

Anhang

Bernhard Blank

Veröffentlicht unter: www.didaktikmat2chem.de¹

Fassung 3.1

© Copyright April 2023

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.

¹ Titel der Website: Erklärungen in Mathematik, Physik und Physikalischer Chemie

Glossar

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 der Elektrodynamik und auch der 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

Eine durch den Wechsel von elektrischen und magnetischen Feldern sich ausbreitende Welle. Strahlung deshalb, weil man den senkrecht zur Wellenfront stehenden Vektor als Strahl begreift.

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 und wie sie aus den drei Newton'schen Axiomen folgen.

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 unsichtbaren 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 Wassermolekülmodell des elektrischen Stromes.

Modulation

Allgemein ein Vorgang, bei dem ein hochfrequenter Träger durch ein niederfrequentes Nutzsignal überlagert wird, so dass 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

Eine in Anlehnung an die klassische Mechanik entwickelte Mechanik, mit der man die Größe von Energiepaketen im Mikrokosmos, den sog. Quanten, berechnen kann.

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.

Statistik

Die mathematische Disziplin, die sich mit der Beschreibung und Einordnung von Verteilungen befasst, einschließlich der sich daraus ergebenden Möglichkeiten.

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

Die mathematische Disziplin der Beschreibung von Zufallsexperimenten.

Wellenmechanik

Eine auf Erwin Schrödinger zurückgehende Form der Quantenmechanik, in der Atome und Moleküle über sog. Ψ - (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.

Unglückliche, naturwissenschaftliche Ausdrücke

Thermodynamisch und kinetisch kontrollierte Reaktionen

Der Kontrollierende ist immer der Chemiker, der durch die Wahl der Reaktionsbedingungen bzw. Reagenzien dafür sorgt, dass eine Reaktion nach den Gesetzmäßigkeiten der Thermodynamik bzw. nach denen der Kinetik abläuft. Die Reaktion selbst ist dabei aber i. Allg. kein Regelkreis, der diese nach thermodynamischen bzw. nach kinetischen Kriterien steuert, sie also „kontrolliert“ .
Hier liegt also ein eindeutiger Bezugsfehler vor.

Verschmierte Elektronen

Hiermit ist gemeint, dass die Wahrscheinlichkeit des Antreffens von Elektronen sich über einen größeren, räumlichen Bereich erstreckt und diese sich nicht mehr auf Bahnen nach den Gesetzen der klassischen Mechanik verhalten. Die physikalische Realität der Elektronen wird dabei durch ψ - bzw. ψ^2 -Funktionen und ihre Bahn nicht, wie in der klassischen Mechanik üblich, durch die Bewegung von Massenpunkten erfasst. Insofern ist der Ausdruck „verschmiert“ ein wenig unglücklich, da er nicht der Realität der ψ - bzw. ψ^2 -Funktionen Rechnung trägt.

Liste der verwendeten Symbole

Allgemeines

		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 $c = const.$
$\prod_{i=1}^n a_i$	$a_1 a_2 \dots a_n$	
$\prod_{i=1}^n a_i$	$a_1 a_2 \dots a_n$	
$\bigcup_{i=1}^n E_i$	$E_1 E_2 \dots E_n$	
$f = f(x), y = f(x)$		Schreibweisen für eine Funktion
$y = y(x)$		identisch
:		ist nach Definition gleich
\sqrt{i}		\sqrt{i}

Differential- und Integralrechnung

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

Funktionaldeterminante, Koordinatentransformation

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

Wahrscheinlichkeitsrechnung

x_i, x	Merkmalwert, Realisation
ω_i	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
$h_r(\omega_i)$	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
Ω	Ergebnisraum, Ergebnismenge
$\mathfrak{P}(\Omega)$	Ereignisraum, Potenzmenge von Ω
X, Y, X_i	Schreibweisen für eine Zufallsvariable
$f(\omega_i), f(x)$	Wahrscheinlichkeitsdichte, Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion
\bar{x}	Mittelwert
$E(X)$	Symbole für einen Erwartungswert
$V(X)$	Varianz
σ	Standardabweichung
σ	Form einer Standardabweichung, die nur diesem Skript verwendet wird

Physikalische Chemie

$\psi(x)$	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, Physikalische Chemie, Teil I, S. 74/75:

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 klassischen 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

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x,t) \psi(x,t) dx = 1$$

ist.

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

$$\bar{P} = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x,t) \hat{P} \psi(x,t) dx$$