

# Morse-potenciál vizsgálata - projekt

Für Dominik László XKTVBJ, Nagy Sebestyén Csaba E2G4LG, Szabó Vencel HGACP9

Projekt leadásának a dátuma 2023.12.06.



**ELTE**  
EÖTVÖS LORÁND  
TUDOMÁNYEGYETEM

# 1. A Morse-potenciál

A Morse-potenciált Philip M. Morse vezette be empirikus formulaként, mely jó közelítéssel visszaadja egy rezgő és nem forgó kétatomos (diatomic) molekula energia spektrumát.

A potenciál felírható a következő alakban:

$$V(r) = D_e(1 - e^{a(r-r_e)})^2 \quad (1)$$

A fenti kifejezésben  $D_e$ , az energiavölgy mélysége a molekula disszociációs energiájából következik, az  $a$  paraméter a kölcsönhatás távolságát szabja meg,  $r$  az atomok egyensúlyi távolsága,  $r_e$  pedig az egyensúlyi állapothoz tartozó kötéstávolság. Mivel ez egy viszonylag egyszerű modell, mindössze három szabad paraméter szabja meg, így a gyakorlatban inkább csak fejlettebb alakjait használják.

A molekulák rezgésének energiaszintjei

$$E_n = \left( \left( n + \frac{1}{2} \right) - \chi \left( n + \frac{1}{2} \right)^2 \right) \hbar \omega_0 \quad (2)$$

, ahol  $n \in \{0, 1, \dots, n_{max}\}$ .

Effektív  $D_e$ ,  $r_e$  és  $a$  paraméterekkel egy forgó molekula viselkedése is közelíthető.

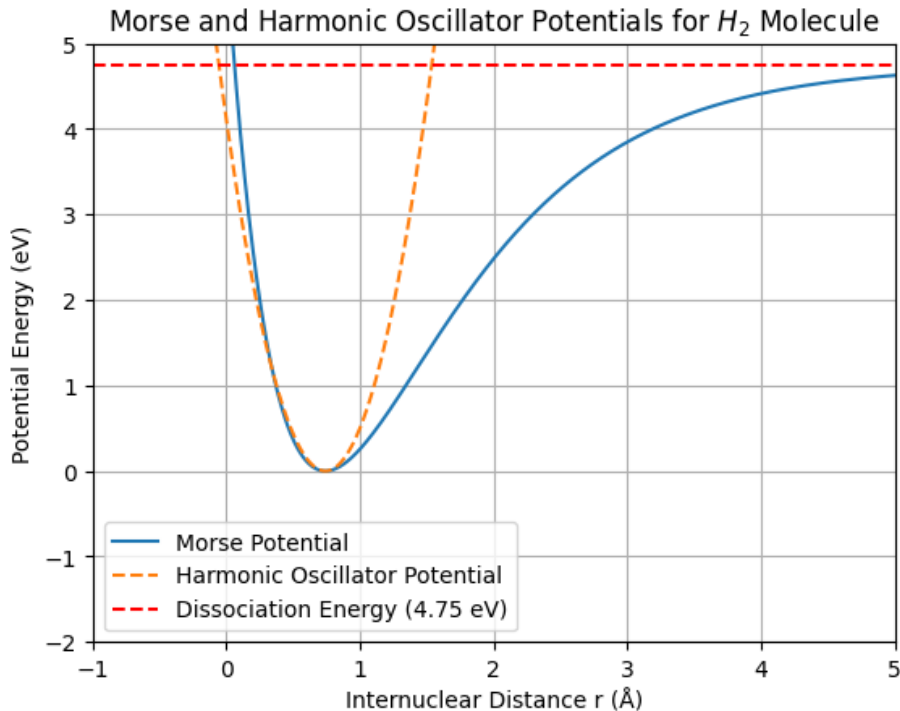
A Morse-potenciál fontos szerepet játszik atomok és molekulák szilárd felületen történő adszorpciójának leírásában, köbös rácsszerkezetű fémek deformációjának elméletében, valamint a molekuláris spektroszkópia területén, akár összetettebb, többatomos molekulák modellezésében is.

A Morse-potenciál gyakran használt alternatív alakja:

$$V(r) = D_e \left( e^{-2\alpha(r-r_e)} - 2e^{-\alpha(r-r_e)} \right) \quad (3)$$

, illetve a 1-es és 3-as egyenletekben szereplő  $r - r_e$  nyugalmi helyzettől vett távolságot sokszor szokták  $r$ -el jelölni.

## 2. A Morse-potenciál numerikus szimulációja $H_2$ molekulára



A Morse- és a harmonikus potenciál szimulált értékei  $H_2$  molekulára

. A Morse-potenciál pontosabban írja le a diatomikus molekulák, mint az  $H_2$ , valós potenciális energia görbületét, különösen nagyobb elmozdulások esetén az egyensúlyi kötési hosszától, míg a harmonikus oszcillátor egy egyszerűbb közelítés, amely az egyensúlyi kötési hossz közelében érvényes. A kód ezeket a potenciálokat számítja ki a megadott internukleáris távolságok tartományában, majd ábrázolja őket, kiemelve a  $H_2$  molekula disszociációs energiáját egy vízszintes vonallal.

