-Nanokatalysators wurden durch einzelatomempfindliche Transmissionselektronenmikroskopie abgebildet (siehe Bild). Die beobachteten Kantenabschlüsse stimmen mit Voraussetzungen aus Modellstudien überein, und die Ergebnisse tragen dazu bei, die „Materiallücke“ in der Katalyse zu schließen.



Hochauflösende Mikroskopie

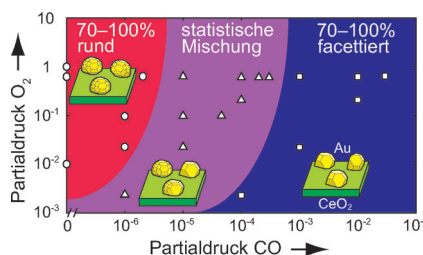


L. P. Hansen, Q. M. Ramasse, C. Kisielowski, M. Brorson, E. Johnson, H. Topsøe, S. Helveg* — 10335 – 10338

Atomic-Scale Edge Structures on Industrial-Style MoS₂ Nanocatalysts



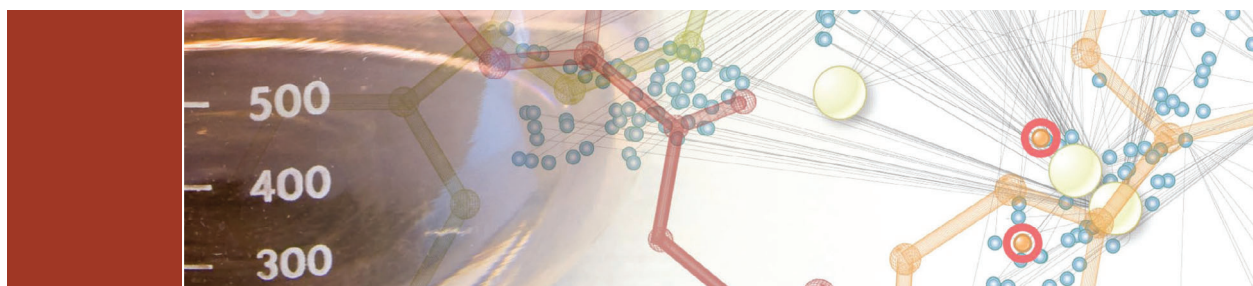
Die Morphologie von Gold-Nanopartikeln (GNPs) auf CeO₂-Trägern und unter verschiedenen CO- und O₂-Partialdrücken wird beschrieben; ihre Morphologie korreliert gut mit ihrer katalytischen Aktivität. Adsorbierte CO-Moleküle stabilisieren die {111}- und {100}-Flächen von GNP-Polyedern; O₂-Moleküle dissoziieren an den GNP-CeO₂-Grenzflächen unter Elektronenbestrahlung, was zu runden GNPs führt (siehe Diagramm).



Goldkatalyse

T. Uchiyama, H. Yoshida, Y. Kuwauchi, S. Ichikawa, S. Shimada, M. Haruta, S. Takeda* — 10339 – 10342

Systematic Morphology Changes of Gold Nanoparticles Supported on CeO₂ during CO Oxidation



Novartis Chemistry Lectureship

Novartis is pleased to announce the following Novartis Chemistry Lecturers for 2011 – 2012.

Yujiro Hayashi

Tokyo University of Science
Tokyo, Japan

Ernest Giralt

IRB Barcelona and
University of Barcelona
Barcelona, Spain

Melanie S. Sanford

University of Michigan
Ann Arbor, MI, USA

Holger Gohlke

Heinrich-Heine-University
Düsseldorf, Germany

Daniel Kahne

Harvard University
Cambridge, MA, USA

Tomislav Rovis

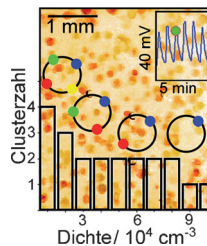
Colorado State University
Fort Collins, CO, USA

The Novartis Chemistry Lectureship is awarded to scientists in recognition of outstanding contributions to organic and computational chemistry, including applications to biology.



