

# TC1 – Grundlagen der Theoretischen Chemie

Irene Burghardt (burghardt@chemie.uni-frankfurt.de)

## Praktikumsbetreuung:

Konstantin Falahati (k.falahati@yahoo.com)

Jan von Cosel (jvcosel@theochem.uni-frankfurt.de)

Robert Binder (rbinder@theochem.uni-frankfurt.de)

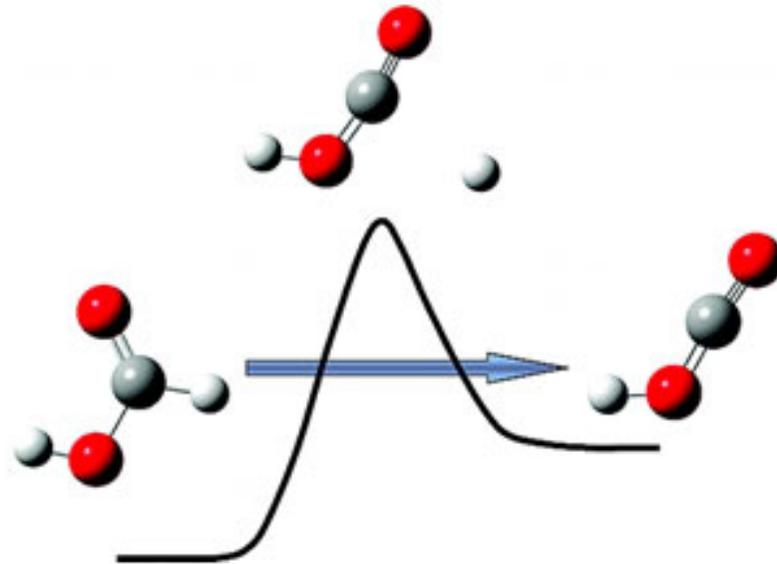
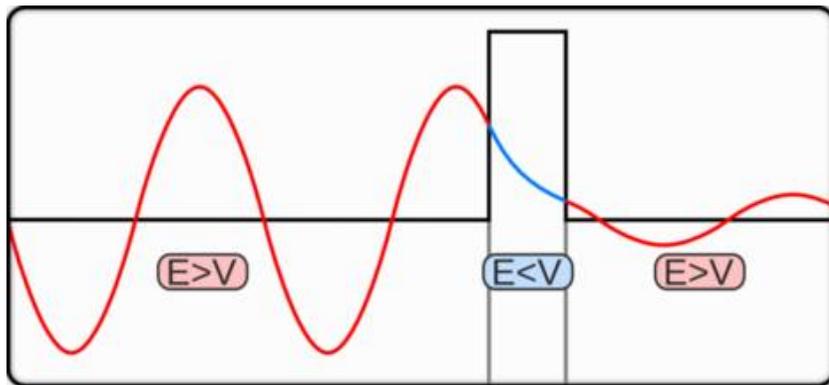
Tianji Ma (beiai@hotmail.de)

Vorlesung: Di 10h-12h, Fr 9h-10h

Übungen: Fr 10h-11h

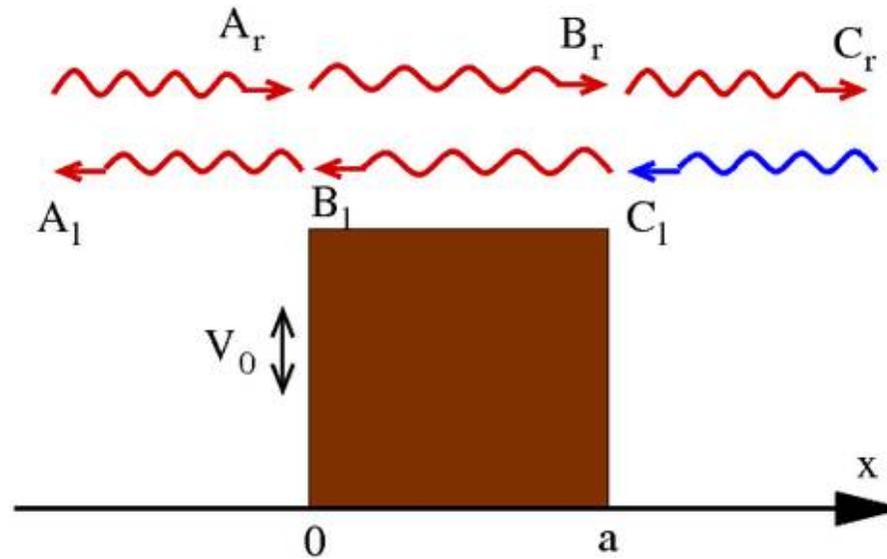
Web site: <http://www.theochem.uni-frankfurt.de/TC1>

