

# Glossar

**Bernhard Blank**

**Veröffentlicht unter: [www.didaktikmat2chem.de](http://www.didaktikmat2chem.de)<sup>1</sup>**

**Fassung 2.0**

© Copyright August 2017

Dieses Glossar ist urheberrechtlich geschützt. Jede Verwertung außerhalb der engen Grenzen des Urheberrechtsgesetzes ist ohne Zustimmung des Autors unzulässig und strafbar. Dies gilt insbesondere für Vervielfältigungen, Übersetzungen und Mikroverfilmungen. Die Einspeicherung und Verarbeitung in elektronischen Systemen ist nur insofern erlaubt, als es für den Dienst von Suchmaschinen und deren Zugriffsmöglichkeiten via Internet erforderlich ist. Es wird untersagt, dieses Glossar über Sharehoster oder anderen Plattformen Dritten zugänglich zu machen.

Eine gewerbliche Nutzung ist nicht zulässig.

<sup>1</sup> Titel der Website: Erklärungen in Mathematik, Physik und Physikalischer Chemie

## ***Axiom***

Etwas, was im Grunde genommen nicht bewiesen werden kann, aber als gültig angesehen wird. Synonyme dafür sind: Postulat, Theorem, Gesetz, manchmal auch Satz (wie z.B. die Hauptsätze der Thermodynamik). Hin und wieder lässt sich dafür jedoch trotzdem eine Erklärung finden, wie bei den Axiomen der Wahrscheinlichkeit.

## ***Determiniertheit***

Unter diesem Begriff versteht man in der Physik, dass alle Bahnen, auf denen sich Teilchen oder Körper bewegen, immer vollständig vorherbestimmt sind, was nichts anderes heißt, als dass man sie im Voraus berechnen kann.

## ***Determinismus***

Philosophische Lehre, nach der angeblich alles auf der Welt vorherbestimmt ist. Der Determinismus fand seine Begründung durch die Mechanik (die heute neben Elektrodynamik und auch Thermodynamik zur klassischen Physik gezählt wird). In der Mechanik läuft alles Materielle auf Bahnen ab, die in ihrer Art determiniert sind. Der Einfluss der Mechanik war so groß, dass durch sie diese philosophische Lehre entstand.

(Eine weitere, nicht unbedeutende Lehre, die auch mit den Naturwissenschaften in Verbindung steht und die zz. en vogue ist, ist der Positivismus [s. dieses Verzeichnis].)

## ***Elektromagnetische Strahlung***

Elektromagnetische Energie, wie z. B. Licht, die man nach dem Teilchenbild interpretiert. Licht breitet sich danach wie ein „Strahl von Teilchen“ geradlinig aus, wie man dies gerade auch bei der Reflexion von Licht an einem Spiegel beobachten kann. Der Begriff wird fälschlicherweise auch auf die Wellennatur des Lichts und von elektromagnetischer Energie generell übertragen.

## ***Extrapolation***

Lt. Wahrig: „Schluss auf einen Sachverhalt, der außerhalb eines experimentell zugänglichen Bereiches liegt.“ Beispiel: das wellenförmige Aussehen von Atom- und Molekülorbitalen, das experimentell so nicht fassbar ist.

## ***Infinitesimalrechnung***

Oberbegriff u.a. für Differentialrechnung, Integralrechnung und die Theorie der Differentialgleichungen

## ***Klassische Mechanik***

Lehre von den Bewegungsabläufen von Körpern, wie sie unter idealisierten Bedingungen auftreten.

## ***Logik***

Widerspruchsfreies Denken, folgerichtiges Denken.

## ***Makrokosmos***

Unsere gegenwärtige Welt sowie die Welt der Sterne und Galaxien.

## ***Matrizenmechanik***

Eine u.a. auf W. Heisenberg zurückgehende Form der Quantenmechanik. Hierbei werden Atome und Moleküle mittels Matrizen beschrieben.

## ***Menge***

Oberbegriff für eine Ansammlung von sichtbaren und nicht sichtbaren Dingen, die alle eine gemeinsame Eigenschaft besitzen. Die Mitglieder einer Menge nennt man Elemente.

## ***Mikrokosmos***

Die Welt der Atome und Moleküle sowie noch kleinerer Teilchen.

## ***Modell***

Eine auf bestimmten Annahmen beruhende, meist anschauliche Idealvorstellung. Beispiele sind: Das Modell des idealen Gases, das Orbitalmodell, das Wassermodell des elektrischen Stromes.

