

Referatsthemen Kurs 1.3 Braunschweig 2018

Michael F. Herbst

Henrik R. Larsson

10.04.2018

Inhaltsverzeichnis

1	Allgemeine Informationen	1
2	Mathematik	2
2.1	Ableitung und Integration	2
2.2	Mehrdimensionale Integrale	2
2.3	Vektoren und Matrizen	2
2.4	Eigenwerte und Eigenvektoren	2
2.5	Taylor-Reihen	2
2.6	Grundprinzipien der numerischen Minimierung	3
3	Quantenmechanik	3
3.1	Welle-Teilchen-Dualismus und Doppelspaltexperiment	3
3.2	Teilchen im Kasten	3
3.3	Harmonischer Oszillator	3
3.4	Tunneleffekt und das Doppelminimumspotential	3
3.5	Morse-Oszillator	4
3.6	Infrarotspektroskopie	4
4	Quantenchemie	4
4.1	Born-Oppenheimer-Näherung	4
4.2	Spin und Pauliprinzip	4
4.3	Orbitalmodell	4
4.4	LCAO-Methode	4
5	Sonstiges	5
5.1	Geschichte der Quantenmechanik und Quantenchemie	5

1 Allgemeine Informationen

Das Referat sollte ungefähr 15 Minuten dauern. Zur Verfügung stehen dir ein Projektor für Präsentationen, eine Tafel und ein Flipboard. Wie du den Vortrag hältst entscheidest aber *du*. Du musst also *nicht* unbedingt eine PowerPoint- oder ähnliche Präsentation vorbereiten, sondern kannst den Vortrag auch gerne anders, z.B. interaktiv, halten. Bitte beachte dass die verwendeten Laptops *kein* Microsoft PowerPoint sondern die freie Alternative, LibreOffice, installiert haben. Solltest du PowerPoint verwenden, so teste bitte, ob die Präsentation auch unter LibreOffice funktioniert oder konvertiere die Folien vorher ins pdf-Format (präferiert). Es empfiehlt sich zudem, *reine* Tafelvorträge vorher, z.B. bei dir in der Schule, zu üben. Bitte bereite in jedem Fall das Referat **zu Hause** und **vor** der Akademie vor. Wir stehen dir natürlich gerne bei Rückmeldungen für Fragen bereit und versorgen dich mit den benötigten Quellen. Du musst also nicht alles selber recherchieren. Außerdem schauen wir uns das

Referat gemeinsam auf der Akademie an. Gerne kannst du uns das Referat (Konzept, Folien o.ä.) auch schon vorher zuschicken, wenn du dich unsicher fühlst.

2 Mathematik

2.1 Ableitung und Integration

Ableiten und Integrieren sind ganz wesentliche Manipulationen in der Mathematik der Funktionen, welche wir an vielen Stellen im Kurs benötigen werden. Ziel dieses Vortrags ist es den Ableitungs- und Integralbegriff der Oberstufe kurz zusammenzufassen und (etwas) zu erweitern.

2.2 Mehrdimensionale Integrale

Selten hat man in der Physik mit Systemen (und damit Funktionen) zu tun, welche nur von einem Parameter abhängen. Meist sind es mindestens 3, nämlich die drei Dimensionen des Raumes. In diesem Vortrag soll deshalb das Integrieren mehrdimensionaler Funktionen kurz erklärt werden. Das erfordert ein gutes Verständnis der Integralrechnung in einer Dimension und zudem etwas räumliches Denken.

2.3 Vektoren und Matrizen

Vereinfacht gesagt sind Vektoren eine spezielle Art von Pfeilen, deren Ursprung, Richtung und Länge klar definiert ist. Mit diesem Konstrukt kann man dann zum Beispiel die Bewegung physikalischer Teilchen geschickt darstellen. Matrizen auf der anderen Seite erlauben es z.B., den Effekt der Umgebung (Luftdruck, Reibung, Gefälle) mathematisch abzubilden. Wie wir sehen werden, hängen diese beiden Konstrukte eng miteinander zusammen: Die Matrix sind so eine Art großer Bruder der Vektoren. Dieser Vortrag soll beleuchten, was diese Konstrukte sind und wie man mit ihnen rechnerisch umgeht. Da Matrizen nicht ganz einfach sind, ist hier ein Grundverständnis von Vektorrechnung von Vorteil.