Phasencluster

A. F. Taylor, M. R. Tinsley, F. Wang,
K. Showalter* — 10343 – 10346



Phase Clusters in Large Populations of
Chemical Oscillators

Und zum Schluss alle gemeinsam: Chemische Oszillatoren kommunizieren in einer Lösung über den Austausch intermediärer Spezies und bilden synchron oszillierende Cluster, deren Phase gegenüber der anderer Cluster verschoben ist. Dieses System entsteht aus nicht-synchronisierten Oszillationen bei niedriger Dichte n und führt schließlich über vier, drei und zwei zu einem einzigen Cluster mit steigendem n (siehe Bild).

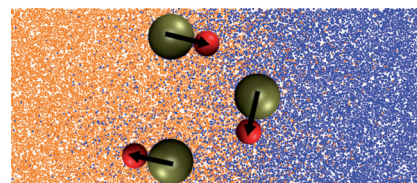
Nanomotoren

S. Thakur, J.-X. Chen,
R. Kapral* — 10347 – 10351



Interaction of a Chemically Propelled
Nanomotor with a Chemical Wave

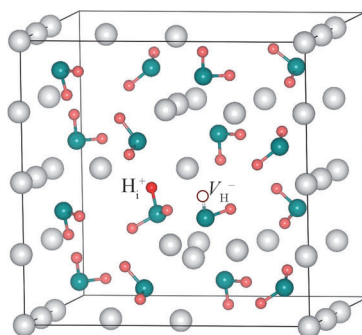
Ein chemisch angetriebener Nanomotor in Form eines Nanopartikel-Dimers wird durch die Wechselwirkung mit einer chemischen Welle zurückgeworfen (siehe Bild). Dieser Effekt bietet sich als möglicher Mechanismus für die gezielte Steuerung von Nanomotorbewegungen an.



Wasserstoffspeicher

K. Hoang, A. Janotti,
C. G. Van de Walle* — 10352 – 10355

The Particle-Size Dependence of the
Activation Energy for Decomposition of
Lithium Amide



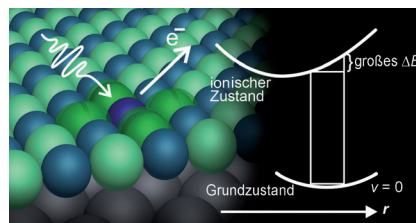
Größenverhältnisse: LiNH_2 zersetzt sich nach zwei konkurrierenden Mechanismen in Li_2NH und NH_3 : Bei einem werden native Defektstellen im Inneren (über einen Frenkel-Paar-Mechanismus), beim anderen an der Oberfläche des Materials gebildet (siehe Bild: H rot, Li grau, N blau). Der vorwiegende Mechanismus, und somit die Höhe der Aktivierungsenergie, hängen vom Oberfläche/Volumen-Verhältnis (oder der spezifischen Oberfläche) ab, das sich mit der Partikelgröße ändert.

Photoelektronenspektroskopie

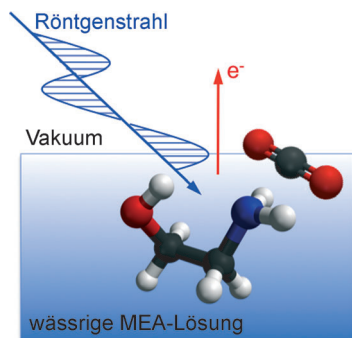
C. J. Nelin, P. S. Bagus,* M. A. Brown,
M. Sterrer, H.-J. Freund — 10356 – 10359



Analysis of the Broadening of X-ray
Photoelectron Spectroscopy Peaks for
Ionic Crystals



Ein intuitiver Ansatz verknüpft Bindungslängenänderungen Kern-Loch-ionisierter Zustände mit der Franck-Condon (FC)-Verbreiterung (ΔE) im Röntgenphotoelektronenspektrum ionischer Verbindungen. Für den Extremfall einer Monoschicht von MgO auf $\text{Ag}(100)$ zeigt der Unterschied in der FC-Verbreiterung im Vergleich zu Bulk- MgO die andersartige Bindungssituation im trägerfixierten Oxid an (siehe Bild; $r = \text{Mg-O-Abstand}$).



