

Das Kapitel acht setzt die Untersuchungen zeitabhängiger Probleme fort. Phänomene im Zusammenhang mit nichtlinearen Mechanismen, wie selbsterregte Oszillationen der Reaktionsgeschwindigkeit bei heterogenkatalytischen Reaktionen, Multiplizitäten und langsame Relaxationen. Die Lotka-Volterra-Gleichungen, das Turner-Sales-Maple-Modell, CO-Oxidationen auf Pt(110) und der Horn-Jackson-Feinberg-Mechanismus dienen als erläuternde Beispiele. Eine detaillierte Analyse des dreistufigen Adsorptionsmechanismus (Langmuir-Hinshelwood) wird gegeben, ohne Annahmen über Gleichgewichte der Adsorptions schritte zu machen. Bereits Mitte der siebziger Jahre haben die russischen Wissenschaftler Yablonsky und Bykov gezeigt, dass dieser Mechanismus der einfachste ist, der eine Multiplizität der Zustände erlaubt. Später wurden dieser und ähnliche Mechanismen sehr populär, um kritische Phänomene in der Kinetik zu erklären.

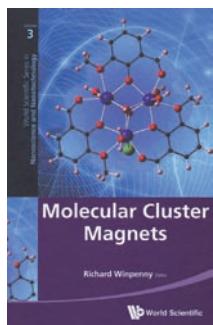
Im Kapitel neun führt das ursprünglich von Lazman und Yablonsky vorgeschlagene Konzept des kinetischen Polynoms ein, das eine implizite Funktion der Reaktionsgeschwindigkeit ist. Das kinetische Polynom ist die allgemeinste Form der Reaktionsgeschwindigkeitsgleichungen komplexer Reaktionen. Es ist für die Beschreibung der Kinetik verschiedener katalytischer Mechanismen geeignet, sowohl linearer als auch nichtlinearer. Die gemeinhin benutzten Langmuir-Hinshelwood- und Hougen-Watson-Gleichungen sind besondere Fälle des kinetischen Polynoms. Es werden mehrere Beispiele des kinetischen Polynoms angegeben, insbesondere die CO-Oxidation und die Wasser gasreaktion. Die Lösung des Horiuti-Boreskov-Problems ist für einige nichtlineare Fälle angegeben.

Das zehnte Kapitel gibt eine umfangreiche Übersicht der fortgeschrittenen Puls-Antwort-Methode für die nichtstationäre Katalysatorcharakterisierung wie sie von Gleaves im Jahre 1988 vorgeschlagen wurde. Diese „Temporal Analysis of Products“(TAP)-Methode wird als ein vielseitiges Werkzeug für die Analyse komplexer Kinetiken heterogenkatalytischer Reaktionen angesehen. Kürzliche Fortschritte in der Theorie und Anwendung des TAP werden diskutiert. Diese Methode kann als „dritte kinetische Strategie“ angesehen werden neben den traditionellen Experimenten in kontinuierlichen Rührreaktoren oder Strömungs rohrreaktoren und oberflächenwissenschaftlichen Experimenten. Verschiedene Strategien für die Auswertung der kinetischen Experimente werden gegeben, einschließlich eines umfangreichen Diagramms der „interrogativen Kinetik“. Es werden Prozeduren für die Ermittlung kinetischer Daten angegeben, die auf den Dreizonen-TAP-Reaktoren basieren.

Die beiden letzten Kapitel beschreiben die Geschichte der chemischen Kinetik und erwarten zukünftige Entwicklungen.

Zusammenfassend kann festgestellt werden, dass dies das erste Buch ist, das einen Überblick über die Dekodierung von Reaktionsmechanismen auf der Basis kinetischer Daten gibt. Dekodierung von Komplexität wird als inhärente Eigenschaft der chemischen Kinetik dargestellt. Es bietet eine einzigartige Kombination von Entwicklungen der Kinetik im Westen und der früheren Sowjetunion. Die letzteren werden weitgehend ignoriert. Viele der dargestellten Methoden können für die Auswertung experimenteller Ergebnisse nützlich sein. Wie die Autoren in ihrer Einleitung erwähnen, ist das Buch keine Enzyklopädie oder ein Lehrbuch der chemischen Kinetik, aber es kann als ergänzendes Buch im Masterstudium für Chemieingenieure und Chemiker in Kursen über chemische Kinetik dienen. Der Text ist verständlich geschrieben und übersichtlich angeordnet.

