

## 4.3 – Modul pružnosti alkalických kovů

### Zadání

Odhadněte modul pružnosti pro alkalické kovy: Li, Na, K, Rb, Cs. Výsledky porovnejte s experimentálními hodnotami.

### Řešení

Pro modul pružnosti platí následující vztah:

$$B = V \cdot \frac{d^2U}{dV^2}, \quad (1)$$

kde  $U$  je energie systému, kterou lze vyjádřit jako  $U = N \cdot E_{\text{tot}}$ . Pro celkovou energii platí  $E_{\text{tot}} = E_k + E_x + E_c$ . Každou z energií přitom počítáme na jeden elektron. Celkovou energii si pak můžeme vyjádřit jako funkci  $r_s$ , což je Wignerův poloměr.

Wignerův poloměr lze vyjádřit z hustoty:

$$\frac{1}{n} = \frac{4}{3}\pi r_s^3 \Rightarrow r_s = \left(\frac{3}{4\pi n}\right)^{\frac{1}{3}}, \quad (2)$$

kde  $n = N/V$  a výsledný vztah je pak

$$r_s = \left(\frac{3V}{4\pi N}\right)^{\frac{1}{3}}. \quad (3)$$

Pro  $U$  platí

$$U = N \cdot \left( \frac{2.21}{r_s^2} - \frac{0.916}{r_s} - \frac{0.88}{r_s + 7.8} \right) \quad (4)$$

$$U = \frac{N \cdot 2.21}{\left(\frac{3V}{4\pi N}\right)^{\frac{2}{3}}} - \frac{N \cdot 0.916}{\left(\frac{3V}{4\pi N}\right)^{\frac{1}{3}}} - \frac{N \cdot 0.88}{\left(\frac{3V}{4\pi N}\right)^{\frac{1}{3}} + 7.8} \quad (5)$$

Dostali jsme  $U = U(V)$  a nyní je třeba pouze provést derivace naznačené v 1. Výsledný vztah je v  $Ry$ ,  $r_s$  je bezrozměrná veličina, neboť se jedná přímo o podíl poloměru koule obsahující jeden elektron a Bohrova poloměru.

$$B = \frac{5 \cdot 2.21}{6\pi} \cdot \frac{1}{r_s^5} - \frac{0.916}{3\pi} \cdot \frac{1}{r_s^4} + \frac{0.88}{3\pi} \cdot \frac{1}{r_s^4} [Ry] \quad (6)$$

### Výsledky

Tabulkové hodnoty jsou převzaty z Kittela.

kov	$r_s$	$B_{\text{exp}} \cdot 10^{11} [\text{Nm}^2]$	$B_{\text{výp}} \cdot 10^{11} [\text{Nm}^2]$
Li	3.25	0.116	0.117
Na	3.93	0.068	0.067
K	4.86	0.032	0.031
Rb	5.20	0.031	0.030
Cs	5.63	0.020	0.019