



## Fundamental Concepts in Heterogeneous Catalysis

Die heterogene Katalyse ist eine Schlüsseltechnologie der chemischen Industrie. Das Schwinden der fossilen Brennstoffreserven verleiht ihr noch größere Bedeutung, da neue Katalysatoren gesucht werden, welche die praktisch unbegrenzt verfügbare Sonnenenergie in effizienter und nachhaltiger Weise zur Erzeugung von Chemikalien und nutzbarer Energie verwenden, und das im großen Maßstab. Um diese enorme Herausforderung zu meistern, könnten Fortschritte durch inspirierte Versuche nicht ausreichen, statt dessen ist ein allumfassender Ansatz auf einer tragfähigen theoretischen Grundlage gefragt. Genau dies ist die Ansicht der Autoren dieses Buchs, das in 12 kurzen Kapiteln einen großen Teil des aktuellen Wissens über die Mechanismen der heterogenen Katalyse auf Atom- und Molekülebene zusammenfasst. Ein Schwerpunkt liegt dabei auf Anwendungen, und auch praktische Aspekte werden angesprochen. Die Grundlage bildet eine tiefe Analyse der Energie- und Freie-Energie-Profile aus Dichtefunktionalrechnungen (DFT) für geeignete, zumeist periodische Oberflächenmodelle. Zu diesem Gebiet haben die Autoren bereits wichtige Beiträge geleistet.

Nach einer kurzen Einleitung werden in Kapitel 2 die wichtigen Konzepte von Adsorptions-, Reaktions- und Aktivierungsenergie auf Oberflächen eingeführt, und die Bedeutung der Oberflächenorientierung und niederkoordinierter Zentren wird aufgezeigt. Kompliziertere Konzepte wie die Nullpunktenergie und Zustandssumme werden gut erklärt. Einige dieser Konzepte und Anmerkungen sind in Kästchen begleitend zum Text herausgestellt, was Studenten sicher zu schätzen wissen.

Anschließend wenden sich die Autoren kurz den Konzepten des chemischen Gleichgewichts zu. Hier verwenden sie einige Ausdrücke, die dem strengen Formalismus der thermodynamischen Potentiale nicht genügen. Der Leser wird aber darauf hingewiesen, dass Näherungen genutzt werden, die für den Zweck hinreichend genau sind. Mithilfe von statistischer Thermodynamik (in vereinfachter Form) wird gezeigt, wie mit DFT berechnete Energien zur Vorhersage thermodynamischer Größen und Beziehungen dienen können; ein Beispiel ist die schöne und einfache Ableitung einer Langmuir-Isotherme.

Kapitel 4 und 5 befassen sich mit der Vorhersage und Anwendung von Geschwindigkeitskonstanten. Die Autoren gehen dieses Problem in technischer Weise an, und der formale Teil ist nicht unerlässlich für den Gesamtüberblick. Die verschiedenen Darstellungsformen der Übergangs-

zustandstheorie und die zugehörigen Näherungen geben nützliche Einblicke. Im Unterschied zu vielen allgemeineren Lehrbüchern zeigen diese beiden Kapitel auch, in welchen Größenordnungen sich die wichtigsten Parameter bewegen; diese Information ist besonders für theoretisch interessierte Leser interessant.

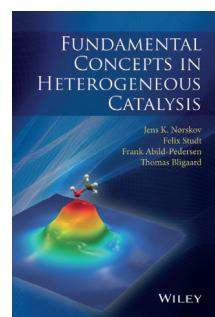
Kapitel 5 stellt die nützlichen Konzepte von Deskriptoren und Skalierung und Brønsted-Evans-Polanyi-Beziehungen vor, die mit herausragenden Forschungsergebnissen der Autoren in Verbindung stehen. Im darauf folgenden Kapitel werden mithilfe von Deskriptoren Aktivitäts- und – wichtiger noch – Selektivitätskarten abgeleitet. Diese wertvollen Hilfsmittel ermöglichen ein Katalysator-screening ohne großen Rechenaufwand.

Die physikalischen Grundlagen für Skalierung und andere Beziehungen liefert Kapitel 8, in dem das bekannte d-Band-Modell im Detail beschrieben wird. Dieses von einigen der Autoren entwickelte Modell schlägt eine Brücke zwischen der Bandtheorie von Festkörpern und qualitativen Konzepten der chemischen Bindung. Ein exakteres Bild, mit zusätzlichen Details zur Bandtheorie, dem Newns-Anderson-Modell und seiner Anwendung auf Tendenzen von Adsorptionsbindungsenergien, folgt am Ende des Buchs in Kapitel 12.