Frerich J. Keil  
Technische Universität Hamburg



**Molecular Cluster Magnets**  
Herausgegeben von Richard Winpenny. World Scientific Books, Singapur 2011.  
312 S., geb., 95.00 \$.—ISBN 978-9814322942

### Molecular Cluster Magnets



Im April 2012 wurde von Jeffrey Mervis publiziert, dass von Menschen jedes Jahr ungefähr 1.2 Zettabyte ( $1.2 \times 10^{21}$ ) elektronische Daten erzeugt werden.<sup>[1]</sup> Die Menschheit wird bald große Probleme haben, diese riesige Datenmenge, die unaufhaltsam zunimmt, zu speichern. Aus diesem Grund beschäftigt sich die Forschung weltweit intensiv mit der Synthese von Magnetsystemen im Nanometerbereich, mit dem langfristigen Ziel, die Größe der magnetischen Einheiten, die in Magnetspeichern für die Informationen kodieren, zu reduzieren. Verschiedene Ansätze wurden entwickelt, um Eindomänen teilchen zu erhalten. Als Anfang der 1990er Jahre Einzelmolekülmagnete („single-molecule magnets“, SMMs) entdeckt wurden, hoffte man, dass Informationen in einzelnen Molekülen gespeichert werden könnten. In den folgenden 20 Jahren wurden zahlreiche SMMs und verwandte molekulare Magnete hergestellt, und eine breite Forschergemeinde arbeitet derzeit an neuen Systemen mit verbesserten magnetischen Eigenschaften. Dante Gatteschi, Roberta Sessoli und Jacques Villain veröffentlichten 2006 das erste Buch über die Chemie und die Physik dieser Nanomagnete: *Molecular Nanomagnets* (Oxford University Press).

R. Winpenny beabsichtigt nicht, mit *Molecular Cluster Magnets* eine neue umfassende Monographie herauszubringen. Er hat vielmehr aktuelle

Beiträge und Übersichtsartikel führender Experten zusammengestellt, um das Werk von Gatteschi und Coautoren zu ergänzen und zu aktualisieren. Sein Buch enthält sechs voneinander unabhängige Kapitel, in denen das Thema unter neuen Aspekten beleuchtet wird: zwei Kapitel betreffen die Chemie, die übrigen die Physik der molekularen Magnete.

In Kapitel 1 beschreiben Laurence K. Thompson und Coautoren unter dem Titel „Supramolecular 2D  $[n \times n]$  Transition-metal Grids“ das Design und Synthesestrategien von molekularen Gittern. Beispielsweise werden die konvergente Selbstorganisation von Metallionen und maßgeschneiderten Liganden vorgestellt und die thermodynamischen Parameter erörtert, die bei derartigen Strategien beachtet werden müssen. Das Kapitel bietet einen detaillierten Überblick über magnetische Komplexe dieses Typs, das Spektrum reicht von  $[2 \times 2]$ -Gittern bis hin zu erstaunlichen  $[5 \times 5]$ -Gittern, die auch auf Oberflächen erzeugt werden können, wie die faszinierende Abbildung 32 zeigt. Die Autoren schließen ihren Beitrag mit einer interessanten Diskussion über die potentielle Verwendung derartiger Molekülgitter in zukünftigen Nanobaueteilen für Quantencomputer.

Kapitel 2, „Recent Synthetic Results Involving Single-Molecule Magnets“ von Guillem Aromi, Eric McInnes und Richard Winpenny, ist eine Übersicht über die Entwicklung der Synthese von SMMs von 2005 bis 2008. Es ist quasi die Fortsetzung eines früheren Übersichtsartikels von Guillem Aromi und Euan Brechin,<sup>[2]</sup> in dem die Forschungen vor 2005 zusammengefasst wurden. Die enorme Menge an publizierten Forschungsergebnissen wurde sorgfältig gesichtet und zusammengefasst. Nach kurzen Einführungen in die betreffende Theorie werden nacheinander neue Mn-, Fe-, Ni- und Co-basierte SMMs sowie verwandte Systeme vorgestellt. Ein großer Teil des Kapitels ist den intensiven Forschungen über Molekülmagnete mit 4f-Elementen und heterometallischen 3d-4f-Systemen gewidmet.

