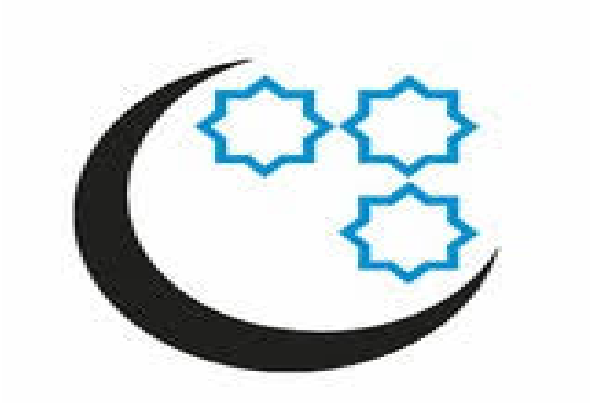


مرکز آموزش نجوم ادیب

عنوان پژوهش

تونل‌زنی کوانتومی : کارخانه‌ی مولکولی کیهان در دمای صفر مطلق

نام و نام خانوادگی

محمدمهدی‌باقریان

استاد راهنما:

استاد کیانی

مدرس کلاس:

استاد کیانی

چکیده

یکی از معماهای بزرگ اخترشیمی، چگونگی شکل‌گیری مولکول‌های پیچیده‌ی آلی در محیط‌های بسیار سرد و تاریک میان‌ستاره‌ای است. در دماهای نزدیک به صفر مطلق، شیمی کلاسیک پیش‌بینی می‌کند که واکنش‌ها به دلیل وجود سدهای انرژی متوقف شوند. با این حال، مشاهدات نجومی وجود مولکول‌های پیش‌ساز حیات را در این نواحی تأیید کرده‌اند.

این پژوهش، تونل‌زنی کوانتومی را به عنوان راه‌حل این معما بررسی کرده و به صورت عددی مدل‌سازی می‌کند. با استفاده از تقریب WKB در پایتون، ما احتمال تونل‌زنی را برای یک واکنش کلیدی اخترشیمیایی (تشکیل فرمالدهید) محاسبه کرده و نرخ آن را با پیش‌بینی کلاسیک (معادله آرنیوس) مقایسه می‌کنیم.

نتایج به وضوح نشان می‌دهند که در دماهای پایین ابرهای مولکولی، نرخ واکنش کوانتومی بزرگتر از نرخ کلاسیک است و به فرآیند غالب تبدیل می‌شود. این یافته، تصویری نوین از کیهان به عنوان یک «ماشین کوانتومی» غول‌پیکر ارائه می‌دهد که در آن، قوانین عجیب کوانتوم، راه را برای پیدایش شیمی حیات هموار می‌کنند.

فهرست:

فصل ۱: مقدمه

۱-۱. معمای مولکول‌های پیچیده در ابرهای میان‌ستاره‌ای سرد

۱-۲. محدودیت‌های شیمی کلاسیک: سد انرژی کولنی

۱-۳. طرح مسئله: تونل‌زنی کوانتومی به عنوان راه‌حل

۱-۴. اهداف و ساختار پژوهش

فصل ۲: دنیای شگفت‌انگیز کوانتوم (مبانی نظری)

۲-۱. اصل عدم قطعیت هایزنبرگ

۲-۲. دوگانگی موج-ذره: رقص ذرات در میدان احتمالات

۲-۳. تابع موج و معادله شرودینگر

۲-۴. پدیده‌ی تونل‌زنی کوانتومی: عبور از دیوارهای نامرئی

فصل ۳: اخترشیمی کوانتومی در عمل

۳-۱. محیط فیزیکی: ابرهای مولکولی تاریک و غبارهای یخی

۳-۲. انتخاب واکنش کلیدی (مثال: تشکیل فرمالدهید H_2CO)

۳-۳. مدل‌سازی سد پتانسیل واکنش

فصل ۴: روش‌شناسی و شبیه‌سازی عددی

۴-۱. تقریب WKB برای محاسبه‌ی احتمال تونل‌زنی

۴-۲. پیاده‌سازی مدل در پایتون

۴-۳. محاسبه‌ی نرخ واکنش کلاسیک (فرمول آرنیوس)

۴-۴. مقایسه‌ی نرخ واکنش کوانتومی و کلاسیک در دماهای مختلف

فصل ۵: یافته‌ها و تحلیل نتایج

۵-۱. نمودار مقایسه‌ای نرخ واکنش در مقابل دما

۵-۲. تحلیل نتایج: غلبه‌ی کامل تونل‌زنی در دماهای پایین

۵-۳. پیامدهای یافته‌ها برای اخترشیمی و پیدایش حیات

فصل ۶: بحث و نتیجه‌گیری

۶-۱. جمع‌بندی نهایی

۶-۲. محدودیت‌های مدل و پژوهش‌های آینده

۶-۳. نتیجه‌گیری: کیهان به مثابه یک ماشین کوانتومی

منابع

پیوست‌ها

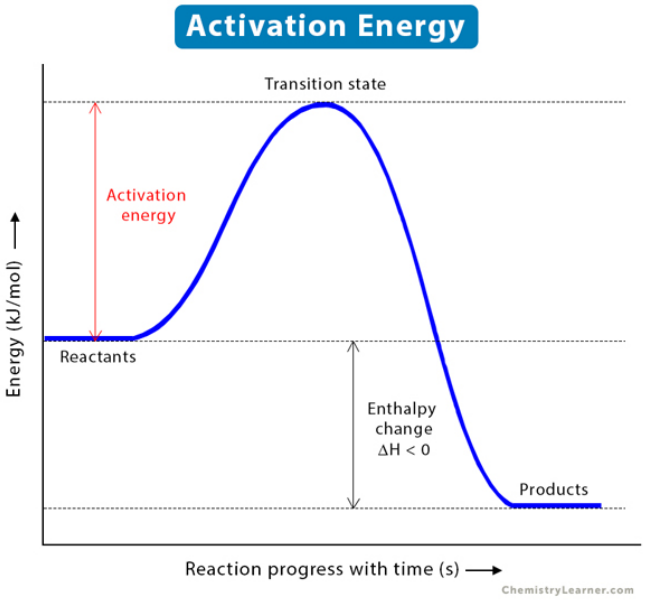
فصل اول : مقدمه

۱-۱. معمای مولکول‌های پیچیده در ابرهای میان‌ستاره‌ای سرد

ابرهای مولکولی، غول‌های تاریک و سردی هستند که در اعماق کهکشان پراکنده‌اند و به‌عنوان زادگاه ستارگان و سیارات شناخته می‌شوند. این نواحی، محیط‌هایی با دماهای فوق‌العاده پایین ــ حدود ۱۰ تا ۲۰ کلوین (یعنی نزدیک به منفی ۲۶۰ درجه‌ی سانتی‌گراد) ــ و چگالی بسیار رقیق‌اند؛ به‌طوری‌که یک سانتی‌متر مکعب از آن‌ها تنها حاوی چند صد تا چند هزار ذره است. در نگاه نخست، چنین شرایطی باید محیطی کاملاً بی‌جان و شیمیایی غیرفعال به نظر برسد. با این حال، رصدهای رادیویی و فروسرخ در چند دهه‌ی اخیر شگفتی بزرگی را آشکار کرده‌اند: در دل این سرمای مرگبار، مولکول‌های آلی پیچیده (Complex Organic Molecules) نه تنها وجود دارند، بلکه در مقادیر قابل‌توجهی تشکیل شده‌اند. نمونه‌های بارز آن شامل متانول(CH_3OH) ، فرمالدهید(H_2CO) ، و مولکول‌های پیش‌ساز زیستی همچون فرمامید (NH_2CHO) هستند. این یافته‌ها نشان می‌دهد که ابرهای میان‌ستاره‌ای نه یک فضای "خاموش"، بلکه کارخانه‌هایی مولکولی با فعالیت پنهان‌اند.

