

Analiza kvantnih dimera opisanih modificiranim Lennard-Jonesovim potencijalom

Šiklić, Toma

Undergraduate thesis / Završni rad

2024

Degree Grantor / Ustanova koja je dodijelila akademski / stručni stupanj: **University of Split, Faculty of Science / Sveučilište u Splitu, Prirodoslovno-matematički fakultet**

Permanent link / Trajna poveznica: <https://um.nsk.hr/um:nbn:hr:166:085509>

Rights / Prava: [In copyright](#)/[Zaštićeno autorskim pravom.](#)

Download date / Datum preuzimanja: **2024-10-19**

Repository / Repozitorij:

[Repository of Faculty of Science](#)



Sveučilište u Splitu
Prirodoslovno-matematički fakultet

**Analiza kvantnih dimera opisanih
modificiranim Lennard-Jonesovim potencijalom**

Završni rad

Toma Šiklič

Split, rujan 2024.

Temeljna dokumentacijska kartica

Sveučilište u Splitu
Prirodoslovno–matematički fakultet
Odjel za fiziku
Ruđera Boškovića 33, 21000 Split, Hrvatska

Završni rad

Analiza kvantnih dimera opisanih modificiranim Lennard-Jonesovim potencijalom

Toma Šiklič

Sveučilišni prijediplomski studij Fizika

Sažetak:

Najpopularniji model potencijala dviju čestica, Lennard-Jonesov (12-6) potencijal, sačinjen je od kratkodosežnog odbojnog dijela te dugodosežnog privlačnog dijela. Ovaj završni rad ispituje kako potencija kratkodosežnog dijela potencijala, koja je u Lennard-Jonesovom potencijalu 12, utječe na karakteristične veličine sustava; energiju i srednju kvadratnu udaljenost. U radu je pokazan univerzalni odnos ovih veličina za različite sustave kvantnih dimera. Schrödingerova jednadžba za ove kvantne sustave nije rješiva analitički pa njenom rješavanju pristupamo numeričkim metodama pogađanja i usklađivanja (shoot and match) te Numerovom metodom. Osim samog iznošenja rezultata priloženo je i detaljno obrazloženje ovih metoda, programskog koda i rješavanja jednadžbe te skaliranja fizičkih veličina radi usporedbe različitih sustava.

- Ključne riječi:** helij, dimer, Lennard-Jonesov potencijal, Numerova metoda
- Rad sadrži:** 19 stranica, 7 slika, 1 tablicu, 12 literaturnih navoda. Izvornik je na hrvatskom jeziku.
- Mentor:** izv. prof. dr. sc. Petar Stipanović
- Neposredni voditelj:** izv. prof. dr. sc. Petar Stipanović
- Ocjenjivači:** izv. prof. dr. sc. Petar Stipanović,
doc. dr. sc. Ivana Weber,
doc. dr. sc. Lucija Krce
- Rad prihvaćen:** 16. rujna 2024.

Rad je pohranjen u Knjižnici Prirodoslovno–matematičkog fakulteta, Sveučilišta u Splitu.

Basic documentation card

University of Split
Faculty of Science
Department of Physics
Ruđera Boškovića 33, 21000 Split, Croatia

Bachelor thesis

Analysis of Quantum Dimers Described by the Modified Lennard-Jones Potential

Toma Šiklić

University undergraduate study Physics

Abstract:

The most popular two-particle potential model, the Lennard-Jones (12-6) potential, consists of a short-range repulsive part and a long-range attractive part. This thesis examines how the exponent of the short-range part of the potential, which is 12 in the Lennard-Jones potential, affects the characteristic quantities of the system, such as energy and the mean square distance. The study demonstrates the universal relationship of these quantities for different quantum dimer systems. The Schrödinger equation for these quantum systems cannot be solved analytically, so we approach its solution using numerical methods such as the shoot and match method and the Numerov method. In addition to presenting the results, a detailed explanation of these methods, the program code, and the solution of the equation is provided, as well as the scaling of physical quantities for comparing different systems.

Keywords: helium, dimer, Lennard-Jones potential, Numerov method

Thesis consists of: 19 pages, 7 figures, 1 tables, 12 references. Original language: Croatian.

Supervisor: Assoc. Prof. Dr. Petar Stipanović

Leader: Assoc. Prof. Dr. Petar Stipanović

Reviewers: Assoc. Prof. Dr. Petar Stipanović,
Assist. Prof. Dr. Ivana Weber,
Assist. Prof. Dr. Lucija Krce

Thesis accepted: September 16, 2024.

Thesis is deposited in the library of the Faculty of Science, University of Split.

Sadržaj

1	Uvod	1
1.1	Klasteri	1
1.2	Lennard-Jonesov potencijal	1
2	Schrödingerova jednađba za dimer	3
2.1	Rješavanje Schrödingerove jednađbe	5
2.2	Numeričko rješavanje - Numerova metoda	5
3	Provjera proizvoljnih parametara u algoritmu	11
3.1	Provjera intervala udaljenosti	11
3.2	Provjera diskretizacije i pogreške	12
4	Rezultati za modificirani Lennard-Jonesov potencijal	13
4.1	Bezdimenzionalne veličine	13
4.2	Univerzalni odnos energije i širine dimera	14
5	Zaključak	17
6	Literatura	18
A	Numerički podatci	19

1 Uvod

1.1 Klasteri

Klaster se definira kao nakupina čestica (atoma ili molekula). Broj tih čestica može biti od dva pa do više stotina tisuća. Ovaj izraz se prvotno odnosio na nakupine u kojima su prisutne metal-metal veze, no do danas su razvijena teorijska predviđanja te je eksperimentalno potvrđeno postojanje klastera nemetala. Svojstva klastera mogu se jako razlikovati od svojstava krutina i molekula, a ovise o broju čestica koje sačinjavaju klaster te o geometriji klastera. [1] Mogu biti sačinjeni od istih čestica pa ih zovemo homoatomski (homomolekularni) klasteri te ih označavamo kao molekule, primjerice A_a ili se mogu sastojati od različitih čestica; heteroatomski (heteromolekularni) klasteri, A_aB_b . Klaster s dvije čestice zovemo dimeri, tri trimeri itd. Postoji više vrsta klastera, neki primjeri su: fulereni, metalni klasteri, ionski klasteri i molekularni klasteri. [2] Motivacija za proučavanje klastera jest što je to područje između molekularne fizike i fizike čvrstog stanja te što imaju zanimljiva svojstva. Obuhvaćaju širok spektar veličina čestica, od molekularne veličine gdje su više izraženi kvantni efekti pa imaju kontinuirana stanja, do mikrokristalne razine gdje su stanja kvazikontinuirana. Za razvoj znanosti o klasterima uvelike je zaslužan napredak u eksperimentalnim metodama. Eksperimenti s klasterima dijele se na tri skupine; generacija klastera, detekcija klastera i proučavanje klastera. Najviše se proučavaju klasteri plemenitih plinova. Razlog tome je to što ih je najlakše generirati.