# Tunneleffekt



- nicht-klassischer (“below barrier”) Beitrag zu Reaktionsraten, z.B. Protonentransfer
- kann bei niedrigen Temperaturen dominant werden

## Tunneleffekt, cont'd



$$\text{Zone A: } H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \quad x < 0$$

$$\text{Zone B: } H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_0 \quad 0 \leq x \leq a$$

$$\text{Zone C: } H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \quad x > a$$

# Tunneleffekt, cont'd

Wellenfunktion:

$$\text{Zone A: } \psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad k = \left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{1/2}$$

$$\text{Zone B: } \psi(x) = A'e^{ik'x} + B'e^{-ik'x} \quad k' = \left(\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}\right)^{1/2}$$

$$\text{Zone C: } \psi(x) = A''e^{ikx} + B''e^{-ikx} \quad k = \left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{1/2}$$

Zone B: Betrachte den Fall  $E < V_0$ , so dass  $k' = i\kappa$  (wobei  $\kappa$  reell ist):

$$\text{Zone B: } \psi(x) = A'e^{-\kappa x} + B'e^{\kappa x} \quad \kappa = \left(\frac{2m|E - V_0|}{\hbar^2}\right)^{1/2}$$

Die Wellenfunktion oszilliert nicht, sondern verhält sich exponentiell

# Tunneleffekt, cont'd

Kontinuität der Wellenfunktion:

(1) Werte von  $\psi$  für  $x = 0, a$ :

$$A + B = A' + B' \quad ; \quad A'e^{-\kappa a} + B'e^{\kappa a} = A''e^{ika} + B''e^{-ika}$$

(2) erste Ableitungen (Stetigkeit):

$$ikA - ikB = -\kappa A' + \kappa B' \quad ; \quad \kappa A'e^{-\kappa a} - \kappa B'e^{\kappa a} = ikA''e^{ika} - ikB''e^{-ika}$$

→ Bestimmung der Koeffizienten

**Transmissionswahrscheinlichkeit:  $T = |A''|^2/|A|^2$**

$$T = \frac{1}{1 + G} \quad G = \frac{V_0^2 \sinh^2 \kappa a}{4E(V_0 - E)} \quad \kappa = \left( \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} \right)^{1/2}$$

# Wie weit dringt die Wellenfunktion in den klassisch verbotenen Bereich ein?

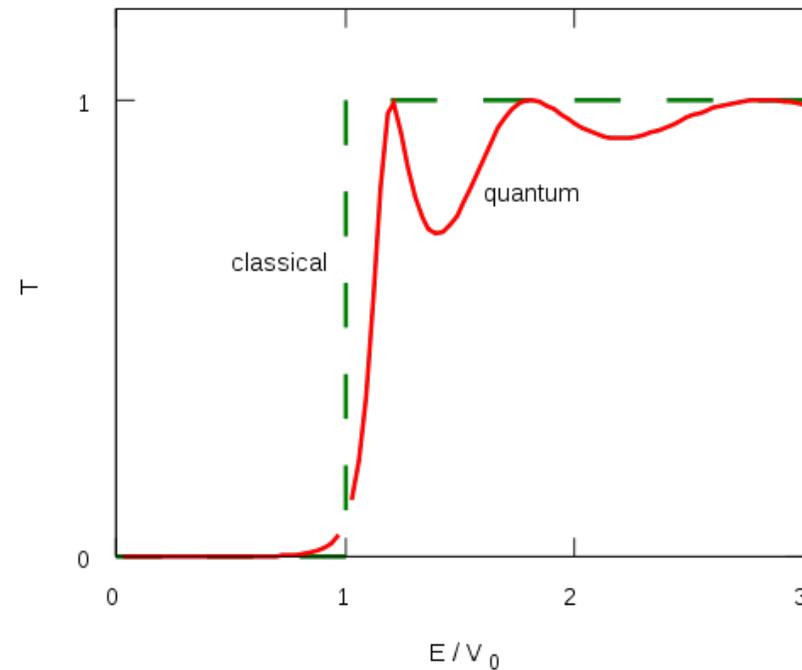
- definiere die **Eindringtiefe**  $\kappa^{-1}$ , wobei wie oben gilt

$$\kappa = \left( \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} \right)^{1/2}$$

- z.B. Elektron, das durch eine Potentialdifferenz von 1 V beschleunigt wurde und eine kinetische Energie von 1 eV besitzt ; Potentialbarriere von 2 eV  $\longrightarrow$  die **Eindringtiefe**  $\kappa^{-1}$  beträgt 2 Å.

