

TFYA35 Molekylfysik
Föreläsning 4 – Bilder

Thomas Ederth
Linköpings universitet
IFM

Tunnling

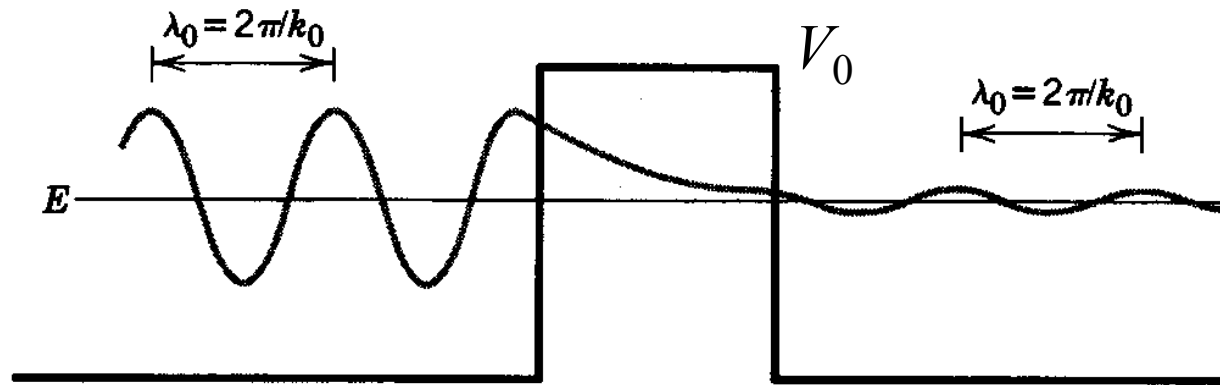
En kvantmekanisk partikel kan befinna sig i ett område som är "förbjudet" enligt klassisk teori (så länge $V < \infty$).

Sannolikheten för tunnling genom en potentialbarriär minskar exponentiellt med barriärens tjocklek och partikelns massa.



Tunnling är viktigt för lätta partiklar som elektroner, men obetydligt för större partiklar, som molekyler.

Tunnling



Klassiskt:

$E > V_0$ Partikeln bromsas av barriären, men fortsätter som före barriären när den passerat.

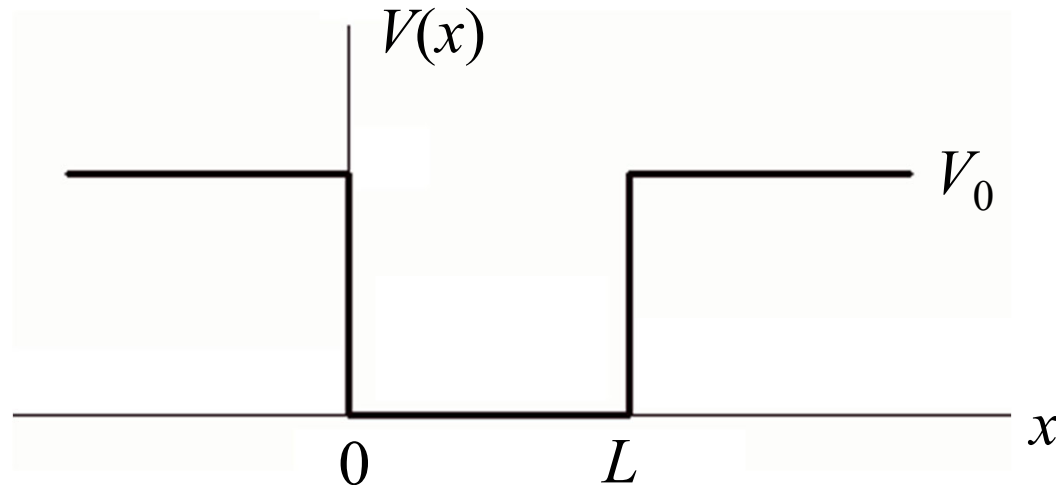
$E < V_0$ Barriären är förbjudet område, partikeln reflekteras.

Kvantmekaniskt: (Alla områden är tillåtna)

$E > V_0$ Partikeln 'sprids' av barriären, fortsätter som före barriären när den passerat, *eller* reflekteras av barriären!

$E < V_0$ Transmissionen igenom barriären beror av partikelns massa, samt barriärens höjd och bredd.

Partikel i ändlig potentialgrop



Klassiskt:

$E > V_0$ Partikelns hastigheten ökar över gropan då V är lägre där.