Reduktion der CO₂-Emission: Photoelektronenspektren einer wässrigen Monoethanolamin(MEA)-Lösung nach Reaktion mit CO₂ werden genutzt, um die räumliche Verteilung von MEA und den Reaktionsprodukten relativ zur Grenzfläche der Lösung zu ermitteln (siehe Bild). Neutrales MEA hält sich vorrangig an der Oberfläche der Lösung auf, während protoniertes MEA und die Reaktionsprodukte die Lösung bevorzugen.

Abscheidung von CO₂

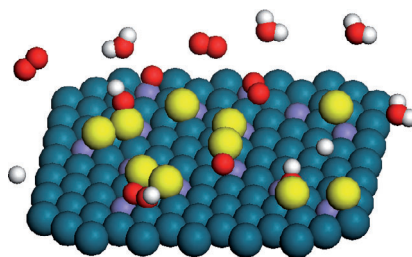


T. Lewis, M. Faubel, B. Winter, J. C. Hemminger* — 10360 – 10363

CO₂ Capture in Amine-Based Aqueous Solution: Role of the Gas-Solution Interface



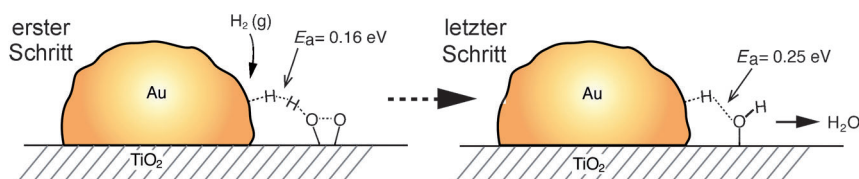
Teamarbeit: Pd_{0.9}Fe_{0.1}-Pd₃Fe(111) (siehe Bild, Pd-Adatome gelb, Fe lila, Pd blau-grün, O rot, H weiß) ist bei der Sauerstoffreduktion fünf- bis achtmal aktiver als Pd(111). Erklärt werden könnte die hohe katalytische Aktivität mit einem kooperativen Effekt einer segregierten Pd-Schicht, die eine große Neigung hat, Oberflächen-O-Spezies durch Protonierung zu entfernen, mit aktivem Fe, das die Dissoziation von O₂ fördert.



Elektrokatalyse

X. Yang, J. Hu, J. Fu, R. Wu, B. E. Koel* — 10364 – 10367

Role of Surface Iron in Enhanced Activity for the Oxygen Reduction Reaction on a Pd₃Fe(111) Single-Crystal Alloy



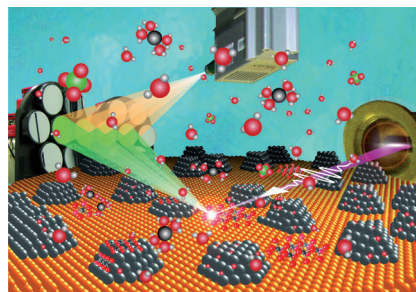
Duales Reaktionszentrum: Die katalytische Reaktion H₂ + O₂ an einem Au/TiO₂-Katalysator wurde durch Transmissions-IR-Spektroskopie und DFT-Rechnungen untersucht. Für die O₂-unterstützte H₂-Dissoziation wurde gefunden, dass sie

über eine Ti-OOH-Zwischenstufe am Au/TiO₂-Perimeter verläuft. Die berechneten Energiebarrieren (0.13–0.25 eV) für die Abfolge von niedrigerenergetischen Reaktionsschritten stimmen mit dem experimentellen E_a-Wert von 0.22 eV überein.

Gold-Katalyse

I. X. Green, W. Tang, M. Neurock, J. T. Yates, Jr.* — 10368 – 10371

Low-Temperature Catalytic H₂ Oxidation over Au Nanoparticle/TiO₂ Dual Perimeter Sites



Gold-Träger destabilisiert Platin: Die niedrige Oberflächenenergie von Au führt dazu, dass ein Pt-Brennstoffzellenkatalysator von der Oberfläche des Au-Trägers entfernt wird. Je nach dem elektrochemischen Potential löst sich Pt entweder im Au-Substrat oder im Elektrolyten (siehe Bild). In-situ-HERFD-XAS-Messungen sprechen für die Bildung von PtO₂ nach einem Auflösungs-Ausfällungs-Mechanismus.

