

# Übungen zur Vorlesung Theoretische Chemie I: Teil 1, Quantenmechanik (Modul A8)

## Blatt 7

### Aufgabe 17: Tunneln: Grundlagen

1. Berechnen Sie das Verhältnis der Transmissionswahrscheinlichkeiten  $T_H/T_D$  für das Tunneln von H- bzw. D-Atomen durch eine rechteckige Barriere der Höhe  $V_0 = 1.0$  eV und der Breite  $L = 100$  pm, für eine Energie von  $E = 0.9$  eV.
2. Berechnen Sie für dieselbe Barriere und für das H-Atom den Transmissionskoeffizienten für  $E = V_0$ . Verwenden Sie hierzu beidermaßen die exakten “ $E < V_0$ ”- und die “ $E \geq V_0$ ”-Formeln im Skript, und zeigen Sie, dass beide das gleiche Ergebnis liefern.

*Hinweise: Verwenden Sie die Regel von de l'Hospital mit  $\sqrt{\Delta E} \rightarrow 0$ . Zur besseren Lesbarkeit wird empfohlen, den Term  $\sqrt{2m}\frac{L}{\hbar}$  in einer Konstante  $k$  zusammenzufassen.*

### Aufgabe 18 Tunneln: Anwendungen

1. Das Rastertunnelmikroskop ist ein bildgebendes Verfahren, welches darauf beruht, den Strom von Elektronen zu messen, die durch das Vakuum zwischen einer leitenden Probe und einer Sondenspitze aus leitfähigem Material tunneln. Der Tunnelstrom ist stark vom Abstand der Probe zur Metallspitze abhängig, und zwar so signifikant, dass mittels dieser Abstandsabhängigkeit einzelne Atome dargestellt werden können. Um ein Gefühl von dieser Abhängigkeit des Tunnelstroms zu bekommen, nehmen Sie an, dass die Wellenfunktion des Elektrons in der Lücke zwischen Probe und Sondenspitze gegeben ist durch

$$\Psi = Be^{-\kappa x}; \quad \kappa = \sqrt{\frac{2m_e(V - E)}{\hbar^2}}. \quad (1)$$

Nehmen Sie für  $V - E$  den Wert 2.0 eV an. Um welchen Faktor nimmt der Strom ab, wenn der Abstand  $x$  der Metallspitze vom Probenmaterial von 0.5 nm auf 0.6 nm erhöht wird?

*Hinweis: Die Tunnelstromstärke ist proportional zur Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Elektrons.*

2. Die Tunnelaufspaltung  $\Delta E = E_{0-} - E_{0+}$  für das niedrigste Tunneldoublet von  $\text{NH}_3$  bzw.  $\text{ND}_3$  beträgt  $0.79 \text{ cm}^{-1}$  ( $\text{NH}_3$ ) bzw.  $0.05 \text{ cm}^{-1}$  ( $\text{ND}_3$ ). Wie groß sind die zugehörigen Tunnelzeiten (“Inversionszeiten”)?