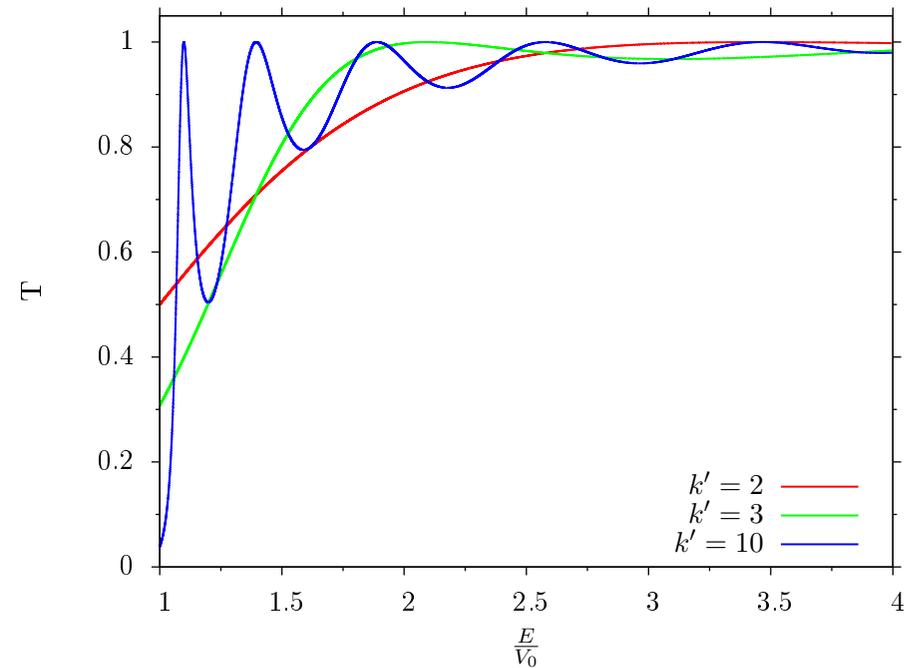
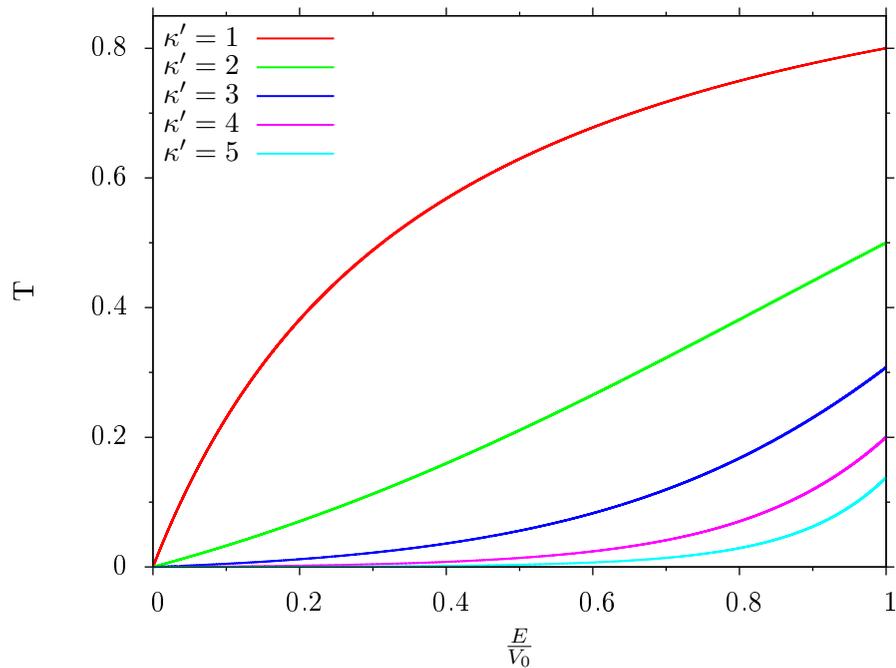
# Transmissionswahrscheinlichkeit

$$T = \frac{1}{1 + G} \quad G = \frac{V_0^2 \sinh^2 \kappa a}{4E(V_0 - E)} \quad \kappa = \left( \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} \right)^{1/2}$$



