УДК 530.145: 535.14

ПОДХОДЫ К РЕШЕНИЮ ЗАДАЧ ПО КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ
1. СТАЦИОНАРНОЕ УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА

Анатолий Анатольевич Аникьев[1]
доктор физико-математических наук, профессор
aaanikiev@mail.ru
Эмилия Николаевна Аникьева[2]
старший преподаватель
korol_0909@mail.ru
[1]Московский государственный технический университет
им. Н.Э. Баумана
г. Москва, Россия
[2]Мичуринский государственный аграрный университет
г. Мичуринск, Россия

Аннотация. Рассмотрены подходы к расчету волновых функций и уровней энергии волновых пакетов, моделирующих квантовые частицы. Внимание обращено на проблему выбора новых переменных для корректного учета граничных условий при решении стационарных уравнений Шредингера, описывающих пространственное распределение волновой функции микрочастицы в поле потенциалов различной формы. Получены волновые функции, коэффициенты отражения от барьера и прохождения микрочастиц через потенциальный барьер.

Ключевые слова: волновой пакет, уравнение Шредингера, потенциальный барьер, уравнение Гаусса.

1. Введение

Если посмотреть на название статьи и название университета, в котором выходит журнал с данной статьей, то возникает вполне понятный вопрос: где сельское хозяйство, а где квантовая механика? Ответить на этот вопрос тем не менее легко –основной способ преобразования энергии солнечного излучения в органические вещества в растительном мире - фотосинтез, природу которого и способы переноса энергии без потерь между биомолекулами невозможно было бы понять без знания квантовой механики и квантовой химии [1]. Кроме того, практическое применение основных положений молекулярной биологии, изучение процессов метаболизма у растений в условиях экстремальных в сравнении с земными для астробиологов и агробиологов, с целью возможного освоения других планет путем создания растительных организмов, использующих отличный от земного метаболизм, например, на основе метана, требует очень хорошей подготовки в области квантовой химии и квантовой микробиологии. Именно поэтому в данной работе обращается внимание на основные методы решения задач квантовой механики для студентов сельскохозяйственных вузов, изучающих квантовую механику в рамках общего курса физики, а также магистрантов, решающих использовать физические методы в изучении условий адаптации растений в экстремальных условиях глобального изменения климата на планете, а также поиск условий возникновения жизни не обязательно на основе углерода [2].

В настоящей работе проводится рассмотрение движения микрочастиц в различного вида внешних потенциалах на основе уравнения Шредингера. В первой части цикла статей рассматриваются методы решения стационарного уравнения Шредингера, получение вида волновой функции микрочастицы, плотности вероятности распространения и потока вероятности.

2. Уравнение движения волнового пакета в квантовой механике.

Известно [3, 4], что эволюция во времени локализованного в пространстве волнового пакета может быть описана дифференциальным уравнением параболического типа, по аналогии с описанием явлений теплопроводности и диффузии при учете соответствующих начальных и граничных условий. Двойственная природа микрочастицы, согласно гипотезе де Бройля позволяет в принципе сопоставить ей волну и описать её эволюцию в пространстве и времени с помощью обычных классических уравнений переноса. Однако существование дискретных энергетических уровней атома, обнаруженное экспериментально заставило пересмотреть классический подход к описанию такой эволюции и вынудило Э. Шредингера предложить операторную форму уравнения переноса для волновой функции микрочастицы. В этом случае задача нахождения волновой функции микрочастицы и энергии системы сводится к решению задачи на собственные функции и собственные значения, т.е. решение операторного уравнения, в которое входит параметр квантования. В таком уравнении гамильтониан системы уже является оператором, записанным через оператор импульса и оператор координаты:

$$i\hbar \cdot \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \Delta\psi + U(x,y,z)\cdot\psi \qquad (1)$$

