

## Übungen zur Vorlesung Theoretische Chemie für LA Chemie (Modul VM11)

### Blatt 7

#### **Aufgabe 19:** *Tunneln durch eine Rechteckbarriere.*

In der Vorlesung wurde eine Näherungsformel für den Transmissionskoeffizienten  $T(E)$  im Tunnelbereich ( $E < V_0$ ) für das Tunneln eines Teilchens durch eine Rechteckbarriere abgeleitet, Gl. (57).

1. Berechnen Sie mit dieser Näherungsformel  $T(E)$  für ein Elektron der kinetischen Energie  $E = 0.3$  eV, das eine Barriere der Höhe  $V_0 = 0.5$  eV und Breite  $1.5$  Å durchtunnelt. Wie groß ist der zugehörige Reflektionskoeffizient  $R(E)$ ?
2. Um welchen Faktor erniedrigt sich die Tunnelwahrscheinlichkeit nach Gl.(57), wenn man das Elektron durch ein Myon ersetzt (Hinweis: Das Myon ist ein Teilchen, dessen Masse 207 mal so groß ist wie die des Elektrons; seine Ladung ist der Elektronenladung gleich.)

#### **Aufgabe 20:** *Chemische Reaktionen.*

1. Bei unimolekularen chemischen Reaktionen, die über eine Barriere verlaufen, ist die klassisch (nach Arrhenius) berechnete Geschwindigkeitskonstante bei sehr niedrigen Temperaturen kleiner als die quantenmechanisch berechnete. Warum?
2. Bei höheren Temperaturen ist es genau umgekehrt. Warum?
3. Welche Aussagen können Sie über die Temperaturabhängigkeit der quantenmechanisch berechneten Raten bei hohen und bei niedrigen Temperaturen machen?