Brennstoffzellenkatalyse

D. Friebe, D. J. Miller, D. Nordlund, H. Ogasawara, A. Nilsson* — 10372 – 10374

Degradation of Bimetallic Model Electrocatalysts: An In Situ X-Ray Absorption Spectroscopy Study



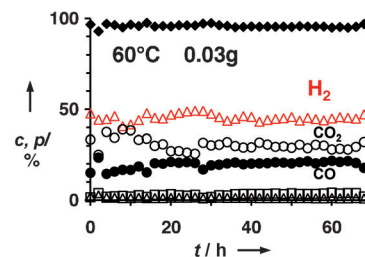


Heterogene Katalyse

C. Pirez, M. Capron, H. Jobic,
F. Dumeignil,
L. Jalowiecki-Duhamel* — 10375 – 10379

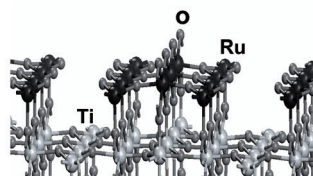
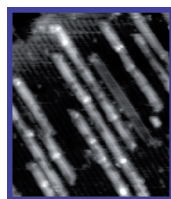
Highly Efficient and Stable CeNiH₂O_y
Nano-Oxyhydride Catalyst for H₂
Production from Ethanol at Room
Temperature

Das Oxyhydrid CeNiH₂O_y ist ein besonderer Katalysator, der Ethanol bei 60°C vollständig umsetzt und H₂ in Gegenwart von Wasser und Sauerstoff produziert. Der H₂-Anteil an den Gasphasenprodukten liegt bei 50% (siehe Bild; *c*: Umsatz, *p*: Produktion). Das Oxyhydrid bildet sich durch In-situ-Aktivierung von CeNiO_y mit H₂ bei 250°C. Das Vorliegen von Hydridspezies im Katalysator wurde durch inelastische Neutronenstreuung nachgewiesen.



Heterogene Katalyse

F. Yang, S. Kundu, A. B. Vidal, J. Graciani,
P. J. Ramírez, S. D. Senanayake,
D. Stacchiola, J. Evans, P. Liu, J. F. Sanz,
J. A. Rodriguez* — 10380 – 10384



Determining the Behavior of RuO_x
Nanoparticles in Mixed-Metal Oxides:
Structural and Catalytic Properties of
RuO₂/TiO₂(110) Surfaces

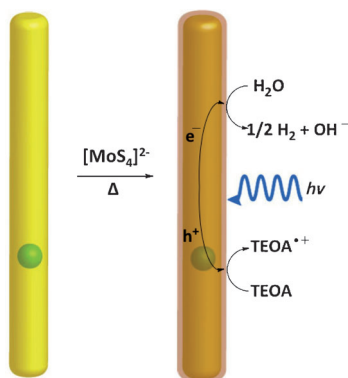
Ein guter Draht: Mit Rastertunnelmikroskopie, Röntgenphotoelektronenspektroskopie und Dichtefunktionalrechnungen wurde die Wechselwirkung von RuO₂-Nanostrukturen mit TiO₂(110) untersucht. Rutheniumoxid bildet einzig-

artige, drahtähnliche Ru₃O₆-Strukturen auf TiO₂, die sich bei Temperaturen von 400–600 K leicht reduzieren und reoxidieren lassen, und zeigt eine sehr hohe katalytische Aktivität für die CO-Oxidation bei niedriger Temperatur.

Nanopartikel-Photokatalyse

M. L. Tang, D. C. Grauer,
B. Lassalle-Kaiser, V. K. Yachandra,
L. Amirav, J. R. Long, J. Yano,
A. P. Alivisatos* — 10385 – 10389

Structural and Electronic Study of an
Amorphous MoS₃ Hydrogen-Generation
Catalyst on a Quantum-Controlled
Photosensitizer

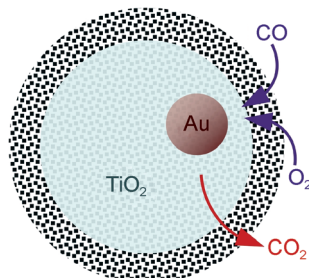


Licht über dem Wasser: Eine amorphe Molybdänsulfidspezies von ähnlicher Struktur wie reduziertes MoS₃ ist photokatalytisch aktiv für die Bildung von H₂ aus H₂O mit sichtbarem Licht (siehe Bild; TEOA = Triethanolamin). Thermisch in einem Schritt abgeschiedenes MoS₃ wird durch quantenkontrollierte Halbleiternanokristalle photosensibilisiert, die als Modellsysteme für die Photophysik der Gewinnung von Treibstoff mit Sonnenenergie fungieren.

