

М.Д. Раранський, В.Н. Балазюк, М.І. Мельник, М.М. Гунько, Я.С. Вербчан

## Закономірності формування поверхонь модулів Юнга монокристалів кубічної сингонії

Чернівецький національний університет ім. Ю.Федьковича, вул. Коцюбинського, 2,  
50012 Чернівці, Україна, e-mail: [fit2010@bigmir.net](mailto:fit2010@bigmir.net)

Проведено аналіз пружних властивостей деяких металів, напівпровідників і лужно-галоїдних сполук. Виявлено особливості формування характеристичних поверхонь модулів Юнга. Визначені екстремальні значення модулів Юнга в основних кристалографічних напрямках. Встановлено механізми формування характеристичних поверхонь модулів Юнга.

**Ключові слова:** хімічний зв'язок, пружні модулі, характеристична поверхня модуля Юнга, ступінь іонності і ковалентності, множник пружної анізотропії, модуль зсуву, співвідношення Коші.

Стаття поступила до редакції 10.02.2014; прийнята до друку 15.09.2014.

### Вступ

Пружні властивості ізотропних середовищ описуються модулем Юнга  $E$ , модулем зсуву  $G$  та коефіцієнтом Пуассона  $\nu$ , які є фундаментальними константами конструкційних матеріалів. В анізотропних середовищах, зокрема в монокристалах, вказані величини є тензорними і залежать від напрямку їх вимірювання. Переважна більшість експериментальних досліджень пружних властивостей монокристалів обмежується визначенням швидкостей поширення ультразвукових хвиль  $u_s$  у різних кристалографічних напрямках та розрахунком модулів пружності  $C_{ij}$ , пружних податливостей  $S_{ij}$ , модулів Юнга  $E_i$ , коефіцієнтів Пуассона  $\nu$  та ін. [1-3]. Дані параметри описують механічні властивості твердих тіл і залежать від типу кристалічної ґратки, сил міжатомної взаємодії та характеру хімічного зв'язку. Інтерпретація експериментальних результатів потребує залучення не тільки сучасних методів фізичної акустики, але й мікроскопічної теорії пружності анізотропних твердих тіл та динаміки кристалічної ґратки. Сучасні комп'ютерні методи дозволяють побудувати об'ємні зображення характеристичних поверхонь тензорних величин, вивчити їх морфологію та визначити екстремальні значення пружних характеристик твердих тіл.

У даній роботі використані швидкості поширення ультразвукових хвиль  $u_s$  у різних кристалографічних

напрямах, визначені нами для монокристалів NaCl, KCl, LiF, CaF<sub>2</sub>, PbS, PbSe, PbTe, SnTe, ZnTe, CdTe і HgTe за методикою суміщення відбитих ехо-імпульсів на частоті 10 МГц [4-7]. Дані монокристали використовуються для виготовлення елементів оптичних систем, сенсорів електромагнітного та ядерного випромінювань, інжекційних лазерів з випромінюванням в спектральному діапазоні 30 мкм та інших оптоелектронних приладів. Із експериментальних значень  $u_s$  визначені модулі пружності  $C_{ij}$  та пружні податливості  $S_{ij}$ , модулі Юнга  $E_i$ . Для аналізу та співставлення отриманих результатів побудовані об'ємні зображення характеристичних поверхонь модулів Юнга для деяких лужних і перехідних металів та лужно-галоїдних сполук, модулі пружності  $C_{ij}$  яких взяті із робіт [8-9]. Визначені екстремальні значення модулів Юнга для всіх вказаних монокристалів.

### I. Експериментальні результати та їх обговорення

Пружні властивості монокристалів описуються модулями пружності  $C_{ij}$  або пружними податливостями  $S_{ij}$ . Для кристалів кубічної сингонії наявність осей 3-го і 4-го порядків приводить до

рівності між собою наступних компонент тензора модулів пружності:

$$\begin{aligned} C_{11} &= C_{22} = C_{33}; & C_{12} &= C_{13} = C_{33}; \\ C_{44} &= C_{55} = C_{66} \end{aligned} \quad (1)$$