Это уравнение записано для частицы массой m во внешнем поле $U(x,y,z)$. Здесь кинетическая энергия частицы $\frac{\vec{p}^{\,2}}{2m}$ записана через оператор импульса $\vec{p} = -i\hbar\vec{\nabla}$. Рассмотрим одномерный вариант уравнения Шредингера, в котором потенциал зависит только от одной переменной z. Если внешний потенциал зависит только от одной переменной, то мы можем искать решение уравнения (1) в виде произведения функций, зависящих только от x и y и только от z, например в виде:

$$\psi(x,y,z,t) = w(x,y)\cdot\varphi(z,t) \equiv e^{k_x x + k_y y}\cdot\varphi(z,t)\,. \qquad (2)$$

Тогда, подставляя это решение в уравнение (1) получим

$$i\hbar \cdot \frac{\partial \varphi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\varphi}{\partial z^2} + \frac{\hbar^2}{2m}\cdot(k_x^2 + k_y^2)\cdot\varphi + U(z,t)\varphi \qquad (3)$$

Если теперь мы обозначим энергию плоских волн, распространяющихся перпендикулярно оси z как $\hbar\omega_0 = \frac{\hbar^2}{2m}\cdot(k_x^2 + k_y^2)$ и введем новую волновую функцию в виде

$$\varphi(z,t) = e^{-i\omega_0 t}\cdot u(z,t), \tag{4}$$

То получим одномерное волновое уравнение Шредингера в более простом для дальнейшего рассмотрения виде

$$i\hbar\frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 u}{\partial z^2} + U(z,t)u. \tag{5}$$

В зависимости от вида потенциала, уравнение (5) может быть решено для получения вида собственных волновых функций и собственных значений как задача на собственные значения оператора энергии. Если потенциал в (5) не зависит от времени, уравнение (5) допускает разделение переменных. Представим функцию *u(z,t)* в виде

$$u(z,t) = w(z)\cdot\upsilon(t) \tag{6}$$

Тогда из (5) находим

$$i\hbar\frac{\dot{\upsilon}}{\upsilon} = \frac{1}{w}\cdot\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot w'' + U(z)\cdot w\right] \tag{7}$$

Поскольку левая часть зависит только от времени, а правая – от координаты можно приравнять их одному и тому же постоянному значению Е:

$$i\hbar\dot{\upsilon} = E\upsilon$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\Delta + U(z)\right]\cdot w(z) = Ew(z) \tag{8}$$

Первое уравнение легко интегрируется с результатом

$$\upsilon(t) = C\cdot e^{-i\cdot\frac{E}{\hbar}\cdot t} \tag{9}$$

Где С – произвольная постоянная.

Второе уравнение можно переписать в виде:

$$\frac{d^2w}{dz^2}-\frac{2m}{\hbar^2}\cdot\left[U(z)-E\right]\cdot w=0 \qquad (10)$$

Необходимо пояснить смысл постоянной разделения E в уравнениях (8). Если система не находится в переменном внешнем поле, то гамильтониан системы (сумма кинетической и потенциальной энергии) не зависит явно от времени. Энергия системы сохраняется. В соотношении (1) в правой части записан оператор Гамильтона, действующий на волновую функцию. Волновые функции состояний, в которых энергия имеет определенные значения, являются собственными функциями такого оператора Гамильтона, а собственные значения есть значения сохраняющейся энергии: $\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n$

Такие состояния называются стационарными. Поэтому уравнение стационарных состояний может быть записано согласно (1) в виде

$$i\hbar\frac{\partial\psi_n}{\partial t}=\hat{H}\psi_n=E_n\psi_n \qquad (11)$$

Решение этого уравнения можно представить в виде

$$\psi_n(z,t)=e^{-i\cdot\frac{E_n}{\hbar}\cdot t}\cdot\varphi(z) \qquad (12)$$

Сравнивая это решение с решением (9) убеждаемся, что E - кинетическая энергия частицы (пакета) и её собственные значения могут быть записаны в виде $E_n=\hbar\cdot\omega_n$, а (12) или (9) описывает зависимость волновых функций стационарных состояний от времени.

