



**Die folgenden Zuschriften wurden von mindestens zwei Gutachtern als sehr wichtig (very important papers) eingestuft und sind in Kürze unter [www.angewandte.de](http://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 Tris(heteroleptic) 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. Clifff\*

**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  $Mg(BH_4)_2$  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  $\alpha$ -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-Profile

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 Gütlich, 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 lärmenden 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 verfemter 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.

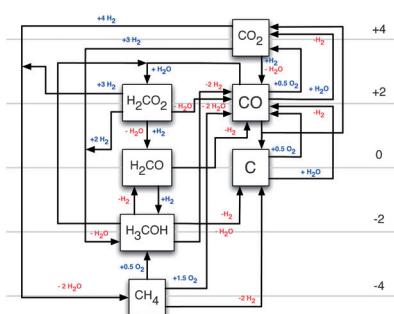


## Aufsätze

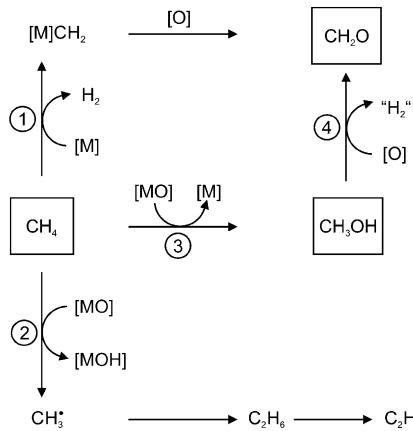
### Heterogene Katalyse

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 Vakuumbedingun-

gen 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

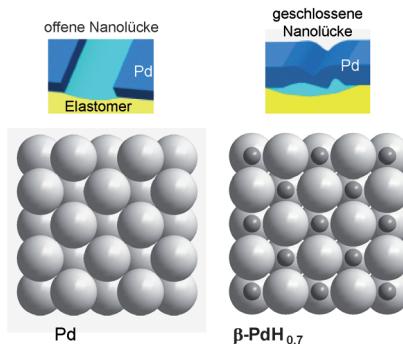
Bestimmung der Struktur, Zusammensetzung und Dynamiken molekularer Oberflächen unter Reaktionsbedingungen bei hohen Drücken und an der Fest-flüssig-Phasengrenzfläche

## Highlights

### Chemische Sensoren

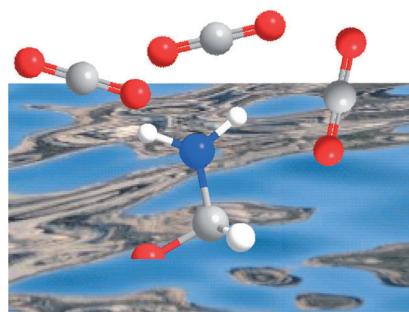
A. Gurlo,\* D. R. Clarke 10312–10314

Hochempfindlicher Wasserstoffnachweis mithilfe von rissigen Palladiumfilmen auf nachgiebigen Substraten



**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.

**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 CO<sub>2</sub>-Abscheidung und -Speicherung gewonnen, z. B. bei der selektiven CO<sub>2</sub>-Absorption in wässrigem Monoethanolamin (siehe Bild; grau C, weiß H, blau N, rot O).



### Kohlendioxid-Abscheidung

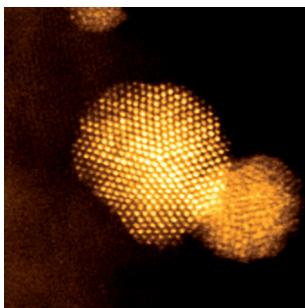
F. Maier\* 10315–10316

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.