A potenciál szimulációja esetén az egyes potenciálokhoz a következő értékeket használtam:

```
# Molekulakonstnsok (tipikus ertekek)
De = 4.75 # Disszociacios energia, eV
a = 1.02 # Szelessegi parameter (1/angstrom)
re = 0.74 # Egyensulyi koteshossz angstrom
k = 15 # Rugoallando eV/A**2

# A lehetsleges r ertekek
r = np.linspace(0, 5, 2000) # angstrom
r2 = np.linspace(-1, 3, 1000)
```

### 3. A Schrödinger egyenlet megoldása

Két  $M_1$  és  $M_2$  tömegű test kölcsönhatását leíró Schrödinger egyenlet radiális része:

$$\left\{ \frac{-\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r^2} \left[ \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{d}{dr} \right) - l(l+1) \right] + v(r) \right\} R(r) = ER, \quad (4)$$

ahol  $\mu = M_1 M_2 / (M_1 + M_2)$  a két test redukált tömege,  $\hbar$  a redukált planck állandó,  $l$  a rendszer mellékkvantumszáma. A Morse-potenciál esetén  $l = 0$ , valamint a potenciál alakja:

$$v(r) = D[e^{-2a(r-r_0)} - 2e^{-a(r-r_0)}] \quad D, a, r_0 > 0 \quad (5)$$

Ha bevezetjük a  $R(r) = U(r)/r$  és  $\rho = ar$  mennyiségeket, akkor a következő egyenletet kapjuk:

$$\left[ -\frac{1}{2} \frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{\mu}{\hbar^2 a^2} v(\rho) \right] U(\rho) = \frac{\mu E}{\hbar^2 a^2} U(\rho) \quad (6)$$

Ezek után bevezetjük a  $\omega_0 = a\sqrt{2D/\mu}$  frekvenciát, ami az egyensúlyi helyzet ( $r = r_0$ ) kis kitérésekor a rendszer frekvenciája. Az energiát és a  $D$  paramétert ezek után a következő alakokban keressük:

$$D = \Delta \hbar \omega_0 \quad E = \varepsilon \hbar \omega_0 \quad (7)$$

Ezeket beírva a következő egyenletet kapjuk:

$$\left[ -\frac{1}{2} \frac{d^2}{d\rho^2} + 2\Delta^2 V(\rho) \right] U(\rho) = 2\Delta\varepsilon U(\rho) \quad U(0) = 0 \quad \lim_{\rho \rightarrow \infty} U(\rho) = 0 \quad (8)$$

Ahol

$$V(\rho) = e^{-2(\rho-\rho_0)} - 2e^{-(\rho-\rho_0)} \quad \rho_0 = ar_0 \quad (9)$$

Ezek után terjesszük ki az  $\rho$  paramétert a negatív számokra és vezessük be a  $u = e^{-(\rho-\rho_0)}$  paramétert. Az így kapott egyenlet:

$$\left[ -\frac{1}{2} \left( \frac{d^2}{du^2} + \frac{1}{u} \frac{d}{du} - \frac{\nu^2}{u^2} \right) - \frac{Z}{u} \right] U(u) = \lambda U(u) \quad u \in [0, \infty) \quad (10)$$

Ahol

$$\nu^2 = -4\Delta\varepsilon \quad Z = 4\Delta^2 \quad \lambda = -2\Delta^2 \quad (11)$$

A határfeltételek pedig:

$$\lim_{u \rightarrow \infty} U(u) = 0 \quad U(0) = 0 \quad (12)$$

Azonban a 10 nem más mint egy kétdimenziójú Schrödinger-egyenlet a hidrogén atomra, aminek ismertek a megoldásai.

$$\lambda = \frac{2Z^2}{(2\nu + 2n + 1)^2} \quad (13)$$

$$U(u) = Cu^\nu e^{-\sqrt{-2\lambda}u} L_n^{(2\nu)}(2\sqrt{-2\lambda}u) \quad (14)$$

Ahol  $n = 1, 2, 3, \dots$ ,  $L_n^{(2\nu)}$  a Laguerre polinom,  $C$  meg egy normálási konstans. Ha a 13 egyenletből kifejezzük  $\nu$ -t, akkor következő két eredményt kapjuk:

$$\nu^{(1)} = -2\Delta - (n + \frac{1}{2}) \quad \nu^{(2)} = 2\Delta - (n + \frac{1}{2}) \quad (15)$$

Azonban az  $u = 0$  határfeltételt figyelembe véve, csak a  $\nu^{(2)}$  lehetséges, ebből meg kifejezve  $\varepsilon$ -t:

$$\varepsilon = -\Delta + (n + \frac{1}{2}) \left[ 1 - \frac{1}{4\Delta} (n + \frac{1}{2}) \right] \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots, K \quad (16)$$

és

$$K = \left[ \left[ 2\Delta - \frac{1}{2} \right] \right] \quad (17)$$

A Morse-potenciál diszkrét sajátértékei  $-\Delta$  és  $0$  között vannak.  $K + 1$  kötött állapot lehetséges. Amennyiben  $\Delta < \frac{1}{4}$  nem létezik diszkrét sajátérték.

## 4. A Morse-Long range potential

Ez a módosított Morse-potenciált sikeresen használták arra, hogy  $Li_2$ ,  $Be_2$ ,  $HBr$ ,  $HCl$  ... molekulák spektroszkópiái, kémiai, kötési tulajdonságaira a kvantummechanika megteremtésének hajnalán magyarázatot adjanak.