Если волновой пакет не находится под действием внешних сил с потенциалом $U(z,t)$, связывающим пространственную и временную переменную, то уравнение (5) описывает движение свободного пакета, энергия и импульс которого могут принимать любые значения, так как эти величины коммутируют между собой . Из (5) при малых $U(z,t)$ получим уравнение

$$i\hbar\frac{\partial u}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \qquad (13)$$

В котором переменные разделяются, если представить функцию

$$u(z,t) = w(z)\cdot\upsilon(t) \qquad (14)$$

Тогда решением уравнения по переменной времени будет функция (9), а второе уравнение будет иметь вид

$$\frac{d^2w}{dz^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\cdot w = 0 \qquad (15)$$

Поскольку энергия E действительная величина и может быть записана для частицы в виде $E = \hbar\cdot\omega$, то и коэффициент при волновой функции w(z) – действительная величина, равная

$$\frac{2m\cdot\omega}{\hbar} = k^2 \qquad (16)$$

Общее решение уравнения (15) можно записать в виде

$$w(z) = A\cdot e^{ik\cdot z} + B\cdot e^{-ik\cdot z} \qquad (17)$$

Тогда решение уравнения (13) запишется в виде

$$u(z,t) = A\cdot e^{i(k\cdot z-\omega\cdot t)} + B\cdot e^{-i(k\cdot z-\omega\cdot t)} \qquad (18)$$

Это решение в своей основе предполагает наличие двух пакетов волн (или микрочастиц), распространяющихся в противоположных направлениях с групповой скоростью, которая может быть найдена из (16)

$$\upsilon_g = \frac{\partial\omega}{\partial k} = \frac{\hbar k}{m} = \frac{p}{m} \qquad (19)$$

Чтобы в какой-то степени подобраться к физическому смыслу волновой функции, найдем плотность вероятности пространственной части волновой функции (17) используя соотношение:

$$\rho(z,t) = \left|\psi(z,t)\right|^2 \qquad (20)$$

$$\rho(z) = \left|A\right|^2 + \left|B\right|^2 + 2\cdot A\cdot B\cdot \mathrm{Cos}(2k\cdot z) \qquad (21)$$

Плотность (21) показывает существование в пространстве плотностей вероятности двух волн, распространяющихся в противоположных направлениях и интерференцию между ними (последнее слагаемое).

Чтобы показать существование двух потоков плотности вероятности найдем выражение для потока плотности вероятности [5]:

$$\vec{s} = -i\frac{\hbar}{2m}\cdot(\psi^{*}\vec{\nabla}\psi - \psi\vec{\nabla}\psi^{*}) \qquad (22)$$

В одномерном (нашем) случае соотношение (22) принимает форму

$$s = -i\frac{\hbar}{2m}\cdot\left(\psi^{*}\cdot\frac{\partial\psi}{\partial z} - \psi\cdot\frac{\partial\psi^{*}}{\partial z}\right) \qquad (23)$$

Подставляя в (23) общее решение (17) находим для потока

$$s = \frac{\hbar k}{m}\cdot(|A|^{2} - |B|^{2}) \qquad (24)$$

Расчет потока дополняет смысл волновой функции: две волны с различными амплитудами соответствуют двум противоположно направленным потокам; их интенсивности пропорциональны нормировочным постоянным. Нормировочные постоянные в выражении (24) определяются из начальных и граничных условий решаемой задачи.

3. Примеры движения частицы в потенциале.

В дальнейшем, примем правую систему координат, в которой ось z направлена горизонтально и вдоль этой оси происходит движение. Оси x и y направлены соответственно в плоскости листа $(x \perp z)$ и к зрителю.

Пример 1

Предположим, что излучение заключено между двумя зеркалами со 100% отражением, или в качестве аналога, микрочастица находится между двумя непроницаемыми стенками с координатами $z = -a$ и $z = a$. Вычислим собственные функции и собственные значения состояний этой частицы.