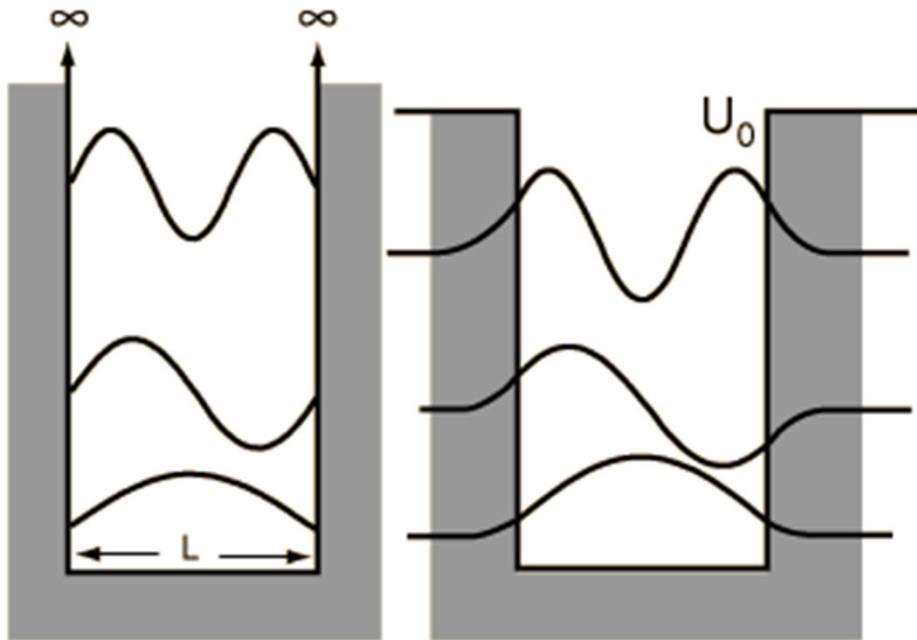
$E < V_0$ Endast möjligt att befinna sig i gropan.

Kvantmekaniskt:

$E > V_0$ Partikeln är i ett obundet tillstånd (E ej kvantiserad). Partikeln kan reflekteras av gropan!

$E < V_0$ Ändligt antal bundna tillstånd i gropan, penetration i gropens väggar.

Partikel i ändlig potentialgrop

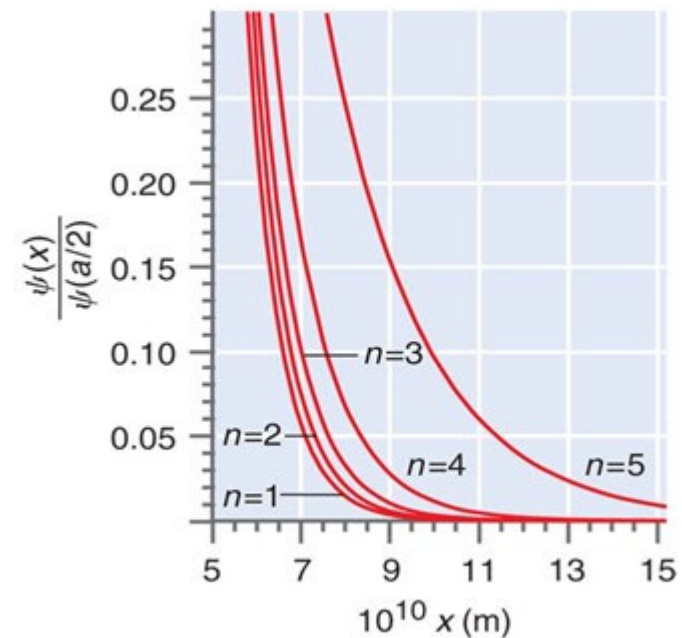


I den ändliga potentialgropen penetrerar vågfunktionerna väggarna, med exponentiellt avtagande amplitud. Vågfunktionen avtar snabbast för tillstånd nära botten.

$E < V_0$ ger ett ändligt antal bundna tillstånd.

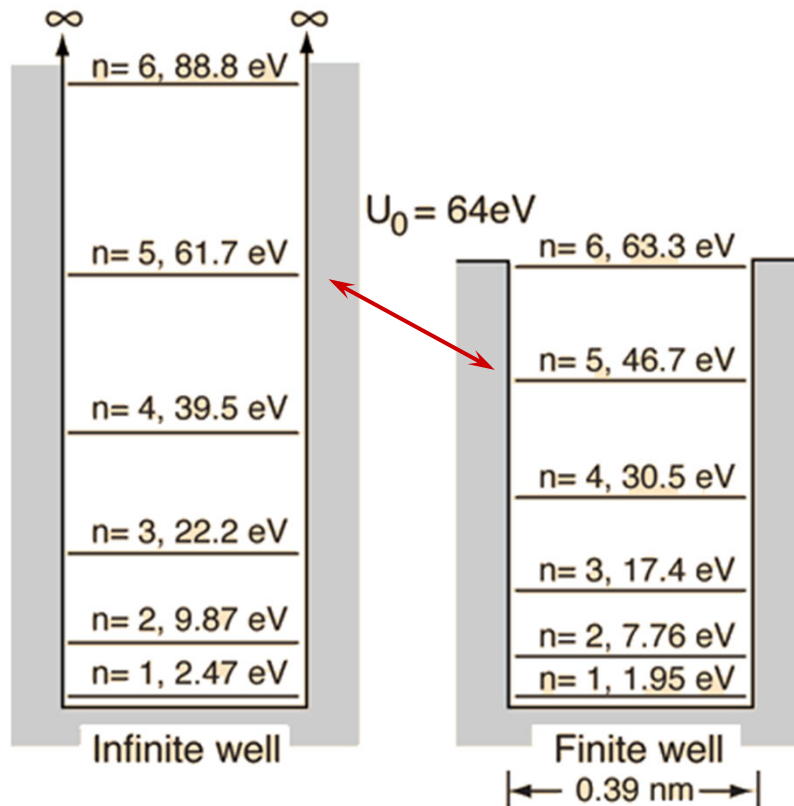
För $E > V_0$ är partikeln obunden, alltså E ej kvantiserad.