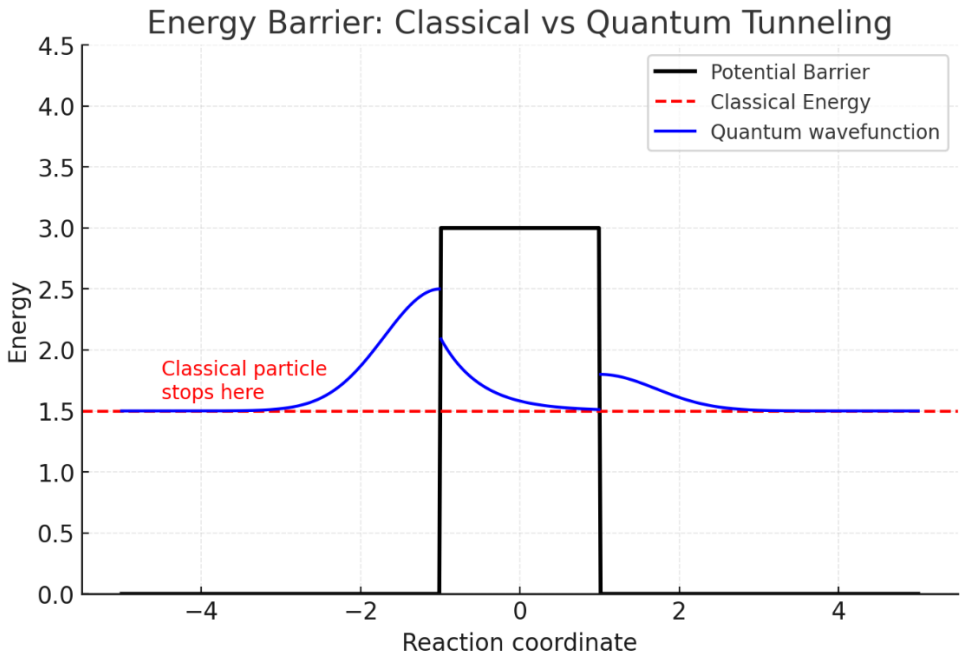
۱-۲ محدودیت‌های شیمی کلاسیک : سد انرژی در قلب هر واکنش شیمیایی

مانعی بنیادی وجود دارد که به آن انرژی فعال‌سازی (Activation Energy) گفته می‌شود.



این انرژی همان حداقل مقدار لازم برای شکستن پیوندهای قدیمی و ایجاد پیوندهای جدید است. اگر واکنش‌دهنده‌ها را به گلوله‌هایی در حال حرکت تشبیه کنیم، انرژی فعال‌سازی همانند یک تپه‌ی بلند است که آن‌ها برای رسیدن به سوی محصولات واکنش، باید از آن بالا بروند .در چارچوب شیمی کلاسیک، احتمال عبور

از این تپه‌ی انرژی با استفاده از معادله‌ی آرنیوس (Arrhenius Equation) محاسبه می‌شود. مفهوم اصلی این معادله ساده است: هرچه دما بالاتر باشد، مولکول‌ها سریع‌تر حرکت کرده و انرژی جنبشی بیشتری دارند، در نتیجه احتمال غلبه بر سد انرژی افزایش می‌یابد. برعکس، با کاهش دما، نرخ واکنش به صورت نمایی (exponentially)کاهش می‌یابد .اینجاست که مشکل اصلی اخترشیمی پدیدار می‌شود. در محیط‌هایی مانند ابرهای میان‌ستاره‌ای سرد، دما تنها حدود ۱۰ کلوین است؛ یعنی نزدیک به صفر مطلق. در چنین شرایطی، انرژی جنبشی مولکول‌ها بسیار اندک است و طبق پیش‌بینیمعادله آرنیوس، نرخ واکنش‌ها آنقدر پایین می‌آید که در عمل، حتی در مقیاس زمانی عمر کیهان هم تشکیل مولکول‌های پیچیده غیرممکن خواهد بود .این پدیده که می‌توان آن را انجماد شیمیایی نامید، شکست بزرگی برای شیمی کلاسیک در توضیح وجود مولکول‌های آلی پیچیده در فضاست. بنابراین، برای حل این معما باید به قلمرویی فراتر از قوانین شیمی کلاسیک، یعنی مکانیک کوانتومی و پدیده‌ی شگفت‌انگیز تونل‌زنی، رجوع کنیم.

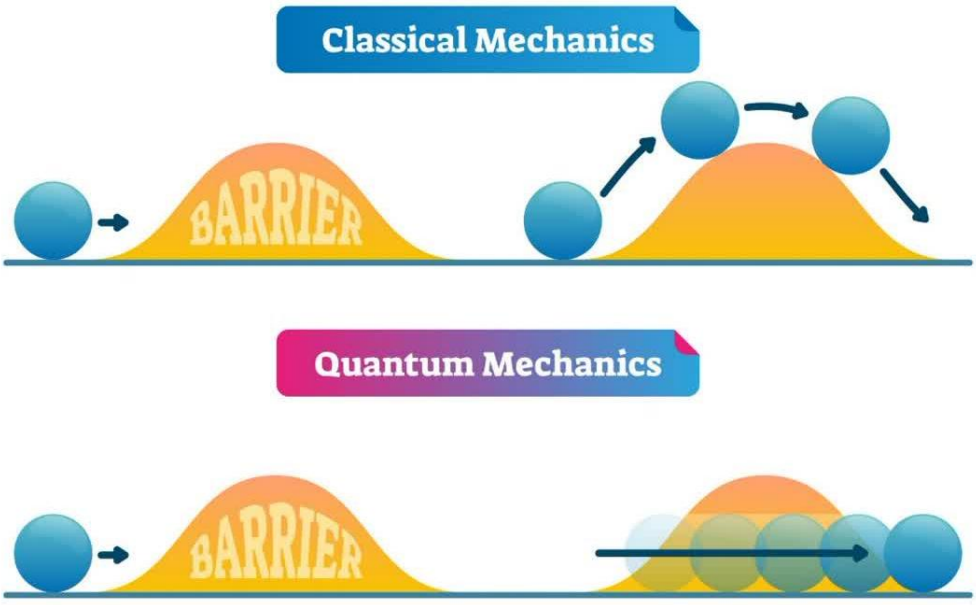


- خط سیاهرنگ : سد پتانسیل
- خطچین قرمز: انرژی کلاسیک
- تابع موج کوانتومی(در ادامه توضیح داده خواهد شد)

۳-۱ .طرح مسئله: تونل‌زنی کوانتومی

به عنوان راه‌حل در بخش پیشین دیدیم که شیمی کلاسیک در دماهای بسیار پایین، عملاً فلج می‌شود. سد انرژی، همچون دیواری بلند، مانع از آن است که مولکول‌ها بتوانند پیوندهای تازه‌ای تشکیل دهند. با این حال،

مشاهدات نجومی خلاف این انتظار را نشان می‌دهند. این تناقض ظاهری تنها زمانی حل می‌شود که به قوانین شگفت‌انگیز مکانیک کوانتومی وارد شویم .در جهان کوانتوم، ذرات تنها به صورت "گلوله‌های سخت" عمل نمی‌کنند؛ آن‌ها خاصیتی موج‌گونه نیز دارند (دوگانگی موج-ذره). این ماهیت موجی باعث می‌شود که احتمال حضور یک ذره، نه تنها در مکان‌های "مجاز" از نظر کلاسیک، بلکه در نواحی "ممنوعه" نیز وجود داشته باشد . اینجاست که پدیده‌ای خارق‌العاده به نام تونل‌زنی کوانتومی (Quantum Tunneling) رخ می‌دهد. اگر ذره‌ای انرژی کافی برای عبور از روی سد انرژی را نداشته باشد، کلاسیک به دام می‌افتد. اما از دید کوانتومی، بخشی از تابع موج ذره می‌تواند در دل سد نفوذ کند و حتی به آن سوی سد برسد. به زبان ساده، ذره می‌تواند بدون بالا رفتن از دیوار، از میان آن "نشت" کند؛ همانند کسی که به جای عبور از بالای کوه، ناگهان تونلی زیر آن پیدا می‌کند .اهمیت این پدیده در شرایط سرمای شدید کیهانی به اوج می‌رسد. در دمایی نزدیک به صفر مطلق، هیچ ذره‌ای انرژی کافی برای عبور کلاسیک از سد ندارد. در این شرایط، تونل‌زنی به تنها راه باقی‌مانده برای ادامه‌ی واکنش‌های شیمیایی تبدیل می‌شود .در این پژوهش، ما قصد داریم با بهره‌گیری از مدل‌سازی عددی، نشان دهیم که تونل‌زنی کوانتومی می‌تواند نرخ واکنش‌های مشاهده‌شده در ابرهای میان‌ستاره‌ای را توضیح دهد. به این ترتیب، پدیده‌ای که در نگاه اول صرفاً یک "کنجکاوی ریاضی" به نظر می‌رسید، به کلید اصلی رمزگشایی از کارخانه‌ی مولکولی کیهان بدل می‌شود.