Стационарные состояния описываются волновой функцией (12). Пространственная часть волновой функции может быть найдена из уравнения Шредингера (10) при U(z,t) = 0 или (15). Решением этого уравнения будет функция вида (17), теперь, однако нужно учитывать граничные условия и условие нормировки

$$u(a)=0,\ u(-a)=0,$$

$$\int_{-a}^{a}\left|u(z)\right|^2 dz=1 \qquad (25)$$

Пока будем считать фазовый множитель произвольным. Подставляя в первые два условия решение (17) получаем уравнения для определения A и B:

$$\begin{aligned} A\cdot e^{ika}+B\cdot e^{-ika}&=0\\ A\cdot e^{-ika}+B\cdot e^{ika}&=0 \end{aligned} \qquad (26)$$

Условие нетривиальной разрешимости этой системы – равенство нулю определителя при неизвестных *A* и *B*, дает нам собственные значения

$$\mathrm{Sin}(2k\cdot a)=0,\rightarrow k_n=\frac{\pi\cdot n}{2a},\ \ n=\pm1,\pm2,\pm3... \qquad (27)$$

($n = 0$ выпадает из-за условия нормировки).

Учитывая определение (16) для собственных значений энергии получим

$$E_n=\frac{\hbar^2k_n^2}{2m}=\frac{\hbar^2\pi^2}{8m\cdot a^2}\cdot n^2 \qquad (28)$$

Подстановка значений волнового вектора из (27) в любое уравнение (26) дает для констант соотношение

$$B=(-1)^{n+1}\cdot A$$

Для нечетных n, $B = A$ и из условия нормировки получим $A = B = (1/2)a^{-1/2}$. Тогда нормированные волновые функции будут иметь вид (обозначим +)

$$u(z)^+{}_n=\frac{1}{\sqrt{a}}\cdot\cos\left(\frac{\pi nz}{2a}\right),\ \ n=\pm1,\pm3,\pm5... \qquad (29)$$

Для четных n, $B = - A$ и мы получим (обозначим их знаком -)

$$u(z)_n^-=\frac{1}{\sqrt{a}}\cdot\sin\left(\frac{\pi nz}{2a}\right),\quad n=\pm2,\pm4,\pm6... \qquad (30)$$

На рисунке 1 показаны собственные волновые функции микрочастицы, запертой между непроницаемыми стенками при четырех значениях n.

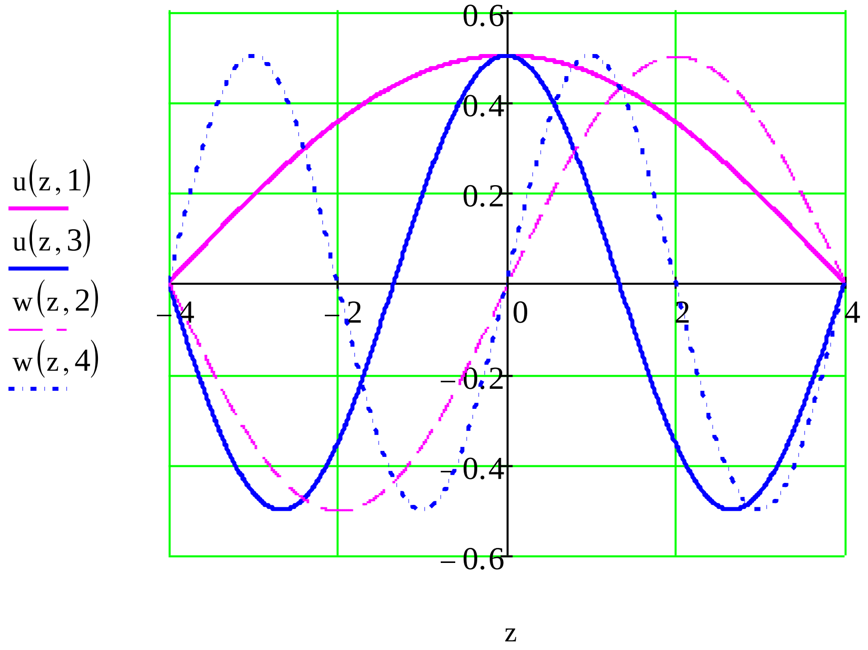

Рисунок 1- Вид четных (сплошные линии) и нечетных (пунктир) волновых функций для частицы в области с непроницаемыми стенками при двух нечетных и двух четных значениях целых чисел, нумерующих уровни энергии системы

Пример 2.