Penetration i väggarna



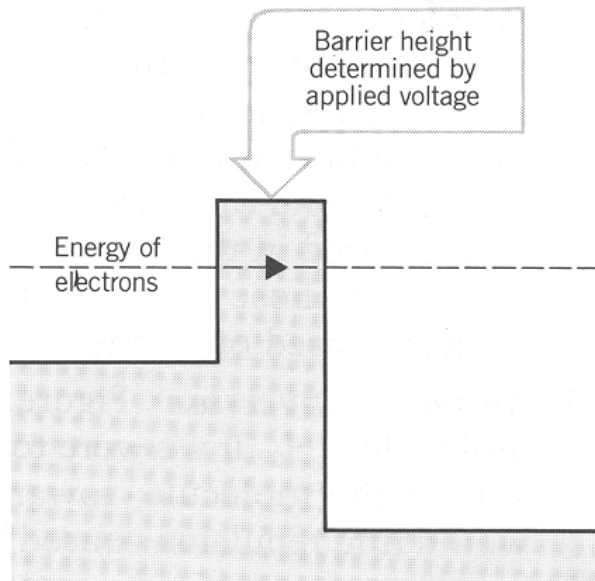
Partikel i ändlig potentialgrop

Penetrationen i brunnens väggar ger en viss förstoring av boxen och alltså längre våglängder, vilket sänker energinivåerna.

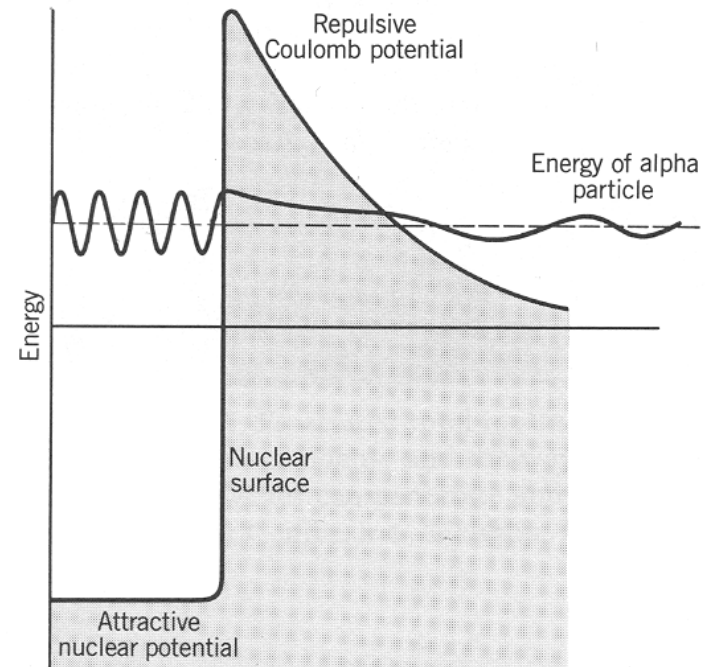


Två potentialbrunnar med samma bredd: Energinivåer för en elektron i en grop med djupet 64 eV jämfört med en oändligt djup grop med samma bredd.

Tunnling

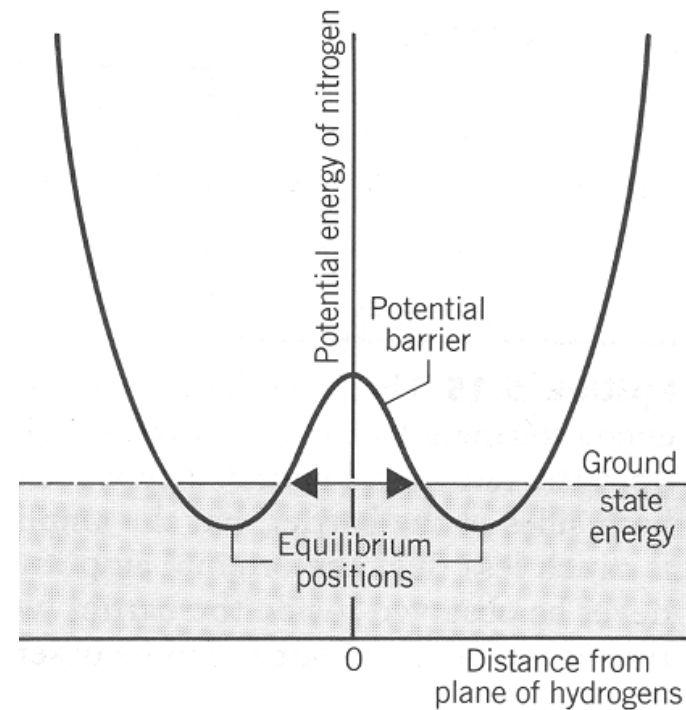
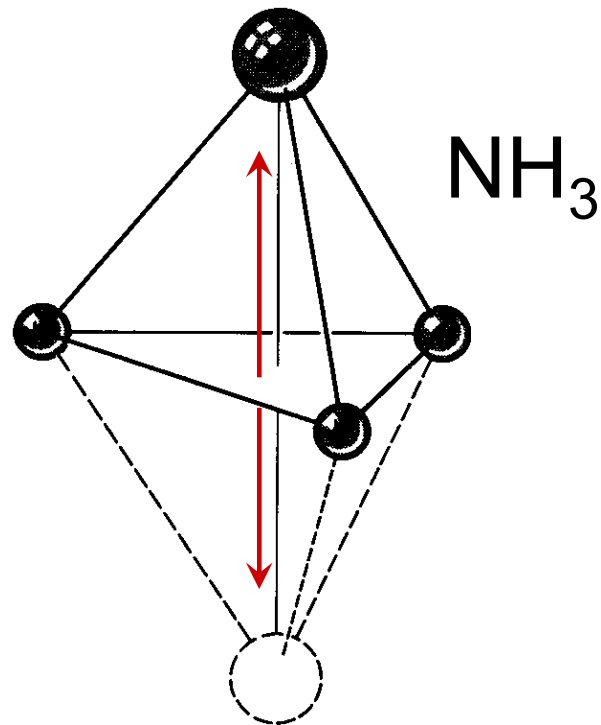