Отже, у даному випадку незалежними є тільки три компоненти  $C_{11}$ ,  $C_{12}$  і  $C_{44}$ , які визначаються через пружні податливості  $S_{ij}$  наступним чином:

$$C_{11} = \frac{S_{11} + S_{12}}{(S_{11} - S_{12})(S_{11} + 2S_{12})}; \quad C_{12} = \frac{-S_{12}}{(S_{11} - S_{12})(S_{11} + 2S_{12})}; \quad C_{44} = \frac{1}{S_{44}}, \quad (2)$$

Більш детальну характеристику пружної анізотропії монокристалів можна отримати, побудувавши характеристичні поверхні модуля Юнга, модуля зсуву та коефіцієнта Пуассона. Для кристалів кубічної сингонії залежність модуля Юнга  $E_i$  від пружних податливостей  $S_{ij}$  записується у вигляді [2]

$$(E_n)^{-1} = S_{11} - (2S_{11} - 2S_{11} - S_{44})(n_1^2 n_2^2 + n_1^2 n_3^2 + n_2^2 n_3^2), \quad (3)$$

Таблиця 1

Множник пружної анізотропії та відношення модулів Юнга

Крист.	A	$X = E_{\max}/E_{\min}$	$X = E_{100}/E_{111}$	$X = E_{100}/E_{110}$
Li	8,38	6,941	0,198	0,358
Na	7	5,949	0,220	0,376
K	6,33	5,475	0,234	0,387
Rb	6,13	5,485	0,154	0,323
Cu	3,21	2,866	0,403	0,522
Ag	3,01	2,753	0,409	0,527
Au	2,88	2,74	0,425	0,540
Pd	2,78	2,59	0,444	0,555
HgTe	2,694	2,458	0,461	0,569
Ni	2,63	2,35	0,484	0,587
CdTe	2,417	2,225	0,390	0,512
ZnTe	2,114	1,924	0,550	0,640
Nb	1,959	1,853	0,568	0,655
LiF	1,939	1,721	0,607	0,686
Pt	1,59	1,545	0,669	0,736
Ta	1,568	1,497	0,689	0,751
Ir	1,515	1,415	0,725	0,780
Re	1,016	1,013	0,988	0,990
Co	1	1	1,000	1,000
W	0,995	1,004	1,004	1,003
Mo	0,775	1,248	1,232	1,186
NaCl	0,707	1,334	1,313	1,250
TlBr	0,661	1,438	1,411	1,329
CsCl	0,588	1,561	1,526	1,421
CaF <sub>2</sub>	0,559	1,636	1,597	1,477
PbS	0,51	1,761	1,723	1,578
RbF	0,409	2,137	2,066	1,852
KCl	0,375	2,261	2,182	1,946
KBr	0,351	2,411	2,323	2,058
RbCl	0,316	2,651	2,548	2,238
PbSe	0,292	2,782	2,671	2,337
RbBr	0,286	2,891	2,773	2,418
PbTe	0,269	2,936	2,815	2,452
RbI	0,255	3,193	2,996	2,597
SnTe	0,22	3,502	3,335	2,868

де  $n_1, n_2, n_3$  – напрямні косинуси.

Аналіз співвідношення (3) показує, що при рівності одного із множників нулю, модуль Юнга  $(E_n)^{-1} = S_{11}$ . Множник  $(n_1^2 n_2^2 + n_1^2 n_3^2 + n_2^2 n_3^2) = 0$  тільки у напрямках  $\langle 100 \rangle$ . Якщо  $(2S_{11} - 2S_{12} - S_{44}) = 0$ , то модуль Юнга  $E_n = 1/S_{11}$  у всіх напрямках, тобто кристал є пружно ізотропним. Дану умову записують у вигляді

$$A = \frac{2(S_{11} - S_{12})}{S_{44}} = 1 \quad \text{або} \quad A = \frac{2C_{44}}{C_{11} - C_{12}} = 1 \quad (4)$$

Величину  $A$  називають множником пружної анізотропії. Для реальних кристалів множник  $A$  може бути як більшим, так і меншим одиниці.

