

# Angewandte Chemie

Eine Zeitschrift der Gesellschaft Deutscher Chemiker



Chemie

[www.angewandte.de](http://www angewandte de)

2012-124/51



## Würfeln mit Mo-V-Te-Nb-Oxid, ...

... einem vielversprechenden Katalysator für die Alkanoxidation, dessen Strukturinformation aber durch die gebrochene Verteilung der V- und Mo-Atome verschleiert wird: P. Sautet et al. präsentieren in der Zuschrift auf S. 13026 ff. einen effizienten DFT-Ansatz zum schnellen Vergleich der Energien von bis zu 8008 Konfigurationen des komplexen Oxids. Die Berechnungen bestätigen die experimentelle statistische V-Verteilung. Die Würfel der Natur sind gezinkt, denn die V/Mo-Verteilung ist alles andere als gleichwahrscheinlich.