

## ДИНАМИКА ТУННЕЛИРОВАНИЯ ВОЛНОВОГО ПАКЕТА В МНОГОЯМНОМ ПЕРИОДИЧЕСКОМ ПОТЕНЦИАЛЕ

О. Г. Романов, М. Б. Шундалов

*Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь, shundalov@bsu.by*

Туннелирование через потенциальные барьеры, разделяющие минимумы потенциальной энергии — широко распространенное в молекулярных системах квантово-механическое явление, оказывающее значительное влияние на структуру молекулярных спектров. Туннелирование в периодическом потенциале, типичным проявлением которого является внутреннее вращение в нежестких молекулах, имеет специфическую особенность, связанную с отождествлением граничных точек потенциальной функции. В соответствии с принципами квантовой механики частица, первоначально локализованная в одном из минимумов периодического потенциала, туннелирует в двух направлениях, соответствующих двум возможным направлениям вращения молекулярного фрагмента.

В данной работе исследуется динамика волнового пакета, туннелирующего в  $n$ -кратном ( $n \geq 2$ ) симметричном периодическом потенциале, который моделирует функцию потенциальной энергии внутреннего вращения нежесткой молекулы. Показано, что кратность потенциала обуславливает характер процесса туннелирования. В двукратном ( $n = 2$ ) потенциале волновой пакет, первоначально локализованный в одном из минимумов потенциальной функции, полностью переходит в соседний минимум. В случае трёхкратного ( $n = 3$ ) потенциала волновой пакет, первоначально локализованный в центральном минимуме, симметрично туннелирует в боковые минимумы и возвращается обратно так, что вероятность его обнаружения в центральном минимуме всегда остаётся отличной от нуля. В случае четырёхкратного ( $n = 4$ ) потенциала временная зависимость функции плотности вероятности имеет вид бегущей волны, а форма этого распределения определяется величинами «приведенного» периода (суммарного расщепления состояния) и периода, соответствующего разностной частоте. Для потенциалов большей кратности динамика туннелирования имеет менее систематический характер, что обусловлено наличием большого количества основных, суммарных и разностных частот.