На рис. 1 наведені найбільш типові характеристичні поверхні модулів Юнга монокристалів кубічної сингонії з різним типом хімічного зв'язку у порядку зменшення множника пружної анізотропії  $A$ . Розрахунки поверхонь проведені за співвідношенням (3) з використанням експериментальних величин модулів пружності  $C_{ij}$  [5-9]. Аналіз наведених поверхонь показує, що екстремальні значення модулів Юнга спрямовані у певних кристалографічних напрямках, а характеристичні поверхні утворюють фігури, які мають усі елементи симетрії, властиві для даних монокристалів. Тому для зручності їх аналізу запишемо співвідношення (3) у вигляді

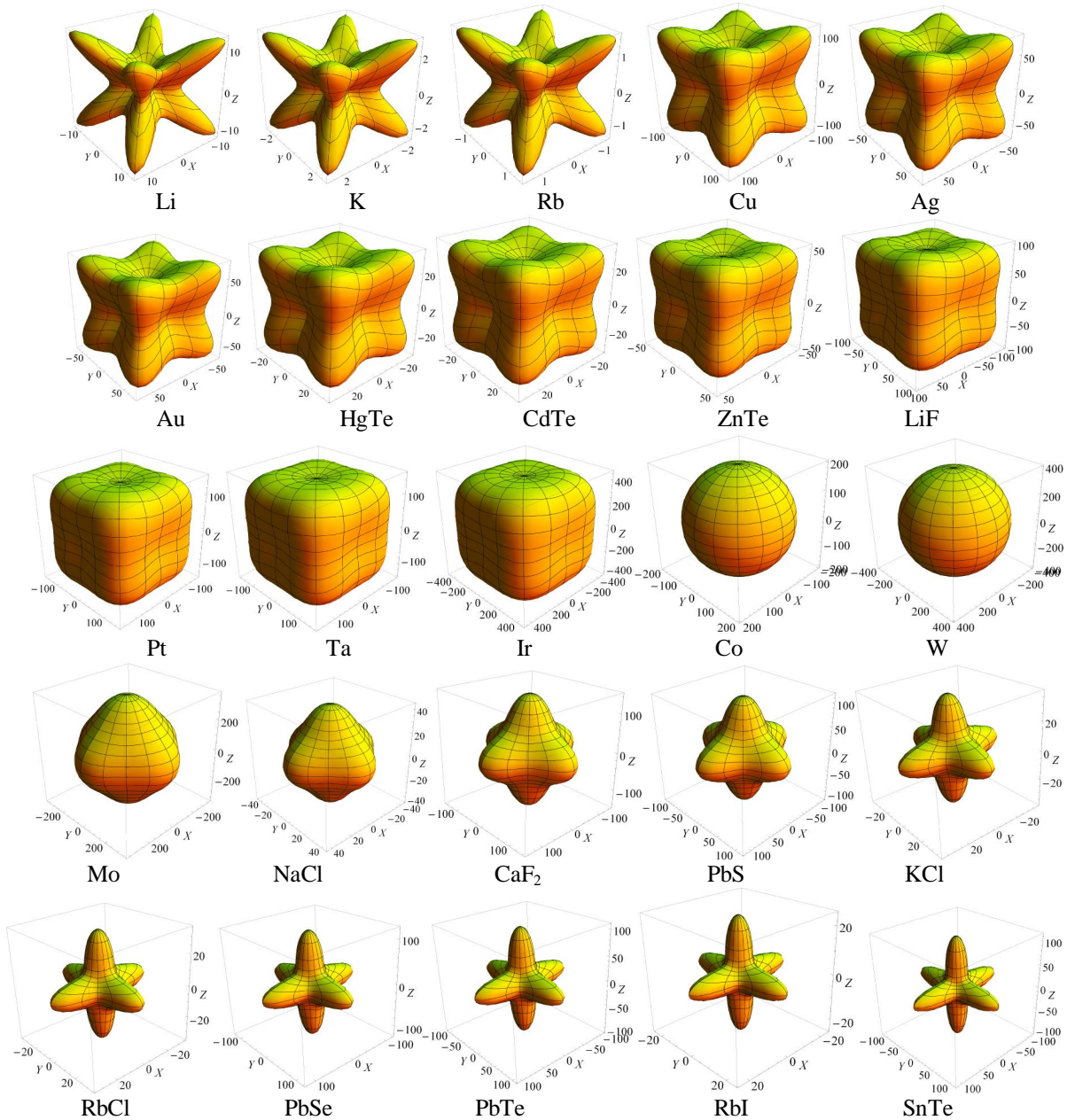


Рис. 1. Характеристичні поверхні модуля Юнга досліджуваних кристалів.