Pri niskim temperaturama moguće je formiranje klastera plemenitih plinova pa tako i helija. [2] Klaster helija s preko tisuću atoma zovemo još i kapljice helija. Čestice unutar klastera interagiraju slabim van der Waalsovima silama. Osim toga atomi helija imaju jako malu masu pa na niskim temperaturama imamo jako izražene kvantne efekte poput suprafluidnosti. Helij je jedina tvar za koju znamo da pri atmosferskom tlaku i temperaturi tik iznad 0 K ostaje tekuća. Uspješno su generirani klasteri helija s i do 10^6 atoma. [3]

1.2 Lennard-Jonesov potencijal

Lennard-Jonesov potencijal zadan je s [5]

$$V(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right], \quad (1.1)$$

gdje je r udaljenost među atomima pa samim time ima mjernu jedinicu udaljenosti. U ovom radu koristit ćemo Å (angstrom) ¹ jer je puno prikladniji od metra u kontekstu atoma. Veličina σ također ima jedinicu udaljenosti te označava nultočku potencijala dok je ε minimum potencijala

¹ 1 Å = 10^{-10} m

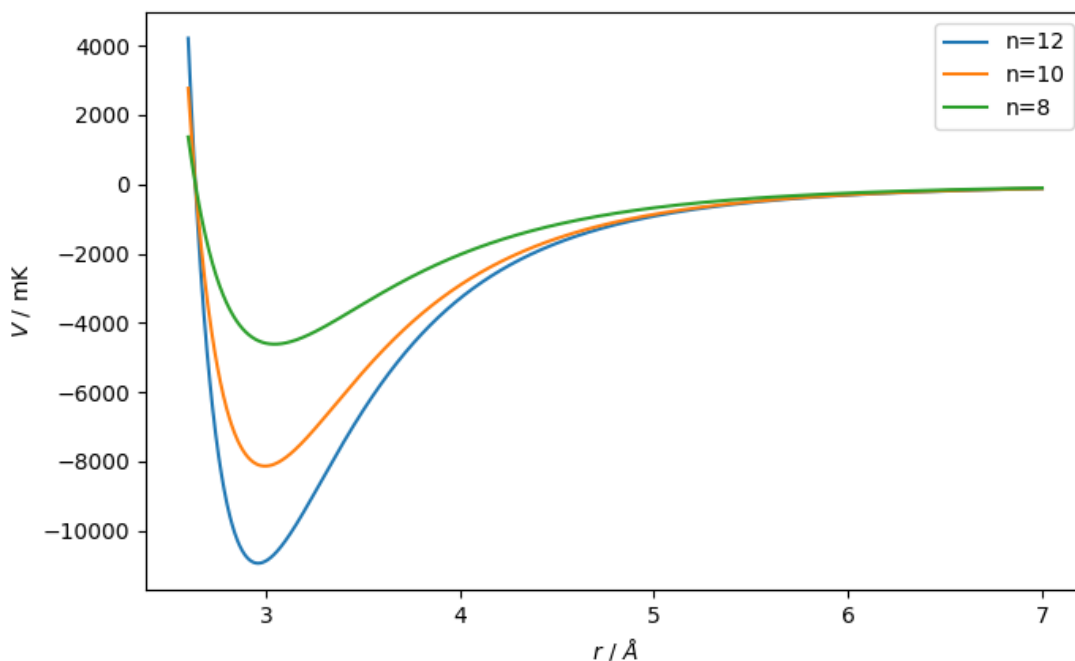
pa uzimamo da ima mjernu jedinicu energije. Još se naziva i dubina potencijalne jame. U ovom radu energiju ćemo izražavati u mK (milikelvinima) što će biti objašnjeno u idućem poglavlju. Kao što vidimo iz jednadžbe (1.1), Lennard-Jonesov potencijal sastoji se od dva člana. Član s potencijom 6 je dugodosežni, privlačni član koji opisuje Londonovu silu. Potencijal Londonove sile općenito možemo razviti u red [2]

$$V(r) = - \left(\frac{C_6}{r^6} + \frac{C_8}{r^8} + \frac{C_{10}}{r^{10}} + \dots \right), \quad (1.2)$$

gdje su $C_n, n = 6, 8, 10, \dots$ konstante. Na velikim udaljenostima članovi s potencijama udaljenosti većim od 6 imaju jako male doprinose pa se u Lennard-Jonesovom potencijalu uzima samo član C_6/r^6 tj. privlačni potencijal aproksimiramo samo prvim članom

$$V(r) = - \frac{C_6}{r^6}. \quad (1.3)$$

Prvi član u (1.1) je kratkodosežni, odbojni dio. Ovaj član opisuje odbojnu silu među atomima kada se jako približe koja se javlja kada se istovrsni naboji nađu u međusobnoj blizini. Ovo međudjelovanje se u nekim modelima opisuje s $\sim e^{-\alpha r}$ ili $\sim r^{-n}$. U ovom radu ćemo promatrati ovisnost $\sim r^{-n}$ za $n = 8, 10, 12$. Potencijali za ove potencije prikazani su na slici 1. Zajednički naziv koji ćemo koristiti za njih je modificirani Lennard-Jonesov potencijal.



Slika 1: Potencijal $V = 4\varepsilon [(\sigma/r)^n - (\sigma/r)^6]$ za različite n te $\varepsilon = 10934$ mK, $\sigma = 2.637$ Å

Lennard-Jonesov potencijal je najjednostavniji model za opis interakcija dviju čestica. Postoje noviji, sofisticiraniji modeli poput: Mie, Buckingham i SAAPx potencijala. [11]

2 Schrödingerova jednačba za dimer

Kvantni sustav opisujemo rješavanjem Schrödingerove jednačbe, koja za sustav dvije čestice, 1 i 2 glasi

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_1}\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\nabla_2^2 + V(r) \right] \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t), \quad (2.1)$$

gdje su ∇_1^2 i ∇_2^2 Laplasijani koordinata prve i druge čestice, a potencijal V ovisi samo o njihovoj međusobnoj udaljenosti. Kako potencijal ne ovisi o vremenu rešenja su stacionarna pa se mogu zapisati kao

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) = \chi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) e^{-iEt/\hbar}, \quad (2.2)$$

gdje je E ukupna energija sustava. [4] Stoga je vremenski neovisna Schrödingerova jednačba

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_1}\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\nabla_2^2 + V(r) \right] \chi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E\chi(\vec{r}_1, \vec{r}_2). \quad (2.3)$$

Za rješavanje ove jednačbe prebacit ćemo se iz sustava dviju čestica na koordinate centra mase \vec{R} i njihove međusobne udaljenosti \vec{r} . Definiramo

$$\vec{R} = \frac{m_1\vec{r}_1 + m_2\vec{r}_2}{m_1 + m_2}, \quad \vec{r} = \vec{r}_2 - \vec{r}_1. \quad (2.4)$$

Uz pokrate za ukupnu i reduciranu masu

$$M = m_1 + m_2, \quad \mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}, \quad (2.5)$$

vrijedi da je

$$\frac{1}{m_1}\nabla_1^2 + \frac{1}{m_2}\nabla_2^2 = \frac{1}{M}\nabla_R^2 + \frac{1}{\mu}\nabla_r^2. \quad (2.6)$$

Uz navedene zamjene 2.1 postaje

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla_R^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_r^2 + V(r) \right] \psi_E(\vec{R}, \vec{r}) = E\psi_E(\vec{R}, \vec{r}), \quad (2.7)$$

gdje je $\psi_E(\vec{R}, \vec{r}) = \chi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$. Ovu jednačbu rješavamo separacijom varijabli. Pretpostavimo rješenje: $\psi_E(\vec{R}, \vec{r}) = \Phi(\vec{R})\psi(\vec{r})$ pri čemu je $\Phi(\vec{R})$ valna funkcija centra mase, a $\psi(\vec{r})$ valna funkcija relativnog gibanja. Uvrštavanjem u (2.7) dobije se

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{1}{\Phi(\vec{R})}\nabla_R^2\Phi(\vec{R}) - \frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{\psi(\vec{r})}\nabla_r^2\psi(\vec{r}) + V(r) = E. \quad (2.8)$$

Prvi pribrojnik ovisi samo o \vec{R} , a druga dva samo o \vec{r} pa oba moraju biti konstanta. Stoga dobijamo dvije jednačbe

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla_{\vec{R}}^2\Phi(\vec{R}) = E_R\Phi(\vec{R}), \quad (2.9)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_{\vec{r}}^2\psi(\vec{r}) + V(r)\psi(\vec{r}) = E_r\psi(\vec{r}), \quad (2.10)$$

uz $E = E_r + E_R$. Prva ima isti oblik kao jednačba slobodne čestice pa je rješenje

$$\Phi(\vec{R}) = (2\pi)^{-3/2}e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}}, \quad (2.11)$$

gdje je \vec{k} valni vektor centra mase. Ako promatramo problem iz sustava centra mase (sustava u kojem centar mase dviju čestica miruje) ostaje nam samo riješiti jednačbu (2.10). Kako u našem slučaju potencijal ovisi samo o udaljenosti dviju čestica koristit ćemo sferne koordinate i separaciju varijabli: $\psi(\vec{r}) = R(r)\Theta(\theta, \phi)$. Rješenje kutnog dijela su sferni harmonici $\Theta(\theta, \phi) = Y_l^m(\theta, \phi)$ [10] Radijalna valna jednačba postaje