Рассмотрим движение микрочастицы в однородном поле в виде ступеньки потенциала, значение которого плавно возрастает от величины $V(z) = 0$ при $z \to -\infty$ до величины V_0 при $z \to \infty$ (рис. 2).

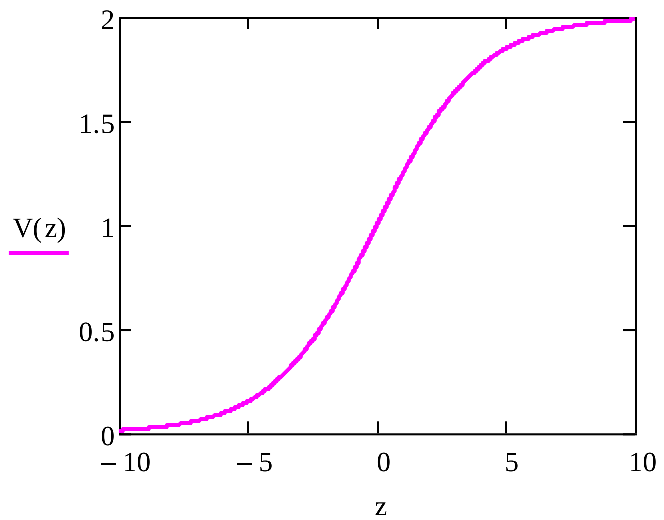

Рисунок 2 - Потенциал в виде ступеньки $V(z) = \frac{V_0}{2} \cdot (1 + th\left(\frac{z}{2a}\right))$ с параметрами $a = 2$, $V_0 = 1$

С точки зрения классической механики, частица с энергией E < V_0 отразится от стенки и начнет двигаться в обратном направлении. Если же энергия частицы больше потенциального барьера (E > V_0) частица продолжит движение в прежнем направлении, но уже с уменьшенной скоростью. В квантовой механике возможна ситуация, когда частица в первом случае будет иметь отличную от нуля вероятность прохождения через барьер, а во втором случае – отразиться от потенциальной стенки. Найдем коэффициент отражения для первого случая и коэффициент прохождения для второго.

Уравнение Шредингера для рассматриваемой задачи имеет вид:

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\cdot(E-V(z))\psi=0 \qquad (31)$$

Для случая $E>V_0$, спектр собственных значений энергии частицы непрерывен а решение уравнения (31) будет иметь при $z\to-\infty$ асимптотический вид

$$\psi(z)=A\cdot e^{ik_1\cdot z}+B\cdot e^{-ik_1\cdot z} \qquad (32)$$

Здесь первый член соответствует падающей на стенку слева частице с волновым вектором $k_1=\frac{1}{\hbar}\cdot\sqrt{2m\cdot E}$ и энергией *E*, а второй член – отраженную от стенки частицу, причем плотность потока вероятности в падающей волне будет $\rho_A\approx k_1\cdot|A|^2$, а плотность потока вероятности в отраженной волне - $\rho_B\approx k_1\cdot|B|^2$. При $z\to\infty$ волновая функция должна описывать частицу прошедшую над стенкой и движущуюся вправо:

$\psi(z)\approx C\cdot e^{ik_2\cdot z}$ с волновым вектором $k_2=\frac{1}{\hbar}\cdot\sqrt{2m\cdot(E-V_0)}$ и плотностью вероятности в прошедшей волне пропорциональной k_2 : $\rho_C\approx k_2\cdot|C|^2$. Введем «коэффициент прохождения» частицы как отношение плотности потока прошедшей волны к плотности потока падающей:

$$T = \frac{k_2 \cdot |C|^2}{k_1 \cdot |A|^2} \qquad (33)$$

Тогда «коэффициент отражения» определится как

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = 1 - \frac{k_2 \cdot |C|^2}{k_1 \cdot |A|^2} \qquad (34)$$

В случае $E < V_0$ волновая функция при $z \to \infty$ имеет асимптотический вид

$$\psi(z) \approx C \cdot e^{-\chi \cdot z}, \quad \chi = \frac{1}{\hbar} \cdot \sqrt{2m \cdot (V_0 - E)} \qquad (35)$$