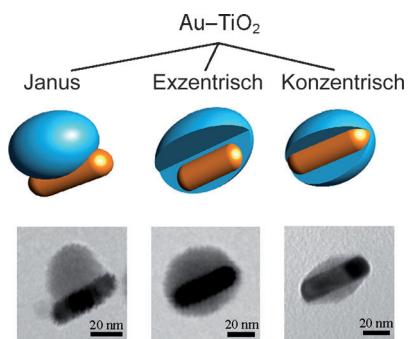
- >Selective Oxidation of Glycerol by Highly Active Bimetallic Catalysts at Ambient Temperature under Base-Free Conditions

### Nanostrukturen

Z. W. Seh, S. H. Liu, S. Y. Zhang,  
M. S. Bharathi, H. Ramanarayanan, 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

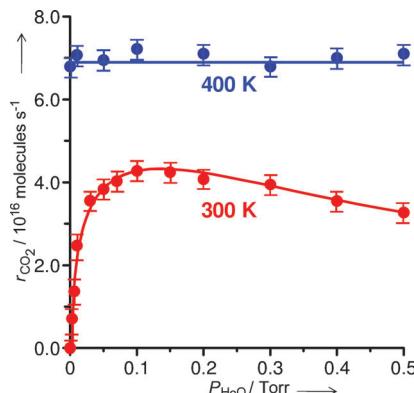
**Wachstumsschub:** Ein einfacher Weg wurde gefunden, um das anisotrope Wachstum von  $\text{TiO}_2$  auf unterschiedlich geformten Goldnanopartikeln in Richtung Janus-, exzentrischer oder konzentrischer Geometrie zu steuern (siehe Bild). Die  $\text{Au}-\text{TiO}_2$ -Janus-Nanostrukturen sind nach 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  $\text{Au}/\text{TiO}_2$



**Bei niedrigen Reaktionstemperaturen** ( $< 320 \text{ K}$ ) spielt Feuchtigkeit eine wichtige Rolle für die Oxidation von CO auf  $\text{Au}/\text{TiO}_2(110)$ -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;  $r_{\text{CO}_2}$  = Anteil an gebildetem  $\text{CO}_2$  und  $p_{\text{H}_2\text{O}}$  = Wasserdruck)

### Heterogene Katalyse

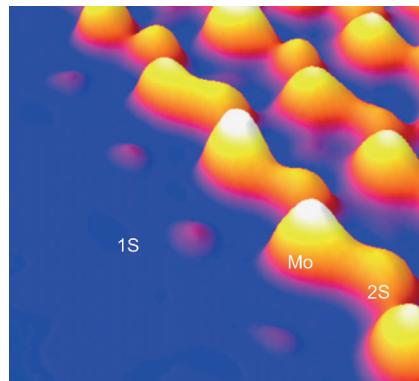
S. D. M. Jacques,\* M. Di Michiel,  
A. M. Beale,\* T. Sochi, M. G. O'Brien,  
L. Espinosa-Alonso, B. M. Weckhuysen,  
P. Barnes **10330–10334**

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



**Farbenspiel:** Die erste Dynamikstudie mit röntgenbeugungsgestützter Computertomographie erfasst die Strukturänderungen während der Präparation millimeter-großer 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 MoS<sub>2</sub>-Nanokatalysators wurden durch einzelatomempfindliche Transmissionselektronenmikroskopie abgebildet (siehe Bild). Die beobachteten Kantenabschlüsse stimmen mit Voraussagen aus Modellstudien überein, und die Ergebnisse tragen dazu bei, die „Materiallücke“ in der Katalyse zu schließen.



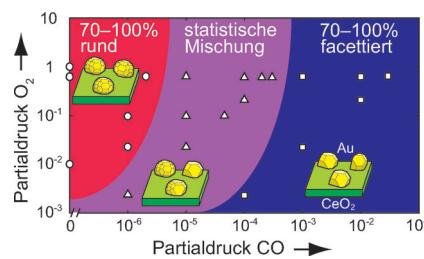
## Hochauflösende Mikroskopie

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 MoS<sub>2</sub> Nanocatalysts