Tunneldiod
switchfrekvens
 $\sim 10^9$ Hz



α -sönderfall (emission av ^4He)
via tunnling ut ur kärnan
(1928, George Gamow)

Ammonium-inversion

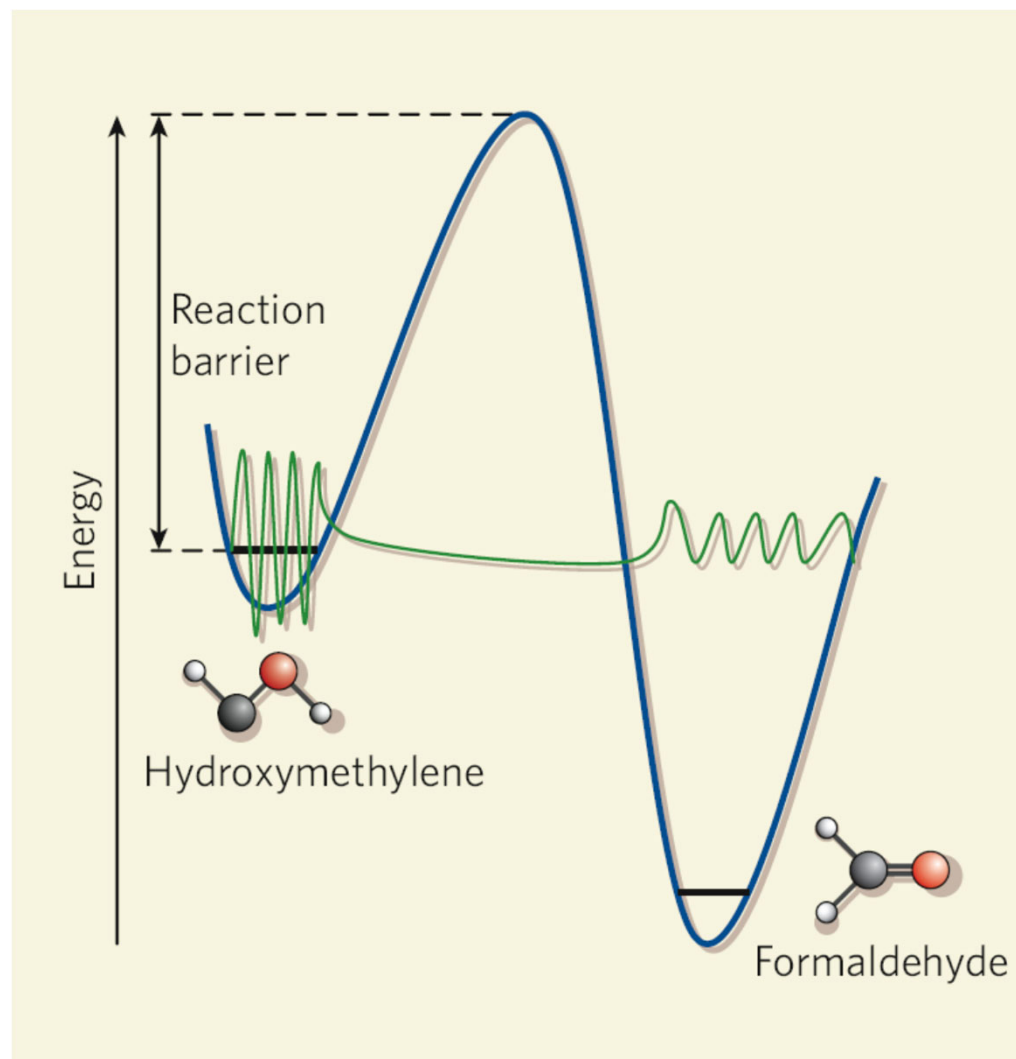


N-atomen tunnlar igenom H_3 -planet mot Coulomb-repulsionen ca 10^{10} ggr/s.