Будем предполагать волновую функцию (32) нормированной таким образом, чтобы коэффициент при первом члене был равен единице (A = 1). Тогда коэффициенты прохождения и отражения будут определяться через C и B. Решаем уравнение Шредингера с потенциалом (рис. 2) V(z) в виде

$$\frac{d^2\psi}{dz^2} + \left[k^2 - \frac{2m}{\hbar^2} \cdot V(z)\right]\psi = 0, \text{ где } V(z) = \frac{V_0}{2} \cdot \left(1 + th\left(\frac{z}{2a}\right)\right) \qquad (36)$$

Введем вместо z новую переменную

$$y = (1 + e^{-z/a})^{-1} \qquad (37)$$

Тогда, учитывая, что

$$\frac{d}{dz} = \frac{1}{a} \cdot y \cdot (1 - y) \frac{d}{dy}$$

$$1 + th\left(\frac{z}{2a}\right) = 2y \qquad (38)$$

Получим вместо (36) уравнение вида

$$y(1-y) \cdot \frac{d^2\psi}{dy^2} + (1 - 2y) \cdot \frac{d\psi}{dy} + \left[\frac{\kappa^2}{y(1-y)} - \frac{\lambda^2}{1-y}\right]\psi = 0 \qquad (39)$$

Здесь мы ввели обозначения

$$\kappa^2 = k^2 \cdot a^2 = \frac{2m \cdot a^2}{\hbar^2} E, \quad \lambda^2 = \frac{2m \cdot a^2}{\hbar^2} \cdot V_0$$

(40)

Полученное дифференциальное уравнение (39) имеет три особые точки y = 0, 1, ∞. Известно [3. 4], что решение такого уравнения выражается через гипергеометрическую функцию. Используя подстановку

$$\psi(y) = y^{\mu} \cdot (1-y)^{\nu} \cdot f(y),$$

(41)

и вводя обозначения

$$\mu^2 = -\kappa^2, \quad \nu^2 = \lambda^2 - \kappa^2,$$

(42)

приводим уравнение (39) после ряда простых алгебраических преобразований к стандартному гипергеометрическому уравнению Гаусса

$$y(1-y) f'' + [(2\mu+1) - (2\mu+2\nu+2) \cdot y] f' -$$
$$-(\mu+\nu) \cdot (\mu+\nu+1) f = 0$$

(43)

Мы решаем задачу нахождения волновых функций для частицы (излучения),

падающей на область с потенциалом (36). Уравнение (36) решается при граничных условиях (32) – (35). Частным решением уравнения (43) будет функция

$$f(y) = C \cdot {}_2F_1(\mu+\nu, \mu+\nu+1, 2\mu+1; y)$$

(44)

Здесь индексы слева и справа от буквы F указывают на число параметров в числителе и знаменателе ряда гипергеометрической функции [1, 6].

В пределе $z \to -\infty$, согласно нашей подстановке () $y \approx e^{z/a} \to 0$ и по свойству гипергеометрической функции $f(0) = C$. Тогда решение (41) становится

$$\psi(y) \to C \cdot y^{\mu} \approx C \cdot e^{ikz}$$

(45)

Другими словами, мы получили решение, имеющее только падающую на стенку волну, в то время как в постановке задачи должна быть и отраженная от стенки волна.

При $z \to \infty$, $y \to 1$, а $1 - y \approx e^{-z/a} \to 0$. В таком случае мы воспользуемся преобразованием гипергеометрической функции от аргумента *y* к аргументу *1-y* [см 1, дополнение d]:

$$\begin{aligned} &{}_2F_1(\mu+\nu, \mu+\nu+1, 2\mu+1; y) = \\ &\frac{\Gamma(2\mu+1)\cdot\Gamma(-2\nu)}{\Gamma(\mu-\nu+1)\cdot\Gamma(\mu-\nu)} \cdot {}_2F_1(\mu+\nu, \mu+\nu+1, 2\nu+1; 1-y) + \\ &(1-y)^{-2\nu} \cdot \frac{\Gamma(2\mu+1)\cdot\Gamma(2\nu)}{\Gamma(\mu+\nu)\cdot\Gamma(\mu+\nu+1)} \cdot {}_2F_1(\mu-\nu+1, \mu-\nu, -2\nu+1; 1-y) \end{aligned}$$