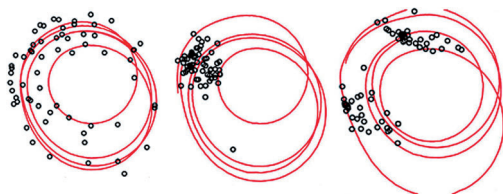
Goldnanopartikel

I. Lee, J. B. Joo, Y. Yin,
F. Zaera* — 10390 – 10393

A Yolk@Shell Nanoarchitecture for Au/
TiO₂ Catalysts



Kein Entkommen: Ein neuer Katalysator, in dem Goldnanopartikel von Titandioxidnanokugeln umhüllt sind, wurde entwickelt (siehe Bild). Die neue Nanoarchitektur verhindert das Sintern und den Aktivitätsverlust dieser Nanopartikel, während sie den Reaktanten freien Zugang zur Metalloberfläche lässt. Das Ergebnis ist ein Katalysator, der die Oxidation von CO bei Raumtemperatur fördert und das Kalzinieren bei Temperaturen über 775 K verträgt.



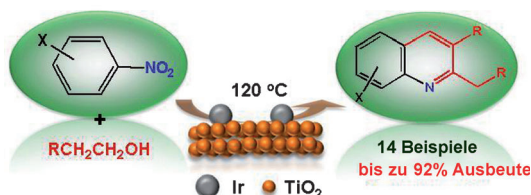
Komplexe dynamische Strukturen gezielt wählen: Ein Ensemble aus 64 chemischen chaotischen Oszillatoren (Phasenraum-momentaufnahmen, links), das die elektrochemische Auflösung von Nickel

beschreibt, wird zur Bildung von Ein- (Mitte) und Zwei-Clusterzuständen (rechts) bei mildem globalem Feedback geführt.

Komplexe Dynamische Strukturen

C. G. Rusin, I. Tokuda, I. Z. Kiss,
J. L. Hudson* 10394 – 10397

Engineering of Synchronization and Clustering of a Population of Chaotic Chemical Oscillators



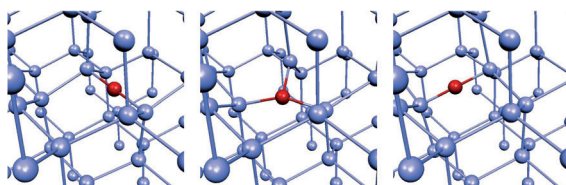
Ein vielseitiger Heterogenkatalysator aus sub-nanometergroßen Iridiumclustern auf einem Titandioxid-Träger (Ir/TiO₂-NCs) vermittelt die direkte Tandemsynthese von Chinolinderivaten aus leicht

zugänglichen Nitroarenen und aliphatischen Alkoholen unter milden Bedingungen und ohne Additive (siehe Schema). Das hochselektive Verfahren toleriert verschiedenste funktionelle Gruppen.

Heterogene Katalyse

L. He, J. Q. Wang, Y. Gong, Y. M. Liu,
Y. Cao,* H. Y. He,
K. N. Fan 10398 – 10402

Titania-Supported Iridium Subnanoclusters as an Efficient Heterogeneous Catalyst for Direct Synthesis of Quinolines from Nitroarenes and Aliphatic Alcohols