# Transmissionswahrscheinlichkeit

$$T = \frac{1}{1 + G} \quad G = \frac{V_0^2 \sinh^2 \kappa a}{4E(V_0 - E)} \quad \kappa = \left( \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} \right)^{1/2}$$



# Transmissionswahrscheinlichkeit

$$T = \frac{1}{1 + G} \quad G = \frac{V_0^2 \sinh^2 \kappa a}{4E(V_0 - E)} \quad \kappa = \left( \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} \right)^{1/2}$$

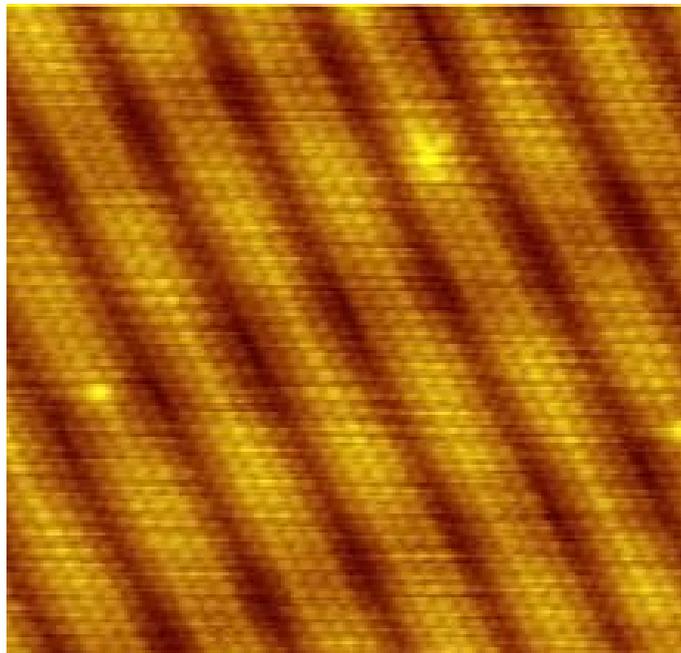
Grenzfall einer **hohen und breiten** Barriere:  $\kappa a \gg 1$

In diesem Fall gilt, da  $\sinh(\kappa a) \simeq 1/2 e^{\kappa a}$ :

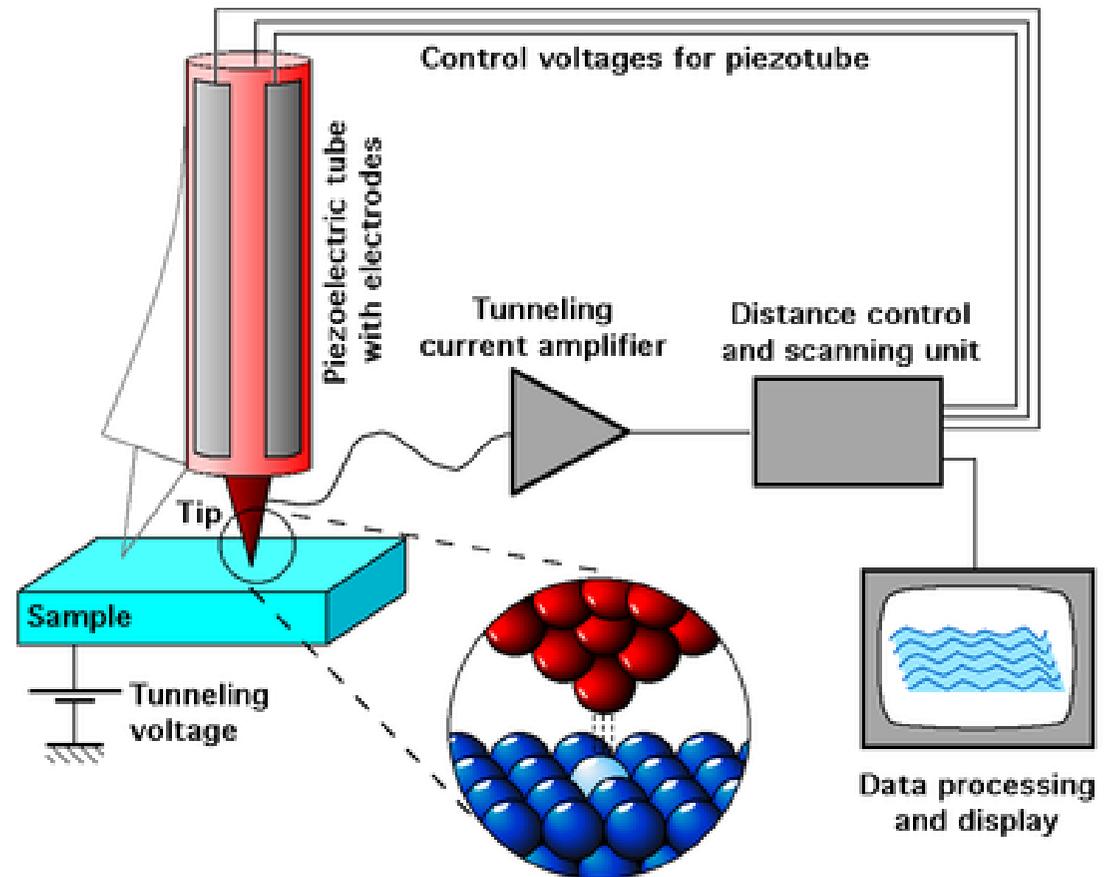
$$T = 16 \left( \frac{E}{V_0} \right) \left( 1 - \frac{E}{V_0} \right) e^{-2\kappa a}$$