2.4 Eigenwerte und Eigenvektoren

Eine elementare Eigenschaft von Matrizen sind ihre sogenannten Eigenwerte und Eigenvektoren. Im Grunde genommen erlauben diese die prinzipiellen Wirkrichtungen einer Matrix zu bestimmen und zu interpretieren. Beispielsweise findet man für eine Matrix, welche das Gefälle eines Geländes beschreibt, über ihre Eigenwerte und Eigenvektoren nachträglich die Richtung des Gefälles und die Stärke. Dieses Thema ist nicht ganz einfach und ein grundlegendes Verständnis von Vektorrechnung ist ebenfalls von Vorteil.

2.5 Taylor-Reihen

Oftmals ist es in der Physik und Chemie nicht unbedingt notwendig, genau zu verstehen, wie ein Größe sich im Verhältnis zu einer anderen verhält. Bereits eine Näherung reicht aus. Ein Verfahren um Näherungen schematisch zu berechnen ist die sogenannte Taylor-Reihe. Dieser Vortrag beschäftigt sich damit, wie man eine solche Taylor-Reihe für ein- und mehrdimensionale Funktionen verstehen kann und wie man sie für den eindimensionalen Fall berechnet. Ein solides Verständnis für Differenzial- und Integralrechnung ist von Vorteil.

2.6 Grundprinzipien der numerischen Minimierung

Eine Anwendung der Taylor-Reihe ist die sogenannte numerische Minimierung, also das Verfahren von einer mathematischen Funktion das Minimum zu bestimmen. Übertragen auf die Chemie können wir damit zum Beispiel die optimale Struktur eines Moleküls berechnen, da diese durch ein Minimum einer Funktion beschrieben wird. Dieses Thema ist durchaus anspruchsvoll. Sowohl ein solides Verständnis für Differenzialrechnung, als auch eine grobe Vorstellung des Begriffes der Taylor-Reihe sind sinnvoll.

3 Quantenmechanik

Vorkenntnisse zur Quantenmechanik aus der Schule sind hier bei allen Referaten hilfreich, aber beim den ersten hier aufgelisteten Referaten nicht zwingend notwendig.

3.1 Welle-Teilchen-Dualismus und Doppelspaltexperiment

Das Doppelspaltexperiment, welches wir auch experimentell durchführen werden, stellt einen Meilenstein in der Entwicklung der Quantenmechanik dar. Es wurde bereits Anfang des 19. Jahrhunderts zum ersten Mal durchgeführt, hat aber Fragen zur Natur des Lichtes aufgeworfen, die erst mittels des Konzeptes des sogenannten Welle-Teilchen-Dualismus erklärt werden konnten.

3.2 Teilchen im Kasten

Wenn man versucht quantenmechanische Effekte zu verstehen, dann bedient sich die Physik oftmals sehr artifiziiell wirkender Modellsysteme. Eines der einfachsten dieser Modelle ist das sogenannte „Teilchen im Kasten“. Trotz seiner Einfachheit illustriert es ein paar Besonderheiten der Quantenmechanik ganz gut und man kann es sogar verwenden um die Farbe einiger chemischer Verbindungen zu erklären.

3.3 Harmonischer Oszillator

Dies ist ein weiteres Modellsystem der Quantenmechanik, allerdings geringfügig komplexer als das Teilchen im Kasten. Dieses System zeigt deutlich die Unterschiede zwischen der Quantenmechanik und klassischen Mechanik. Man kann zum Beispiel zeigen, dass sich Teilchen in Bereichen des Systems aufhalten können, in welchen sie nach der Lehre der klassischen Mechanik nicht sein dürften. Eine Anwendung für den Harmonischen Oszillator ist die physikalische Beschreibung einer chemischen Bindung.

3.4 Tunneleffekt und das Doppelminimumspotential

Ein experimentelles Phänomen, welches sich nur durch die Quantenmechanik erklären lässt ist der sogenannte Tunneleffekt. Er beschreibt die Tatsache, dass es Teilchen unter gewissen Umständen möglich sein kann einer Barriere zu entkommen, obwohl die klassische Mechanik dies eigentlich nicht erlauben würde. Beispiele, bei welchen der Tunneleffekt eine Rolle spielt, sind radioaktiver Zerfall und das chemische Verhalten von Wasserstoffbrücken. Dieser Vortrag benutzt das sogenannte Doppelminimumspotential als Modellsystem um den Tunneleffekt zu erklären. Hilfreich ist eine grobe Vorstellung vom quantenmechanischen harmonischen Oszillator.