$$(E_{hkl})^{-1} = S_{11} - S_{44}(A-1) \frac{(h^2k^2 + k^2l^2 + l^2h^2)}{(h^2 + k^2 + l^2)^2}, \quad (5)$$

де  $A = \frac{2C_{44}}{C_{11} - C_{12}} = \frac{C_{44}}{C_S}$ ,  $\tilde{N}_S$  – модуль зсуву,  $h, k, l$  –

індекси Міллера. Із співвідношення (5) модулі Юнга в основних кристалографічних напрямках рівні:

$$E_{\langle 100 \rangle} = \frac{1}{S_{11}}; \quad E_{\langle 110 \rangle} = \frac{1}{S_{11} - \frac{1}{4}S_{44}(A-1)};$$

$$E_{\langle 111 \rangle} = \frac{1}{S_{11} - \frac{1}{3}S_{44}(A-1)}. \quad (6)$$

Оскільки абсолютні значення модулів Юнга для різних кристалів в одному і тому ж напрямку відрізняються суттєво, для аналізу формування характеристичних поверхонь необхідно ввести відносні величини

$$X = \frac{E_{\langle 111 \rangle}}{E_{\langle 100 \rangle}} = \frac{S_{11}}{S_{11} - \frac{1}{3}S_{44}(A-1)}, \quad (7)$$

Значення величин  $X$  наведені у таблиці 1.

Для лужних металів першої групи елементів, які мають ОЦК ґратку, просторова група симетрії  $O_h^9 - Im\bar{3}m$  (на рис. 1 наведені тільки Li, K, Rb), максимальні значення модулів Юнга зосереджені у напрямках  $\langle 111 \rangle$ , а мінімальні – у напрямках  $\langle 100 \rangle$ . Характеристичні поверхні зберігають усі елементи симетрії  $Im\bar{3}m$ . У той же час кути між максимальними значеннями модулів Юнга  $E^{\max}$  у площинах  $\{110\}$  не дорівнюють  $90^\circ$ . Із ростом іонних радіусів ( $r_{Li} = 0,68 \text{ \AA}$ ,  $r_K = 1,33 \text{ \AA}$ ,

$r_{Rb} = 1,49 \text{ \AA}$ ) спостерігається незначне розмиття орієнтації модулів Юнга. Далі на рис. 1 наведені перехідні метали Cu, Ag, Au (елементи першої побічної групи), які мають ГЦК ґратку, просторова група симетрії  $O_h^5 - Fm\bar{3}m$ . У них  $d$ -оболонки цілком заповнені, а іонні радіуси зі збільшенням порядкового номера  $Z$  зростають ( $r_{Ni} = 0,98 \text{ \AA}$ ,  $r_{Ag} = 1,13 \text{ \AA}$ ,  $r_{Au} = 1,37 \text{ \AA}$ ). Зміна типу кристалічної ґратки (ОЦК  $\rightarrow$  ГЦК) приводить до зменшення анізотропії модулів Юнга. Характеристичні поверхні поступово набувають форми куба із заокругленими вершинами і ребрами та увігнутими поверхнями граней. Із зменшенням фактора пружної анізотропії  $A$  спостерігається ріст величин  $E_{\langle 100 \rangle}$ , що приводить до вирівнювання граней куба. При цьому відбувається поступове зменшення  $X = E^{\max} / E^{\min}$  (рис. 2). Отже, основним механізмом формування характеристичних поверхонь металів першої групи є зміна типу кристалічної ґратки та довжин хімічних зв'язків (іонних радіусів).