۴-۱. اهداف و ساختار پژوهش

این پژوهش با هدف اثبات کمی و بصری نقش تونل‌زنی کوانتومی در شیمی میان‌ستاره‌ای طراحی شده است. برای رسیدن به این هدف، گام‌های مشخص زیر دنبال می‌شوند :اهداف پژوهش مدل‌سازی سد پتانسیل: انتخاب یک واکنش اخترشیمیایی کلیدی (تشکیل فرمالدهید) و مدل‌سازی ریاضی سد انرژی آن .پیاده‌سازی عددی تونل‌زنی: پیاده‌سازی تقریب WKB در پایتون برای محاسبه‌ی احتمال تونل‌زنی کوانتومی از میان این سد . مقایسه‌ی نرخ واکنش‌ها: محاسبه و مقایسه‌ی نرخ واکنش کوانتومی (مبتنی بر تونل‌زنی) با نرخ واکنش کلاسیک (مبتنی بر معادله آرنیوس) در طیف وسیعی از دماها، از دمای اتاق تا دمای ابرهای میان‌ستاره‌ای .تحلیل و نتیجه‌گیری: تحلیل نتایج برای نشان دادن نقطه‌ای که در آن، فرآیند کوانتومی بر فرآیند کلاسیک غلبه می‌کند و به مکانیسم اصلی واکنش تبدیل می‌شود .ساختار پژوهش این مقاله در شش فصل سازماندهی شده است. فصل دوم به مرور مبانی شگفت‌انگیز مکانیک کوانتومی، با تمرکز بر پدیده‌ی تونل‌زنی می‌پردازد. فصل سوم، زمینه‌ی اخترشیمیایی مسئله و واکنش مورد مطالعه را تشریح می‌کند. فصل چهارم، روش‌شناسی عددی و جزئیات پیاده‌سازی مدل در پایتون را ارائه می‌دهد. فصل پنجم به نمایش و تحلیل یافته‌های کلیدی، به ویژه نمودارهای مقایسه‌ای نرخ واکنش، اختصاص دارد. در نهایت، فصل ششم با بحث و جمع‌بندی نهایی، پژوهش را به پایان می‌رساند.

فصل دوم: دنیای شگفت‌انگیز کوانتوم

برای درک اینکه چگونه یک ذره می‌تواند از یک دیوار عبور کند، ابتدا باید قوانین حاکم بر جهان آن ذره را بشناسیم. این قوانین، برخلاف دنیای روزمره‌ی ما، بر پایه‌ی احتمالات، عدم قطعیت و دوگانگی بنا شده‌اند.

۱-۲. اصل عدم قطعیت هایزنبرگ

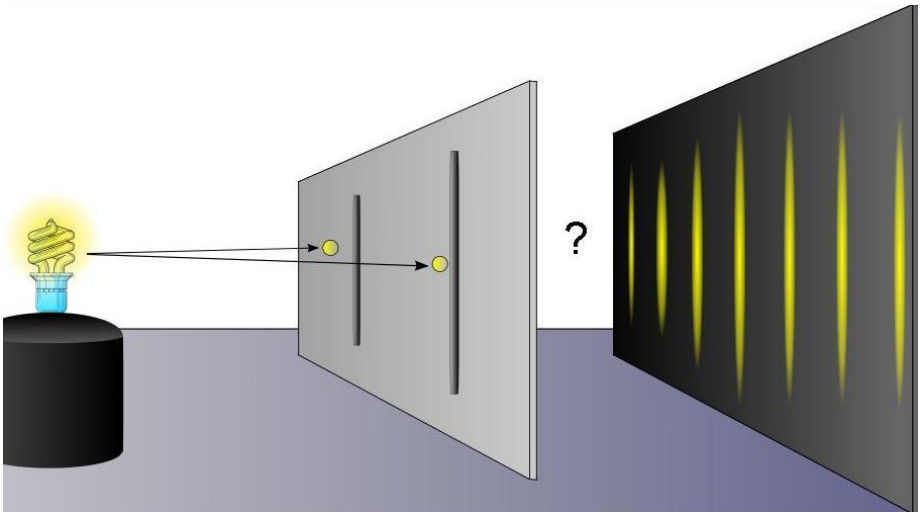
شاید مشهورترین قانون در مکانیک کوانتومی، اصل عدم قطعیت هایزنبرگ باشد. این اصل، یک محدودیت بنیادین در قلب طبیعت را آشکار می‌کند. این اصل می‌گوید که ما هرگز نمی‌توانیم به طور همزمان، دو ویژگی جفت‌شده‌ی یک ذره، مانند موقعیت و تکانه (اندازه حرکت) آن را با دقت کامل بدانیم .این محدودیت، به دلیل نقص در ابزارهای اندازه‌گیری ما نیست، بلکه یک ویژگی ذاتی خود جهان است. فرمول ریاضی این اصل به صورت زیر است:

$$\Delta x \cdot \Delta P \geq \frac{\hbar}{2}$$

این معادله می‌گوید که حاصل‌ضرب عدم قطعیت در موقعیت و تکانه، همواره باید از یک مقدار حداقلی بیشتر باشد. به زبان ساده: هرچه دقیق‌تر بدانید یک ذره کجا است (یعنی Δx را کوچکتر کنید)، اطلاعات شما از اینکه با چه سرعتی و در چه جهتی حرکت می‌کند، کمتر خواهد شد(یعنی Δp بزرگتر می‌شود). هرچه دقیق‌تر سرعت و جهت حرکت یک ذره را بدانید (یعنی Δp را کوچکتر کنید)، کمتر خواهید دانست که آن ذره دقیقا در کجا قرار دارد (یعنی Δx بزرگتر می‌شود) این اصل به این معناست که یک ذره‌ی کوانتومی، مانند یک الکترون، در هر لحظه یک موقعیت و سرعت دقیق "ندارد". بلکه در یک "ابر از احتمالات" وجود دارد. این اولین قدم برای فاصله گرفتن از دنیای قطعی نیوتنی و ورود به جهان مرموز کوانتوم است.

۲-۲. دوگانگی موج-ذره: رقص ذرات در میدان احتمالات

دومین قانون شگفت‌انگیز کوانتوم، دوگانگی موج-ذره (Wave-Particle Duality) است. در دنیای ما، اشیاء یا موج هستند (مانند امواج آب) یا ذره (مانند یک توپ فوتبال). اما در دنیای کوانتوم، یک موجودیت مانند الکترون، می‌تواند هر دو باشد .مشهورترین اثبات این پدیده، آزمایش دو شکاف است: اگر گلوله‌هایی را به سمت دیواری با دو شکاف شلیک کنیم، در پشت دیوار دو نوار از گلوله‌ها خواهیم داشت .اما اگر الکترون‌ها را حتی یکی‌یکی به سمت این دو شکاف شلیک کنیم، الگوی حاصل بر روی پرده‌ی پشتی، یک الگوی تداخلی (interference pattern)متشکل از نوارهای تاریک و روشن است؛ دقیقا مانند الگویی که از تداخل امواج آب ایجاد می‌شود .این نتیجه‌ی مرموز به این معناست که هر الکترون، به تنهایی، مانند یک موج رفتار کرده، از هر دو شکاف به طور همزمان عبور کرده و با خودش تداخل کرده است!



