

# Chiralität und optische Aktivität

Kurztext im Rahmen von „Quanten auf Reisen“

Physikdidaktik, Albert-Ludwigs-Universität Freiburg



Weitere Kurztexte hier: <https://physikdidaktik.uni-freiburg.de/kurztexte/>

Gefördert durch:



Bundesministerium  
für Forschung, Technologie  
und Raumfahrt

universität freiburg



# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Chiralität und optische Aktivität</b>	<b>3</b>
1.1	Wechselwirkung zwischen Licht und Molekülen . . . . .	3
1.2	Chiralität . . . . .	4
1.3	Optische Aktivität . . . . .	4
1.4	Polarimetrie . . . . .	7
1.5	Historische Einordnung . . . . .	7
1.6	Wechselwirkung zwischen Photonen und chiralen Molekülen . . . . .	8

# Kapitel 1

## Chiralität und optische Aktivität

*Autor: Anja Kuhnhold, Version vom: 23.11.2025*

<sup>1</sup>

Die optische Aktivität ist ein Effekt, der bei der Wechselwirkung von polarisiertem Licht mit speziellen Molekülen in einer Lösung auftritt. Die Symmetrieeigenschaften der Moleküle sorgen dafür, dass sich die Polarisations Ebene des Lichts beim Durchtritt durch die Lösung dreht und dadurch zum Beispiel zur Rotationsdispersion führt. Der Effekt kann im Rückschluss dazu genutzt werden, Eigenschaften der Lösung und der Moleküle zu bestimmen.

### 1.1 Wechselwirkung zwischen Licht und Molekülen

Trifft Licht (also eine elektromagnetische Welle) auf ein Material induziert dies, im Rahmen der linearen Optik<sup>2</sup>, im Allgemeinen Dipolmomente in den Molekülen:

$$\vec{p} = \underline{\alpha} \vec{E} ; \quad (1.1)$$

dabei sind  $\underline{\alpha}$  der Polarisierbarkeitstensor und  $\vec{E}$  der elektrische Feldstärkenvektor; d.h., der induzierte Dipol muss nicht parallel zum Feld sein.  $\vec{p}$  ist dabei zeitabhängig und oszilliert mit der Frequenz des elektrischen Feldes. Die Symmetrieeigenschaften des Tensors  $\underline{\alpha}$  hängen direkt mit der Molekülstruktur zusammen. Ist das Medium isotrop (keine ausgezeichnete Raumrichtung) und achiral (siehe unten), verschwinden im statistischen Mittel alle nicht-diagonalen Beiträge und sind die diagonalen Beiträge  $\alpha_{ii}$  gleich groß, also  $\underline{\alpha} = \alpha_0 \mathbb{1}$ . Bei anisotropen Molekülen sorgen die Nicht-Diagonal-Elemente für eine Kopplung zwischen den verschiedenen Raumrichtungen. Befinden sich die Moleküle in einer Lösung, kann sich die Auswirkung der Anisotropie herausmitteln, im Gegensatz zur Situation in Kristallen, bei denen die Tensorstruktur sichtbar bleibt. Das makroskopische Verhalten ergibt sich nämlich

---

<sup>1</sup>Bei der Überarbeitung und Gliederung dieses Textes, sowie der Erstellung von Abbildungen wurde ChatGPT zu Rate gezogen (Zugang: HAWKI, <https://hawki.uni-freiburg.de/interface>, ChatGPT-4.1 (Provider: Firma OpenAI), bzw. Open WebUI, <https://openwebui.uni-freiburg.de/> OpenAI: ChatGPT-5/5.2).

<sup>2</sup>Die Feldstärken sind klein genug, dass Terme höherer Ordnung in  $\vec{E}$  vernachlässigt werden können.

aus der Betrachtung des mittleren Dipols

$$\vec{P} = \frac{1}{V} \sum_i \vec{p}_i, \quad (1.2)$$

mit

$$\vec{P} = \varepsilon_0 \underline{\chi} \vec{E}, \quad (1.3)$$

wobei die Suszeptibilität  $\underline{\chi}$  aus den molekularen Polarisierbarkeiten resultiert. Im Allgemeinen ist die Polarisierbarkeit frequenzabhängig, was zu Dispersionseffekten führen kann.