Цікаво розглянути кристали кубічної сингонії, які мають інші типи хімічних зв'язків та кристалічних ґраток. Для цього на рис. 1 наведені характеристичні поверхні модулів Юнга напівпровідникових сполук HgTe, CdTe, ZnTe, які кристалізуються з утворенням ґратки типу сфалериту (просторова група симетрії  $T_d^2 - F\bar{4}3m$ ) і мають іонно-ковалентний характер хімічного зв'язку. Детальний аналіз хімічного зв'язку, анізотропії пружних властивостей та структурної стабільності даного типу напівпровідникових сполук наведений у роботах [5-7]. Характеристичні поверхні модулів Юнга мають

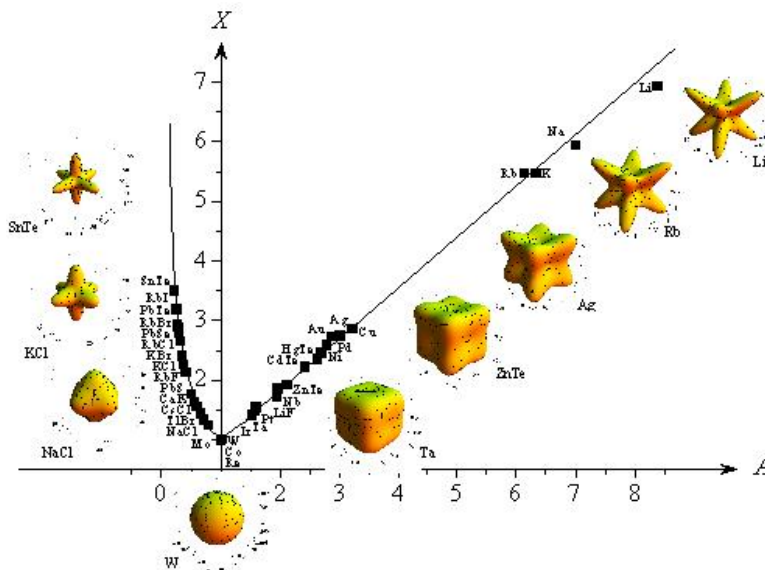


Рис. 2. Залежність  $X = E^{\max} / E^{\min}$  від множника пружної анізотропії  $A$ .

таку ж форму як і у металів Cu, Ag, Au та класичних гомеополарних напівпровідників C, Si, Ge,  $\alpha$ -Sn. Довжини хімічного зв'язку  $d$  для HgTe, CdTe, ZnTe змінюються у межах 2,8 - 2,64 Å. У той же час ступінь іонності змінюється суттєво за рахунок швидкої зміни модуля зсуву  $C_S$  ( $C_S(\text{HgTe}) = 1,506 \text{ Å}^{-1}$ ,  $C_S(\text{CdTe}) = 1,65 \text{ Å}^{-1}$ ,  $C_S(\text{ZnTe}) = 2,981 \text{ Å}^{-1}$ ). Модуль зсуву  $C_S$  пропорційний енергії ковалентного зв'язку і визначає розорієнтацію гібридизованих  $sp^3$ -орбіталей [5, 10], що приводить до зміни множника пружної анізотропії  $A$  та зменшення відношень  $E^{\max}/E^{\min}$ . Отже, основним механізмом формування характеристичних поверхонь модуля Юнга для даного типу кристалів є вирівнювання кутів гібридизованих  $sp^3$ -орбіталей.