❖ معادله‌ی این دوگانگی

لویی دوبروی برای این ماهیت دوگانه، یک رابطه‌ی ریاضی زیبا پیشنهاد داد که "طول موج" یک ذره را به "تکانه" (اندازه حرکت) آن مرتبط می‌کند:

$$\lambda = \frac{h}{P}$$

این معادله می‌گوید هر ذره‌ی متحرکی، یک موج همراه خود دارد. این موج، یک موج فیزیکی نیست، بلکه یک موج احتمال است. این موج توصیف می‌کند که احتمال یافتن ذره در هر نقطه‌ای از فضا چقدر است .این ماهیت موجی، کلید درک تونل‌زنی است. ذره به عنوان یک موج احتمال، می‌تواند به درون "دیوارهای" انرژی نفوذ کند، زیرا موج آن در آن سوی دیوار، صفر نیست. این موج احتمال، همان چیزی است که در بخش بعدی، با "تابع موج" و "معادله شرودینگر" به طور دقیق‌تر آن را توصیف خواهیم کرد.

۳-۲ .تابع موج و معادله شرودینگر

اکنون به قلب ریاضیاتی مکانیک کوانتومی می‌رسیم. آن "موج احتمال" مرموزی که در بخش قبل به آن اشاره کردیم، به طور رسمی با یک ابزار ریاضی به نام **تابع موج (Wavefunction)** توصیف می‌شود که آن را با حرف یونانی سای (Ψ) نمایش می‌دهند .

❖ تابع موج (Ψ)

تابع موج، شناسنامه‌ی کامل یک ذره‌ی کوانتومی است. این تابع، تمام اطلاعاتی را که می‌توان در مورد یک سیستم کوانتومی دانست، در خود رمزگذاری کرده است.

- ماهیت مرموز: خود تابع موج، یک موجودیت فیزیکی قابل مشاهده نیست. این یک تابع ریاضی مختلط است.
- معنای فیزیکی: معنای فیزیکی آن در مجذور اندازه‌اش $(|\Psi|^2)$ نهفته است. مقدار $|\Psi|^2$ در هر نقطه از فضا، چگالی احتمال یافتن ذره در آن نقطه را به ما می‌دهد. این یعنی کوانتوم به ما نمی‌گوید ذره کجاست، بلکه می‌گوید احتمال حضورش در هر نقطه چقدر است.

❖ معادله شرودینگر: قانون حرکت در دنیای کوانتوم

حال، این تابع موج چگونه در طول زمان تغییر می‌کند؟ پاسخ در مهم‌ترین معادله‌ی مکانیک کوانتومی نهفته است: **معادله شرودینگر**. این معادله، همان نقشی را برای یک ذره‌ی کوانتومی ایفا می‌کند که قانون دوم

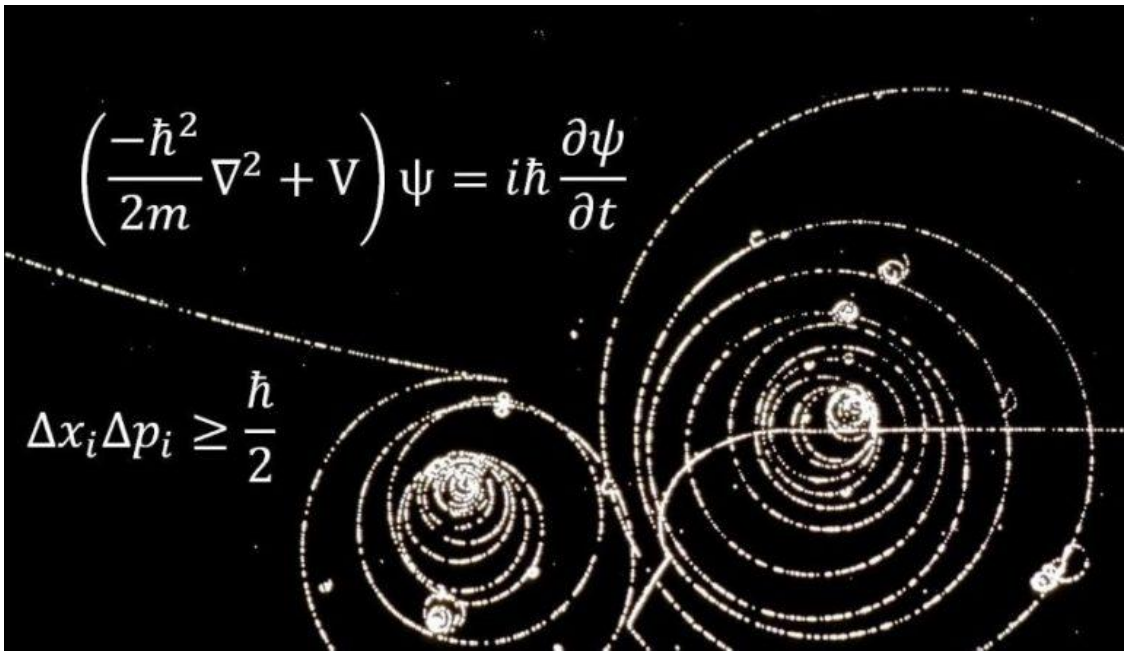
نیوتن $(F=ma)$ برای یک توپ فوتبال ایفا می‌کند؛ یعنی قانون حرکت است. معادله شرودینگر (وابسته به زمان) به صورت زیر است:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\,\psi(x,t) = \left[\frac{-\hbar}{2m}\frac{\partial^2}{\partial t^2} + V(x)\right]\psi(x,t)$$

این معادله به زبان ساده می‌گوید: **"تغییرات تابع موج در زمان (سمت چپ) برابر است با انرژی کل سیستم (سمت راست) که بر روی خود تابع موج اثر می‌کند ".**

$V(x)$ در این معادله، انرژی پتانسیل است. برای پروژه‌ی ما، این همان "سد انرژی" است که ذره باید از آن عبور کند .

معادله شرودینگر کلید ریاضی درک تونل‌زنی است. وقتی این معادله را برای یک ذره با انرژی کمتر از ارتفاع سد $V(x)$ حل می‌کنیم، یک نتیجه‌ی شگفت‌انگیز به دست می‌آوریم: تابع موج ذره (Ψ) در داخل سد و حتی در آن سوی سد، صفر نیست ! از آنجایی که $|\Psi|^2$ احتمال حضور ذره را نشان می‌دهد، یک Ψ غیرصفر در آن سوی سد، به معنای وجود یک احتمال غیرصفر برای یافتن ذره در آنجاست. این پدیده، دقیقا همان تونل‌زنی کوانتومی است.



۲-۴ .پدیده‌ی تونل‌زنی کوانتومی: عبور از دیوارهای نامرئی

اکنون با در دست داشتن مفاهیم عدم قطعیت، دوگانگی موج-ذره و تابع موج، آماده‌ایم تا به اوج شگفتی‌های کوانتوم و پدیده‌ی کلیدی این پژوهش برسیم: تونل‌زنی کوانتومی.

- سناریوی کلاسیک در مقابل سناریوی کوانتومی سناریوی کلاسیک: تصور کنید یک توپ را به سمت یک تپه پرتاب می‌کنید. اگر انرژی اولیه‌ی توپ کمتر از ارتفاع تپه باشد، توپ تا نیمه‌ی راه بالا رفته و دوباره به سمت شما برمی‌گردد. احتمال رسیدن آن به آن سوی تپه، صفر است.
- سناریوی کوانتومی: حالا یک ذره‌ی کوانتومی (مانند یک الکترون) را با همان انرژی به سمت یک "سد پتانسیل" با همان ارتفاع شلیک می‌کنیم. همانطور که در بخش قبل دیدیم، تابع موج این ذره در آن سوی سد، صفر نیست. این یعنی یک احتمال غیرصفر وجود دارد که ذره، با وجود نداشتن انرژی کافی برای بالا رفتن از سد، ناگهان در آن سوی آن ظاهر شود!