A Morse-/hosszú távú potenciálenergia függvény alakja a következő:

$$V(r) = \mathfrak{D}_e \left( 1 - \frac{u(r)}{u(r_e)} e^{-\beta(r)y_p^{req}(r)} \right)^2 \quad (18)$$

ahol  $\mathfrak{D}_e$  a disszociációs energia,  $r_e$  az egyensúlyi kötéshossz,  $u(r)$  egy hosszú távú kölcsönhatást leíró függvény, és  $\beta(r)$  egy skálázó függvény.

Nagy  $r$  értékekre, a potenciál közelítőleg:

$$V(r) \simeq \mathfrak{D}_e - u(r) + \frac{u(r)^2}{4\mathfrak{D}_e}, \quad (19)$$

így  $u(r)$  a hosszú távú kölcsönhatás elméletileg helyes viselkedését írja le (lásd az alábbi egyenletet).

$$\beta(r)y_p^{ref}(r) \simeq \beta_\infty = \ln \left( \frac{2\mathfrak{D}_e}{u(r_e)} \right), \quad (20)$$

ahol  $\beta_\infty$  egy konstans érték, ami a hosszú távú viselkedést írja le.

A hosszú távú viselkedés elérésének egyik módja, hogy  $\beta(r)$  egy olyan polinom legyen, ami hosszú távon  $\beta_\infty$ -re konvergál:

$$\beta(r) = (1 - y_p^{ref}(r)) \sum_{i=0}^{N_\beta} \beta_i y_q^{ref}(r)^i + y_p^{ref}(r) \beta_\infty, \quad (21)$$

ahol  $N_\beta$  a polinom fokszáma.

A  $y_n^{rx}(r)$  függvény a következőképpen definiálható:

$$y_n^{rx}(r) = \frac{r^n - r_x^n}{r^n + r_x^n}, \quad (22)$$

ahol  $n$  egy 1-nél nagyobb egész szám, amit a hosszú távú potenciál modellje határoz meg.

A hatványkitevőre igaz lesz, hogy:

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \beta(r) = \beta_\infty. \quad (23)$$

## 5. A Morse-oszcillátor Wigner-függvényei

A Wigner-függvény egy kvantummechanikai rendszer fázisterebeli eloszlását írja le, amely lehetővé teszi a kvantumállapotok klasszikus-szerű reprezentációját. A Morze-oszcillátor esetében a Morze-potenciál nem harmonikus, így a hozzá kapcsolódó Wigner-függvények bonyolultabbak és gazdagabb struktúrájúak, mint a harmonikus oszcillátoroké. A Morze-oszcillátor Wigner-függvényei segítenek jobban megérteni a kvantummechanikai rezgési állapotokat, különösen a magasabb energiaszinteken, ahol a nemlineáris hatások szerepet játszanak.

A Wigner függvényeket valószínűségi eloszlások használatával a következő integrál adja meg:

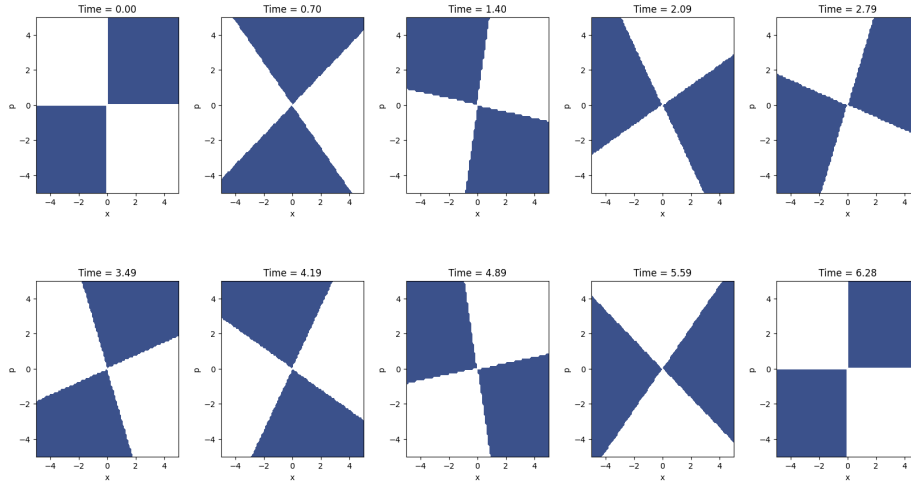
$$W(x, p) = \int e^{-ipy/\hbar} \psi(x + \frac{y}{2}) \psi^*(x - \frac{y}{2}) dy$$

A fenti függvényben a  $\psi$  hullámfüggvényt használva (annak abszolútérték négyzetét képezve) negatív valószínűségeket is kaphatunk (nemklasszikus viselkedés miatt).

A valószínűségek értelmezése a koordináta és impulzustérben a következők szerint történik:

$$P(x) = \int W(x, p) dp = |\psi(x)|^2$$

$$P(p) = \int W(x, p) dx = |\psi(p)|^2$$



Az ábrán egy időben változó kvantumos rendszer állapotának változását látjuk, amit a Wigner-függvénnyel ábrázoltam a fázistérben. A fázistérbeli kontúrálbrán a sötétebb területek nagyobb valószínűséggel felelnek meg a részecske megtalálásának adott helyen és impulzussal egy adott időpillanatban. Az ábrán látható csíkozott mintázatokat "kvantum szőnyegnek" vagy és "kvantum szőnyegmintáknak" is neveznek.