(46)

Учитывая выражения (41) и (44), получим для волновой функции

$$\psi(z) \to C \cdot \left[\frac{\Gamma(2\mu+1)\cdot\Gamma(-2\nu)}{\Gamma(\mu-\nu+1)\cdot\Gamma(\mu-\nu)} \cdot e^{-\nu\cdot z/a} + \frac{\Gamma(2\mu+1)\cdot\Gamma(2\nu)}{\Gamma(\mu+\nu)\cdot\Gamma(\mu+\nu+1)} \cdot e^{\nu\cdot z/a} \right]$$

(47)

В полученном результате можно выделить две возможности:

1. $E < V_0$, $\mu = i\kappa$ - мнимое число и ν - действительное число больше нуля. В этом случае первый член описывает экспоненциально убывающую волновую функцию за барьером, как и должно быть, а второй член – неограниченно возрастающую часть волновой функции, физически не имеющую смысла.

2. $E > V_0$, $\mu = i\kappa$ и $\nu = -i\sigma$ - мнимые величины. В этом случае первый член описывает волну, прошедшую над барьером, а второй – волну, отраженную от барьера, что является невозможным для области $z \to \infty$. Возникающие противоречия связаны с выбором новой переменной в виде (37). Выбор переменной в виде $y = (1 + e^{z/a})^{-1}$ разрешает указанные противоречия.

4. Заключение

На примере анализа ряда примеров взаимодействия волновых пакетов с потенциальными барьерами показано, что волновые пакеты могут рассматриваться как частицы при взаимодействии с потенциальными барьерами различной формы. Важным обстоятельством, на которое хотелось бы обратить внимание является выбор новой переменной в стационарном уравнении Шредингера в зависимости от вида и формы потенциала, в котором находится частица. В зависимости от вида потенциала мы имеем различные типы дифференциальных уравнений, решение которых существенно зависит от условий на границах и нормировки волновой функции.

Список литературы:

1. Рис Э., Стернберг М. Введение в молекулярную биологию. М.: Мир. 2002. 137 с.
2. Албертс Б., Брей Д., Льюис Дж. Молекулярная биология клетки. В 3-х т. М.: Мир. 1994.
3. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. 3-е изд., испр. М. Наука. Гл. ред. Физ.-мат. лит. 1973. 752 с.
4. Давыдов А.С. Квантовая механика. 2-е изд., испр. М. Наука. Гл. ред. Физ.-мат. лит. 1973. 698 с.
5. Л. Шифф. Квантовая механика. 2-е изд. М. ИЛ. 1959. 473 с.
6. Бейтмен Г., Эрдейи А. Высшие трансцендентные функции. Т. 1. М. Изд-во «Наука». 1965. стр. 86.

UDC 530.145: 535.14

APPROACHES TO THE TASKS SOLVING IN QUANTUM MECHANICS

1. STATIONARY SCHRÖDINGER EQUATION

Anatoly A. Anikiev[1]

Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor
aaanikiev@mail.ru
Emiliya N. Anikieva[2]
Senior Lecturer
korol_0909@mail.ru
[1]Moscow State Technical University named after N.E. Bauman
Moscow, Russia
[2]Michurinsk State Agrarian University
Michurinsk, Russia

Annotation. Approaches to the calculation of wave functions and energy levels of wave packets simulating quantum particles are considered. Attention is drawn to the problem of choosing new variables to correctly take into account the boundary conditions when solving the stationary Schrödinger equations describing the spatial distribution of the wave function of a microparticle in a field of potentials of various shapes. The wave functions, the coefficients of reflection from the barrier and the passage of microparticles through the potential barrier are obtained.

Keywords: wave packet, Schrödinger equation, potential barrier, Gauss equation.

Статья поступила в редакцию 05.09.2023; одобрена после рецензирования 16.10.2023; принята к публикации 27.10.2023.

The article was submitted 05.09.2023; approved after reviewing 16.10.2023; accepted for publication 27.10.2023.