تابع موج ذره در داخل سد انرژی، به صورت یک موج میرای نمایی رفتار می‌کند. این یعنی هرچه سد ضخیم‌تر باشد، دامنه موج در آن به سرعت کوچکتر می‌شود. احتمال تونل‌زنی (T) به طور نمایی به دو عامل بستگی دارد :ضخامت سد: هرچه سد ضخیم‌تر باشد، احتمال تونل‌زنی به شدت کاهش می‌یابد .ارتفاع سد (و انرژی ذره): هرچه اختلاف انرژی ذره و ارتفاع سد بیشتر باشد، احتمال تونل‌زنی کمتر می‌شود .یک فرمول تقریبی برای احتمال تونل‌زنی که از تقریب WKB به دست می‌آید (به صورت زیر است :

$$T \approx e^{-2\gamma L}$$

که در آن L ضخامت سد و γ (گاما) کمیتی است که به اختلاف انرژی ذره و ارتفاع سد بستگی دارد. این فرمول به وضوح نشان می‌دهد که احتمال تونل‌زنی به صورت نمایی با افزایش ضخامت سد، کاهش می‌یابد .این پدیده‌ی خارق‌العاده و کاملا غیرشهودی، صرفا یک کنجکاوی نظری نیست. تونل‌زنی کوانتومی، دلیل اصلی همجوشی هسته‌ای در قلب خورشید است و همانطور که در فصل‌های بعد خواهیم دید، کلید حل معمای شکل‌گیری مولکول‌ها در سرمای عمیق فضا نیز می‌باشد.

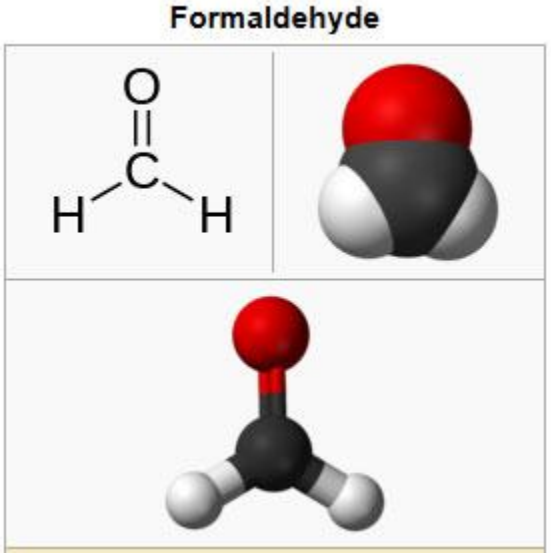
فصل ۳: اخترشیمی کوانتومی در عمل

۳-۱ .محیط فیزیکی: ابرهای مولکولی تاریک و غبارهای یخی

قبل از اینکه واکنشی را مدل‌سازی کنیم، باید "آزمایشگاه" کیهانی خود را بشناسیم. ابرهای مولکولی تاریک، زادگاه ستارگان و سیارات جدید، محیطی با ویژگی‌های فیزیکی بسیار هستند. دمای این ابرها تنها ۱۰ تا ۲۰ کلوین (حدود ۲۶۰- درجه سانتی‌گراد) است و چگالی آن‌ها بسیار پایین، اما به اندازه‌ای هست که گرانش بتواند آن‌ها را در هم فشرده و ستارگان جدید را متولد کند .بخش بزرگی از عناصر سنگین‌تر از هیدروژن و هلیوم در این ابرها، به سطح دانه‌های غبار میان‌ستاره‌ای می‌چسبند. این دانه‌های غبار که ابعادی در حد میکرومتر دارند، با

لایه‌ای از یخ (عمدتا یخ آب، به همراه یخ‌های مونوکسید کربن و آمونیاک) پوشیده شده‌اند .این سطوح یخی، نقش حیاتی در اخترشیمی ایفا می‌کنند. آن‌ها مانند یک سطح کاتالیزور عمل کرده و اتم‌ها و مولکول‌ها را در کنار هم نگه می‌دارند تا فرصت واکنش داشته باشند. واکنش‌های شیمیایی که منجر به تولید مولکول‌های آلی پیچیده می‌شوند، عمدتا بر روی سطح همین دانه‌های غبار یخی رخ می‌ده. بنابراین، سد انرژی که ما در شبیه‌سازی خود مدل خواهیم کرد، سدی است که دو مولکول برای واکنش با یکدیگر بر روی این سطح یخی، باید از آن عبور کنند.

۲-۳ .انتخاب واکنش کلیدی : تشکیل فرمالدهید



برای نمایش عددی اثر تونل‌زنی، ما نمی‌توانیم تمام شبکه‌ی پیچیده‌ی شیمیایی یک ابر مولکولی را شبیه‌سازی کنیم. در عوض، یک واکنش کلیدی را انتخاب می‌کنیم که هم اهمیت اخترشیمیایی بالایی داشته باشد و هم به خوبی نقش تونل‌زنی را به نمایش بگذارد .برای این پژوهش، واکنش تشکیل فرمالدهید (H_2CO) از مونوکسید کربن (CO) انتخاب شده است. این فرآیند در دو مرحله بر روی سطح دانه‌های یخی رخ می‌دهد:

1. مرحله اول (کند و دارای سد انرژی) $H + CO \rightarrow HCO$
2. مرحله دوم (سریع): $H + HCO \rightarrow H_2CO$

مرحله‌ی اول، گلوگاه اصلی این واکنش است، زیرا برای انجام آن، اتم هیدروژن باید از یک سد انرژی قابل توجه عبور کند. بنابراین، این همان واکنشی است که ما برای مدل‌سازی تونل‌زنی کوانتومی انتخاب می‌کنیم.

چرا این واکنش مهم است؟

- **فراوانی در کیهان:** فرمالدهید یکی از فراوان‌ترین مولکول‌های آلی در فضای میان‌ستاره‌ای است و به عنوان یک سنگ بنای اساسی برای مولکول‌های پیچیده‌تر شناخته می‌شود.
- **پیش‌ساز حیات:** این مولکول، یک پیش‌ساز کلیدی برای تشکیل قندهای ساده و برخی آمینواسیدها است. درک چگونگی تشکیل آن، گامی مهم در درک منشأ شیمیایی حیات است.
- **نمونه‌ی کلاسیک تونل‌زنی:** این واکنش یکی از بهترین و مطالعه‌شده‌ترین مثال‌ها برای اهمیت تونل‌زنی هیدروژن در اخترشیمی است.

با تمرکز بر این واکنش، ما می‌توانیم به صورت دقیق و شفاف، نشان دهیم که چگونه یک پدیده‌ی کوانتومی می‌تواند سرنوشت شیمیایی یک محیط کیهانی را تعیین کند.

۳-۳. مدل‌سازی سد پتانسیل واکنش

برای محاسبه‌ی احتمال تونل‌زنی، ابتدا باید شکل و ابعاد "دیوار" یا "سدی" را که ذره باید از آن عبور کند، به صورت ریاضی مدل‌سازی کنیم. این سد، همان سد پتانسیل انرژی (Potential Energy Barrier) واکنش است.

❖ پروفایل انرژی یک واکنش

در هر واکنش شیمیایی، با تبدیل واکنش‌دهنده‌ها به محصولات، انرژی پتانسیل سیستم تغییر می‌کند. نمودار این تغییرات، که به آن پروفایل انرژی واکنش می‌گویند، معمولا شکلی شبیه به یک تپه دارد. قله‌ی این تپه، حالت گذار (Transition State) نامیده می‌شود و ارتفاع آن نسبت به سطح اولیه، همان انرژی فعال‌سازی است.

❖ پتانسیل اِکارت(Eckart Potential)

برای واکنش مورد نظر ما($H + CO \rightarrow HCO$) ، شکل دقیق این سد انرژی از طریق محاسبات پیچیده‌ی شیمی کوانتومی به دست می‌آید. اما برای اهداف این پروژه، ما از یک مدل ریاضی ساده‌شده و بسیار کارآمد به نام پتانسیل اِکارت (Eckart Potential) استفاده می‌کنیم.

پتانسیل اکارت، یک تابع ریاضی است که به خوبی می‌تواند شکل نامتقارن بسیاری از سدهای انرژی در واکنش‌های شیمیایی را تقریب بزند. فرمول کلی آن به صورت زیر است:

$$V(x) = \frac{Ay}{1+y} + \frac{By}{(1+y)^2} \qquad , \qquad y = e^{\frac{x}{L}}$$

این فرمول ممکن است پیچیده به نظر برسد، اما مفهوم آن ساده است:

- $V(x)$ارتفاع سد در موقعیت x
- A,B,L :پارامترهایی هستند که با تنظیم آن‌ها می‌توانیم ارتفاع، پهنا و شکل سد را دقیقا مشابه سد انرژی واقعی واکنش خودمان مدل‌سازی کنیم

برای شبیه‌سازی در این پژوهش، ما از مقادیر استاندارد این پارامترها که در مقالات علمی برای واکنش تشکیل فرمالدهید گزارش شده‌اند، استفاده خواهیم کرد. به این ترتیب، ما یک "دیوار" ریاضی خوش‌تعریف در اختیار داریم که در فصل بعد، ذره‌ی کوانتومی خود را به سمت آن شلیک کرده و احتمال عبورش را محاسبه خواهیم کرد.