A csíkozott mintázatok az időben történő kvantum interferencia komplex jelenségét mutatják, ami a kvantum állapotok időbeli fejlődésének következménye.

Ezek a mintázatok gyakran időben periodikus viselkedést mutatnak, amit "revivaloknak" vagy "újraéledéseknek" neveznek, amikor a hullámfüggvény időszakosan visszatér eredeti formájához. Ezek a jelenségek a kvantummechanikában fontos szerepet játszanak, és segítenek megérteni, hogyan terjednek és interferálnak a hullámcsomagok az idő múlásával.

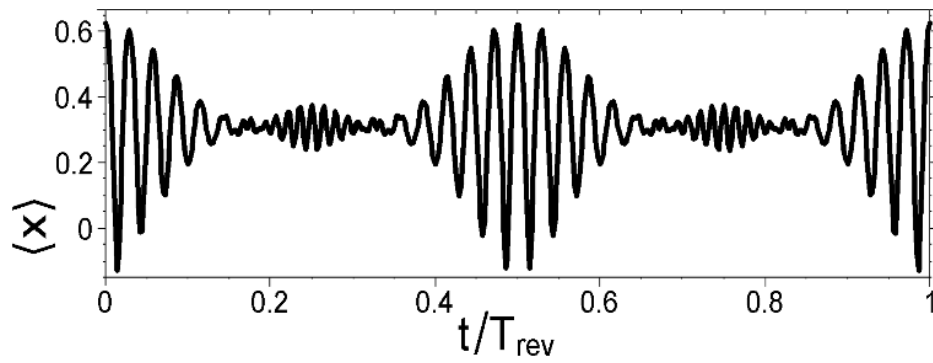
### 5.1. A Wigner-függvények időfejlődése

Ahhoz, hogy a Morse-oszcillátor időfejlődését időben tárgyalni tudjuk, szükséges a Wigner-függvények időfejlődésének a bevezetése:

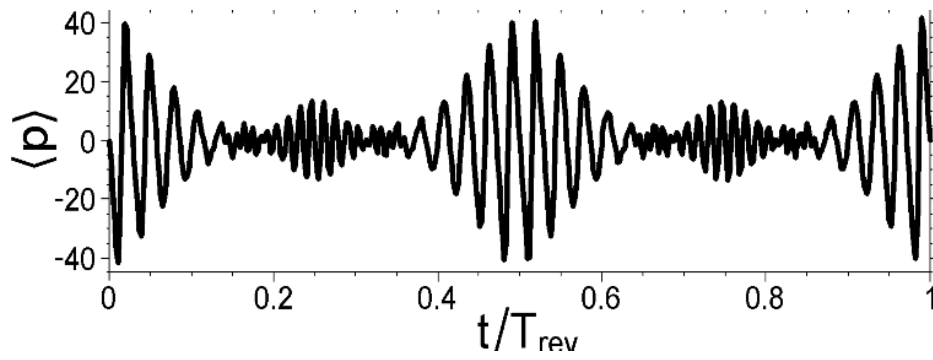
$$W(x, p, t) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int e^{-\frac{ipy}{\hbar}} \psi(x + \frac{y}{2}, t) \psi^*(x - \frac{y}{2}, t) dy$$

Az egyes csatolt helykoordináta-impulzus valószínűséget a következő integrál adja meg:

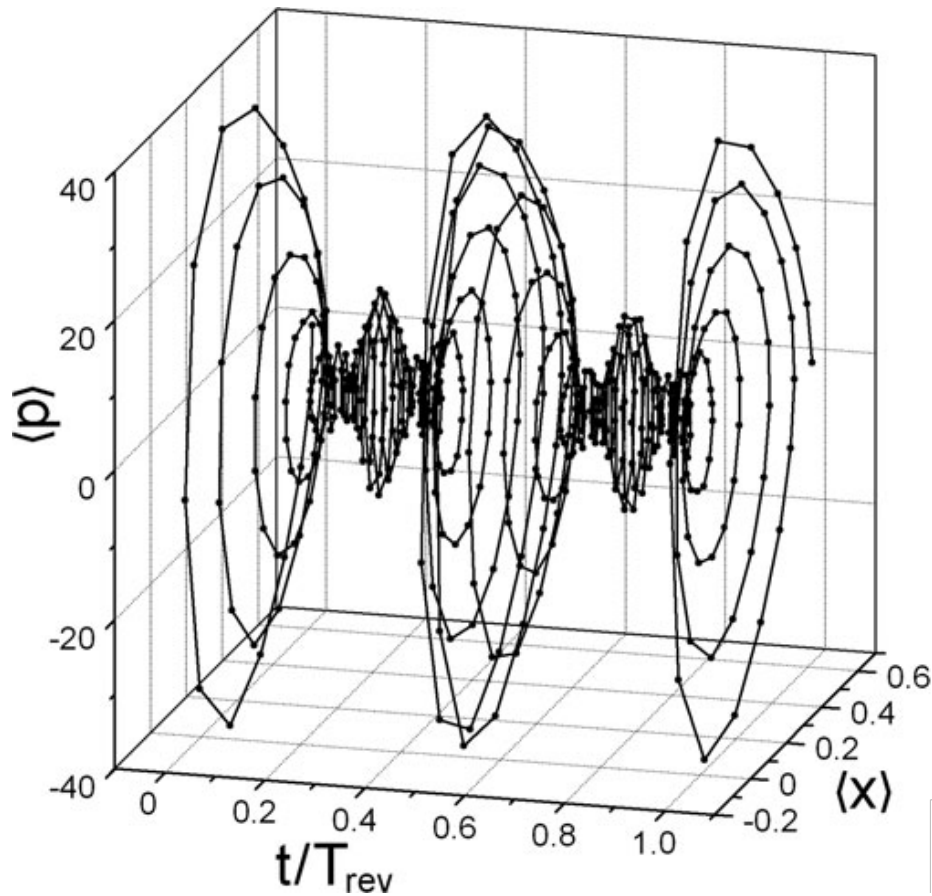
$$P(p, t) = \int W(x, p, t) dx$$



A helyoperátor várható értéke, mint az idő függvénye



Az impulzusoperátor várható értéke, mint az idő függvénye

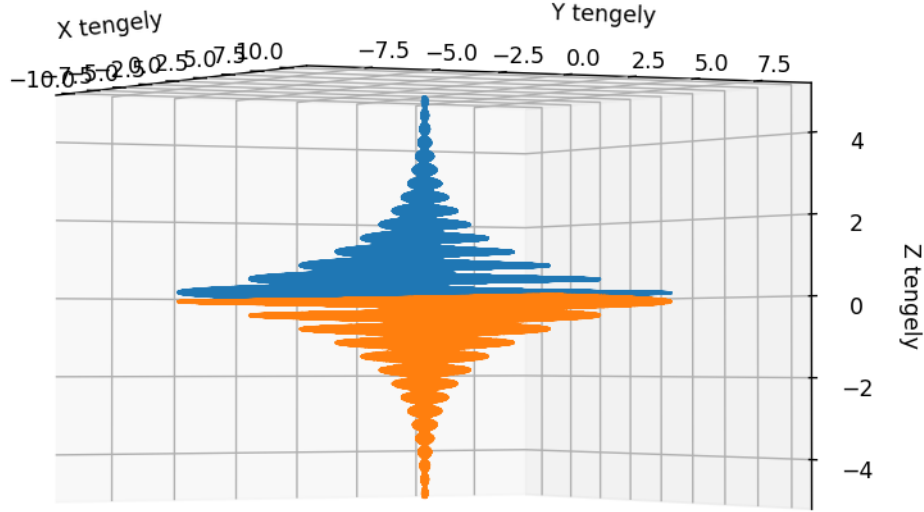


Az impulzus és a hely várható értéke az idő függvényében egy grafikonon ábrázolva

A fenti számításokat a Morse-potenciálra numerikusan nem sikerült elvégeznünk (a megírt python-kód nem futott le.)

A kód először definiált egy hullámfüggvényt  $\psi(x, t)$ , majd kiszámította volna a Wigner-függvényt  $W(x, p, t)$  a valós és képzetes részek numerikus integrálásával. A  $Q(x, t)$  függvény a Wigner-függvény impulzustérbeli integrálásával számította volna ki a pozíciósűrűség-eloszlást. Végül a kód készített volna egy kontúrdiagramot, amely ábrázolta volna a  $Q(x, t)$  időbeli változását, így vizualizálva a rendszer viselkedését az idő függvényében.

Mivel a kód nem futott le, a fenti grafikonot egy mágneses térben mozgó elektronnal szimuláltam.



A grafikon elektron spirális mozgását szimulálja egy mágneses térben, ahol az elektron pályáját a ciklotron rezonancia frekvencia határozza meg. A szkript előállít egy 3D grafikont, amelyen az elektron eredeti és az xy síkra tükrözött pályáját is ábrázolja, a z koordináta előjeleinek megfordításával. A grafikonon az elektron mozgása az idő függvényében látható, a sugár exponenciális csökkenése és növekedése mellett.

A rendszer időfejlődése a következő integrálok segítségével számítható ki:

$$\langle x(t) \rangle = \int xQ(x, t) dx \quad (24)$$

$$\langle p(t) \rangle = \int pP(p, t) dp \quad (25)$$

## 6. A Morse- és a Lennard-Jones-potenciál összehasonlítása

Érdekes kérdésfeltevés lehet, hogy mennyire használható a Morse-potenciál két molekula kölcsönhatásának a leírására. A van der Waals interakciók leírására, numerikus szimulációkhoz bevett módszer a Lennard-Jones potenciál alkalmazása.

Az irodalomban többféle összehasonlítás található a két potenciálra.

A két potenciál összehasonlításakor az  $U_1$  és  $U_2$  potenciális függvények paramétereinek összehasonlításával történik. Két Az egyik módszer a deriváltak egyenlővé tételén alapul:

$$\left. \frac{\partial U_1}{\partial r_i} \right|_{r=R} = \left. \frac{\partial U_2}{\partial r_i} \right|_{r=R}, \quad i = 0, 1, \dots, j \quad (26)$$

A másik a Maclaurin-sorok használatán alapul:

$$U_1 = \sum_{k=0}^{\infty} a_k r^k \quad (27)$$

$$U_2 = \sum_{k=0}^{\infty} b_k r^k \quad (28)$$

Ekkor az  $a_k = b_k$  paraméterek egyezőségét vizsgálják meg. A módszerek segítségével megállapítható, hogy a görbületek egyeznek, konvergálnak, vagy jelentős eltérnek, ha  $\frac{r}{R} > 1$  (itt  $r$ ,  $R$  a görbületi sugarakat jelöli).