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}\right) - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]R(r) + V(r)R(r) = ER(r). \quad (2.12)$$

U ovom radu promatramo smo osnovno stanje dimera. To znači da je $l = 0$ i $m = 0$. Kutni dio je onda $Y_0^0 = 1/4\pi$. Radi daljnjeg rješavanja uvodimo supstituciju $y(r) = rR(r)$. Uz sve navedeno jednačba (2.12) postaje

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dr^2}y(r) = y(r)[E - V(r)] \quad (2.13)$$

$$\frac{d^2y(r)}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2}y(r)[E - V(r)] = 0 \quad (2.14)$$

$$\frac{d^2y(r)}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2}k_B y(r)\left[\frac{E}{k_B} - \frac{V(r)}{k_B}\right] = 0, \quad (2.15)$$

pri čemu je $k_B = 1.380649 \cdot 10^{-23} \text{ J K}^{-1}$ [6] Boltzmannova konstanta koja je izlučena da bismo pri numeričkom rješavanju, koje će biti objašnjeno u nastavku, dobili pogodnije brojeve i tako izbjegli numeričke pogreške. Reducirana Planckova konstanta, \hbar iznosi

$1.054571817 \cdot 10^{-34} \text{ J s}$ [6]. Također, nadalje ćemo energiju označavati u milikelvinima (mK) što dobijemo izlučivanjem Boltzmannove konstante. Promatrali smo sustave za koje vrijedi $m_1 = m_2$ te je za daljnju analizu za ove mase uzeta masa atoma helija. Sada je reducirana masa

$$\mu = \frac{m_{\text{He}}}{2}, \quad (2.16)$$

a masa atoma helija iznosi $m_{\text{He}} = 4.00260 m_u$ [7], pri čemu je m_u atomska jedinica mase i iznosi $m_u = 1.66053906892 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$. [6]

2.1 Rješavanje Schrödingerove jednadžbe

Valnu funkciju kojom opisujemo sustav tražimo rješavanjem Schrödingerove jednadžbe, no da bi funkcija bila fizikalno prihvatljiva valna funkcija, mora ispunjavati neke uvjete. Treba biti neprekidna te njena prva derivacija treba biti neprekidna. Također, treba biti kvadratno integrabilna. Osim toga, za modificirani Lennard-Jonesov potencijal, fizikalno treba vrijediti da valna funkcija teži u nulu kada udaljenost dvaju atoma teži u nula i u beskonačnost. Prije rješavanja jednadžbe (2.15) uvedimo pokrate:

$$\gamma = \frac{2\mu}{\hbar^2} k_B = 8.251326 \text{ mK}^{-1} \text{ \AA}^{-2}, \quad (2.17)$$

$$g(r) = \frac{\gamma}{k_B} [E - V(r)], \quad (2.18)$$

uz koje ona postaje

$$\frac{d^2 y(r)}{dr^2} + g(r)y(r) = 0. \quad (2.19)$$

Oblik valne funkcije ovisit će o predznaku $g(r)$. Ako je $g(r) > 0$, ukupna energija sustava veća je od potencijalne energije. Područje u kojem je to zadovoljeno naziva se klasično dozvoljeno područje i tu valna funkcija ima oscilatorno ponašanje. Kada je $g(r) < 0$, potencijalna energija veća je od ukupne pa je to klasično zabranjeno područje i tu valna funkcija ima eksponencijalno ponašanje. Ovisno o području domene uzimamo ili padajuću ili rastuću eksponencijalnu funkciju kako bi valna funkcija bila kvadratno integrabilna. Mogućnost analitičkog rješavanja jednadžbe (2.19) ovisi o tome koja je funkcija $g(r)$ ili drugim riječima o funkciji potencijala $V(r)$. Analitičko rješenje znamo samo za određene potencijale. Za sve ostale koristimo numeričke metode poput one objašnjene u idućem potpoglavlju.

2.2 Numeričko rješavanje - Numerova metoda

Numerova metoda [8, 9] je numerička metoda za rješavanje diferencijalnih jednadžbi oblika

$$\frac{d^2 y}{dx^2} = -g(x)y(x) + s(x), \quad (2.20)$$

što je upravo jednadžba (2.19) uz dodatno pojednostavljenje $s(x) = 0$, a $g(x)$ je uvedeno s (2.18). Funkcije g , s i y su neprekidne funkcije, no pri numeričkom rješavanju ne možemo raditi s neprekidnim vrijednostima već moramo koristiti diskretizaciju. To znači da interval domene (s neprebrojivo mnogo elemenata) treba podijeliti na konačan broj točaka. Taj broj točaka treba biti dovoljno velik, odnosno razmak između točaka dovoljno malen da se funkcija ponaša približno kao neprekidna. To radimo tako da odredimo početnu i krajnju točku, x_{\min} i x_{\max} te uzmemo N_x točaka jednakog razmaka $\Delta x = (x_{\max} - x_{\min})/N_x$ tako da je $x_i = x_{\min} +$

$i\Delta x, i = 0, \dots, N$ gdje je i redni broj točke, tj. x_i je i -ta po redu točka. Definiramo također: $y_i \equiv y(x_i), g_i \equiv g(x_i), s_i \equiv s(x_i)$. Razvojem u Taylorov red slijeva i zdesna funkcije y do petog reda dobijemo y_{i-1} i y_{i+1} čijim zbrajanjem dobijemo Numerovu formulu za y_{i+1} [8]

$$y_{i+1} \left[1 + g_{i+1} \frac{(\Delta x)^2}{12} \right] = 2y_i \left[1 - 5g_i \frac{(\Delta x)^2}{12} \right] - y_{i-1} \left[1 + g_{i-1} \frac{(\Delta x)^2}{12} \right] + (s_{i+1} + 10s_i + s_{i-1}) \frac{(\Delta x)^2}{12} + O[(\Delta x)^6]. \quad (2.21)$$

Radi preglednosti uvodimo i pokratu $f_i = 1 + g_i((\Delta x)^2)/12$ te dobijemo

$$y_{i+1} = \frac{(12 - 10f_i)y_i - f_{i-1}y_{i-1}}{f_{i+1}}. \quad (2.22)$$

Korištenjem ove formule možemo dobiti svaku slijedeću točku y_{i+1} poznavanjem prethodne dvije y_i i y_{i-1} . To znači da ako znamo samo funkcijske vrijednosti prve dvije točke y_0 i y_1 možemo izračunati vrijednosti za sve ostale. Osim toga, možemo se i vraćati unatrag tj. iz vrijednosti u zadnje dvije točke dobiti sve ostale. S obzirom na to da očekujemo da će za naš sustav valna funkcija težiti nuli u nuli i beskonačnosti trebamo uzeti domenu koja je dovoljno velika i kojoj je početna točka dovoljno blizu nuli. Tada u prvoj i posljednjoj točki domene možemo staviti neku malu vrijednost valne funkcije (misli se na apsolutnu vrijednost). Prvu točku ne možemo staviti u 0 jer modificirani Lennard-Jonesov potencijal tu divergira zbog dijeljenja s nulom. Cijela valna funkcija mora biti istog predznaka jer promatramo osnovno stanje pa ono nema nultočke. Osim prve i zadnje točke za primjenu Numerove metode trebaju nam i druga i predzadnja. Kako se valna funkcija treba približavati nuli na rubovima domene, vrijednosti u ovim točkama trebaju biti veće nego u prvoj i zadnjoj. Ovisno koju vrijednost odaberemo u ove dvije točke cijela valna funkcija bit će skalirana za neki konstantni faktor što naravno ne predstavlja problem jer se valna funkcija može normirati ako je kvadratno integrabilna. Normiramo je tako da je podijelimo s tim konstantnim faktorom koji iznosi

$$\int_{\text{cijeli prostor}} \psi^* \psi dV = \int_0^\infty y^2 dr. \quad (2.23)$$

S obzirom na to da imamo slobodu biranja vrijednosti u ovim točkama, odaberemo neke koje će učiniti naš program stabilnim. Ako odaberemo prevelike ili premale vrijednosti možemo dobiti numeričke pogreške. Pokazalo se da vrijednosti prve i druge (te zadnje i predzadnje) točke $2 \cdot 10^{-9}$ te $3 \cdot 10^{-9}$ dobro funkcioniraju za različite vrijednosti Δx od 10^{-4} do 10^{-2} .