Finns hydroxymetylen, H-C-OH?

Förekomsten av hydroxymetylen, H-C-OH, förutsågs redan på 1920-talet, men försök att observera denna (och andra alkoxykarbener) har misslyckats.

Teoretiska beräkningar förutser att hydroxymetylen skall gå att isolera, men nyligen visades att hydroxymetylen omvandlas till formaldehyd med en halveringstid på 2h vid 11 K via vätetunnling genom en barriär på 125 kJ/mol.



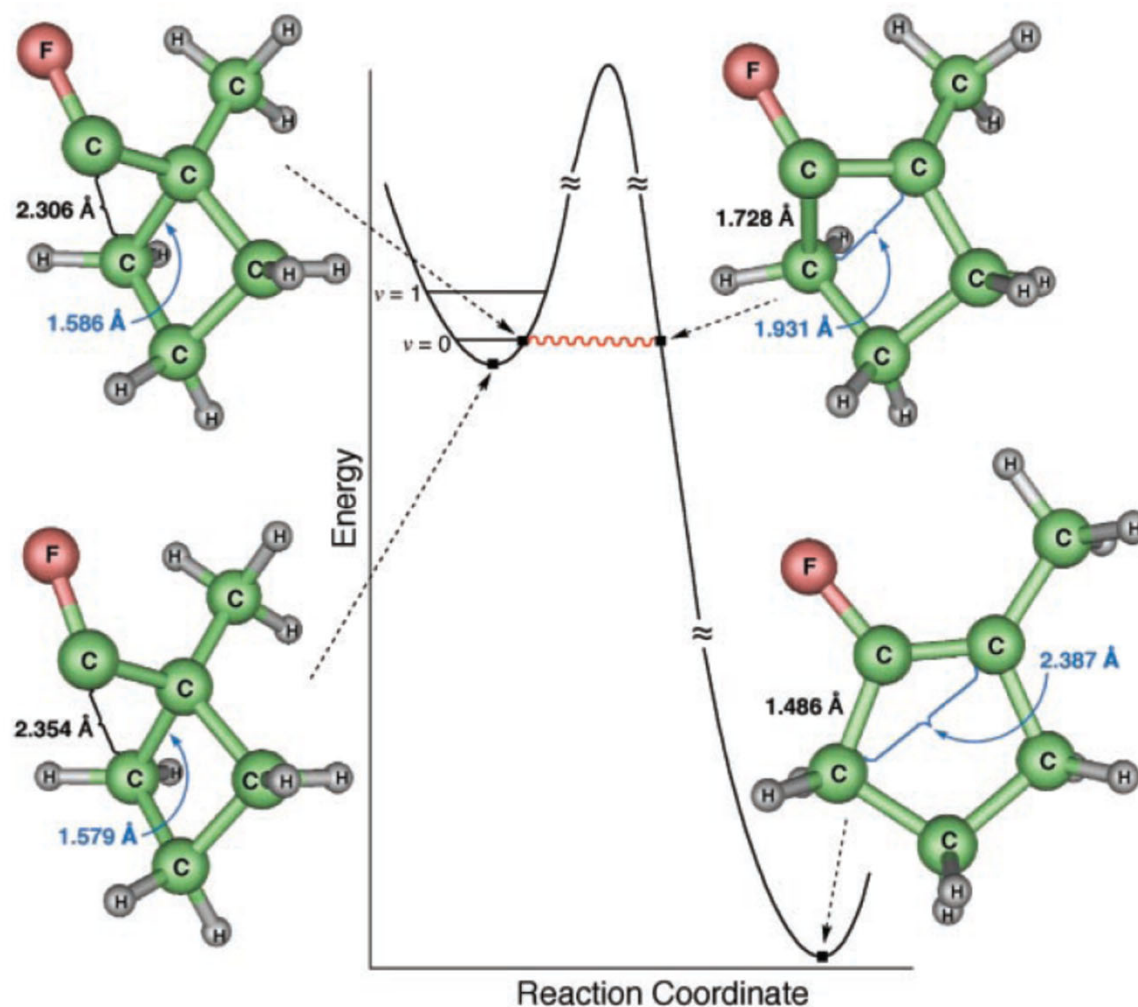
Carbon Tunneling from a Single Quantum State

Peter S. Zuev,¹ Robert S. Sheridan,^{1*} Titus V. Albu,²
Donald G. Truhlar,^{2*} David A. Hrovat,³
Weston Thatcher Borden^{3*}

Ring expansion of
1-methylcyclobutyl-
fluorocarbene at 8 K
involves carbon tunneling.