A hibát (a két potenciál eltérését) minimalizálhatjuk:

$$\min |error| = \min \left| \int_R^1 (U_1 - U_2) dr \right| \quad (29)$$



Egyszerűsítve:

$$\int_R^1 U_1 dr - \int_R^1 U_2 dr = 0 \quad (30)$$

Legyen a általános Morse-potenciál:

$$U_{GeneralMorse} = A_1 e^{(-\lambda_1 r)} - A_2 e^{(-\lambda_2 r)} \quad (31)$$

Az egyensúlyi távolság felírható, mint:

$$R = \frac{1}{\lambda_1 - \lambda_2} \ln \left( \frac{\lambda_1 A_1}{\lambda_2 A_2} \right) \quad (32)$$

Alternatív formában:

$$U_{GeneralMorse}(D) = \frac{\lambda_2}{\lambda_1 - \lambda_2} e^{(-\lambda_1 R)(1 - \frac{r}{R})} - \frac{\lambda_1}{\lambda_1 - \lambda_2} e^{(-\lambda_2 R)(1 - \frac{r}{R})} \quad (33)$$

Morse-potenciál paraméterei a Lennard-Jones-potenciál paramétereinek függvényében:

$$\alpha R = \frac{3(n-1)(2n-1)}{2(3n-1)} \quad (34)$$

És fordítva:

$$m = 2n = f(\alpha R) + \sqrt{f(\alpha R)^2 - \frac{4}{3}} \quad (35)$$

Ahol  $f(x) = \frac{3}{2} + x$ .

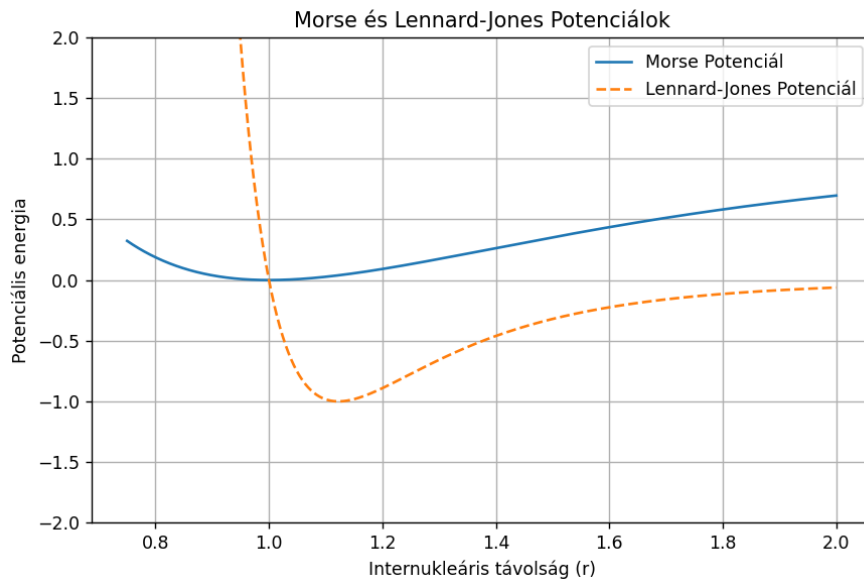
A Morse-potenciál paraméterei a Lennard-Jones-potenciál paramétereinek függvényében az alábbiak szerint adható meg:

$$R \begin{Bmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \end{Bmatrix} = \frac{(m+n)(m-1)(n-1)}{m+n-1} \begin{Bmatrix} m^{-1} \\ n^{-1} \end{Bmatrix} \quad (36)$$

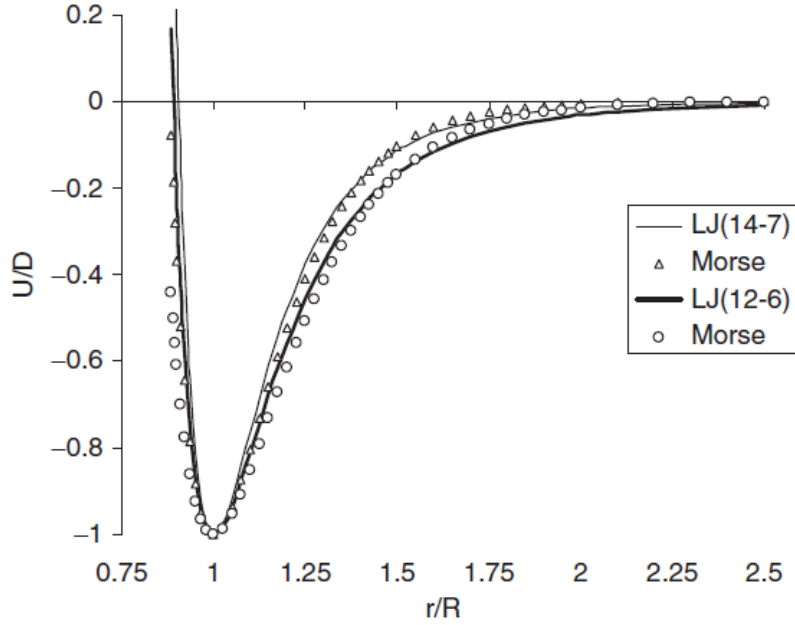
A Lennard-Jones-potenciál paraméterei a Morse-potenciál paramétereinek függvényében az alábbiak szerint kaphatóak meg:

$$\begin{Bmatrix} m \\ n \end{Bmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \lambda_2^{-1} & \lambda_2^{-1} \\ \lambda_1^{-1} & \lambda_1^{-1} \end{pmatrix} \times \left\{ \sqrt{\frac{g(\lambda_1, \lambda_2, R)}{g(\lambda_1, \lambda_2, R)[g(\lambda_1, \lambda_2, R) - 4 \left( \frac{\lambda_1 \lambda_2}{\lambda_1 + \lambda_2} \right)]}} \right\} \quad (37)$$

A fenti kifejezésben szereplő  $g$  egy  $g(x, y, z) = x + y + xyz$  alakú függvény.