In den folgenden vier Kapiteln stehen die Physik, Theorie und wichtige Techniken im Mittelpunkt. Boris Tsukerblat und Alex Tarantul beschreiben auf 70 Seiten die wunderbare Welt des so genannten  $V_{15}$ -Komplexes. In diesem Kapitel erhält der Leser alle bekannten Informationen über diesen einzigartigen Komplex hinsichtlich Moleküllstruktur, Spin- und Wechselwirkungstopologie, magnetische Frustration, magnetische Anisotropie, antisymmetrischen Austausch usw. Auch Daten aus Untersuchungen mit Elektronenspinresonanz(EPR)- und NMR-Spektroskopie, inelastischer Neutronenstreuung, Myonenstreuung und Rabi-Oszillation werden, begleitet mit einer ausführlichen theoretischen Diskussion, präsentiert.

In Kapitel 4 erläutert Tatiana Guidi in einem didaktisch wertvollen, informativen Beitrag, wie mit Hilfe der Neutronenspektroskopie physikalische

Charakteristika molekularer Magnete untersucht werden können. Nach einer Beschreibung der theoretischen Grundlagen und der Technik stellt die Autorin anhand treffender Beispiele die Vorteile der Neutronenspektroskopie bei der Untersuchung von Austauschwechselwirkungen, Energiespektren, der magnetischen Anisotropie, Spindynamik und Quantenkohärenz in molekularen Nanomagneten heraus.

Eric J. L. McInnes bietet in Kapitel 5 unter dem Titel „Recent Developments in EPR Spectroscopy of Molecular Nanomagnets“ unter anderem einen Überblick über die EPR-Modellierung jenseits der Makrospin-Approximation, experimentelle Studien von Molekülkomplexpaaren und die Anwendung der Puls-EPR-Spektroskopie in Untersuchungen der Spindynamik und Kohärenz. Dieser Beitrag enthält sehr viele Literaturverweise, wobei die in der Einführung zitierten Arbeiten und Übersichtsartikel besonders für Neulinge auf diesem Gebiet sehr nützlich sind.

Das letzte Kapitel steht unter dem Thema „Simulating Computationally Complex Magnetic Molecules“. Ausgehend vom Heisenberg-Modell beschreiben Larry Engelhardt und Christian Schröder die theoretischen Verfahren für die Simulation von Eigenschaften magnetischer Komplexe. Monte-Carlo-Simulationen und klassische Spindynamik-Methoden werden erklärt und mit dem Matrixdiagonalisierungsverfahren verglichen, wobei Vor- und Nachteile dieser Verfahren erörtert werden. Die Anwendung der verschiedenen Verfahren wird an ausgewählten magnetischen Komplexen veranschaulicht.

F. A. Cotton würde sich bestimmt an dem Titel des Buchs stören, d.h. an der Verwendung der Bezeichnung „Cluster“ für einfache Koordinationsverbindungen, die keine Metall-Metall-Bindung aufweisen. Winpenny hätte durchaus einen besseren Titel finden können! Aber dieser „Missgriff“ ist eigentlich der einzige Kritikpunkt an diesem Buch, und: Wenn einem der Titel eines Buchs nicht passt, ist das kein Grund, seinen Inhalt nicht zu mögen. Dieses Buch ist eine ausgezeichnete Ergänzung des oben erwähnten Lehrbuchs von Gatteschi und Coautoren. Hochschullehrer, fortgeschrittene Studierende und diejenigen, die auf diesem Gebiet forschen, werden *Molecular Cluster Magnets* mit Freuden lesen und als wertvolles Nachschlagewerk nutzen.

Rodolphe Clérac

Centre de Recherche Paul Pascal, CNRS  
Université de Bordeaux (Frankreich)

DOI: 10.1002/ange.201202869

[1] J. Mervis, *Science* **2012**, *336*, 22.

[2] G. Aromi, E. K. Brechin, *Structure and Bonding* **2006**, *122*, 1–67.