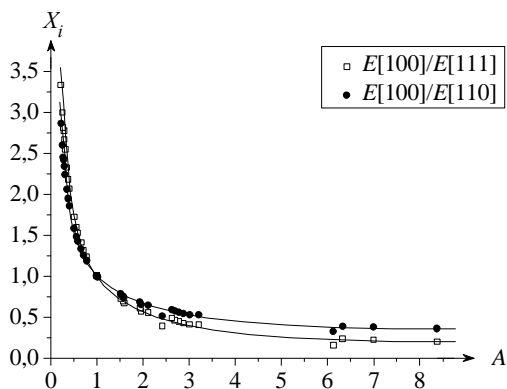
Розглянемо ще один особливий тип кубічних кристалів – ізокаційний ряд LiF, LiCl, LiBr, LiI. Дані лужно-галоїдні сполуки мають кристалічні ґратки типу NaCl, просторова група симетрії  $O_h^5 - Fm\bar{3}m$ . Характерною рисою даних кристалів є велика різниця між іонними радіусами катіона ( $r_{\text{Li}} = 0,68 \text{ Å}$ ) і аніонів ( $r_{\text{F}} = 1,33 \text{ Å}$ ,  $r_{\text{Cl}} = 1,81 \text{ Å}$ ,  $r_{\text{Br}} = 1,96 \text{ Å}$ ,  $r_{\text{I}} = 2,2 \text{ Å}$ ). Унаслідок цього катіони не дотикаються між собою у кристалічній ґратці, а сильний хімічний зв'язок виникає між атомами аніонів у напрямках  $\langle 110 \rangle$ . Це приводить до виникнення ковалентної складової хімічного зв'язку, а ступінь іонності  $f_i$  зі зростанням радіуса аніона швидко спадає ( $f_i(\text{LiF}) = 0,862$ ;  $f_i(\text{LiCl}) = 0,648$ ;  $f_i(\text{LiBr}) = 0,578$ ;  $f_i(\text{LiI}) = 0,463$ ). Модулі зсуву  $C_S$  і  $C_{44}$  синхронно спадають, але фактор пружної анізотропії залишається більшим одиниці. Отже, форма характеристичної поверхні модуля Юнга обумовлена в основному появою сильної ковалентної складової хімічного зв'язку. На рис. 1 наведена для прикладу тільки характеристична поверхня монокристалу LiF. Далі на рис. 1 ілюструються характеристичні поверхні групи перехідних металів, які у переважній більшості мають ГЦК ґратку, просторова група симетрії  $O_h^5 - Fm\bar{3}m$  (за винятком Ta, W і Mo – ОЦК ґратка). Форма поверхонь, як і для кристалів напівпровідникових сполук, залишається аналогічною, а із зменшенням множника пружної анізотропії зменшується відношення  $E^{\max}/E^{\min}$  і відбувається подальше вирівнювання граней куба. Особливістю цих елементів є незавершеність будови електронних  $3d$ -,  $4d$ -,  $5d$ -оболонки. Різний характер локалізації  $d$ - і  $s$ -електронів приводить до зменшення іонних радіусів, появи великої частки ковалентного

зв'язку та аномалій у зміні пружних і магнітних властивостей [10]. Зауважимо, що для всіх наведених кристалів з ростом атомного номера  $Z$  іонні радіуси практично не змінюються і рівні 0,6 – 0,7 Å, а пружні властивості змінюються у широких межах. Це пов'язано зі складними процесами гібридизації електронних  $s$ -,  $p$ -,  $d$ -орбіталей перехідних металів [10]. Тому для даних кристалів немає лінійної залежності між множником пружної анізотропії і атомним номером  $Z$ . Подальше зростання величин  $E_{\langle 110 \rangle}$  і  $E_{\langle 100 \rangle}$  приводить до рівності  $E_{\langle 111 \rangle} = E_{\langle 110 \rangle} = E_{\langle 100 \rangle}$  для монокристалів Re, Co, W (див. табл. 1). Множник пружної анізотропії  $A \approx 1$  і характеристичні поверхні модулів Юнга вироджуються у сферу (рис. 1). Отже, дані кристали є пружно ізотропними. Оскільки іонні радіуси перехідних металів практично не змінюються, то основний внесок у зміну модулів пружності  $C_{ij}$ , а, відповідно, множника  $A$  і характеристичної поверхні модуля Юнга дають процеси гібридизації атомних  $s$ -,  $p$ -,  $d$ -орбіталей.

Починаючи від Mo відбувається інверсія експериментальних значень модуля Юнга. Тепер максимальних значень набувають величини  $E_{\langle 100 \rangle}$ , а  $E_{\langle 111 \rangle}$  і  $E_{\langle 110 \rangle}$  поступово зменшуються. Характеристична поверхня вироджується із сфери в октаедр із заокругленими вершинами і ребрами. Така форма поверхонь є типовою для класичних лужно-галоїдних кристалів (за винятком галоїдів Li), флюоритів ( $\text{CaF}_2$ ,  $\text{SrF}_2$ ) та деяких халькогенідів напівпровідникових сполук ( $\text{PbS}$ ,  $\text{PbSe}$ ,  $\text{PbTe}$ ,  $\text{SnTe}$ ) (рис. 1). Дані сполуки мають кристалічну ґратку типу NaCl або  $\text{CaF}_2$ , просторова група симетрії  $O_h^5 - Fm\bar{3}m$ . Співвідношення між модулями пружності  $C_{ij}$  змінюються, що приводить до зменшення анізотропії  $A$  (див. табл. 1). При  $A < 0,4$  модулі Юнга  $E_{\langle 111 \rangle}$  і  $E_{\langle 110 \rangle}$  набувають мінімальних значень, а максимальні значення зосереджуються строго у кристалографічних напрямках  $\langle 100 \rangle$ . Залежність  $X(A) = E_{\langle 100 \rangle}^{\max}/E_{\langle 111 \rangle}^{\min}$  для даних кристалів наведена на рис. 2. На рис. 3 наведена динаміка залежності  $E_{\langle 100 \rangle}/E_{\langle 111 \rangle}$  та  $E_{\langle 100 \rangle}/E_{\langle 110 \rangle}$  від анізотропії  $A$ .