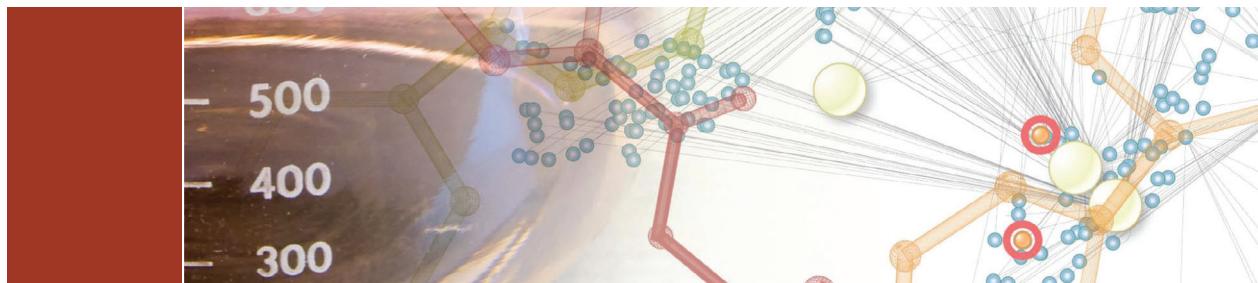
**Die Morphologie von Gold-Nanopartikeln (GNPs) auf CeO<sub>2</sub>-Trägern und unter verschiedenen CO- und O<sub>2</sub>-Partialdrücken wird beschrieben; ihre Morphologie korreliert gut mit ihrer katalytischen Aktivität. Adsorbierte CO-Moleküle stabilisieren die {111}- und {100}-Flächen von GNP-Polyedern; O<sub>2</sub>-Moleküle dissoziieren an den GNP-CeO<sub>2</sub>-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 CeO<sub>2</sub> 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.

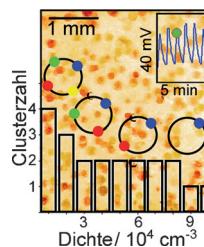


## Phasencluster

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).

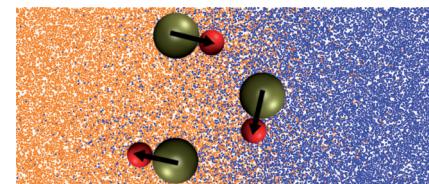
## Nanomotoren

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



Interaction of a Chemically Propelled Nanomotor with a Chemical Wave

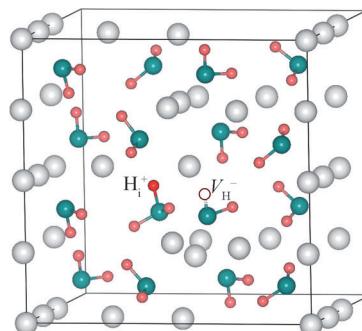
**Ein chemisch angetriebener Nanomotor** in Form eines Nanopartikel-Dimers wird durch die Wechselwirkung mit einer chemischen Welle zurückgeworfen (siehe Bild). Dieser Effekt bietet sich als möglicher Mechanismus für die gezielte Steuerung von Nanomotorbewegungen an.



## 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



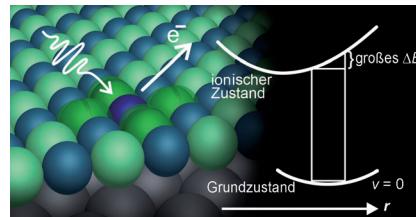
**Größenverhältnisse:**  $\text{LiNH}_2$  zersetzt sich nach zwei konkurrierenden Mechanismen in  $\text{Li}_2\text{NH}$  und  $\text{NH}_3$ : Bei einem werden native Defektstellen im Inneren (über einen Frenkel-Paar-Mechanismus), beim anderen an der Oberfläche des Materials gebildet (siehe Bild: H rot, 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

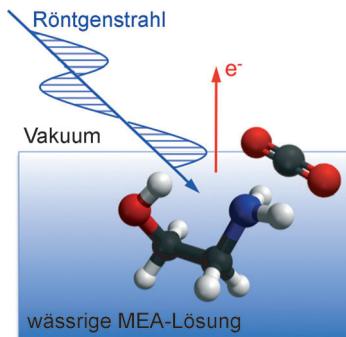
C. J. Nelin, P. S. Bagus,\* M. A. Brown,  
M. Sterrer, H.-J. Freund **10356 – 10359**