- Die Transmissionswahrscheinlichkeit nimmt exponentiell mit der Barrierenbreite und der Masse ab!

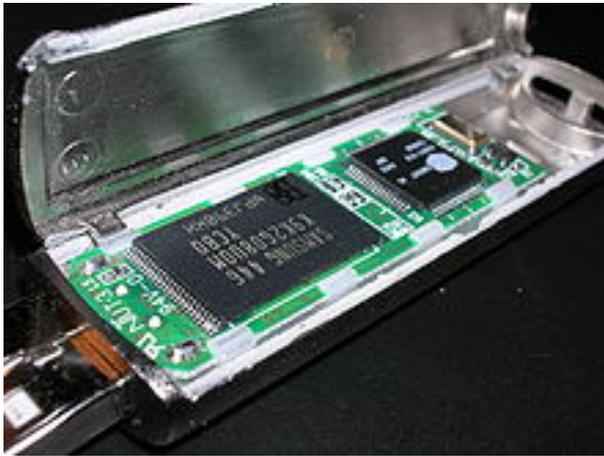
# Scanning Tunneling Microscope (STM)



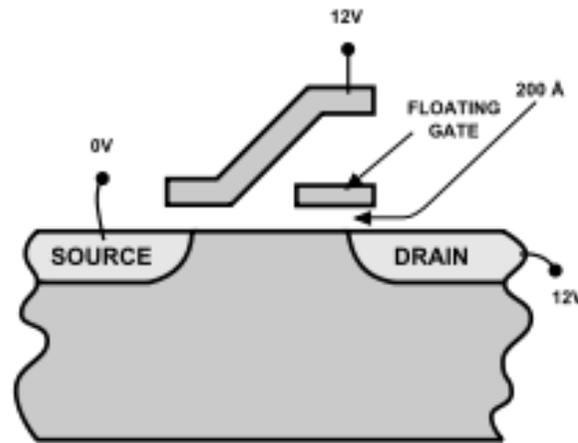
STM-Bild einer Gold-Oberfläche



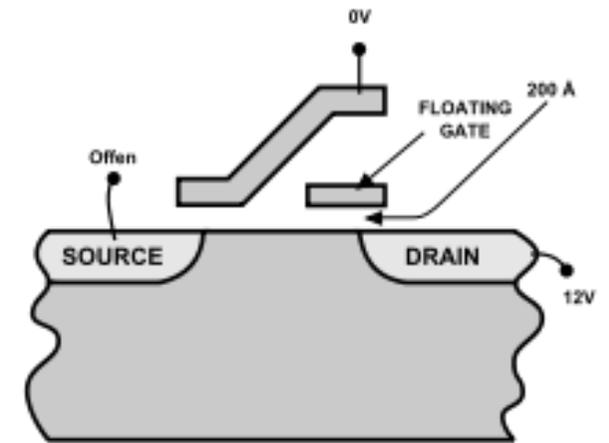
# USB Stick



Programmierung durch *Hot Electron Injection*



Löschen durch Tunneln



<http://de.wikipedia.org/wiki/Flash-Speicher>

- Information speichern: Ladung wird bei hoher positiver Spannung auf das Floating-Gate aufgebracht
- Information löschen: Ladung wird bei hoher negativer Spannung aus dem Floating-Gate ausgetrieben
- Elektronen müssen isolierende Oxidschicht passieren: **Tunneleffekt!**