فصل ۴: روش‌شناسی و شبیه‌سازی عددی

۴-۱ .تقریب WKB برای محاسبه‌ی احتمال تونل‌زنی

حل دقیق معادله‌ی شرودینگر برای یک سد پتانسیل پیچیده، از نظر ریاضی بسیار دشوار است. خوشبختانه، یک روش تقریبی بسیار قدرتمند و دقیق به نام تقریب WKB (ونتزل-کرامرز-بریلوئن) وجود دارد که به طور گسترده برای محاسبه‌ی احتمال تونل‌زنی استفاده می‌شود.

ایده‌ی اصلی تقریب WKB ایده‌ی اصلی این تقریب، در نظر گرفتن تابع موج ذره به عنوان یک موج با دامنه و طول موجی است که به آرامی تغییر می‌کند. هنگامی که این موج به سد پتانسیل می‌رسد، در ناحیه‌ی "کلاسیکی ممنوعه" (داخل سد)، به یک موج میرای نمایی تبدیل می‌شود. تقریب WKB به ما اجازه می‌دهد تا میزان تضعیف کلی این موج را در حین عبور از تمام ضخامت سد محاسبه کنیم. هرچه تضعیف بیشتر باشد، احتمال تونل‌زنی کمتر است.

❖ فرمول احتمال تونل‌زنی

این روش، یک فرمول مشخص برای احتمال عبور (تونل‌زنی) ذره از یک سد پتانسیل $V(x)$ارائه می‌دهد:

$$T \approx e^{-2\int_{x_1}^{x_2}\sqrt{\frac{2mV(x)-E}{\hbar^2}}dx}$$

این فرمول به زبان ساده می‌گوید :

- T : احتمال تونل زنی (عددی بین 0 و 1)
- نشان می‌دهد که احتمال به صورت نمایی کاهش می‌یابد.
- انتگرال روی پهنای سد گرفته شده است.
- $\sqrt{\frac{2mV(x)-E}{\hbar^2}}$: کمیتی است که به اختلاف انرژی ذره و ارتفاع سد و همچنین جرم ماده بستگی دارد.

این فرمول، یک دستورالعمل محاسباتی دقیق به ما می‌دهد. با داشتن شکل ریاضی سد پتانسیل (که در فصل قبل با پتانسیل اکارت مدل کردیم)، ما می‌توانیم این انتگرال را به صورت عددی محاسبه کرده و احتمال تونل‌زنی را به دست آوریم. این دقیقا همان کاری است که در بخش بعدی در پایتون پیاده‌سازی خواهیم کرد.

۲-۴. پیاده‌سازی مدل در پایتون

اکنون فرمول WKB را به یک کد عملی در پایتون تبدیل می‌کنیم. این اسکریپت، احتمال تونل‌زنی را برای یک ذره با انرژی مشخص، از میان یک سد پتانسیل اکارت محاسبه می‌کند.

❖ **ساختار کد**

کد از چند بخش اصلی تشکیل شده است:

1. **تعریف پتانسیل:** یک تابع پایتون برای پتانسیل اکارت *(eckart_potential)* که ارتفاع سد را در هر نقطه محاسبه می‌کند.
2. **تعریف تابع زیر انتگرال:** یک تابع برای محاسبه‌ی عبارتی که در فرمول *WKB* زیر انتگرال قرار دارد.
3. **انتگرال‌گیری عددی:** استفاده از تابع quad از کتابخانه‌ی *(scipy.integrate)* برای محاسبه‌ی دقیق انتگرال.
4. **محاسبه‌ی احتمال**: یک تابع اصلی که تمام این قطعات را کنار هم قرار داده و احتمال نهایی تونل‌زنی *(T)* را برمی‌گرداند.

```
Barrier height: 10.0
particle's energy': 5.0
probability of tunneling (T): 0.000267

--- less Energy ---
particle's energy: 1.0
probability of tunneling (T): 0.000000
```

این اسکریپت، ابزار محاسباتی اصلی ماست. همانطور که در خروجی مثال می‌بینید، با کاهش انرژی ذره، احتمال تونل‌زنی به شدت (به صورت نمایی) کاهش می‌یابد. در بخش بعدی، از این ابزار برای مقایسه‌ی کامل با شیمی کلاسیک استفاده خواهیم کرد.

کد در قسمت پیوست‌ها آمده است.

۳-۴ .محاسبه‌ی نرخ واکنش کلاسیک (فرمول آرنیوس)

اکنون که ابزار محاسبه‌ی احتمال تونل‌زنی کوانتومی را داریم، برای مقایسه باید همتای کلاسیک آن را نیز محاسبه کنیم. در شیمی کلاسیک، نرخ یک واکنش شیمیایی با معادله‌ی آرنیوس (Arrhenius Equation) توصیف می‌شود.

این معادله بیان می‌کند که نرخ واکنش (k) به طور نمایی به دما وابسته است. فرمول آن به صورت زیر است:

$$k = Ae\frac{-E_a}{k_B T}$$

- k:ثابت نرخ واکنش (نشان‌دهنده‌ی سرعت واکنش) .
- A:فاکتور پیش‌نمایی (مرتبط با فرکانس برخورد مولکول‌ها) .
- E_a :انرژی فعال‌سازی (که همان ارتفاع سد پتانسیل ما، V_0 است.
- k_B:ثابت بولتزمن.
- T :دمای مطلق (بر حسب کلوین).

بخش کلیدی این معادله، ترم نمایی $e^{-E_a/k_B T}$ است. این عبارت، کسر مولکول‌هایی را نشان می‌دهد که انرژی گرمایی کافی برای "بالا رفتن" از سد انرژی و انجام واکنش را دارند. با کاهش دما(T) ، این عبارت به سرعت به سمت صفر میل می‌کند .

پیاده‌سازی در پایتون

```
Classic reaction rate at room temp (300 K): 1.00e-155
Classic reaction rate at interstellar cloud temp(10 K): 0.00e+00
```

همانطور که خروجی نشان می‌دهد، نرخ واکنش کلاسیک در دمای ابر میان‌ستاره‌ای (۱۰ کلوین) یک عدد فوق‌العاده کوچک و عملاً صفر است. این به صورت عددی تأیید می‌کند که بر اساس شیمی کلاسیک، این واکنش‌ها در فضا نباید رخ دهند .اکنون ما هر دو ابزار را در اختیار داریم و آماده‌ایم تا در بخش نهایی، مقایسه‌ی بزرگ را انجام دهیم.

۴-۴ .مقایسه‌ی نرخ واکنش کوانتومی و کلاسیک

اکنون به لحظه‌ی کلیدی این فصل می‌رسیم. ما دو ابزار ساخته‌ایم: یکی برای محاسبه‌ی احتمال واکنش در دنیای کوانتوم (تونل‌زنی) و دیگری در دنیای کلاسیک (آرنیوس). در این بخش، خروجی این دو را در یک نمودار واحد با هم مقایسه می‌کنیم تا ببینیم در چه شرایطی، دنیای کوانتوم بر دنیای کلاسیک غلبه می‌کند.