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



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



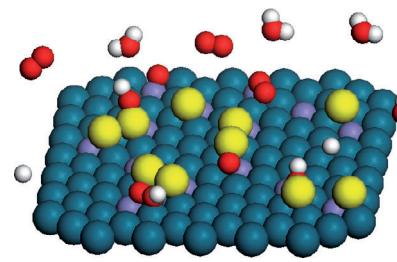
**Reduktion der CO<sub>2</sub>-Emission:** Photoelektronenspektren einer wässrigen Monoethanolamin(MEA)-Lösung nach Reaktion mit CO<sub>2</sub> werden genutzt, um die räumliche Verteilung von MEA und den Reaktionsprodukten relativ zur Grenzfläche der Lösung zu ermitteln (siehe Bild). Neutrales MEA hält sich vorrangig an der Oberfläche der Lösung auf, während protoniertes MEA und die Reaktionsprodukte die Lösung bevorzugen.

## Abscheidung von CO<sub>2</sub>

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

CO<sub>2</sub> Capture in Amine-Based Aqueous Solution: Role of the Gas–Solution Interface

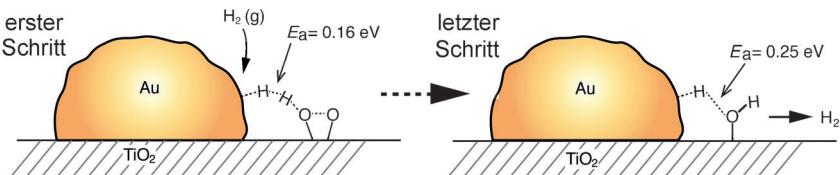
**Teamarbeit:** Pd<sub>0.9</sub>Fe<sub>0.1</sub>-Pd<sub>3</sub>Fe(111) (siehe Bild, Pd-Adatome gelb, Fe lila, Pd blau-grün, O rot, H weiß) ist bei der Sauerstoffreduktion fünf- bis achtmal aktiver als Pd(111). Erklärt werden könnte die hohe katalytische Aktivität mit einem kooperativen Effekt einer segregierten Pd-Schicht, die eine große Neigung hat, Oberflächen-O-Spezies durch Protonierung zu entfernen, mit aktivem Fe, das die Dissoziation von O<sub>2</sub> 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 Pd<sub>3</sub>Fe(111) Single-Crystal Alloy



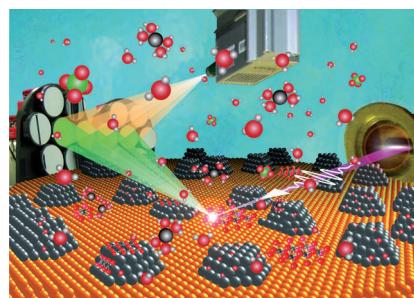
**Duales Reaktionszentrum:** Die katalytische Reaktion H<sub>2</sub>+O<sub>2</sub> an einem Au/TiO<sub>2</sub>-Katalysator wurde durch Transmissions-IR-Spektroskopie und DFT-Rechnungen untersucht. Für die O<sub>2</sub>-unterstützte H<sub>2</sub>-Dissoziation wurde gefunden, dass sie

über eine Ti-OOH-Zwischenstufe am Au/TiO<sub>2</sub>-Perimeter verläuft. Die berechneten Energiebarrieren (0.13–0.25 eV) für die Abfolge von niedernergetischen Reaktionsschritten stimmen mit dem experimentellen E<sub>a</sub>-Wert von 0.22 eV überein.

## Gold-Katalyse

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

Low-Temperature Catalytic H<sub>2</sub> Oxidation over Au Nanoparticle/TiO<sub>2</sub> 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 PtO<sub>2</sub> nach einem Auflösungs-Ausfällungs-Mechanismus.