Die Wechselwirkungsenergie eines elektrischen Dipols mit Moment  $\vec{p}$  mit einem elektrischen Feld  $\vec{E}$  beträgt  $V_{\text{el}} = \vec{p} \cdot \vec{E}$ . Im Folgenden wird gezeigt, welche zusätzlichen Terme in der Wechselwirkung möglich sind, wenn die molekulare Struktur bestimmte Symmetrieeigenschaften nicht besitzt.

## 1.2 Chiralität

Ein Objekt heißt chiral, wenn man es nicht durch Drehungen in sein Spiegelbild überführen kann. Chiralität bedeutet daher das Fehlen jeder Spiegelebene oder Drehspiegelungssymmetrie. Typische Beispiele für chirale Objekte sind Hände, Schrauben, Spiralen, oder asymmetrische Kohlenstoffatome (vier unterschiedliche Substituenten). Viele Moleküle (natürliche oder synthetische) sind chiral; manche kommen in beiden Händigkeiten (Enantiomeren) vor, andere von Natur aus nur in einer der beiden. In einem achiralen Umfeld haben beide Enantiomere dieselbe Energie und zeigen dasselbe Verhalten; in einer chiralen Umgebung unterscheiden sie sich jedoch.

Kenntnisse über die molekulare Chiralität sind besonders relevant im biologischen und medizinischen Kontext, denn oftmals entscheidet die Händigkeit auch über die Funktion. Beispielsweise liegt DNA immer als rechtshändige Helix vor und manche medikamentösen Wirkstoffe interagieren ausschließlich in einer bestimmten Händigkeit mit den Zielproteinen. Van't Hoff (und gleichzeitig Le Bel) erläuterte die Chiralität organischer Moleküle erstmals mit dem tetraedrischen Kohlenstoffmodell, das zugleich erklärt, weshalb solche Strukturen optisch aktiv sein können[1, 2]. Hat ein Kohlenstoffatom vier unterschiedliche Substituenten, die sich tetraedisch im Raum anordnen, wie es in organischen Molekülen zumeist vorkommt, gibt es genau zwei unterschiedliche Konfigurationen, die nicht durch Rotation ineinander überführt werden können. Diese Anordnungen sind jedoch zueinander spiegelbildlich und entsprechen den Enantiomeren. Dies ist schematisch in Abbildung 1.1 dargestellt; jede scheinbar andere Konfiguration lässt sich durch Rotation in eine der beiden Formen überführen.

## 1.3 Optische Aktivität

Bei der Wechselwirkung von Licht und Materie spielt der Molekülaufbau eine essentielle Rolle. Das elektrische Feld der Lichtwelle regt im Molekül Ladungsträgerbewegungen an, deren Antwort (induzierte Dipolmomente) von der Orientierung und Symmetrie der Bindungen

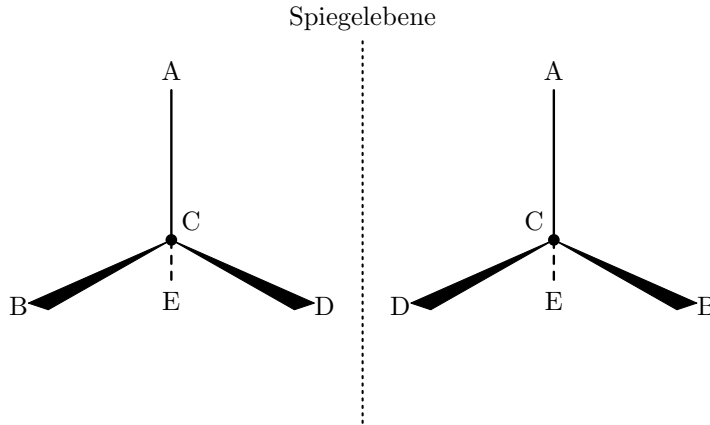


Abbildung 1.1: Tetraedrisches Kohlenstoffmodell mit vier unterschiedlichen Substituenten (A, B, D, E). Die beiden Konfigurationen sind spiegelbildlich, aber nicht durch Rotation ineinander überführbar und bilden ein Enantiomerenpaar.