Numerovom metodom možemo dobiti valnu funkciju za neku energiju, no u našem problemu, kao što je to često slučaj, ne znamo unaprijed energiju osnovnog stanja. Moramo je na neki način pronaći. Tehnički, možemo za bilo koju energiju provesti Numerov algoritam i dobiti neku valnu funkciju (ako naravno ne dobijemo neke numeričke pogreške), ali ako nismo zadali

dobru energiju ta valna funkcija neće imati fizikalnog smisla i neće biti valjana valna funkcija po kriterijima koje smo naveli ranije. Neke od grešaka koje se mogu dogoditi su da valna funkcija ima krivi broj čvorova (za osnovno stanje broj čvorova je nula) ili da divergira.

Za određivanje ispravne energije koristili smo metodu pogađanja (shooting). [8] Ovo je jednostavna metoda koja se zasniva na tome da krenemo od neke početne energije, izračunamo valnu funkciju za tu energiju, provjerimo je li valjana te ako nije ovisno o tome kakvu pogrešku dobijamo povećamo ili smanjimo energiju na neku pogodniju vrijednost. Onda postupak ponovimo za tu energiju sve dok ne dođemo do neke granice koju smo sami postavili. Primjerice, granica može biti broj iteracija ovog postupka. Ispravnoj energiji možemo se približavati na razne načine. Za potrebe ovog rada korištena je metoda bisekcije. Metoda bisekcije se zasniva na tome da odaberemo minimalnu i maksimalnu energiju, E_{\min} i E_{\max} , i taj interval sužavamo na pola u svakoj iteraciji tako da odbacimo onu polovicu unutar koje se ne nalazi ciljana energija. Na taj način dobijemo upola manji interval koji još uvijek sadrži ispravnu energiju kojoj se možemo sve preciznije približavati. Minimalna i maksimalna energija odabiru se tako da imaju smisla za zadani problem. Kako u ovom radu promatramo vezani sustav znamo da maksimalna energija sigurno ne može biti veća od nule pa stavljamo $E_{\max} = 0$. Nadalje, energija osnovnog stanja je sigurno veća od minimuma potencijalne energije pa za E_{\min} postavljamo upravo $E_{\min} = \min(V(r))$. Odabir ispravne polovice intervala obavljamo na temelju izgleda valne funkcije na energiji

$$E = \frac{E_{\max} - E_{\min}}{2}. \quad (2.24)$$

Korištena su dva kriterija kojima smo određivali koji interval zadržati.

Prvi je kriterij ispravan broj čvorova (nultočaka) koji daje grubu procjenu energije. U ovome dijelu algoritma, rješavamo jednadžbu 2.19 od x_{\min} do kraja klasično dozvoljenog područja. Modificirani Lennard-Jonesov potencijal ima dvije klasične točke obrata. To su točke u kojima je ukupna energija jednaka potencijalnoj, tj. gdje se one sijeku. Drugim riječima, to su točke u kojima funkcija $E - V$ mijenja predznak. Stoga klasično dozvoljeno područje, ako idemo u pozitivnom smjeru završava u drugoj klasičnoj točki obrata, koju ćemo označiti x_{ikl} . Ako smo uzeli premal interval, tj. ako je $x_{\max} < x_{\text{ikl}}$, trebamo proširiti interval povećavanjem x_{\max} . Razlog zašto ne provodimo Numerovu metodu na dijelu intervala nakon x_{ikl} je to što tu funkcija svakako sigurno nema nultočke već mora eksponencijalno opadati, jer je to klasično zabranjeno područje. Sada, ako valna funkcija ima više od željenog broja čvorova, koji je u našem slučaju nula, postavljamo $E_{\max} = E$, odnosno smanjujemo energiju. Kada bismo promatrali neko pobuđeno stanje, koje ima više od nula čvorova, u slučaju da dobijemo premali broj čvorova trebali bismo povećati energiju tj. postaviti $E_{\min} = E$.

Brojanjem čvorova dobijamo grubu procjenu energije. Zbog toga provodimo drugi dio algoritma kojim dobivamo finiju procjenu. U ovom dijelu algoritma koristimo kriterij za

neprekidnost valne funkcije i njene prve derivacije. Za ovo provodimo metodu usklađivanja (matching) [8]. U prvom dijelu ove metode Numerovom metodom slijeva dobijamo valnu funkciju od x_{\min} do x_{ikl} te zdesna od x_{\max} do x_{ikl} . Ova dva dijela grafa funkcije se u pravilu neće susresti, jer to ovisi o početnom odabiru vrijednosti druge i predzadnje točke. Drugim riječima, $y_{ikl}^L \neq y_{ikl}^D$, gdje su y_{ikl}^L i y_{ikl}^D funkcijske vrijednosti lijeve i desne strane u x_{ikl} . Zbog ovoga moramo ili lijevi ili desni dio skalirati za omjer y_{ikl}^L i y_{ikl}^D . Primjerice, valnu funkciju u području domene $x_i > x_{ikl}$ pomnožimo s: y_{ikl}^L/y_{ikl}^D . Nakon ovog skaliranja cijelu funkciju normiramo formulom (2.23) u diskretiziranom obliku

$$\text{norma} = \Delta x \sum_{i=0}^{Nx} y_i^2, \quad y_i = \frac{y_i}{\sqrt{\text{norma}}}. \quad (2.25)$$

Ovim smo postigli neprekidnost valne funkcije. U drugom dijelu metode usklađivanja osiguravamo neprekidnost prve derivacije. Lijevi i desni dio razvijamo u red oko x_{ikl} u točkama x_{ikl-1} i x_{ikl+1} . Radi preglednosti označit ćemo indeks ikl sa i . U Taylorovom razvoju ćemo zanemariti sve nakon drugog reda:

$$y_{i-1}^L = y_i^L - y_i'^L \Delta x + \frac{1}{2} y_i''^L (\Delta x)^2 + O[(\Delta x)^3], \quad (2.26)$$

$$y_{i+1}^D = y_i^D + y_i'^D \Delta x + \frac{1}{2} y_i''^D (\Delta x)^2 + O[(\Delta x)^3]. \quad (2.27)$$

Zbrojimo li ove dvije jednadžbe i umemo li u obzir da je $y_i^L = y_i^D$ jer smo desnu stranu skalirali u prvom dijelu metode dobijemo

$$(y_i'^D - y_i'^L) \Delta x = y_{i-1}^L + y_{i+1}^D - (y_i^L + y_i^D) - \frac{1}{2} (y_i''^L + y_i''^D) (\Delta x)^2. \quad (2.28)$$

Sada iskoristimo činjenicu da je $y_i^L = y_i^D$ jer smo desnu stranu skalirali u prvom dijelu metode, te da je, prema (2.20)

$$y_i''^D = y_i''^L = -g_i y_i$$

čime (2.28) postaje

$$y_i'^D - y_i'^L = \frac{y_{i-1}^L + y_{i+1}^D - (14 - 12f_i)}{\Delta x} + O[(\Delta x)^2]. \quad (2.29)$$

Ako je za zadanu energiju $y_i'^D - y_i'^L > 0$ to znači da je trenutna energija prevelika pa trebamo probati s većom energijom, odnosno postavljamo E_{\max} na trenutnu energiju. Ako je pak $y_i'^D - y_i'^L < 0$ energija je premala te interval energija mijenjamo na način da postavljamo E_{\min} na zadanu energiju.

Ovaj postupak pogađanja i usklađivanja uz upotrebu Numerove metode za računanje valne funkcije ponavljamo dok ne dođemo do točne vrijednosti energije osnovnog stanja. To znači da naš program treba moći prepoznati kada je do toga došlo i zaustaviti se. Za potrebe ovog rada

odlučili smo to napraviti tako da ograničimo kolika može biti maksimalna razlika ϵ između E_{\min} i E_{\max} te kada bi se došlo do te granice program bi se zaustavio i uzela bi se ta energija. Kao dodatna "mjera opreza" postavljen je i dodatni uvjet da se može izvršiti maksimalno $N_k = 1000$ iteracija kako bismo izbjegli predugo izvršavanje i beskonačne petlje.