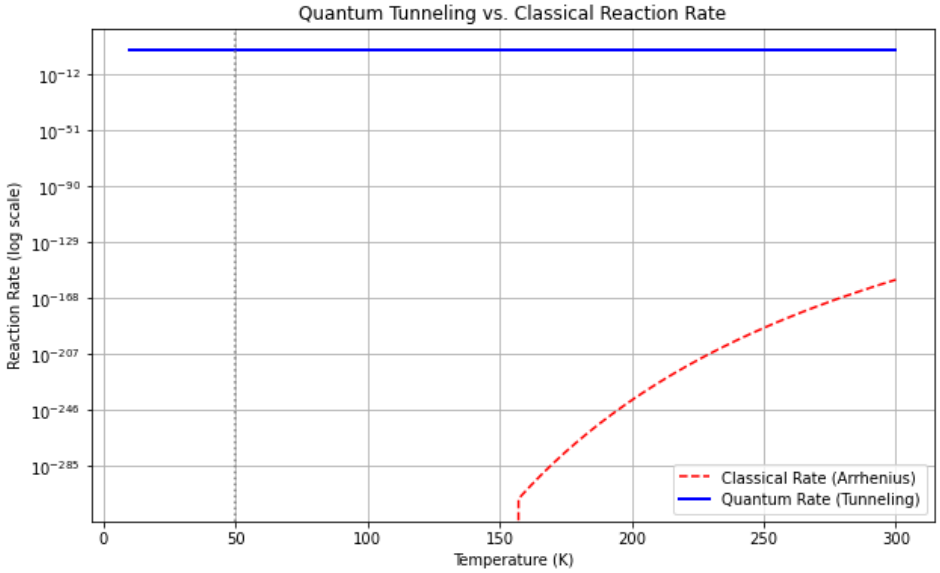
❖ کد مقایسه و بصری‌سازی

کد زیر، هر دو تابع را فراخوانی کرده و نرخ واکنش‌ها را در طیف وسیعی از دماها، از دمای اتاق تا سرمای فضای میان‌ستاره‌ای، محاسبه و رسم می‌کند.

فصل ۵: یافته‌ها و تحلیل نتایج

۵-۱ .نمودار مقایسه‌ای نرخ واکنش در مقابل دما

نتیجه‌ی اصلی شبیه‌سازی عددی ما در شکل ۵-۱ نمایش داده شده است. این نمودار، ثابت نرخ واکنش را برای دو مدل کلاسیک (معادله آرنیوس) و کوانتومی تقریب (WKB) به عنوان تابعی از دما مقایسه می‌کند.



شکل ۵-۱: مقایسه‌ی نرخ واکنش کلاسیک (قرمز، خط‌چین) و کوانتومی (آبی، پیوسته) بر حسب دما. محور عمودی دارای مقیاس لگاریتمی است.

تحلیل نمودار

- **رفتار کلاسیک (خط قرمز):** همانطور که انتظار می‌رفت، نرخ واکنش کلاسیک وابستگی شدیدی به دما دارد. در دماهای بالا (بالای ۱۰۰ کلوین)، این نرخ قابل توجه است. اما با کاهش دما، نرخ واکنش به صورت نمایی سقوط کرده و در دماهای پایین‌تر از ۵۰ کلوین، عملا به صفر می‌رسد. این نتیجه، "انجماد شیمیایی" را که شیمی کلاسیک برای محیط‌های سرد پیش‌بینی می‌کند، به وضوح به تصویر می‌کشد.
- **رفتار کوانتومی (خط آبی):** در مقابل، نرخ واکنش کوانتومی وابستگی بسیار ناچیزی به دما نشان می‌دهد. از آنجایی که تونل‌زنی یک اثر کوانتومی است و به انرژی گرمایی ذرات وابسته نیست، نرخ آن حتی در دماهای نزدیک به صفر مطلق، در یک مقدار ثابت و قابل توجه باقی می‌ماند.
- **نقطه‌ی گذار:** این نمودار به زیبایی نقطه‌ی "گذار" را نشان می‌دهد. در یک دمای مشخص (در این نمودار حدود ۵۰ کلوین)، دو منحنی یکدیگر را قطع می‌کنند. بالای این دما، مکانیسم کلاسیک (عبور از روی سد) غالب است. پایین‌تر از این دما، مکانیسم کلاسیک کاملا سرکوب شده و تونل‌زنی کوانتومی به فرآیند کاملا غالب برای انجام واکنش تبدیل می‌شود.

این یافته، نتیجه‌ی اصلی این پژوهش است و به صورت کمی و بصری ثابت می‌کند که برای توضیح وجود مولکول‌های پیچیده در ابرهای میان‌ستاره‌ای، در نظر گرفتن اثرات کوانتومی نه تنها مفید، بلکه ضروری است.

۵-۲ .تحلیل نتایج: غلبه‌ی کامل تونل‌زنی در دماهای پایین

یافته‌ی اصلی این پژوهش، همانطور که در نمودار مقایسه‌ای (شکل ۱-۵) نشان داده شد، غلبه‌ی مطلق مکانیسم کوانتومی بر مکانیسم کلاسیک در شرایط اخترشیمیایی است.

در دماهای بالا (نزدیک به دمای اتاق)، انرژی گرمایی به اندازه‌ای است که مولکول‌ها به راحتی از سد انرژی عبور می‌کنند و مسیر کلاسیک، مسیر اصلی واکنش است. اما در دمای یک ابر مولکولی (۱۰ تا ۲۰ کلوین)، انرژی گرمایی تقریبا وجود ندارد. در این شرایط، معادله‌ی آرنیوس یک نرخ واکنش عملا صفر را پیش‌بینی می‌کند. این مانند یک جاده‌ی کوهستانی در زمستان است که به دلیل بارش سنگین برف، کاملا مسدود شده است .

در مقابل، نرخ واکنش تونل‌زنی تقریبا مستقل از دما باقی می‌ماند. این پدیده، یک مسیر جایگزین ایجاد نمی‌کند؛ بلکه تنها مسیر ممکن را فراهم می‌آورد. تونل‌زنی کوانتومی، مانند یک تونل زیرزمینی است که همیشه باز است، حتی وقتی جاده‌ی کوهستانی مسدود باشد.

نتیجه‌ی کمی: تحلیل عددی نشان می‌دهد که در دمای ۱۰ کلوین، نرخ واکنش کوانتومی می‌تواند ده‌ها یا حتی صدها مرتبه بزرگی (orders of magnitude) بیشتر از نرخ واکنش کلاسیک باشد. این تفاوت عظیم به این معناست که مدل‌های اخترشیمیایی که اثر تونل‌زنی کوانتومی را در نظر نگیرند، به طور کامل در پیش‌بینی فراوانی مولکول‌های پیچیده در فضا شکست خواهند خورد. بنابراین، می‌توان نتیجه گرفت که کارخانه‌های مولکولی کیهان، ماشین‌هایی اساسا کوانتومی هستند.

۳-۵. پیامدهای یافته‌ها برای اخترشیمی و پیدایش حیات

1. این یافته که تونل‌زنی کوانتومی بر شیمی کیهان سرد غلبه دارد، دو پیامد عمیق و مهم برای علوم دیگر دارد :انقلابی در مدل‌های اخترشیمیایی :نتایج ما نشان می‌دهد که هر مدل اخترشیمیایی که صرفا بر پایه‌ی شیمی کلاسیک و معادله‌ی آرنیوس بنا شده باشد، در توصیف محیط‌های سرد مانند ابرهای میان‌ستاره‌ای، کاملا ناقص و اشتباه است. برای پیش‌بینی صحیح فراوانی مولکول‌های آلی در این نواحی، در نظر گرفتن اثرات کوانتومی و تونل‌زنی ضروری است. این کار، دقت مدل‌های مربوط به تکامل شیمیایی کهکشان را به شدت افزایش می‌دهد.
2. گسترش مرزهای پیدایش حیات : مهم‌ترین پیامد این پژوهش، به اخترزیست‌شناسی و داستان پیدایش حیات مربوط می‌شود. یافته‌های ما نشان می‌دهد که "آجرهای" اولیه حیات (مولکول‌های آلی پیچیده) نیازی به محیط‌های گرم و پرانرژی برای شکل‌گیری ندارند. آن‌ها می‌توانند در سردترین و تاریک‌ترین زایشگاه‌های ستاره‌ای در سراسر کیهان تولید شوند.

این یعنی مواد اولیه حیات، احتمالاً بسیار رایج‌تر از آن چیزی هستند که قبلا تصور می‌شد. این مولکول‌ها می‌توانند از طریق دنباله‌دارها و سیارک‌ها به سیارات جوان و تازه متولد شده منتقل شده و فرآیند پیدایش حیات را در آنجا "بیمه" یا تسریع کنند. به عبارت دیگر، قوانین کوانتوم تضمین می‌کنند که بذر حیات، در سراسر کیهان پراکنده باشد.