## Brennstoffzellenkatalyse

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

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

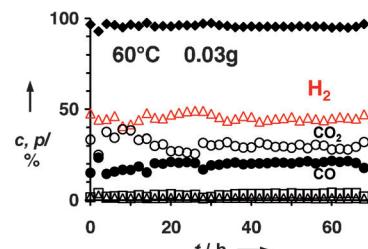


## Heterogene Katalyse

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

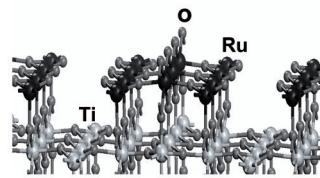
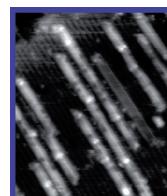
Highly Efficient and Stable  $\text{CeNiH}_2\text{O}_y$  Nano-Oxyhydride Catalyst for  $\text{H}_2$  Production from Ethanol at Room Temperature

**Das Oxyhydrid  $\text{CeNiH}_2\text{O}_y$  ist ein besonderer Katalysator, der Ethanol bei  $60^\circ\text{C}$  vollständig umsetzt und  $\text{H}_2$  in Gegenwart von Wasser und Sauerstoff produziert. Der  $\text{H}_2$ -Anteil an den Gasphasenprodukten liegt bei 50% (siehe Bild;  $c$ : Umsatz,  $p$ : Produktion). Das Oxyhydrid bildet sich durch In-situ-Aktivierung von  $\text{CeNiO}_y$  mit  $\text{H}_2$  bei  $250^\circ\text{C}$ . 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**



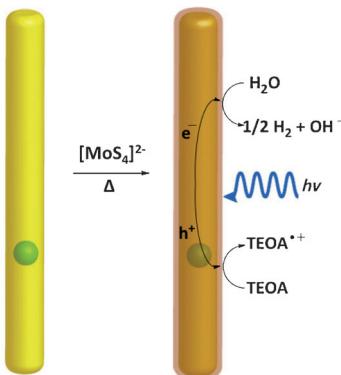
Determining the Behavior of  $\text{RuO}_x$  Nanoparticles in Mixed-Metal Oxides: Structural and Catalytic Properties of  $\text{RuO}_2/\text{TiO}_2(110)$  Surfaces

**Ein guter Draht:** Mit Rastertunnelmikroskopie, Röntgenphotoelektronenspektroskopie und Dichtefunktionalrechnungen wurde die Wechselwirkung von  $\text{RuO}_2$ -Nanostrukturen mit  $\text{TiO}_2(110)$  untersucht. Rutheniumoxid bildet einzig-

artige, drahtähnliche  $\text{Ru}_3\text{O}_6$ -Strukturen auf  $\text{TiO}_2$ , 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**



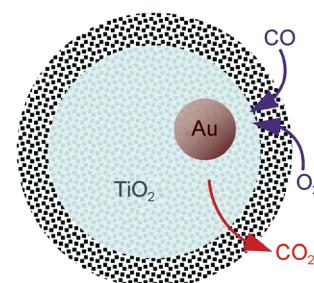
Structural and Electronic Study of an Amorphous  $\text{MoS}_3$  Hydrogen-Generation Catalyst on a Quantum-Controlled Photosensitizer

**Licht über dem Wasser:** Eine amorphe Molybdänsulfidspezies von ähnlicher Struktur wie reduziertes  $\text{MoS}_3$  ist photokatalytisch aktiv für die Bildung von  $\text{H}_2$  aus  $\text{H}_2\text{O}$  mit sichtbarem Licht (siehe Bild; TEOA = Triethanolamin). Thermisch in einem Schritt abgeschiedenes  $\text{MoS}_3$  wird durch quantenkontrollierte Halbleiter-nanokristalle photosensibilisiert, die als Modellsysteme für die Photophysik der Gewinnung von Treibstoff mit Sonnenenergie fungieren.

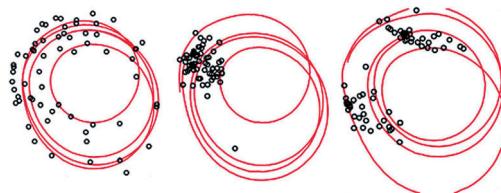
## Goldnanopartikel

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

A Yolk@Shell Nanoarchitecture for Au/ $\text{TiO}_2$  Catalysts



**Kein Entkommen:** Ein neuer Katalysator, in dem Goldnanopartikel von Titan-dioxidnanokugeln 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 Kalzинieren bei Temperaturen über  $775\text{ K}$  verträgt.