Naposlijetku, za ispravnu energiju i pripadnu valnu funkciju izračunata je i srednja kvadratna udaljenost

$$\langle r^2 \rangle = \int y^2(r) r^2 dr. \quad (2.30)$$

Pseudokod

//postavljanje početnih postavki i pomoćnih veličina

$x_{\min}, x_{\max}, N_x, N_{\text{cvor}}, y_0, y_1, y_{N_x}, y_{N_x-1}, E_{\max}, E_{\min}, \epsilon, N_0, \Delta x, E$

//postavljanje funkcije potencijala V_i

dok $k < N_k \wedge E_{\max} - E_{\min} > \epsilon$:

 //traženje klasičnih točaka obrata

za $i = 1, \dots, N_x$:

$f_i = V_i - E$

ako $V_i - E$ mijenja predznak:

$x_{\text{ikl}} = x_i$

ako nema klasičnih točaka obrata:

 IZLAZ

 //računanje lijevog dijela valne funkcije Numerovom metodom

za $i = 1, \dots, \text{ikl}$:

$y_{i+1} = \frac{(12-10f_i)y_i - f_{i-1}y_{i-1}}{f_{i+1}}$

 //brojanje nultočaka valne funkcije N_0

ako $N_0 \neq N_{\text{cvor}}$

ako $N_0 > N_{\text{cvor}}$:

$E_{\max} = E$

inače:

$E_{\min} = E$

$E = \frac{E_{\max} + E_{\min}}{2}$ //računanje desnog dijela valne funkcije Numerovom metodom

za $i = N_x - 1, \dots, \text{ikl} + 1$:

$y_{i-1} = \frac{(12-10f_i)y_i - f_{i+1}y_{i+1}}{f_{i-1}}$

 //skaliranje desnog dijela rješenja za omjer $y_{\text{ikl}}^L / y_{\text{ikl}}^D$

za $i = N_x - 1, \dots, \text{ikl} + 1$:

$y_i = y_i \cdot \frac{y_{\text{ikl}}^L}{y_{\text{ikl}}^D}$

Pseudokod (nastavak)

inače:

//normiranje valne funkcije

norma = 0

za $i = 0, \dots, N_x$:norma = norma + $y_i^2 \cdot \Delta x$ norma = $\sqrt{\text{norma}}$ **za** $i = 0, \dots, N_x$: $y_i = \frac{y_i}{\text{norma}}$

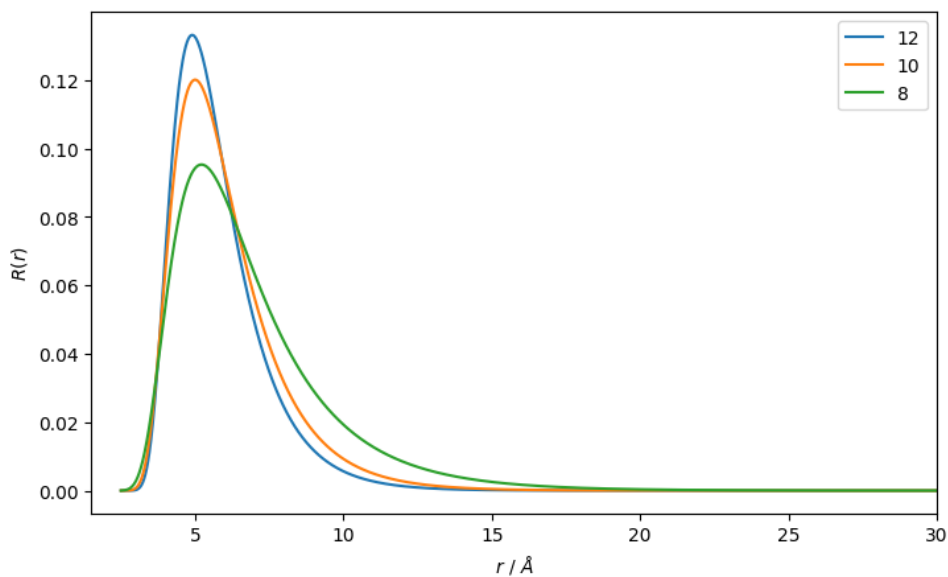
//provjera neprekidnosti derivacije

skok = $y_{ikl}^L - y_{ikl}^D$ **ako** skok > 0: $E_{\max} = E$ **inače:** $E_{\min} = E$ $E = \frac{E_{\max} - E_{\min}}{2}$

//računanje srednje kvadratne udaljenosti pomoću (2.30)

 $\langle r^2 \rangle = 0$ **za** $i = 1, \dots, N_x$: $\langle r^2 \rangle = \langle r^2 \rangle + y_i^2 \cdot x_i^2 \cdot \Delta x$

Na slici 2 vidimo primjere valnih funkcija koje dobijemo provođenjem ovog algoritma.



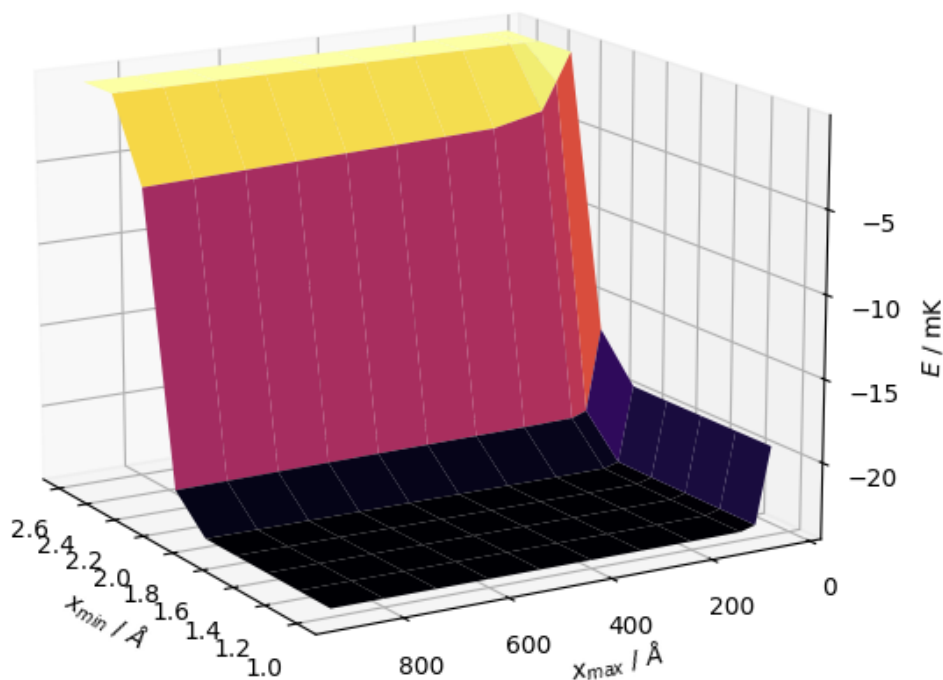
Slika 2: Valne funkcije za modificirani Lennard-Jonesov potencijal s parametrima $\varepsilon = 20000$ mK, $\sigma = 4$ Å te različite potencije kratkodosežnog dijela potencijala n

3 Provjera proizvoljnih parametara u algoritmu

Kako bismo znali dobivamo li ispravne rezultate trebamo se uvjeriti da smo zadali simlene vrijednosti za sve proizvoljno odabrane veličine.