abhängt. Die mathematische Betrachtung der optischen Aktivität basiert auf der Zerlegung von linear polarisiertem Licht in zwei gegenläufig zirkular polarisierte Anteile:

$$\vec{E}(t, z) = E_0 \Re \{ \exp(i(kz - \omega t)) \vec{e}_x \} \quad (1.4)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{E_0}{2} \Re \{ \exp(i(kz - \omega t)) \vec{e}_x + \exp(i(kz - \omega t - \pi/2)) \vec{e}_y \} \\ &\quad + \frac{E_0}{2} \Re \{ \exp(i(kz - \omega t)) \vec{e}_x + \exp(i(kz - \omega t + \pi/2)) \vec{e}_y \} \end{aligned} \quad (1.5)$$

$$= \frac{E_0}{2} \Re \{ \exp(i(kz - \omega t)) \vec{e}_R + \exp(i(kz - \omega t)) \vec{e}_L \} ; \quad (1.6)$$

hier wurde angenommen, dass die Lichtwelle sich in  $z$ -Richtung ausbreitet und in  $x$ -Richtung polarisiert ist, und  $\vec{e}_{R/L} = \vec{e}_x \mp i\vec{e}_y$  definiert. Rechts- und linkszirkular polarisiertes Licht hat in chiralen Substanzen unterschiedliche Ausbreitungsgeschwindigkeiten, sodass sich zwischen den beiden Anteilen beim Durchlaufen der Substanz eine Phasendifferenz  $\Delta\phi$  ergibt. Diese Phasendifferenz entspricht einer Drehung der Polarisationsachse, wenn man die beiden zirkular polarisierten Anteile wieder überlagert. Im Medium wird nämlich  $k$  zu  $k_L \neq k_R$  mit  $k_{L,R} = 2\pi n_{L,R}/\lambda$  und damit  $\Delta\phi = (k_L - k_R) d$ , wobei  $d$  die Schichtdicke,  $\lambda$  die Wellenlänge des Lichts und  $n_{L,R}$  die Brechungsindizes für die beiden Richtungen sind. Unter Verwendung von  $\bar{k} := (k_L + k_R)/2$ , sieht man die Drehung der Polarisationsachse um  $\Delta\phi/2$  durch Einsetzen in 1.6 und Umformen wie folgt:

$$\vec{E}(t_e, d) = \frac{E_0}{2} \Re \{ \exp(i(k_R d - \omega t_e)) \vec{e}_R + \exp(i(k_L d - \omega t_e)) \vec{e}_L \} \quad (1.7)$$

$$= \frac{E_0}{2} \Re \{ \exp(i(\bar{k} d - \Delta\phi/2 - \omega t_e)) \vec{e}_R + \exp(i(\bar{k} d + \Delta\phi/2 - \omega t_e)) \vec{e}_L \} \quad (1.8)$$

$$= \frac{E_0}{2} \Re \{ \exp(i(\bar{k} d - \omega t_e)) (\exp(-i\Delta\phi/2) \vec{e}_R + \exp(i\Delta\phi/2) \vec{e}_L) \} \quad (1.9)$$

$$= E_0 \Re \{ \exp(i(\bar{k} d - \omega t_e)) (\cos(\Delta\phi/2) \vec{e}_x - \sin(\Delta\phi/2) \vec{e}_y) \} . \quad (1.10)$$

Man kann chirale Moleküle danach als links- oder rechtsdrehend klassifizieren ( $\Delta\phi$  ist positiv oder negativ). Enthält eine Lösung keine 50:50-Mischung von links- und rechtsdrehenden Molekülen (derselben Sorte), erfährt polarisiertes Licht beim Durchtritt durch die Lösung eine Netto-Drehung um einen Winkel, der von der Länge des Weges durch die Lösung, der Art der Moleküle und deren Konzentration abhängt (zusätzlich auch von der Temperatur). Außerdem hängt die Drehung von der Wellenlänge des Lichtes ab; es findet eine Rotationsdispersion statt, sodass sich weißes Licht durch die unterschiedlich starke Drehung der Polarisationsachse in Farben aufspaltet, die, durch einen Polarisationsfilter betrachtet, unter verschiedenem Winkel zu sehen sind. Der Drehwinkel bestimmt sich also aus

$$\alpha = [\alpha]_{\lambda}^T cd = \Delta\phi/2, \quad (1.11)$$

wobei  $d$  die Schichtdicke und  $c$  die Konzentration der Lösung sind und  $[\alpha]_{\lambda}^T$  die temperatur- und wellenlängenabhängige spezifische Drehung ist.

