

21.2	Geschwindigkeitsgesetze	852
21.2.1	Elementarreaktionen	852
21.2.2	Aufeinander folgende Elementarreaktionen	854
21.3	Reaktionsmechanismen	859
21.3.1	Unimolekulare Reaktionen	859
21.3.2	Die Kinetik von Polymerisationen	862
21.3.3	Photochemie	866
<b>22</b>	<b>Reaktionsdynamik</b>	<b>885</b>
22.1	Reaktive Stöße	885
22.1.1	Die Stoßtheorie	886
22.1.2	Diffusionskontrollierte Reaktionen	893
22.1.3	Die Stoffbilanzgleichung	897
22.2	Die Theorie des Übergangszustands	898
22.2.1	Die Eyringgleichung	898
22.2.2	Thermodynamische Aspekte	902
22.3	Die Dynamik molekularer Stöße	905
22.3.1	Reaktive Stöße	905
22.3.2	Potenzialhyperflächen	907
22.3.3	Theoretische und experimentelle Ergebnisse	908
22.4	Die Dynamik des Elektronentransfers	912
22.4.1	Elektronentransfer in homogenen Systemen	912
22.4.2	Elektronentransferprozesse an Elektroden	917
<b>23</b>	<b>Katalyse</b>	<b>933</b>
23.1	Homogene Katalyse	933
23.1.1	Merkmale der homogenen Katalyse	933
23.1.2	Enzyme	935
23.2	Heterogene Katalyse	942
23.2.1	Wachstum und Struktur von festen Oberflächen	942
23.2.2	Adsorption	946
23.2.3	Die Geschwindigkeit von Oberflächenprozessen	953
23.2.4	Mechanismen der heterogenen Katalyse	956
23.2.5	Die katalytische Aktivität an Oberflächen	958
<b>Anhang A Wegweiser</b> 971		
<b>Anhang B Tabellen</b> 975		
<b>Anhang C Charaktertafeln</b> 1013		
<b>Sachregister</b> 1017		



# Vorwort

Wir sind mit dieser Auflage unserer üblichen Tradition gefolgt, sowohl den Inhalt als auch die Präsentation vollständig zu überarbeiten. Das Ziel war dabei, das Buch weiterhin flexibel einsetzbar, für Studierende verständlich, umfassend und verlässlich zu halten, ohne seinen Umfang ausufern zu lassen. Andererseits darf nicht übersehen werden, dass ein großer Teil des Umfangs dieses Buchs durch die verwendeten pädagogischen Elemente verursacht wird (wie *Beispiele*, *Die wichtigsten Gleichungen auf einen Blick* oder *Tabellenanhang*), nicht unbedingt durch die reine Informationsdichte.

Das Buch ist immer noch in drei Teile gegliedert, allerdings wurde Material zwischen den Kapiteln verschoben und die Kapitel wurden neu organisiert. Auf die Tatsache, dass die Thermodynamik weniger im Fokus steht als früher, haben wir durch Zusammenfassen mehrerer Kapitel aus Teil 1 (Gleichgewicht) reagiert, wobei wir auch im Blick hatten, dass manche der angesprochenen Themen bereits in einführenden Vorlesungen behandelt werden. So erhält die Behandlung der Phasendiagramme nun kein eigenes Kapitel mehr, sondern erfolgt in den Kapiteln 4 (*Physikalische Umwandlungen reiner Stoffe*) und 5 (*Die Eigenschaften einfacher Mischungen*). Neue *Anwendungen* beleuchten die Anwendung grundlegender thermodynamischer Prinzipien in den Materialwissenschaften, einem Gebiet von wachsender Bedeutung für die Chemie.

In Teil 2 (Struktur) wurden die einzelnen Kapitel um die Beschreibung aktueller Methoden der Materialwissenschaften (einschließlich der Nanowissenschaften) und der Spektroskopie ergänzt. Auch die Abdeckung der modernen Rechenverfahren in der Chemie insbesondere in Kapitel 10 wurde verbessert.

In Teil 3 sind die Kapitel über die Kinetik komplexer Reaktionen sowie Oberflächenprozesse verschwunden, nicht jedoch die entsprechenden Inhalte. Wir halten diese Themen gerade heutzutage für sehr wichtig. Um sie besser in die anderen Themen des Buchs einzugliedern, erfolgt die Beschreibung von Polymerisationen, der Photochemie sowie enzym- und oberflächenkatalysierter Reaktionen jetzt in den Kapiteln 21 (*Die Geschwindigkeit chemischer Reaktionen*) und 22 (*Reaktionsdynamik*), die bereits aus früheren Auflagen bekannt sind, sowie einem neuen Kapitel 23 über *Katalyse*.