3.1 Provjera intervala udaljenosti

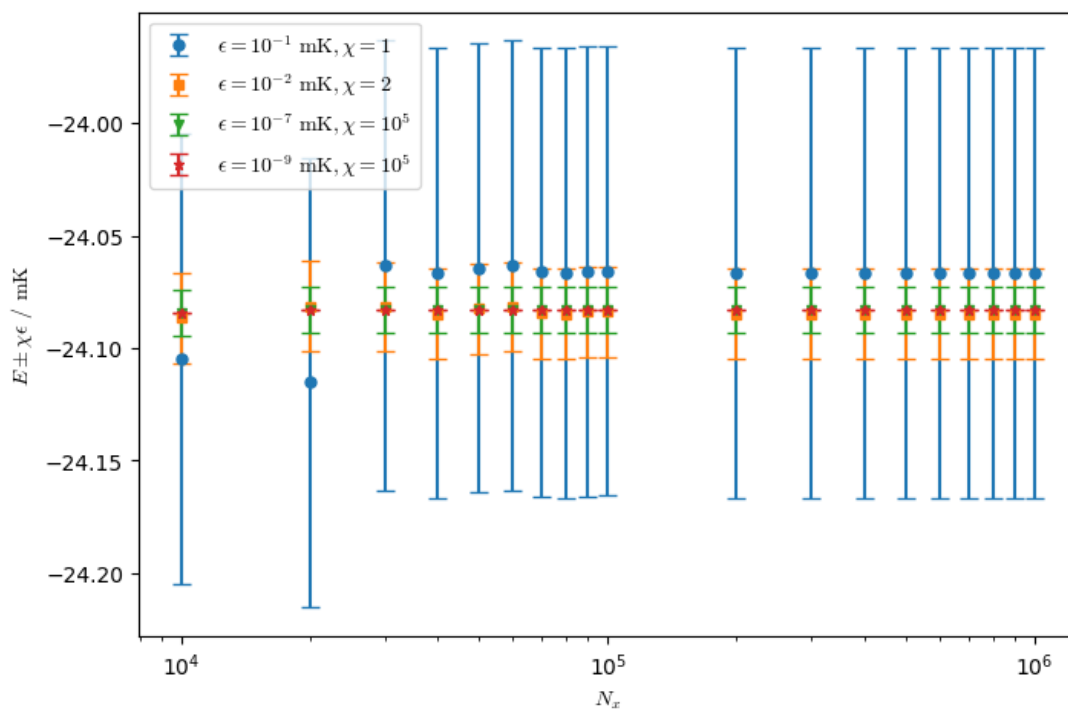
Za potrebe testiranja intervala udaljenosti dviju čestica korišten je Lennard-Jonesov (12-6) potencijal s parametrima: $\epsilon = 10934$ mK i $\sigma = 2.637$ Å. Računali smo valne funkcije za devet vrijednosti x_{\min} u rasponu od 1 Å do 2.6 Å te jedanaest vrijednosti x_{\max} od 40 Å do 900 Å. Za maksimalnu razliku između E_{\max} i E_{\min} uzeto je $\epsilon = 10^{-7}$ mK. Interval $[x_{\min}, x_{\max}]$ smo podijelili na $N_x = 200000$ dijelova. Na slici 3 vidimo ovisnost energije o x_{\min} i x_{\max} . Iz ovog grafa možemo zaključiti da su, za zadane parametre, dobre vrijednosti za x_{\min} od 1 Å do 1.6 Å, a za x_{\max} od 200 Å do 900 Å. Energije za ove parametre se razlikuju tek na šestoj decimali, a iznose $E = -24.08289$ mK. Razlika reda veličine 10^{-5} mK je zanemariva pa sve ove intervale možemo smatrati kao ispravan izbor.



Slika 3: Ovisnost energije osnovnog stanja helijeve $^4\text{He}_2$ dimera o granicama domene x_{\min} i x_{\max} za Lennard-Jonesov potencijal s parametrima $\epsilon = 10934$ mK, $\sigma = 2.637$ Å

3.2 Provjera diskretizacije i pogreške

Osim x_{\min} i x_{\max} proizvoljno biramo i N_x , što je broj dijelova na koji dijelimo interval $[x_{\min}, x_{\max}]$, te ϵ , što je maksimalna pogreška u energiji, odnosno maksimalni dozvoljeni razmak energija E_{\min} i E_{\max} . Izračuni su provedeni uz iste parametre potencijala ϵ i σ kao u prethodnom potpoglavlju, a granice udaljenosti zadane su s $x_{\min} = 1.5 \text{ \AA}$ i $x_{\max} = 801 \text{ \AA}$. Provjerene su četiri vrijednosti pogreške: $10^{-1}, 10^{-2}, 10^{-7}, 10^{-9} \text{ mK}$. S grafa na slici 4 vidi se da samo točke sa $\epsilon = 10^{-1} \text{ mK}$ značajno odstupa od ostalih za isti N_x pa možemo zaključiti da je razumno uzeti bilo koji $\epsilon \leq 10^{-2} \text{ mK}$. Da uzmemo što manju pogrešku, a da izbjegnemo predugo izvršavanje programa, za sve ostale izračune odabrano je $\epsilon = 10^{-7} \text{ mK}$. Na grafu su pogreške skalirane za χ da se mogu vidjeti. N_x smo testirali za vrijednosti od 10^4 do 10^5 s razmacima od 10^4 te od 10^5 do 10^6 s razmacima od 10^5 . Sa slike 4 vidimo da nakon $N_x = 10^5$ dobivamo vrlo slične vrijednosti energija za svaki ϵ . Iz istog razloga kao i za ϵ , za ostale izračune korišteno je $N_x = 2 \cdot 10^5$.



Slika 4: Ovisnost energije osnovnog stanja helijeva ${}^4\text{He}_2$ dimera o diskretizaciji promatranog intervala, N_x te o iznosu pogreške energije ϵ (pogreška je skalirana χ puta da se može vidjeti na grafu)

4 Rezultati za modificirani Lennard-Jonesov potencijal

4.1 Bezdimezionalne veličine

Da bismo mogli rezultate različitih sustava međusobno uspoređivati definirat ćemo bezdimezionalnu udaljenost i energiju. Uvodimo bezdimezionalni ekvivalent srednje kvadratne udaljenosti tako što srednju kvadratnu udaljenost podijelimo kvadratom neke karakteristične veličine, koja je u angstromima

$$Y = \frac{\langle r^2 \rangle}{R^2}. \quad (4.1)$$

Za karakterističnu veličinu u ovom radu odabran je van der Waalsov radijus $R \equiv R_6$ koji je konstanta za svaki pojedini sustav. Definira se kao udaljenost pri kojoj je kinetička energija jednaka dugodosežnom dijelu Lennard-Jonesovog potencijala

$$\frac{\hbar^2}{2\mu R_6^2} = 4\varepsilon \frac{\sigma^6}{R_6^4} \implies R_6 = \left(\frac{8\varepsilon\mu\sigma^6}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{4}}. \quad (4.2)$$

Alternativno, R_6 možemo definirati preko točke minimuma potencijala r_{\min} koja je sa σ povezana relacijom

$$r_{\min} = 2^{1/6}\sigma. \quad (4.3)$$

Tada je

$$R_6 = \left(\frac{4\mu\varepsilon r_{\min}^6}{\hbar^2} \right). \quad (4.4)$$

Za bezdimezionalni ekvivalent energije odabrano je

$$X = \frac{|E|mR_6^2}{2\hbar^2}, \quad (4.5)$$

gdje je E energija osnovnog stanja. Definirajmo sada konstantu

$$C = \sqrt{\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}}. \quad (4.6)$$

Kako je za slučaj dvije iste čestice $\mu = m/2$, R_6 možemo zapisati kao

$$R_6 = (C^2 r_{\min}^6)^{1/4}. \quad (4.7)$$

4.2 Univerzalni odnos energije i širine dimera

Na $T = 0$ K klasični sustav miruje u minimumu potencijala pa je $\langle r^2 \rangle = r_{min}^2$. Onda je

$$Y_{kl} = \frac{\langle r^2 \rangle}{R_6^2} = \frac{r_{min}^2}{Cr_{min}^3} = \frac{1}{Cr_{min}}. \quad (4.8)$$