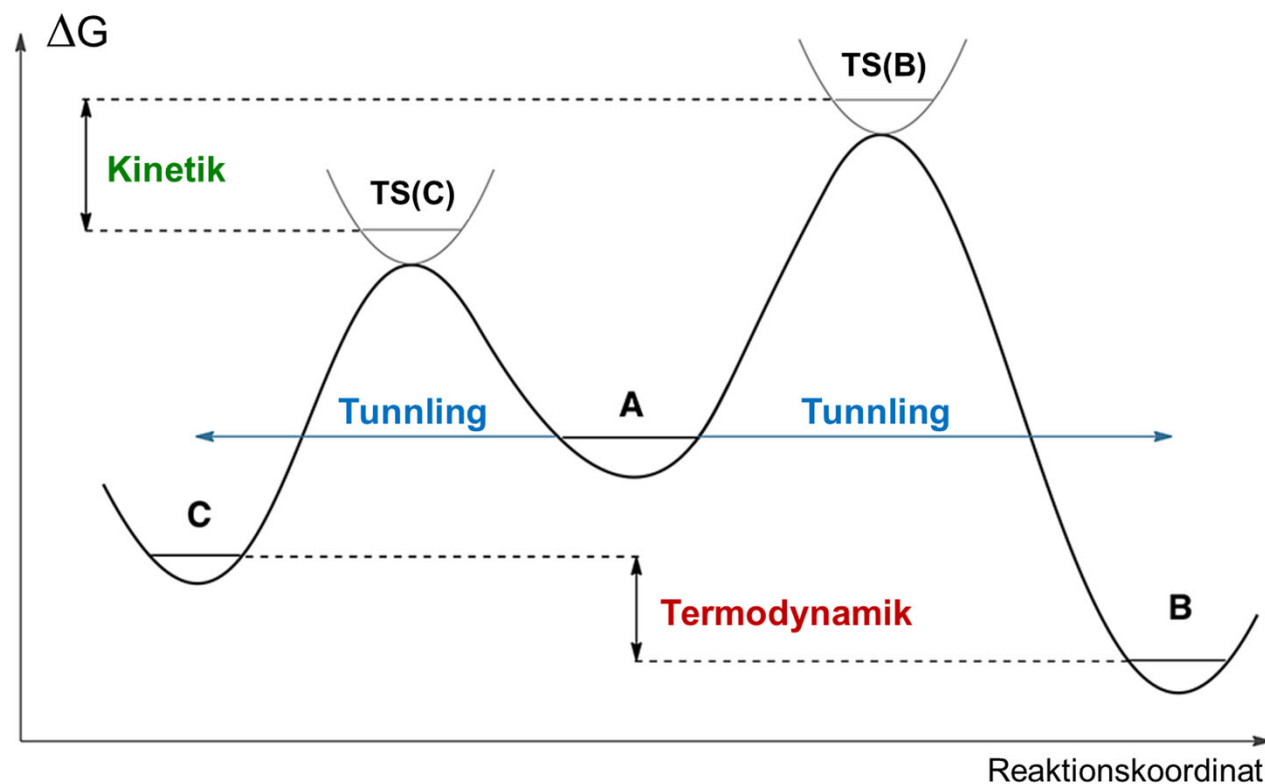
The tunneling contribution
to the rate is **152 orders
of magnitude** greater than
the contribution from
passage over the barrier
(barrier height 27 kJ/mol).

Science **299**, 867 (2003)