A grafikon egymáshoz hasonló görbületi sugarú potenciálokkal készült. Az ábrán  $m=2n$



Cikkből vett ábra. Itt szintén  $m=2n$ , a két potenciál értékei nagyon jól egyeznek.

Az itt kapottakból kiindulva egy olyan Morse-függvényt kaphatunk, amely jobb közelítést nyújt a van der Waals-kölcsönhatás leírására. A Morse-függvény inkább szilárdanyag-szerű anyagokat írja le a legkisebb hibával. Kölcsönhatásra a Lennard-Jones, Buckingham vagy más, gyakran használt van der Waals-potenciál függvények alkalmazása a Morse-függvény helyett ajánlott. Ha mégis a Morse-függvényt használnánk, akkor célszerű a számértékeket a fentebb leírtak szerint a Lennard-Jones potenciálból (esetleg spektroszkópiai adatokból) kinyerni.

## 7. Köbös kristályrács

A két atom kölcsönhatását leíró Morse-potenciál használható összetett molekulák, kristályrácsok modellezésére is. Még a legegyszerűbb köbös kristályrácsszerkezeteknél is a valóságban sok különböző összetevője van az atomok között ható erőknek, mégis a kémia és molekuláris fizika széles területén alkalmazzák a Morse-potenciált. Előnye a kevés szabad paraméter, így nagyban felgyorsulnak a számítógépes szimulációk, illetve nagyobb részecskeszám modellezhető; és emellett sokszor a szükséges hibahatáron belül visszaadja a kísérleti eredményeket.

Egy tércentrált köbös-, vagy lapcentrált köbös rácsszerkezetnél az  $i$ . és  $j$ . atom közötti távolságot jelölje  $r_{ij}$ . Ekkor a két atom között ható erő potenciálja:

$$V(r) = D \left( e^{-2\alpha(r_{ij}-r_0)} - 2e^{-\alpha(r_{ij}-r_0)} \right) \quad (38)$$

Az egy atomra ható erő potenciálja:

$$V(r) = \frac{1}{2} D \sum_j \left( e^{-2\alpha(r_j-r_0)} - 2e^{-\alpha(r_j-r_0)} \right) \quad (39)$$

, ahol  $r_j$  a  $j$ . atomtól vett távolság a rácsszerkezetben.

A potenciálból kiszámolható tetszőleges számú atomból álló köbös rácsszerkezetű fémek rugalmas modulusza. Lincoln, Koliwad és Ghate [6] ezt kiszámolta alumíniumra, rézre, ezüstre, aranyra, nátriumra és káliumra és összevetették a kísérleti eredményekre. A számoláshoz használt adatok:

|    | fél rácsvektor hossza<br>[Å] | kompresziós<br>modulusz<br>[10 GPa] | kötési energia<br>[100 $\frac{\text{nJ}}{\text{mol}}$ ] | $D$ [100 nJ] | $\alpha$ [Å <sup>-1</sup> ] | $r_0$ [Å] |
|----|------------------------------|-------------------------------------|---|--------------|-----------------------------|-----------|
| Al | 4,050                        | 7,22                                | -3,22   | 4,3264       | 1,0341                      | 3,4068    |
| Cu | 3,614                        | 13,09                               | -3,38   | 5,2587       | 1,3123                      | 2,8985    |
| Ag | 4,086                        | 10,07                               | -2,86   | 5,2118       | 1,3535                      | 3,1300    |
| Au | 4,078                        | 17,32                               | -3,67   | 7,6148       | 1,5830                      | 3,0242    |
| Na | 4,290                        | 0,682                               | -1,09   | 0,9241       | 0,5504                      | 5,3678    |
| K  | 5,32                         | 0,318                               | -0,91   | 0,8530       | 0,4766                      | 6,4130    |

A Morse-potenciál paraméterei köbös rácsszerkezetű fémeknél.

A számolást 176 és 168 lapcentrált, illetve tércentrált rácsszerkezetű atomra végezték el.

A (nem lineáris) rugalmasságtanban a feszültségtenzor ( $\sigma_{ij}$ ) és a deformációs tenzor ( $\varepsilon_{ij}$ ) közötti összefüggés:

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl}\varepsilon_{kl} + C_{ijklmn}\varepsilon_{kl}\varepsilon_{mn} \quad (40)$$

, ahol  $C_{ijkl}$  és  $C_{ijklmn}$  az anyagra jellemző (másod- és harmadrendű) rugalmas moduluszok. Egy köbös rácsban a szimmetriák miatt a másodrendű rugalmas modulusznak 3 ( $C_{11}$ ,  $C_{12}$ ,  $C_{44}$ ), a harmadrendű rugalmas modulusznak 6 ( $C_{111}$ ,  $C_{112}$ ,  $C_{166}$ ,  $C_{123}$ ,  $C_{456}$ ,  $C_{144}$ ) független komponense van.