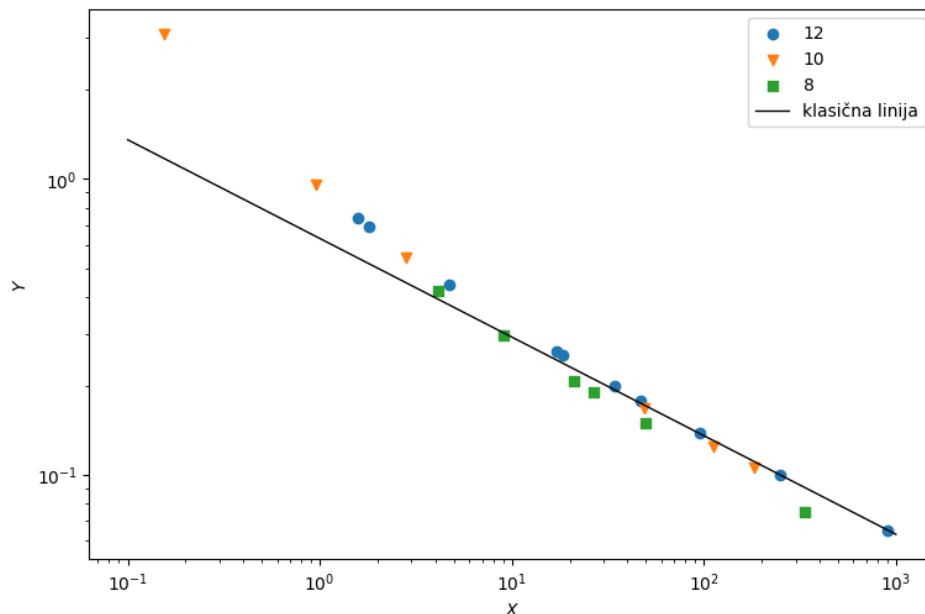
Energija je u tom slučaju potencijalna energija sustava ε pa je bezdimenzionalna energija

$$X_{kl} = \frac{\varepsilon m R_6^2}{2\hbar^2} = \frac{2\varepsilon m C r_{min}^3}{2 \cdot 2\hbar^2} = \frac{C^3 r_{min}^3}{4} = \frac{1}{4Y_{kl}^3} \quad (4.9)$$

te očekujemo da jako vezani sustavi prate klasičnu liniju

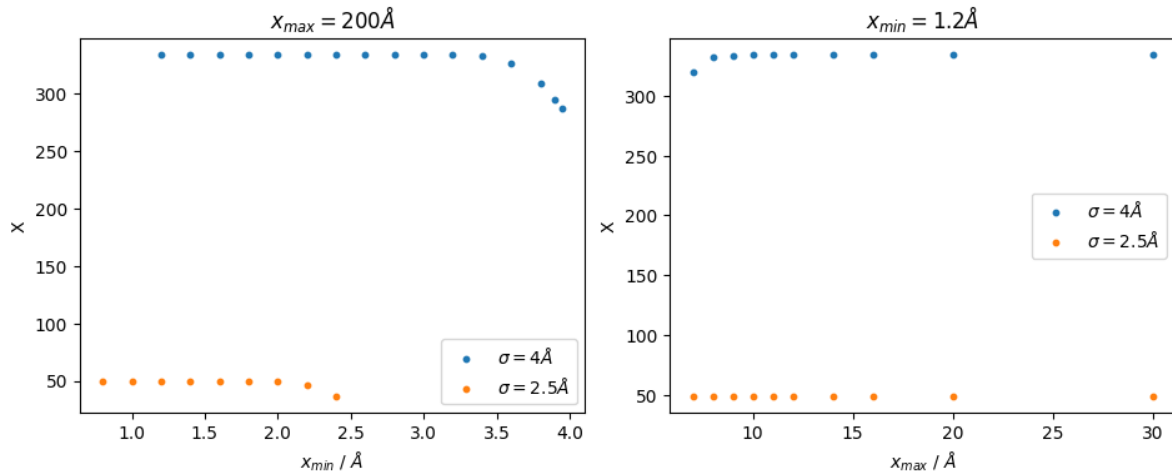
$$Y_{kl} = \frac{1}{(4X_{kl})^{1/3}}. \quad (4.10)$$

Testirali smo utjecaj kratkodosežnog (odbojnog) dijela potencijala, koji inače ima potenciju 12, s potencijama: 8, 10 i 12 na X - Y ovisnost. Sustave s različitim vezanjem dobiju se naravno mijenjanjem parametara ε i σ . Podaci za sve izračunate točke nalaze se u tablici 1 u dodatku A u kojoj se vide različite vrijednosti ovih parametara koje su uzete. Rezultate vidimo na slici 5, prikazane u logaritamskoj skali. Na ovoj slici se jasno vidi univerzalni odnos veličina X i Y ili drugim riječima, vrijednosti za različite sustave prate istu liniju.

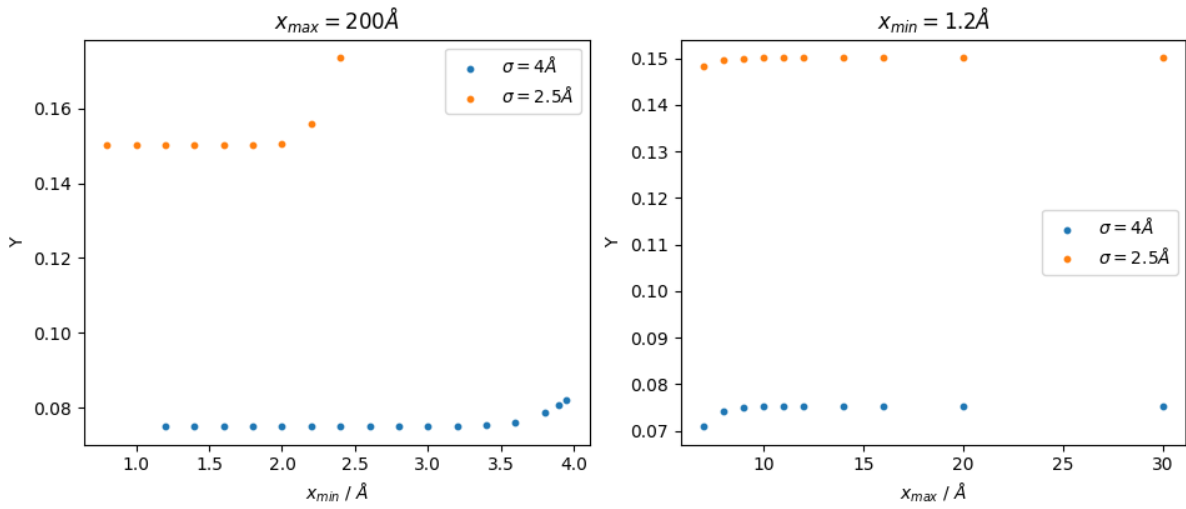


Slika 5: Ovisnost bezdimenzionalne srednje kvadratne udaljenosti $Y = \langle r^2 \rangle / R_6^2$ o bezdimenzionalnoj energiji $X = |E|mR_6^2/2\hbar^2$ za različite potencije Lennard-Jonesovog potencijala te različite parametre ε i σ

Na grafu se točke krenu jako dobro slagati s klasičnom linijom na $X \approx 4$ s tim da potencija 8 ima najlošije slaganje, no odstupanja nisu velika. Kako vezanje slabi sve veći je utjecaj kvantnog tuneliranja zbog čega dobivamo veće udaljšavanje od klasične linije. Za kraj možemo provjeriti kako bi odabir proizvoljnih parametara x_{\min} i x_{\max} utjecao na ova rješenja za dvije zelene desne točke na slici 5. One se dobiju za sustav gdje je potencija kratkodosežnom dijelu potencijala $n = 8$, te gdje je za oba sustava $\varepsilon = 10^6$ mK, ali je za jednu (lijevu) $\sigma = 4 \text{ \AA}$, a za drugu (desnu) $\sigma = 2.5 \text{ \AA}$. Na slici 6 vidimo kako x_{\min} i x_{\max} utječu na X , a na slici 7 kako utječu na Y . Bitno je odabrati takve x_{\min} i x_{\max} da izvan njih valna funkcija stvarno može biti aproksimirana nulom. Što se tiče x_{\min} , vidimo da za ova dva sustava dobijamo neprecizne rezultate tek kada se jako približimo vrijednosti σ za taj sustav, pa tako za $\sigma = 2.5 \text{ \AA}$ rješenja za X krenu odudarati od ostalih tek na $x_{\min} = 2 \text{ \AA}$, a za $\sigma = 4 \text{ \AA}$ na $x_{\min} = 3.4 \text{ \AA}$. Nadalje, na desnim grafovima na slikama 6 i 7 su rezultati za X i Y uz fiksni x_{\min} za različite x_{\max} . Možemo primijetiti da su sva rješenja za $x_{\max} > 10 \text{ \AA}$ jednaka pa možemo biti sigurni da su te vrijednosti dobri početni uvjeti, tj. da takvim odabirom ne zanemarujemo kvantne efekte prisutne u sustavu.