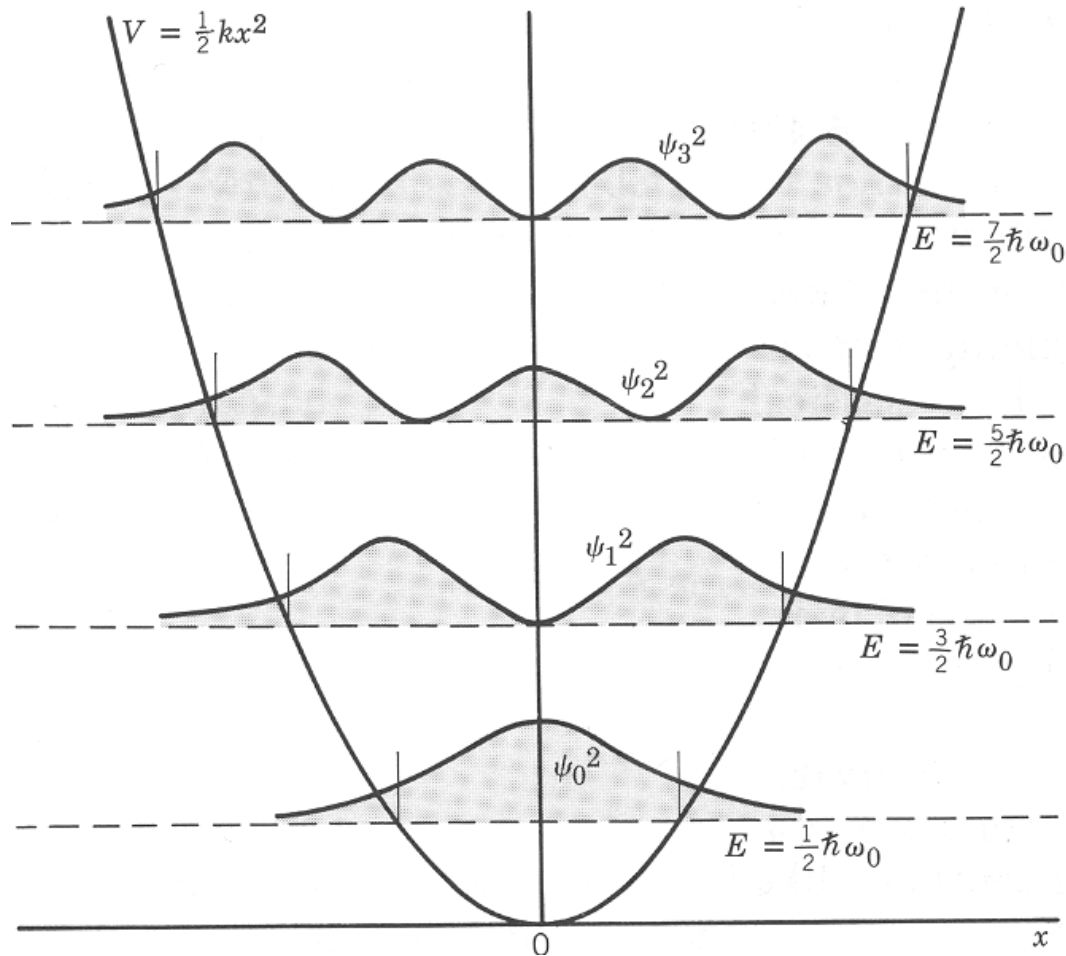


Tunnlingskontrollerade kemiska reaktioner

Tunnlingsberoende reaktioner kan ge produkter som normalt inte fås via passage av kinetiska barriärer, och bör beaktas vid sidan av kinetiskt eller termodynamisk kontrollerade reaktioner.



Harmonisk oscillator

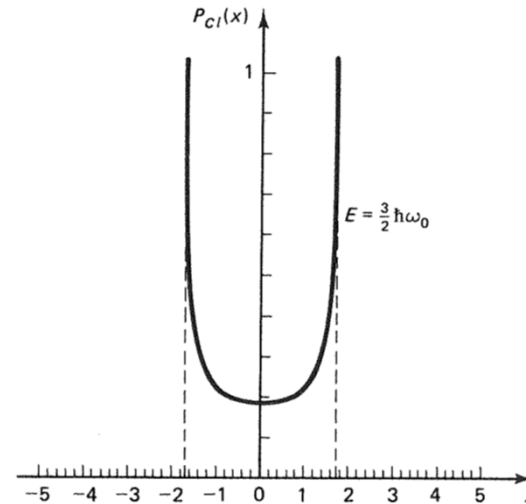
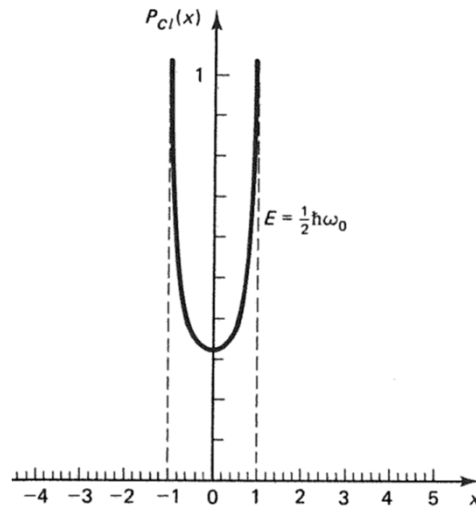


Skillnader mot klassisk oscillator:

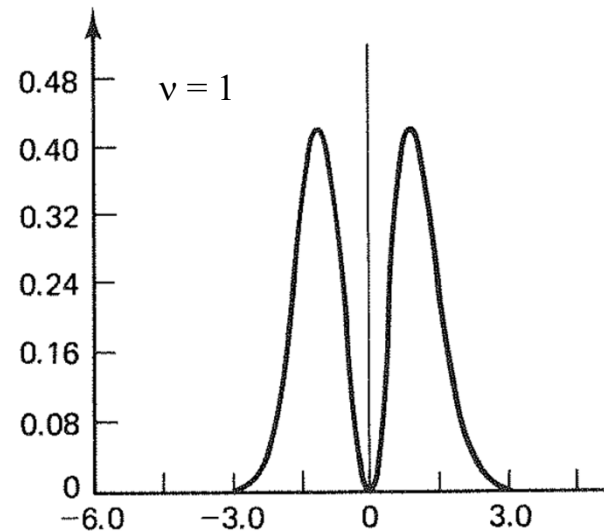
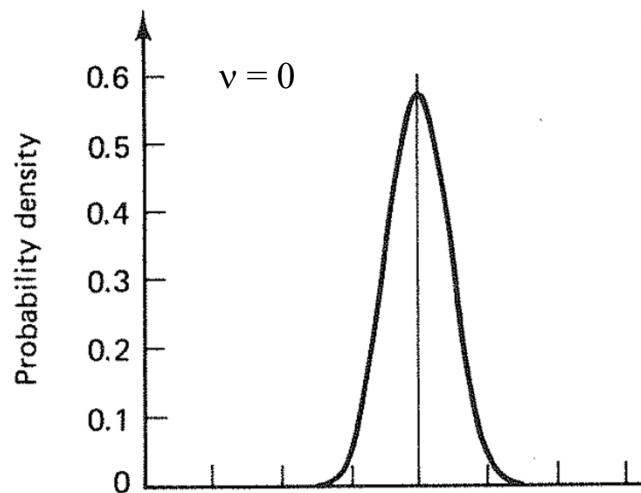
- Sannolikhetsfördelning
- Väändlägen
- Nollpunktsenergi