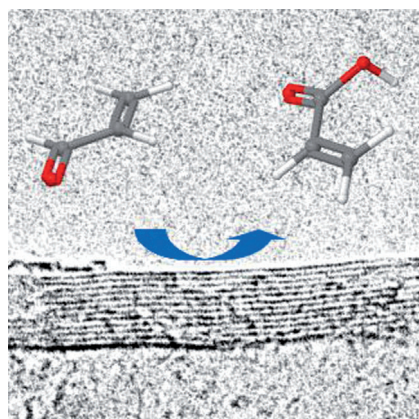
Mit DFT-Rechnungen wurden die Aktivierungsenergien E_a für die Diffusion von Defekten in Si (blau im Bild) ermittelt (von links nach rechts: Diffusion von O_i^0 (rot)). Die mit vier Austauschkorrelationsfunktionalen E_{xc} berechneten E_a -Werte wurden mit experimentellen Daten

verglichen. Die E_a -Werte der „atomähnlichen“ Defekte auf Zwischengitterplätzen sind meist unabhängig von E_{xc} , im Unterschied zu stark gebundenen Verunreinigungen. Die besten Werte liefert das RPBE-Funktional.

Siliciumdefekte

S. K. Estreicher,* D. J. Backlund,
C. Carbogno, M. Scheffler 10403 – 10407

Aktivierungsenergien für die Diffusion von Defekten in Silicium: die Rolle des Austauschkorrelationsfunktionals



Graphitischer Kohlenstoff katalysiert die Insertion eines O-Atoms in Acrolein. Derart komplexe mehrstufige Reaktionsabläufe wurden bislang vorwiegend bei Metall(oxid)-Katalysatoren beobachtet. Im C-katalysierten Prozess wird das Formyl-H-Atom von nukleophilen O-Atomen an der Kante der graphitischen (0001)-Oberfläche angegriffen, und der aktivierte Aldehyd wird über mobile Epoxy-O-Atome oxidiert. sp^2 -Kohlenstoff ist demnach ein difunktionaler Katalysator.

Metallfreie Katalyse

B. Frank, R. Blume, A. Rinaldi,
A. Trunschke,* R. Schlögl 10408 – 10413

Katalyse der Sauerstoffinsertion durch sp^2 -Kohlenstoff



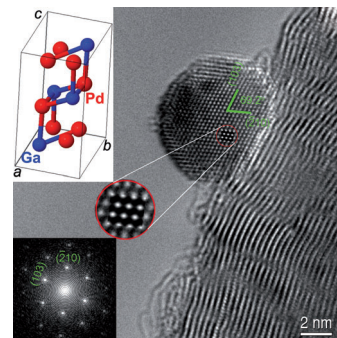
Nanostrukturierte Katalysatoren

L. Shao, W. Zhang, M. Armbrüster,
D. Teschner, F. Girgsdies, B. Zhang,
O. Timpe, M. Friedrich, R. Schlögl,
D. S. Su* ————— **10414–10418**



Nanopartikuläre intermetallische
Verbindungen auf
Kohlenstoffnanoröhren: aktive und
selektive Hydrierungskatalysatoren

Nanomaßstab und doch geordnet: Die intermetallische Verbindung Pd_2Ga wurde auf Kohlenstoffnanoröhren als Träger synthetisiert und als aktiver und selektiver Katalysator in der Alkinhydrierung angewendet. Intermetallische Verbindungen im Nanomaßstab dienen der Erzielung hoher Massenaktivität, während die geordnete Kristallstruktur der intermetallischen Verbindung hohe Barrieren für oberflächennahe chemische Vorgänge mit sich bringt und die Bildung größerer aktiver Pd-Zentren verhindert.



DOI: 10.1002/ange.201106547

Vor 50 Jahren in der Angewandten Chemie

Zukunft braucht Herkunft – die *Angewandte Chemie* wird seit 1888 publiziert, und in diesem Jahr gibt es auch die International Edition schon 50 Jahre. Ein Blick zurück kann Augen öffnen, zum Nachdenken und -lesen anregen oder ein Schmunzeln hervorlocken: Deshalb finden Sie an dieser Stelle wöchentlich Kurzurückblicke, die abwechselnd auf Hefte von vor 100 und vor 50 Jahren schauen.