Slika 6: Ovisnost $X = |E| m R_6^2 / \hbar^2$ o proizvoljnom odabiru x_{\min} pri konstantnom x_{\max} (lijevi graf), te o odabiru x_{\max} pri konstantnom x_{\min} (graf desno) za sustave s potencijom kratkodosežnog dijela potencijala $n = 8$ te $\varepsilon = 10^6$ mK i različite σ



Slika 7: Ovisnost $Y = \langle r^2 \rangle / R_6^2$ o proizvoljnom odabiru x_{min} pri konstantnom x_{max} (lijevi graf), te o odabiru x_{max} pri konstantnom x_{min} (graf desno) za sustave s potencijom kratkodosežnog dijela potencijala $n = 8$ te $\varepsilon = 10^6$ mK i različite σ

5 Zaključak

Cilj ovog završnog rada bio je provjeriti kako potencija odbojnog dijela Lennard-Jonesovog potencijala utječe na jačinu vezanja kvantnih dimera, točnije na energiju osnovnog stanja te srednju kvadratnu udaljenost.

Za opis kvantnog sustava koristimo valnu funkciju. Valnu funkciju, naravno, dobijemo rješavanjem Schrödingerove jednadžbe sustava. Schrödingerova jednadžba koja pripada promatranom sustavu nije analitički rješiva pa smo koristili Numerovu metodu, numeričku metodu za rješavanje diferencijalnih jednadžbi drugog stupnja, koje pritom nemaju član s prvom derivacijom, što upravo opisuje diferencijalnu jednadžbu koju smo trebali riješiti.

Kako za kvantne sustave ne znamo unaprijed svojstvenu energiju osnovnog stanja, ona uz valnu funkciju predstavlja još jednu nepoznanicu. Za određivanje ispravne energije korištena je metoda pogađanja i usklađivanja (shoot and match). Dio s pogađanjem sastoji se od toga da odaberemo početni interval energija, za što smo odabrali područje između minimuma potencijala i nule, jer znamo da energija vezanog stanja mora biti unutar tih vrijednosti, te nakon toga taj interval iterativno raspolavljamo metodom bisekcije dok ne dođemo do unaprijed zadane maksimalne konačne širine intervala, tj. dok ne dobijemo željenu preciznost. Uvjet prema kojem sužavamo interval jest broj nultočaka jer znamo da osnovno stanje nema nultočke. Nakon toga smo usklađivanjem rješenja lijevo i desno od druge klasične točke obrata dobili finiju procjenu energije koristeći uvjete za valnu funkciju koji kažu da ona mora biti neprekidna, normirana te da njena prva derivacija mora biti neprekidna.

Za provođenje upravo opisanog algoritma bilo je potrebno unaprijed definirati neke proizvoljne parametre, a to su: početna i krajna točka intervala na kojem provodimo algoritam, diskretizacija tog intervala te preciznost energije. Analizirali smo njihov utjecaj na rješenja da se uvjerimo da odabiremo adekvatne vrijednosti.

Naposlijetku smo uveli bezdimenzionalne veličine koje smo koristili za provjeru utjecaja potencije kratkodosežnog (odbojnog) člana Lennard-Jonesovog potencijala na karakteristike sustava. Pokazan je univerzalni odnos skalirane srednje kvadratne udaljenosti i skalirane energije.

Osim samog iznošenja rezultata, ovaj rad služi i kao detaljan opis korištenog programa za rješavanje diferencijalnih jednadžbi te sada imamo program kojim možemo riješiti diferencijalnu jednadžbu za proizvoljan potencijal.

6 Literatura

- [1] R. Pal, A. Poddar, P. K. Chattaraj: *Atomic Clusters: Structure, Reactivity, Bonding, and Dynamics*
URL: <https://www.frontiersin.org/journals/chemistry/articles/10.3389/fchem.2021.730548/full>
(27. 8. 2024.)
- [2] R. L. Johnston: *Atomic and Molecular Clusters (Masters Series in Physics and Astronomy, Vol. 2)*, Taylor & Francis, London i New York, 2002.
- [3] G. W. F. Drake (urednik): *Handbook of Atomic, Molecular, and Optical Physics*, Springer, Würzburg, 2006.
- [4] N. Zettili: *Quantum Mechanics Concepts and Applications*, izd. 2, Wiley, 2009.
- [5] X. Wang, S. Ramirez-Hinestrosa, J. Dobnikar, D. Frenkel: The Lennard-Jones potential: when (not) to use it., Journal: Royal Society of Chemistry (RSC), 2019.
- [6] Eite Tiesinga, Peter J. Mohr, David B. Newell, Barry N. Taylor: *The 2018 CODATA Recommended Values of the Fundamental Physical Constants*, web-verzija 8.1, bazu razvili J. Baker, M. Douma i S. Kotochigova, National Institute of Standards and Technology (NIST), Gaithersburg, MD 20899.
URL: <http://physics.nist.gov/constants> (1. 9. 2024.)
- [7] *Nuclear Periodic Table & Isotopic data*, Radiochemistry Society, Los Alamos National Laboratory, 2003.
URL: <http://www.radiochemistry.org/periodictable> (1. 9. 2024.)
- [8] Morten Hjorth-Jensen: *Computational Physics*, University of Oslo, 2010.
- [9] P. Giannozzi: *Numerical Methods in Quantum Mechanics*, University of Udine, 2013.
- [10] G. B. Arfken, H. J. Weber, F. E. Harris: *Mathematical Methods for Physicists*, 6th edition, 2005.
- [11] P. Moscato, M. N. Haque: *New alternatives to the Lennard-Jones potential*, Sci Rep **14**, 11169, 2024.
DOI: <https://doi.org/10.1038/s41598-024-60835-8>

A Numerički podatci

Tablica 1: Numerički izračunate vrijednosti energije osnovnog stanja E , srednje kvadratne udaljenosti $\langle r^2 \rangle$, bezdimenzionalne energije X i bezdimenzionalne srednje kvadratne udaljenosti Y za različite parametre Lennard-Jonesovog potencijala ε i σ te različite potencije odbojnog dijela potencijala n

ε [mK]	σ [mK]	n	E [mK]	$\langle r^2 \rangle$ Å	X	Y
10000	4	12	-990.1421715	51.04443486	4.74965	0.43901
20000	4	12	-5081.813954	32.88237096	34.47446	0.19998
50000	4	12	-23150.6008	26.04209088	248.31956	0.10017
100000	4	12	-59603.55657	23.82788542	904.14032	0.06481
20000	2.5	12	-1088.900587	27.78659602	1.80346	0.69216
40000	2.5	12	-7845.274661	14.35668712	18.37561	0.25288
80000	2.5	12	-28717.6205	11.18569335	95.12555	0.13932
6000	4.5	12	-299.6813847	94.7763678	1.58546	0.73909
12000	4.5	12	-2274.878492	47.22495329	17.02041	0.26041
18000	4.5	12	-5128.832964	39.70169138	46.99764	0.17875
20000	2.5	10	-573.7242703	38.33954717	0.95022	0.95504
70000	2.5	10	-15883.80379	12.61309717	49.21611	0.16794
130000	2.5	10	-43126.63713	10.79983056	182.10463	0.10552
10000	4	10	-590.1379841	62.99727227	2.83085	0.54181
6000	4	10	-41.56364009	278.4322226	0.15444	3.09152
40000	4	10	-11702.66031	29.06334305	112.27376	0.12498
20000	4	8	-1332.918663	48.64417796	9.04237	0.29583
30000	4	8	-3197.250561	38.31323194	26.56446	0.19025
100000	4	8	-21990.77674	27.62598501	333.58325	0.07514
100000	2.5	8	-13305.51864	13.47150894	49.27601	0.15007
70000	2.5	8	-6809.425435	15.64966602	21.09906	0.20837
40000	2.5	8	-1770.552364	23.85010171	4.14708	0.42010