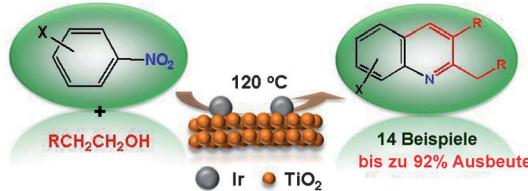
**Komplexe dynamische Strukturen gezielt wählen:** Ein Ensemble aus 64 chemischen chaotischen Oszillatoren (Phasenraummomentaufnahmen, links), das die elektrochemische Auflösung von Nickel

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



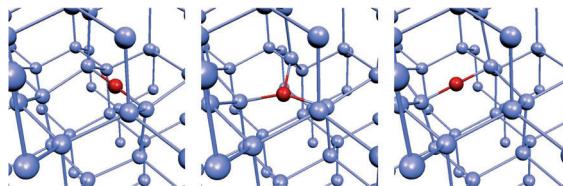
**Ein vielseitiger Heterogenkatalysator** aus sub-nanometergroßen Iridiumclustern auf einem Titandioxid-Träger ( $\text{Ir}/\text{TiO}_2$ -NCs) vermittelt die direkte Tandemsynthese von Chinolinderivaten aus leicht

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



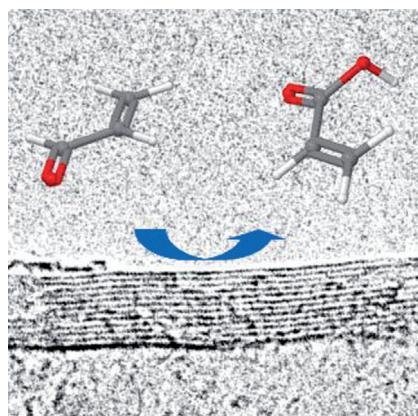
**Mit DFT-Rechnungen** wurden die Aktivierungsenergien  $E_a$  für die Diffusion von Defekten in Si (blau im Bild) ermittelt (von links nach rechts: Diffusion von  $\text{O}_i^0$  (rot)). Die mit vier Austauschkorrelationsfunktionalen  $E_{xc}$  berechneten  $E_a$ -Werte wurden mit experimentellen Daten

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.

## Siliziumdefekte

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

Aktivierungsenergien für die Diffusion von Defekten in Silizium: die Rolle des Austauschkorrelationsfunktional



**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.  $\text{sp}^2$ -Kohlenstoff ist demnach ein difunktioneller Katalysator.

## Metallfreie Katalyse

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

Katalyse der Sauerstoffinsertion durch  $\text{sp}^2$ -Kohlenstoff



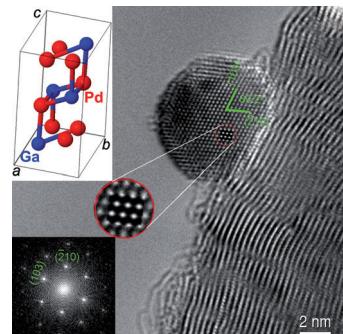
## Nanostrukturierte Katalysatoren

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 Kurzrückblicke, 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“ zurückinnern – 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 Kunstharpionentauscher für den Einsatz als Ionensieb, wobei er zwei Methoden – die Bemmelen-Bachmann-Maier(BBM)- und die Brunauer-

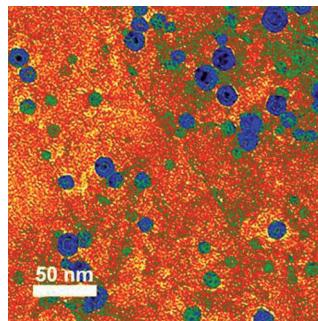
Emmet-Teller(BET)-Methode – einander gegenüberstellt. Ergänzt wird Blasius' Beitrag von einem Aufsatz über Dünnenschichtchromatographie an Ionen-austauscher-Schichten von K. Randerrath, der beschreibt, wie sich Nucleinsäure-Derivate an einem Cellulose-Anionenaustauscher trennen lassen.