Manch ein Chemiker wird sich noch an seine ersten Begegnungen mit dem „Jander/Blasius“ zurückerrinnern – kein vollständiger Kationentrennungsgang ohne Konsultation des „Lehrbuchs der analytischen und präparativen anorganischen Chemie“! Für die *Angewandte Chemie* hat einer der Autoren, Ewald Blasius, seinerzeit Privatdozent an der TU Berlin im Umfeld von Gerhart Jander, drei Übersichtsartikel über Ionensiebe verfasst, von denen sich der dritte – „Kapillareigenschaften eines Kationenaustauschers auf Silicon-Basis“ – in Heft 20 befindet. Blasius liefert eine gründliche Analyse der wichtigen Porenabmessungen einiger Silicon- und Kunstharz-Ionenaustauscher für den Einsatz als Ionensieb, wobei er zwei Methoden – die Bemmelen-Bachmann-Maier(BBM)- und die Brunauer-

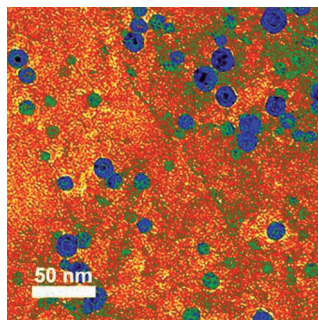
Emmet-Teller(BET)-Methode – einander gegenüberstellt. Ergänzt wird Blasius' Beitrag von einem Aufsatz über Dünnschichtchromatographie an Ionenaustauscher-Schichten von K. Randeth, der beschreibt, wie sich Nucleinsäure-Derivate an einem Cellulose-Anionenaustauscher trennen lassen.

Wie Lackmus wird das weniger bekannte Orcein aus einer Flechtenart durch Behandlung mit Ammoniak gewonnen. Heute kaum noch verwendet, spielte Orcein in früheren Jahrhunderten eine wichtige Rolle als Färbemittel für Stoffe, allerdings war die so erhaltene Rotfärbung nicht waschecht und verblasste schnell; als Ammoniaklieferant kam damals schlicht Urin zur Anwendung. Wie wir im Aufsatz „Orcein und Lackmus“ von H. Musso et al. erfahren, be-

steht das Orcein in Wirklichkeit aus 14 verschiedenen, stickstoffhaltigen Verbindungen, die allesamt – ebenso wie Lackmus – Farbumschläge bei bestimmten pH-Werten zeigen. Alle leiten sich von 2-Phenoxazon- oder 2-Phenoxazim-Grundgerüsten ab. Die Autoren schließen mit der eher philosophischen Frage, ob Lackmus und Orcein eigentlich zu Recht als Naturfarbstoffe bezeichnet werden, und gelangen zu der Erkenntnis: „Man ist also nur dann berechtigt, sie auch weiterhin, wie es in vielen Büchern geschah, als Naturstoffe zu führen, wenn man den Vorgang, bei dem eine Orseille-Flechte z. B. mit Harn in Berührung kommt, als einen natürlichen bezeichnet“.

Lesen Sie mehr in Heft 20/1961

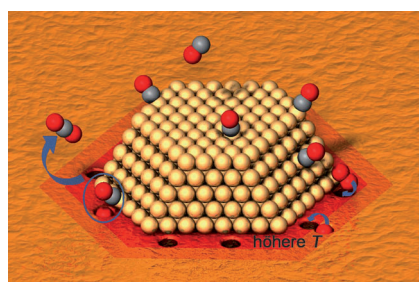
Kompositkatalysatoren aus mehrlagigem Kohlenstoff und Eisenoxid sind sehr aktiv in der katalytischen Oxidation von sekundären Alkoholen. Größe und Struktur der Eisenoxid-Partikel (blau im Transmissions-elektronenmikroskopiebild), die in den mehrlagigen Kohlenstoff eingebettet sind, können relativ einfach über eine Änderung der Reduktionstemperatur kontrolliert werden.