Sannolikhetsstätheter för partikelns läge

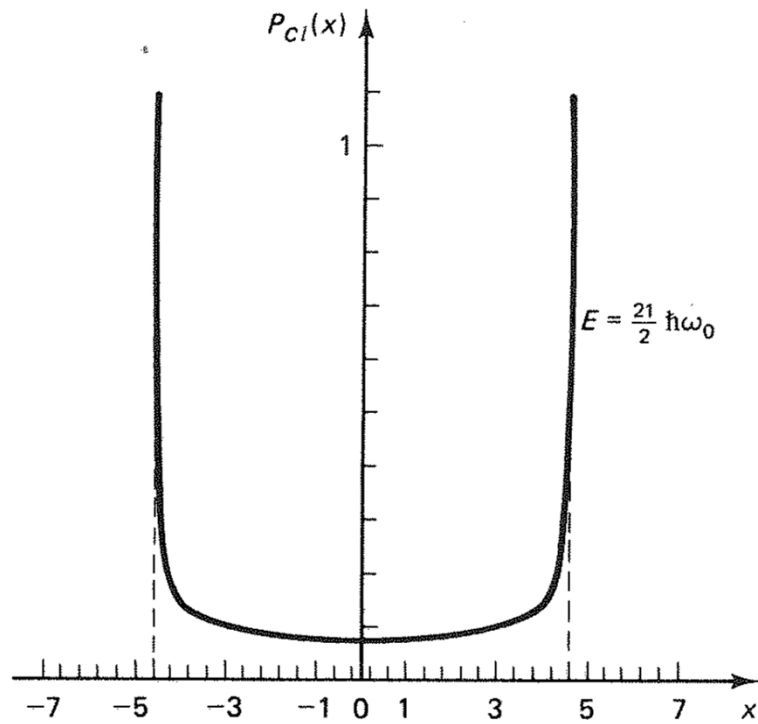
Klassisk oscillator



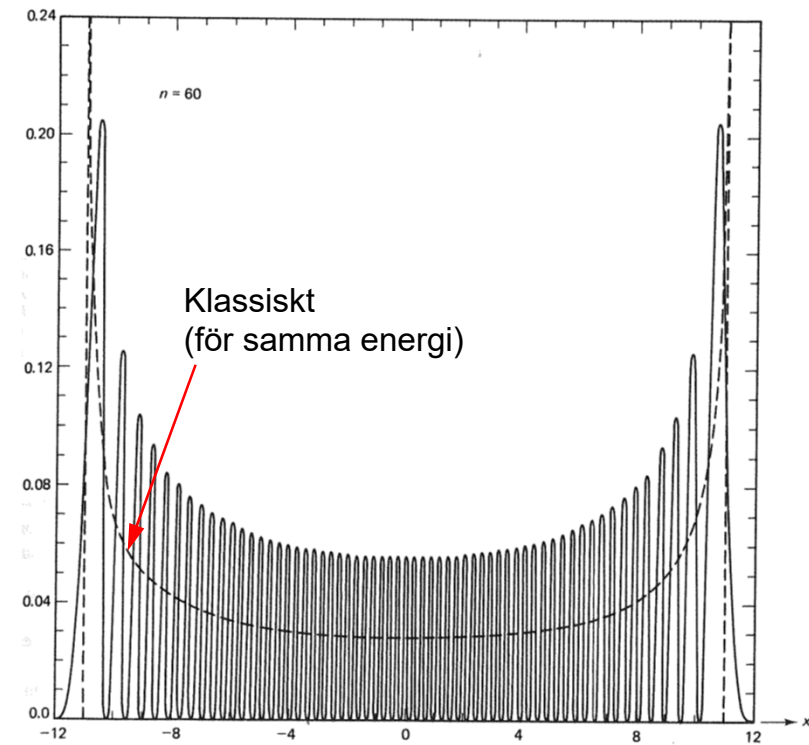
Kvantmekanisk oscillator



Klassisk oscillator ($E = E_{v=10}$)



Kvantmekanisk oscillator, $v = 60$



För en harmonisk oscillator gäller också:

$$\begin{aligned}\langle V(x) \rangle &= \left\langle \frac{kx^2}{2} \right\rangle = \frac{k}{2} \langle x^2 \rangle = \dots = \frac{k}{2} \left(\nu + \frac{1}{2} \right) \frac{\hbar}{m\omega} = \left(\nu + \frac{1}{2} \right) \frac{\hbar\omega}{2} = \frac{E_\nu}{2} \\ \Rightarrow \langle T \rangle &= E_\nu - \langle V \rangle = \frac{E_\nu}{2} \quad \Rightarrow \quad \langle V \rangle = \langle T \rangle\end{aligned}$$

(Detta är ett specialfall av *Virialteoremet*, som säger att för ett system med den potentiella energin $V = ax^b$ gäller alltid $2\langle T \rangle = b\langle V \rangle$.)