## ***Modulation***

Allgemein ein Vorgang, bei der ein hochfrequenter Träger durch ein niederfrequentes Nutzsignal überlagert wird, dass so dessen ‚Rhythmus‘ ändert. Der hochfrequente Träger lässt sich über ein entsprechendes Medium übertragen, das niederfrequente Nutzsignal alleine nicht. (Modulation = *lat.* Rhythmus, Takt)

## ***Physik***

Wissenschaft vom Messen und von den Gesetzmäßigkeiten zwischen den gemessenen oder davon abgeleiteten Größen.

## ***Positivismus***

Philosophische Lehre, nach der nur das als gültig angesehen wird, was gemäß dem naturwissenschaftlichen Denken durch das Experiment verifizierbar ist.

## ***Quant***

Bei elektromagnetischer Strahlung die Energie von jeweils einer ganz bestimmten Wellenlänge, das als Energiepaket (= Teilchen) angesehen wird.

## ***Quantenchemie***

Auf den Postulaten der Quantenmechanik beruhende Berechnungsmethoden, die chemische Fragestellungen zum Gegenstand haben, so z. B. die Struktur und Reaktivität von Atomen und Molekülen sowie deren physikalisch-chemische Eigenschaften.

## ***Quantenmechanik***

Die gegenwärtige Theorie mikrophysikalischer Systeme, so von Atomen und Molekülen, und auch von Elementarteilchen, in der diese in ihrer nichtrelativistischen Form berechnet werden können. Sie ähnelt in ihren Gesetzmäßigkeiten formal der klassischen Mechanik (daher auch der Name), nur das man es hier mit gequantelten Zuständen zu tun hat.

Es gibt zwei Formen der Quantenmechanik: die Wellenmechanik und die Matrizenmechanik, die beide mathematisch gleichwertig sind, also zu den gleichen Ergebnissen führen.

Der Begriff der Quantenmechanik steht jedoch meist schon für den der Wellenmechanik schlechthin.

## ***Quantenphysik***

Der Teil der Physik, in dem das plancksche Wirkungsquantum  $h$  eine Rolle spielt. Das ist i. Allg. der Mikrokosmos.

## **Quantentheorie**

Oberbegriff für die Gesamtheit aller Theorien über mikrophysikalische Systeme. Sie wurde von M. Planck durch seine Strahlungsformel angestoßen und umfasst das bohrsche Atommodell ebenso wie die Quantenmechanik und weitere Theorien.

## **Thermodynamik**

Teildisziplin der Physik, die sich mit der Umwandlung von Wärme in eine gerichtete Kraft befasst (vom griech. *thermos* = warm, heiß und *dynamis* = Kraft, Vermögen).

## **Unendlichkeit**

Bezeichnet die Eigenschaft, dass etwas ohne Ende ist.

## **Wahrscheinlichkeitsrechnung**

In der Wahrscheinlichkeitsrechnung befasst man sich mit den Wahrscheinlichkeiten in Zufallsexperimenten.

## **Wellenmechanik**

Eine auf Erwin Schrödinger zurückgehende Form der Quantenmechanik, in der Atome und Moleküle über sog.  $\Psi$ - (sprich: Psi-) Funktionen beschrieben werden. Die wellenförmige Gestalt dieser gibt ihr den Namen.  
Die Wellenmechanik ist gerade in der Chemie von großer Bedeutung.

## **Wellenpaket**

Räumlich abgegrenzter Bereich eines Wellengebildes mit besonders hoher Amplitude, z.B. das gaußsche Wellenpaket.

## Liste der verwendeten Symbole

### **Allgemeines**

$\infty$	steht für unendlich groß; wird der Einfachheit halber im Sprachgebrauch und in der Literatur mit ‚unendlich‘ bezeichnet, obwohl diese Ausdrucksweise nicht ganz korrekt ist.
$c$	eine beliebig gewählte Konstante, also $c = const.$
$\sum_{i=1}^n a_i$	$a_1 + a_2 + \dots + a_n$
$\prod_{i=1}^n a_i$	$a_1 \cdot a_2 \cdot \dots \cdot a_n$
$\bigcup_{i=1}^n E_i$	$E_1 \cup E_2 \cup \dots \cup E_n$
$f = f(x), y = f(x),$ $y = y(x)$	Schreibweisen für eine Funktion
$\equiv$	identisch
$:=$	ist nach Definition gleich
$i$	$\sqrt{-1}$