Hintergrund der optischen Aktivität ist, dass bei der Wechselwirkung von Licht mit chiralen Molekülen eine Kopplung zwischen elektrischem und magnetischem Feld auftreten kann, was sich in den induzierten Momenten äußert:

$$\vec{p} = \underline{\alpha}_E \vec{E} + i\underline{\beta} \vec{B} \quad (1.12)$$

$$\vec{m} = \underline{\alpha}_M \vec{B} + i\underline{\beta} \vec{E}. \quad (1.13)$$

Der Tensor  $\beta$  ist ein Pseudotensor, der nur in chiralen Molekülen ungleich null ist. Links- und rechtszirkular polarisiertes Licht erfährt dadurch einen unterschiedlichen Brechungsindex,  $n_{L,R} = n_0 \pm \kappa$ , wie oben erwähnt. Frühe Arbeiten zur optischen Aktivität, aus denen diese Zusammenhänge folgen, stammen beispielsweise von Léon Rosenfeld[3] und Jakov Frenkel[4]. In der makroskopischen Beschreibung der Licht-Materie-Wechselwirkung ergibt sich mittels elektrischer Verschiebung und magnetischer Induktion

$$\begin{pmatrix} \vec{D} \\ \vec{B} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varepsilon & \xi \\ \zeta & \mu \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{E} \\ \vec{H} \end{pmatrix}.$$

In achiralen Medien ist  $\xi = \zeta = 0$ ; in chiralen Medien sorgt die Kopplung über  $\xi$  und  $\zeta$  für die optische Aktivität.

Während sich die optische Aktivität auf den Unterschied der Phasengeschwindigkeiten von links- und rechtszirkular polarisiertem Licht zurückführen lässt, beschreibt der zirkuläre Dichroismus die unterschiedliche Absorption der beiden Polarisierungen beim Durchtritt durch ein Medium. Das Ergebnis beim zirkulären Dichroismus ist eine elliptische Polarisation des transmittierten Lichts. Beide Phänomene entstehen aus derselben chiralen Kopplung zwischen elektrischem und magnetischem Dipolmoment.

## 1.4 Polarimetrie

Die optische Aktivität von Lösungen wird beispielsweise verwendet, um die Konzentration der optisch aktiven Moleküle in der Lösung zu ermitteln. Bei dieser Polarimetrie wird die Drehung der Polarisationsachse vom einfallenden Licht bestimmt, also der Drehwinkel  $\alpha$ . Das linear polarisierte Licht trifft dabei nach dem Durchgang durch die Lösung auf einen Analysator (Polarisationsfilter). Den Analysator dreht man so, dass maximal viel Licht (Richtung der Achsen parallel zueinander) oder kein Licht (Richtung der Achsen senkrecht zueinander) hindurchtritt. Da die Weglänge und die spezifische Drehung des untersuchten Stoffes bekannt sind, kann daraus auf dessen Konzentration geschlossen werden. Gleichermäßen kann man die chemische oder optische Reinheit einer Substanz oder den Enantiomerenüberschuss bestimmen. Bei Mischungen zweier Enantiomeren ergibt sich die beobachtete Drehung zu  $\alpha_{\text{exp}} = [\alpha]_{\lambda}^T d(c_L - c_R)$ , sodass der Enantiomerenüberschuss  $(c_L - c_R)/(c_L + c_R)$  bei Kenntnis der Gesamtkonzentration  $(c_L + c_R)$  direkt aus der Messung folgt.