Die Anhänge aus früheren Auflagen haben wir abgeschafft. Die zuvor in den Anhängen versteckte Behandlung elementarer mathematischer Methoden erfolgt jetzt in Form von *Mathematischen Exkursen* an geeigneten Stellen über das gesamte Buch verteilt. Jeder dieser Exkurse entwickelt und vertieft genau die mathematischen Methoden, die im jeweiligen Kapitel gerade erforderlich sind. Der Beschreibung chemischer und physikalischer Grundlagen, die früher ebenfalls in den Anhängen zu finden war, ist jetzt ein eigenes Kapitel *Grundlagen* zu Beginn des Buchs gewidmet; spezielle Punkte werden gelegentlich in Form einer *Anmerkung* oder *Zusatzinformation* im Text vertieft. Wir glauben, dass sich durch die Auflösung der Anhänge und die Präsentation der Inhalte an der Stelle im Text, an der sie wirklich benötigt werden, die Wahrscheinlichkeit erhöht, dass diese gelesen und wahrgenommen werden.

Die Diskussion in der Physikalischen Chemie, ob Vorlesungen über Physikalische Chemie eher die Quantenmechanik oder doch die Thermodynamik an den Anfang stellen sollten, geht unvermindert weiter. Als Konsequenz haben wir versucht, die Einteilung des Buchs so flexibel wie möglich zu halten. Das Ziel war dabei, unterschiedliche Wege durch das Buch möglich zu machen. Am Ende dieses Vorworts machen wir zwei Vorschläge, in welcher Reihenfolge die einzelnen Kapitel durch-

gearbeitet werden könnten. Für all diejenigen, die einen vertieften Kurs ausgehend von der Quantenmechanik wünschen oder benötigen, empfehlen wir einen Blick in unser Buch *Quanta, matter, and change* (mit Ron Friedman), das ein ähnliches Spektrum von Themen abdeckt wie das vorliegende Buch, aber wegen des anderen Ansatzes eine ganz unterschiedliche Philosophie verfolgt.

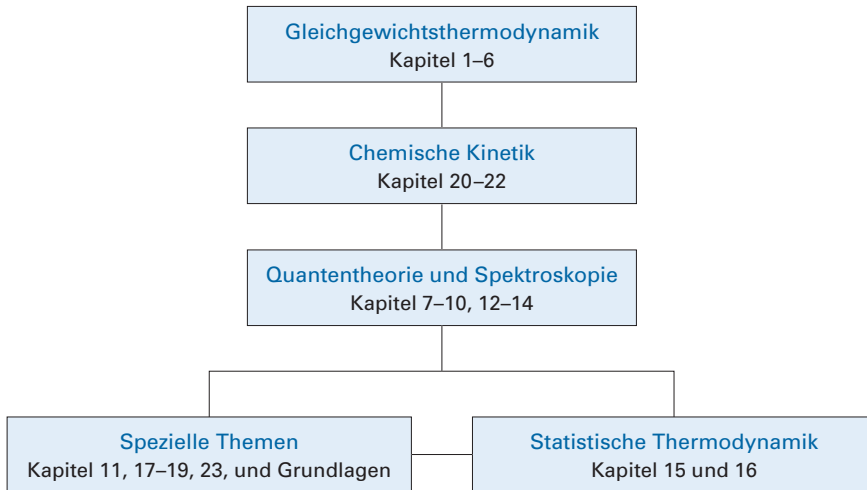
Unsere in den Voraufgaben geäußerte Besorgnis hinsichtlich der mathematischen Voraussetzungen der Studenten ist nicht geringer geworden. Wir haben versucht, weitere Strategien zu entwickeln, um die absolute Notwendigkeit der Mathematik für die Physikalische Chemie deutlich zu machen und gleichzeitig diese Mathematikkenntnisse zu vermitteln. Zusätzlich zu den *Mathematischen Exkursen* im Anschluss an eine Reihe von Kapiteln leiteten wir Gleichungen noch ausführlicher her, begründeten ihren Sinn und ihre Notwendigkeit und kommentieren jeden einzelnen Schritt. Wir haben versucht, uns in die Studenten zu versetzen, und versuchen ihnen so viel Hilfe wie möglich beim Kampf mit der Mathematik zu geben.

Viele weitere Änderungen dienen dem Zweck, das Buch effizienter und nützlicher zu machen und gleichzeitig die Themen unterhaltsamer und lebendiger zu präsentieren. Beispielsweise haben wir fast jede der über 1000 Grafiken neu gezeichnet, um ihre Darstellung konsistenter zu machen. Der Abschnitt *Die wichtigsten Gleichungen auf einen Blick* am Ende jedes Kapitels bieten einen kondensierten Überblick über die wichtigsten der im jeweiligen Kapitel auftretenden Gleichungen. Ein weiteres neues Element sind die *Wegweiser* im Anhang, die den Zusammenhang zwischen verschiedenen Beziehungen und die Herkunft wichtiger Gleichungen veranschaulichen sollen.

Alles in allem haben wir den Text komplett überarbeitet, aktualisiert und stärker auf Anwendungen der physikalischen Chemie in anderen Fachgebieten ausgerichtet, haben den Einsatz elektronischer Hilfsmittel verstärkt und das Buch insgesamt flexibler und natürlich aktueller gemacht.

Oxford  
Portland

P. W. A.  
J. de P.

**Makroskopischer Ansatz****Mikroskopischer Ansatz**