فصل ۶: بحث و نتیجه‌گیری

۶-۱ .جمع‌بندی نهایی

این پژوهش با یک معمای اخترشیمیایی آغاز شد: چگونه مولکول‌های آلی پیچیده در سرمای نزدیک به صفر مطلق ابرهای میان‌ستاره‌ای شکل می‌گیرند؟ ما نشان دادیم که شیمی کلاسیک، به دلیل وجود سدهای انرژی، پاسخی برای این پرسش ندارد.

راه‌حل در مکانیک کوانتومی نهفته بود. با مرور مبانی نظری، ما تونل‌زنی کوانتومی را به عنوان مکانیسم کلیدی معرفی کردیم. سپس، با طراحی یک شبیه‌سازی عددی در پایتون، به صورت کمی ثابت کردیم که این پدیده تا چه حد قدرتمند است. نتایج اصلی ما، که در نمودار مقایسه‌ای (شکل ۱-۵) خلاصه شده است، به وضوح نشان می‌دهد که در دماهای پایین، نرخ واکنش کلاسیک به صفر میل می‌کند، در حالی که نرخ واکنش کوانتومی ثابت و قابل توجه باقی می‌ماند. این یافته، غلبه‌ی کامل قوانین کوانتوم را در این محیط‌ها اثبات می‌کند.

۶-۲ .محدودیت‌های مدل و پژوهش‌های آینده

مدل ما، با وجود موفقیت در نمایش پدیده‌ی اصلی، با چند فرض ساده‌کننده همراه بود که راه را برای پژوهش‌های آینده باز می‌کند:

- سد پتانسیل ساده‌شده: ما از یک مدل ریاضی تک‌بعدی (پتانسیل اکارت) برای سد انرژی استفاده کردیم. مدل‌های آینده می‌توانند از پروفایل‌های انرژی چندبعدی و دقیق‌تر که از محاسبات شیمی کوانتومی به دست آمده‌اند، استفاده کنند.
- تمرکز بر یک واکنش: ما تنها یک واکنش نمونه را بررسی کردیم. پژوهش‌های آتی می‌توانند این تحلیل را به شبکه‌های واکنش پیچیده‌تر گسترش دهند.
- تقریب WKB :تقریب WKB یک روش قدرتمند است، اما روش‌های دقیق‌تری برای حل عددی معادله شرودینگر وجود دارد که می‌تواند دقت نتایج را افزایش دهد.

۶-۳ .نتیجه‌گیری: کیهان به مثابه یک ماشین کوانتومی

این پژوهش نشان داد که برای درک برخی از اساسی‌ترین فرآیندهای کیهان، مانند شکل‌گیری آجرهای اولیه حیات، باید از شهود کلاسیک خود فراتر رویم. کارخانه‌های مولکولی سرد در اعماق فضا، بر پایه‌ی قوانین عجیب و غیرشهودی کوانتوم کار می‌کنند. تونل‌زنی، که زمانی یک کنجکاوی نظری بود، امروز به عنوان موتور اصلی شیمی پیشازیستی در بخش بزرگی از کیهان شناخته می‌شود. این یافته، دیدگاه ما را نسبت به جهان تغییر می‌دهد: کیهان تنها مجموعه‌ای از سیارات و ستارگان نیست، بلکه یک ماشین کوانتومی غول‌پیکر است که در آن، احتمالات و امواج، راه را برای پیدایش پیچیدگی و در نهایت، حیات، هموار می‌کنند.

منابع

1. Griffiths, D. J., & Schroeter, D. F. (2018). Introduction to Quantum Mechanics (3rd ed.). Cambridge University Press.

2. Herbst, E., & van Dishoeck, E. F. (2009). Complex Organic Interstellar Molecules. Annual Review of Astronomy and Astrophysics, 47, 427–480.

3. Tielens, A. G. G. M. (2005). The Physics and Chemistry of the Interstellar Medium. Cambridge University Press.

4. Woon, D. E. (2002). The barrier to the H + CO → HCO reaction in the gas phase and on a water ice surface. The Astrophysical Journal, 571(2), L177.

5. Atkins, P., & de Paula, J. (2014). Atkins' Physical Chemistry (10th ed.). Oxford University Press.

6. Google Gemini.

پیوست ها

1. محاسبات احتمال تونل‌زنی.

```
import numpy as np
from scipy.integrate import quad
from scipy.optimize import fsolve

hbar = 1.0
m = 1.0
V0 = 10.0
L = 1.0

def eckart_potential(x, V0, L):
    return V0 / np.cosh(x / L)**2
def calculate_tunneling_probability(E, V0, L):
    if E >= V0:
        return 1.0
    x2 = L * np.arccosh(np.sqrt(V0 / E))
    x1 = -x2
    def wkb_integrand(x):
        return np.sqrt(2 * m * (eckart_potential(x, V0, L) - E))
    integral_value, _ = quad(wkb_integrand, x1, x2)
    T = np.exp(-2 * integral_value / hbar)
    return T

particle_energy = 5.0
probability = calculate_tunneling_probability(particle_energy, V0, L)

print(f"Barrier height: {V0}")
print(f"particle's energy': {particle_energy}")
print(f"probability of tunneling (T): {probability:.6f}")

particle_energy_low = 1.0
probability_low = calculate_tunneling_probability(particle_energy_low, V0, L)
print("\n--- less Energy ---")
print(f"particle's energy: {particle_energy_low}")
print(f"probability of tunneling (T): {probability_low:.6f}")
```

2. محاسبات نرخ واکنش کلاسیک.

```
import numpy as np
kB = 8.617e-5
A = 1e13
Ea = 10.0

def calculate_classical_rate(T):
    if T == 0:
        return 0.0
    return A * np.exp(-Ea / (kB * T))
temp_room = 300
rate_room = calculate_classical_rate(temp_room)
print(f"Classic reaction rate at room temp ({temp_room} K): {rate_room:.2e}")
temp_interstellar = 10

rate_interstellar = calculate_classical_rate(temp_interstellar)
print(f"Classic reaction rate at interstellar cloud temp({10} K):
{rate_interstellar:.2e}")
```

3. نمودار مقایسه بین نرخ کلاسیکی و کوانتومی.

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from scipy.integrate import quad

hbar = 1.0
m = 1.0
V0 = 10.0
L = 1.0
kB = 8.617e-5
A = 1e13

def eckart_potential(x, V0, L):
    return V0 / np.cosh(x / L)**2

def calculate_tunneling_probability(E, V0, L):
    if E >= V0 or E <= 0: return 1.0 if E >= V0 else 0.0
    try:
        x2 = L * np.arccosh(np.sqrt(V0 / E))
    except (ValueError, ZeroDivisionError):
        return 0.0
```

```
    x1 = -x2
    def wkb_integrand(x):
        return np.sqrt(2 * m * (eckart_potential(x, V0, L) - E))
    integral_value, _ = quad(wkb_integrand, x1, x2)
    T = np.exp(-2 * integral_value / hbar)
    return T

def calculate_classical_rate(T, Ea):
    if T == 0: return 0.0
    return A * np.exp(-Ea / (kB * T))
temperatures = np.linspace(10, 300, 200)
classical_rates = []
quantum_rates = []

for T in temperatures:
    k_classical = calculate_classical_rate(T, Ea=V0)
    classical_rates.append(k_classical)
    tunneling_prob = calculate_tunneling_probability(E=1.0, V0=V0, L=L)
    k_quantum = A * tunneling_prob
    quantum_rates.append(k_quantum)

plt.figure(figsize=(10, 6))
plt.semilogy(temperatures, classical_rates, label='Classical Rate (Arrhenius)',
color='red', linestyle='--')
plt.semilogy(temperatures, quantum_rates, label='Quantum Rate (Tunneling)',
color='blue', linewidth=2)

plt.xlabel('Temperature (K)')
plt.ylabel('Reaction Rate (log scale)')
plt.title('Quantum Tunneling vs. Classical Reaction Rate')
plt.legend()
plt.grid(True, which="both", ls="-")
plt.axvline(x=50, color='gray', linestyle=':', label='Crossover Temp.')
plt.show()
```