Eisenoxid-Nanostrukturen

Y. Gao, D. Ma,* G. Hu, P. Zhai, X. Bao, B. Zhu, B. Zhang, D. S. Su* 10419–10423

Stabilisierung von Eisenoxid-Nanostrukturen mit mehrlagigem Kohlenstoff und Einsatz als Oxidationskatalysator

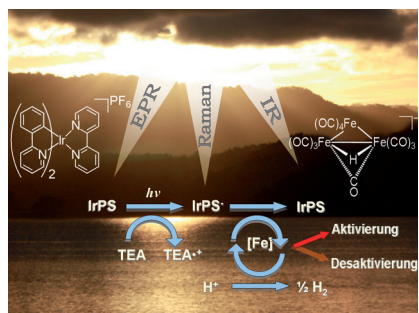


In bester Lage: Aktiver Sauerstoff für die CO-Oxidation über Au/TiO₂-Katalysatoren ist eine sehr stabile Sauerstoffspezies, deren Bildung leicht und kaum aktiviert ist. Es handelt sich dabei um Oberflächengittersauerstoff am Rand der Au-TiO₂-Grenzfläche, der durch die Au-Nanopartikel aktiviert ist. Bei höheren Temperaturen können wegen thermisch aktivierter Oberflächendiffusion von O_{Gitter} und Leerstellen auch weiter entfernte Spezies an der Reaktion teilnehmen.

Aktiver Sauerstoff

D. Widmann, R. J. Behm* 10424–10428

Aktiver Sauerstoff auf einem Au/TiO₂-Katalysator – Bildung, Stabilität und Aktivität für die CO-Oxidation



Die Kopplung von Raman- und EPR-Spektroskopie erwies sich als gut geeignet, um die Aktivierungs-, Reaktions- und Desaktivierungsschritte bei der Iridium- und Eisen-katalysierten Wasserspaltung mit Licht zu visualisieren. Auf der Grundlage dieser Studie ist die Entwicklung von aktiveren Wasserreduktionskatalysatoren möglich. IrPS = Iridium-Photosensibilisator, TEA = Triethylamin.

Reaktionsmechanismen

D. Hollmann, F. Gärtner, R. Ludwig,* E. Barsch, H. Junge, M. Blug, S. Hoch, M. Beller,* A. Brückner* 10429–10433

Einblicke in den Mechanismus der photokatalytischen Wasserreduktion durch DFT-gestützte In-situ-EPR/Raman-Spektroskopie



Hintergrundinformationen sind unter www.angewandte.de erhältlich (siehe Beitrag).



Eine Videodatei ist als Hintergrundinformation unter www.angewandte.de oder vom Korrespondenzautor erhältlich.



Dieser Artikel ist online frei verfügbar (Open Access)

Verstärkung gesucht?

Sie brauchen Verstärkung für Ihr Top Team?
... Chemiker, Doktoranden, Laborleiter, Manager, Professoren,
Verkaufsrepräsentanten ...

Nutzen Sie unseren Stellenmarkt für Fach- und Führungskräfte in Europa
sowohl im Print-Medium als auch im Internet.

Angewandte Chemie

Anzeigenabteilung: Marion Schulz

Tel.: 0 62 01 – 60 65 65, Fax: 0 62 01 – 60 65 50

E-Mail: MSchulz@wiley-vch.de

Service

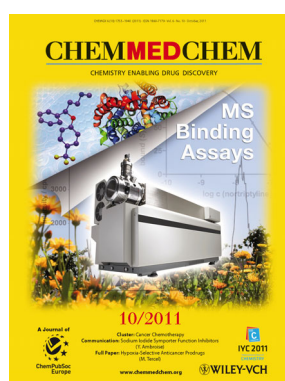
Top-Beiträge der Schwesterzeitschriften
der Angewandten _____ 10188 – 10190

Vorschau _____ 10436

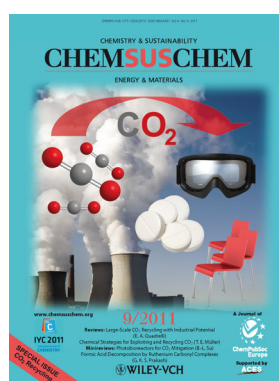
Weitere Informationen zu:



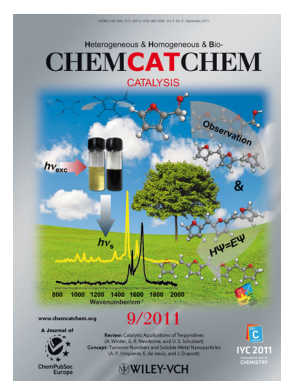
www.chemasianj.org



www.chemmedchem.org



www.chemsuschem.org



www.chemcatchem.org