Bis hierher war die Diskussion auf Ergebnisse von DFT-Rechnungen an perfekten, ebenen oder gestuften Oberflächen beschränkt. Um realistische Katalysatormodelle zu erhalten, werden in Kapitel 9 Struktur- und Trägereffekte mit einbezogen. Das Ausmaß der Strukturempfindlichkeit sowie Auswirkungen des Trägers und Promotors liefern wichtige Informationen über die physikalische Natur der aktiven Zentren, die für die Entwicklung neuer und die Verbesserung bestehender Katalysatoren essenziell sind. Promotor- und Vergiftungseffekte werden in Kapitel 10 behandelt.

In Kapitel 11 geht es um ein „heißes“ und zugleich kniffliges Thema: Die Oberflächen-Elektrokatalyse ist eine der aussichtsreichsten Technologien zur Energieerzeugung. Hier stellen die Autoren jüngste Erkenntnisse aus theoretischen Simulationen von Reaktionen auf Elektrodenoberflächen vor, wobei sie die meisten Konzepte und Hilfsmittel anwenden, die in den vorangehenden Kapiteln vorgestellt wurden. Gemeinsamkeiten und Unterschiede beider Szenarien werden im Detail besprochen.

Die Monographie beschreibt den Wissensstand auf dem Gebiet der theoretischen heterogenen Katalyse, wobei der Schwerpunkt mehr auf allgemeinen Tendenzen als auf der Genauigkeit der jeweiligen DFT-Rechnungen liegt. Dadurch unterscheidet sie sich von anderen Quantenchemie-Büchern, die auf eine präzise Vorhersage der Thermochemie abzielen. Bei den komplexen Systemen der heterogenen Katalyse stellt es aber bereits



Fundamental Concepts in Heterogeneous Catalysis  
Von Jens K. Nørskov, Felix Studt, Frank Abild-Pedersen und Thomas Bligaard. John Wiley and Sons, Hoboken 2014. 208 S., geb., 83,70 €.—ISBN 978-1118888957

einen großen Erfolg dar, überhaupt zu einer tragfähigen Vorhersage zu gelangen. Für Leser, die es genauer wissen wollen, hält das Buch eine Reihe von Anhängen bereit, in denen einige wichtige Aspekte weiter diskutiert werden, sowie eine Auswahl von Literaturverweisen, hauptsächlich zu Arbeiten der Autoren. Auch wenn der Text etwas zur Perspektive der Festkörperphysik neigt, deren Konzepte nicht allen Lesern geläufig sind, ist er doch eine wichtige Ergänzung für Chemiker auf

dem Gebiet der heterogenen Katalyse, die Einblick in die „versteckte Zauberkraft“ der Katalysatoren suchen.

*Francesc Illas*

Physical Chemistry Department  
University of Barcelona (Spanien)

**Internationale Ausgabe:** DOI: 10.1002/anie.201506018

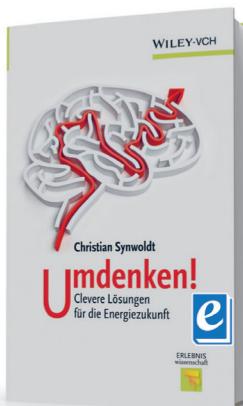
**Deutsche Ausgabe:** DOI: 10.1002/ange.201506018



**Neugierig?**

**Sachbücher** von **WILEY-VCH**

Jetzt auch als E-Books unter:  
[www.wiley-vch.de/ebooks](http://www.wiley-vch.de/ebooks)



CHRISTIAN SYNWOLDT

## **Umdenken**

Clevere Lösungen  
für die Energiezukunft

ISBN: 978-3-527-33392-9  
September 2013 250 S. mit 58 Abb.  
Gebunden € 24,90

Natürliche Ressourcen für die Energiegewinnung werden knapp – wir wissen das. Doch was tun? Sind neue Technologien und Energieeffizienz der Königsweg zu einer nachhaltigen Energieversorgung? Können Kohlekraftwerke der nächsten Generation klimaneutral arbeiten? Ist Photovoltaik der Heilige Gral der Stromerzeugung? Oft gibt es auf diese Fragen nur einseitige, interessengeleitete Antworten.

Christian Synwoldt zeigt in seinem Buch Hintergründe und Details, die in der Diskussion um eine nachhaltige Energieversorgung regelmäßig unter den Tisch fallen und stellt dabei bequeme Standpunkte in Frage.

5964101308.htm

Wiley-VCH • Postfach 10 11 61  
D-69451 Weinheim

Tel. +49 (0) 62 01-606-400  
Fax +49 (0) 62 01-606-184  
E-Mail: [service@wiley-vch.de](mailto:service@wiley-vch.de)

**WILEY-VCH**

[www.wiley-vch.de/sachbuch](http://www.wiley-vch.de/sachbuch)

Irrtum und Preisänderungen vorbehalten. Stand der Daten: August 2013