A rugalmas moduluszokra a modell adta jóságot és a mért valós értékeket a következő táblázat foglalja össze:

|    | $C_{11}$ |                | $C_{12}$       |                                | $C_{44}$       |
|----|----------|----------------|----------------|--------------------------------|----------------|
|    | elméleti | mért           | mért           | elméleti ( $C_{12} = C_{44}$ ) | mért           |
| Al | 8,98     | 10,56<br>10,82 | 6,39<br>6,13   | 6,34                           | 2,85<br>2,85   |
| Cu | 16,36    | 16,61<br>16,84 | 11,99<br>12,14 | 11,46                          | 7,56<br>7,54   |
| Ag | 12,85    | 12,22<br>12,40 | 9,07<br>9,37   | 8,68                           | 4,54<br>4,61   |
| Au | 22,75    | 19,29<br>19,23 | 16,38<br>16,31 | 14,60                          | 4,15<br>4,20   |
| Na | 0,93     | 0,768<br>0,738 | 0,645<br>0,521 | 0,55                           | 0,434<br>0,661 |
| K  | 0,47     | 0,370          | 0,314          | 0,24                           | 0,188          |

|    | $C_{111}$ |         | $C_{112}$ |                                  | $C_{166}$ | $C_{123}$ | $C_{456}$ | $C_{144}$ | $C_{123} = C_{456} = C_{144}$ |
|----|-----------|---------|-----------|----------------------------------|-----------|-----------|-----------|-----------|-------------------------------|
|    | elméleti  | mért    | mért      | elméleti ( $C_{112} = C_{166}$ ) | mért      | mért      |           |           | elméleti                      |
| Al | -59,15    | -       | -         | -38,55                           | -         | -         | -         | -         | 4,48                          |
| Cu | -110,00   | -127,10 | -81,4     | -74,88                           | -78,00    | -5,00     | -9,5      | -0,3      | 7,723                         |
| Ag | -93,22    | -84,3   | -52,9     | -62,92                           | -63,7     | 18,9      | 8,3       | 5,6       | 4,874                         |
| Au | -184,21   | -172,9  | -92,2     | -119,04                          | -64,8     | -23,3     | -1,2      | -1,3      | 6,141                         |
| Na | -9,28     | -       | -         | -1,89                            | -         | -         | -         | -         | -1,97                         |
| K  | -4,24     | -       | -         | -0,88                            | -         | -         | -         | -         | -1,01                         |

A rugalmas moduluszok mért és számolt értéke köbös rácsszerkezetű fémeknél, mértékegység: 10 GPa.

Az elmélet szerint a Morse-potenciál centrális erőteret kelt, ebből következően azt várnánk, hogy a rugalmas moduluszoknál a  $C_{12} = C_{44}$  egyenlőség teljesül, ezt azonban a kísérleti eredmények egyértelműen megcáfolják. A harmadrendű rugalmas moduluszoknál ismét nem teljesülnek az elmélet adta egyenlőségek ( $C_{112} = C_{166}$  és  $C_{123} = C_{456} = C_{144}$ ). Itt már sokkal jelentősebb eltérés figyelhető meg a mért és számolt adatok között, ez illusztrálja az egyszerű Morse-potenciál pontatlanságát.

## 8. Hivatkozások

- [1] 'Morse potential' (2023) Wikipedia. Available at: [https://en.wikipedia.org/wiki/Morse\\_potential](https://en.wikipedia.org/wiki/Morse_potential) (Accessed: 25 November 2023).

- [2] Taşeli, H, 1997, 'Exact Solutions for Vibrational levels of the Morse Potential', *Journal of Physics A: Mathematical and General*, vol. 31, No. 2, pp. 779-788.
- [3] Dhal, J P, Springborg, M, 1987, 'The Morse Oscillator in Position Space, Momentum Space, and Phase Space', *Journal of Chemical Physics*, vol. 88, No. 7, pp. 4535-4547.
- [4] 'Morse/Long-range potential' (2023) Wikipedia. Available at: [https://en.wikipedia.org/wiki/Morse/Long-range\\_potential](https://en.wikipedia.org/wiki/Morse/Long-range_potential) (Accessed: 25 November 2023).
- [5] Jalal, A, Iqbal, S, 2018, 'Quantum Dynamical Behavior of the Morse Oscillator: The Wigner Function Approach', *Journal of Russian Laser Research*, vol. 39, No. 6, pp. 544-551.
- [6] Lincoln, R C, Koliwad, K M, Ghate, P B, 1967, 'Morse-Potential Evaluation of Second- and Third-Order Elastic Constants of Some Cubic Metals', *The Physical Review*, vol. 157, No. 3, pp. 463-466.
- [7] Tiek-Cheng Lim, 2006, 'Long range relationship between Morse and Lennard-Jones potential energy functions', *Molecular Physics*, vol. 105, No. 8, pp. 1013-1018.
- [8] Filho, R N C, Alencar, G, Skagerstam, B -S, Andrade, J S jr., 2012, 'Morse Potential Derived from First Principles', *Europhysics Letters*, vol. 101, no. 1, pp. 10009.