### **Differential- und Integralrechnung**

$x \rightarrow \infty, x \rightarrow 0$	steht für einen Grenzprozess
$\Delta x, \Delta y$	wird hier für ein Stadium eines Grenzprozesses verwendet
$dx, \partial x$	ein Differential bzw. ein partielles Differential
$d\vec{u}, d\vec{v}$	Vektorschreibweise für Differentiale
$F(x), G(x)$	Schreibweisen für eine Stammfunktion
$[F(x)]_a^b$	Stammfunktion in den Grenzen von $a$ bis $b$
$\frac{df(x)}{dx}$	Ableitung einer Funktion $f(x)$
$\frac{\partial f(x, y)}{\partial x}$	partielle Ableitung einer Funktion

### **Funktionaldeterminante, Koordinatentransformation**

$ A $	eine Determinante
$r, \varphi$	ebene Polarkoordinaten
$r, \vartheta, \varphi$	sphärische Polarkoordinaten
$x_I, x_{II}, x_{III}, \dots, x_V$	Veränderliche eines mehrdimensionalen Koordinatensystems
$x_0, x_1, x_2, x_p$	Koordinaten einer Veränderlichen

## **Wahrscheinlichkeitsrechnung**

$x_i, x$	Merkmalwert, Realisation
$\omega_i, \omega$	Elementarereignis, Ereignis
$A, B, C, \dots, E, E_i$	Ereignis
$h_a(\omega_i), h_a(E_i), h_a(x_i)$	absolute Häufigkeit
$h_r(\omega_i), h_r(E_i), h_r(x_i)$	relative Häufigkeit
$h_r(\omega_i)_\infty$	relative Häufigkeit für unendlich viele Ausfälle (nur in diesem Skript verwendet) [= Wahrscheinlichkeit]
$P(E_i), P(X = x_i)$	Wahrscheinlichkeit
$P(E_i E_j \dots)$	Wahrscheinlichkeit in einem mehrstufigen Zufallsexperiment
$\Omega$	Ergebnisraum, Ergebnismenge
$\mathfrak{P}(\Omega)$	Ereignisraum, Potenzmenge von $\Omega$
$X, Y, X_i$	Schreibweisen für eine Zufallsvariable
$f(\omega), f(x)$	Wahrscheinlichkeitsdichte, Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion
$\bar{x}$	Mittelwert
$E(X), \mu$	Symbole für einen Erwartungswert
$V(X)$	Varianz
$\sigma$	Standardabweichung
$\bar{\sigma}$	Form einer Standardabweichung, die nur diesem Skript verwendet wird

## **Physikalische Chemie**

$\rho(x)$	Wahrscheinlichkeitsdichte bzw. Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion in der Quantenmechanik
$\psi(x)$	psi-Funktion
$\psi^*(x)$	konjugiert-komplexe Funktion zu $\psi(x)$ (die Größe $i$ wird hierbei durch $-i$ ersetzt)
$\bar{x}$	Erwartungswert des Ortes in der Quantenmechanik

## Postulate der Quantenmechanik

Übernommen nach der Einteilung von G. M. Barrow<sup>1</sup>:

1. Jeder Zustand eines atomaren Systems mit einem Freiheitsgrad wird durch eine *Wellenfunktion* (Zustandsfunktion)  $\Psi(x, t)$  beschrieben.
2. Die *Wellengleichung* (Zustandsgleichung) für  $\Psi(x, t)$ , die sog. Schrödingergleichung, erhält man aus der Gesamtenergie  $E = \frac{p_x^2}{2m} + V(x)$ , indem man die klassische Größen durch *Operatoren* ersetzt und auf  $\Psi(x, t)$  wirken lässt.

Klassische Größe	Operator
$x$ (Ort)	$x$
$p_x$ (Impuls)	$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \quad (i = \sqrt{-1})$
$E$ (Gesamtenergie)	$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t}$

3. Die Wellenfunktion  $\Psi(x, t)$  soll über den ganzen Bereich der Variablen  $x$  endlich, eindeutig und differenzierbar sein.
4. Die Wellenfunktion  $\Psi(x, t)$  wird so normiert, dass

$$\int_x \Psi^*(x, t) \Psi(x, t) dx = 1$$

ist.

5. Der Erwartungswert  $\bar{P}$  einer experimentell beobachtbaren Größe  $P$  mit dem Operator  $\mathbf{P}$  wird auf folgende Weise gebildet:

$$\bar{P} = \int_x \Psi^*(x, t) \mathbf{P} \Psi(x, t) dx$$

---

<sup>1</sup> Barrow, Gordon M.: Physikalische Chemie. 4. Auflage. Teil I, Heidelberg, Wien (Bohmann), Braunschweig (Friedr. Vieweg & Sohn) 1980, S. 74/75.