3.5 Morse-Oszillator

Um eine chemische Bindung zu beschreiben stößt der Harmonische Oszillator sehr schnell an seine Grenzen. So können beispielsweise Bindungsbrüche nicht vom Harmonischen Oszillator beschrieben werden. Ein besseres Modell ist hier der sogenannte Morse-Oszillator. Dieser Vortrag soll dieses Modellsystem einführen und die Unterschiede zum Harmonischen Oszillator aufzeigen. Entsprechend ist auch hier eine Vorstellung vom quantenmechanischen harmonischen Oszillator hilfreich bzw. sollte sich vorher erarbeitet werden.

3.6 Infrarotspektroskopie

Die Infrarotspektroskopie (IR) ist eine sehr wichtige Methode der analytischen Chemie um die Struktur einer chemischen Verbindung aufzuklären. Grob gesagt ermöglicht es IR einem synthetischen Chemiker zu bestätigen, dass er wirklich hergestellt hat, was er wollte. Dieser Vortrag soll eine Brücke schlagen zwischen den theoretischen Vorhersagen, welche die Modelle des Harmonischen Oszillators und des Morse-Oszillators zulassen, und den tatsächlich experimentell gemessenen Spektren.

4 Quantenchemie

4.1 Born-Oppenheimer-Näherung

Die Physik eines chemischen Moleküls wird durch die sogenannte molekulare Schrödingergleichung bestimmt. Diese Gleichung ist extrem schwer zu lösen und die exakte Lösung ist nur in wenigen Ausnahmefällen wirklich nötig. Als Trick behilft man sich der sogenannten Born-Oppenheimer Näherung, welche es erlaubt in gewisser Weise die Atomkerne getrennt von den Elektronen eines Moleküls zu betrachten. Man erhält damit die *elektronische* und die *nukleare* Schrödingergleichung. Dieser Vortrag ist mathematisch und physikalisch nicht ganz einfach vorzubereiten. Ein grundlegendes Verständnis der Quantenmechanik ist hilfreich.

4.2 Spin und Pauliprinzip

Ein weiteres Resultat der Quantenmechanik ist, dass Elektronen eine Eigenschaft namens Spin besitzen, welche bei ihnen nur genau zwei Werte annehmen kann. Dieser Spin hat einen Einfluss auf das Verhalten der Elektronen und manifestiert sich unter anderem in der Tatsache, dass ein jedes Energieniveau eines Atoms oder Moleküls mit maximal zwei Elektronen besetzt werden kann. Eine etwas allgemeinere Formulierung dieser Beobachtung bezeichnet man als das *Pauliprinzip*. Für diesen Vortrag ist es hilfreich bereits eine grobe Vorstellung von dem Begriff „Spin“ zu haben.

4.3 Orbitalmodell

Die Lösung der Schrödingergleichung für das Wasserstoffatom führt zu sogenannten Orbitalen. Orbitale kann man näherungsweise auch dazu verwenden, andere Atome mit mehreren Elektronen und sogar Moleküle zu beschreiben. Weitergehende Konzepte können auch die chemische Bindung beschreiben (siehe LCAO-Methode). Dieser Vortrag beschäftigt sich zum einen mit der geometrischen Struktur der Orbitale, als auch mit der Herleitung der Elektronenkonfiguration für Atome.

4.4 LCAO-Methode

Anstelle, dass die komplizierte Schrödingergleichung für Moleküle gelöst wird, werden in der LCAO-Methode zuerst die Lösungen der Atome, die Orbitale, verwendet, um daraus Lösungen für Moleküle zu konstruieren. LCAO-

Methode kommt vom engl. *linear combination of atomic orbitals*, also *lineare Kombination von Atomorbitalen*. Mit dieser geschickten linearen Kombination können viele Effekte wie zum Beispiel Aromatizität qualitativ beschrieben werden. Eine Vertrautheit mit dem Orbitalmodell ist bei der Vorbereitung dieses Vortrags von Vorteil.

5 Sonstiges

5.1 Geschichte der Quantenmechanik und Quantenchemie

Die Quantenmechanik wurde Anfang des 20. Jahrhunderts entwickelt. Sie unterscheidet sich in ihrem Fundament erheblich von dem, was wir im Alltag von der Wirklichkeit wahrnehmen. Entsprechend war die Entwicklung der Quantenmechanik von vielen Kontroversen um die Interpretation der Theorie begleitet. Nichtsdestominder versuchte man schon in den Frühzeiten der Quantenmechanik, diese Theorie auf die Chemie anzuwenden, was mit großen Erfolgen gekrönt war. In diesem Vortrag soll auf die Historie der Quantenmechanik und der Quantenchemie eingegangen zu werden.