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-Phenoxyazom- oder 2-Phenoxyazim-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**

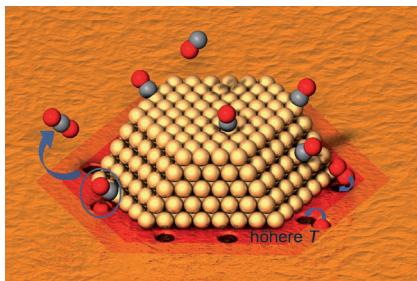
**Kompositkatalysatoren** aus mehrlagigem Kohlenstoff und Eisenoxid sind sehr aktiv in der katalytischen Oxidation von sekundären Alkoholen. Größe und Struktur der Eisenoxid-Partikel (blau im Transmissionselektronenmikroskopiebild), die in den mehrlagigen Kohlenstoff eingebettet sind, können relativ 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

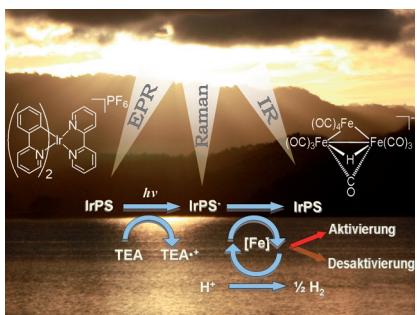


**In besserer Lage:** Aktiver Sauerstoff für die CO-Oxidation über Au/TiO<sub>2</sub>-Katalysatoren ist eine sehr stabile Sauerstoffspezies, deren Bildung leicht und kaum aktiviert ist. Es handelt sich dabei um Oberflächengittersauerstoff am Rand der Au-TiO<sub>2</sub>-Grenzfläche, der durch die Au-Nanopartikel aktiviert ist. Bei höheren Temperaturen können wegen thermisch aktiverter Oberflächendiffusion von O<sub>Gitter</sub> und Leerstellen auch weiter entfernte Spezies an der Reaktion teilnehmen.

## Aktiver Sauerstoff

D. Widmann, R. J. Behm\* **10424–10428**

Aktiver Sauerstoff auf einem Au/TiO<sub>2</sub>-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](http://www.angewandte.de) erhältlich (siehe Beitrag).



Eine Videodatei ist als Hintergrundinformation unter [www.angewandte.de](http://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](mailto:MSchulz@wiley-vch.de)

## Service

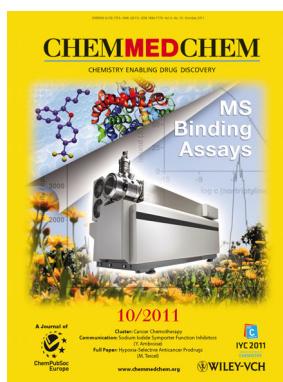
**Top-Beiträge der Schwesternzeitschriften  
der Angewandten** — 10188 – 10190

**Vorschau** ————— 10436

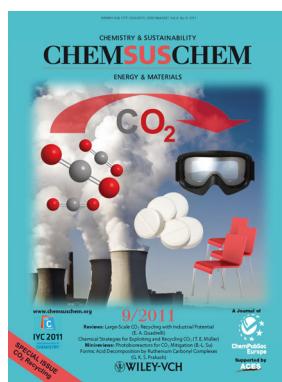
## Weitere Informationen zu:



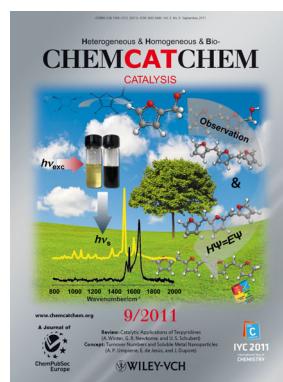
[www.chemasianj.org](http://www.chemasianj.org)



[www.chemmedchem.org](http://www.chemmedchem.org)



[www.chemsuschem.org](http://www.chemsuschem.org)



[www.chemcatchem.org](http://www.chemcatchem.org)