## 1.5 Historische Einordnung

Die Erforschung der optischen Aktivität ist ein gutes Beispiel dafür, wie Beobachtung, physikalische Theorie und chemische Strukturvorstellung sich gegenseitig beeinflussten. Bereits Anfang des 19. Jh. untersuchte Jean-Baptiste Biot die Drehung der Polarisationsachse von Licht beim Durchgang durch Quarzkristalle und organische Flüssigkeiten. Er führte die spezifische Drehung als Materialgröße ein und zeigte, dass die Drehung proportional zur durchlaufenen Schichtdicke und zur Konzentration der Substanz ist und auch von der Wellenlänge des Lichts abhängt (Rotationsdispersion). Vorher war nur bekannt, dass Kristalle die Polarisationsachse von Licht drehen können. Bemerkung: Zu dieser Zeit galt noch die Korpuskeltheorie zur Beschreibung von Licht (partikelorientierte Lichttheorie), die kurz danach durch die Wellenbeschreibung abgelöst wurde.

Das Verständnis von zirkular polarisiertem Licht als Überlagerung zweier linear polarisierter Wellen mit Phasenunterschied, geprägt durch Augustin Fresnel, diente als Grundlage zur Erklärung der optischen Aktivität in Quarzkristallen[5].

Louis Pasteur studierte in der Mitte des 19. Jh. den Zusammenhang zwischen makroskopischer optischer Aktivität und mikroskopischer Asymmetrie von Molekülen[6]. Dies war möglich, da er Methoden zur Racemattrennung (Trennung spiegelbildlicher Kristalle) beherrschte, die er auf Weinsäure anwendete. Aus seinen Untersuchungen folgte das Konzept der molekularen Chiralität.

Der Begriff der Optischen Rotationsdispersion wurde im Rahmen der theoretischen Behandlung der optischen Aktivität auf der Basis von elektrischen und magnetischen Dipolmomenten eingeführt (Peter Debye, Léon Rosenfeld, Jakov Frenkel u.a. im 20. Jh.[7, 3, 8]).

## 1.6 Wechselwirkung zwischen Photonen und chiralen Molekülen

Was geschieht auf mikroskopischer Ebene, wenn ein Photon ein chirales Molekül trifft? Durch die Kopplung von elektrischem und magnetischem Feld bei chiralen Molekülen, bestimmt der Polarisationszustand des Photons, wie die möglichen elektrischen und magnetischen Dipolübergänge des Moleküls miteinander interferieren. Auf der Ebene der Photonen lässt sich allerdings die optische Aktivität nicht gut verstehen; die Drehung der Polarisationsrichtung von Licht entsteht durch die Wechselwirkung des Lichts mit vielen Molekülen und die unterschiedlichen Brechungsindizes für links- und rechtszirkular polarisiertes Licht.

# Literaturverzeichnis

- [1] Van't Hoff, J.H. *Voorstel tot uitbreiding der tegenwoordig in de scheikunde gebruikte structuurformules in de ruimte*. Archives Néerlandaises des Sciences Exactes et Naturelles 9, 445–454 (1874).
- [2] Le Bel, J.A. *Sur les relations qui existent entre les formules atomiques des corps organiques et le pouvoir rotatoire de leurs dissolutions*. Bulletin de la Société Chimique de France 22, 337–347 (1874).
- [3] Rosenfeld, L. *Quantenmechanische Theorie der natürlichen optischen Aktivität von Flüssigkeiten und Gasen*. Zeitschrift für Physik 52, 161–174 (1929).
- [4] Frenkel, J. *Quasi-mikroskopische Theorie der elektromagnetischen Eigenschaften materieller Körper*. in Makroskopische Elektrodynamik der Materiellen Körper 118–190 (Springer Vienna, Vienna, 1928).
- [5] Fresnel, A. *Sur la diffraction de la lumière*. Mémoires de l'Académie Royale des Sciences 5, 339–475 (1826).
- [6] Pasteur, L. *Sur les relations qui peuvent exister entre la forme cristalline, la composition chimique et le sens de la polarisation rotatoire*. Annales de Chimie et de Physique 24, 442–459 (1848).
- [7] Debye, P. *Polar molecules* Dover Publications (1929).
- [8] Frenkel, J. *On the transformation of light into heat in solids*. Physical Review 37, 17–44 (1931).