Проведемо деякі узагальнення закономірностей формування характеристичної поверхні модуля Юнга. Компоненти тензора  $E_i$  є функціями модулів пружності  $C_{ij}$  (або  $S_{ij}$ ), які у свою чергу визначаються через швидкості поширення поперечних і поздовжніх ультразвукових хвиль  $v_i$  у певних кристалографічних напрямках. Пружні хвилі

в кристалах несуть інформацію про сили міжатомної взаємодії, формування хімічного зв'язку та структурну стабільність ґраток. Якщо сили



**Рис. 3.** Залежності  $E_{\langle 100 \rangle} / E_{\langle 111 \rangle}$  та  $E_{\langle 100 \rangle} / E_{\langle 110 \rangle}$  від множника пружної анізотропії  $A$ .

міжатомної взаємодії, які утримують кристал у рівновазі, є парними і центральними, то тензор модулів пружності  $C_{ij}$  є повністю симетричним (тензор Коші). Тоді для будь-яких кристалів кубічної сингонії, враховуючи (1), отримуємо

$$C_{12} = C_{44}, \tag{8}$$

Аналіз числових значень модулів пружності  $C_{ij}$  досліджуваних монокристалів показує, що співвідношення Коші (8) виконується лише наближено (з похибкою  $\pm 10\%$ ) тільки для Rb, Ir, Re, NaCl, KCl, PbSe. Відхилення від співвідношення Коші свідчить про наявність нецентральної сили взаємодії між атомами, що приводить до вирівнювання довжин хімічних зв'язків і валентних кутів, тобто появи ковалентної складової хімічного зв'язку. Аналіз співвідношення Коші, проведений в роботі [11], показує, що для кристалів кубічної сингонії з чисто ковалентним типом хімічного зв'язку, тобто з суттєвим перекриттям електронних оболонок, виконується нерівність

$$C_{12} - C_{44} < 0, \tag{9}$$

У той же час для металів, іонних та іонно-ковалентних кристалів

$$C_{12} - C_{44} > 0, \tag{10}$$

Співвідношення (9) і (10) є базовими для визначення типу хімічного зв'язку кристалів кубічної сингонії. Для монокристалів LiF, PbSe, PbTe і SnTe виконується співвідношення (9), отже, відбувається суттєве перекриття електронних оболонок і переважаючим є ковалентний тип хімічного зв'язку. Для всіх останніх досліджуваних кристалів переважаючим є металевий або іонно-ковалентний тип хімічного зв'язку. Для більш детального аналізу характеру хімічного зв'язку вводяться поняття

ступенів металічності  $\alpha_m$ , ковалентності  $\alpha_c$  та іонності  $\alpha_p$ , які визначаються через енергії металевого  $V_1$ , ковалентного  $V_2$  та іонного  $V_3$  зв'язків [10] або через співвідношення між модулями пружності  $C_{ij}$ , які отримані в двопараметричних силових моделях Борна, Кітінга, Харрісона [5, 6, 12]. Отже, у залежності від типу хімічного зв'язку будуть змінюватись співвідношення між модулями пружності.

Аналіз співвідношень (3) і (5) показує, що основним параметром, який формує характеристичні поверхні модуля Юнга, є множник пружної анізотропії  $A$ . Зауважимо, що для його визначення використовуються усі модулі пружності кубічного кристала. Множник  $A$  є функцією модулів пружності  $C_{44}$  і зсуву  $C_S$ , які є мірами опору деформаціям, зумовленим напруженнями, прикладеними в площині (100) у напрямку [010] і в площині (110) у напрямку  $[\bar{1}10]$  відповідно. Така деформація кристала приводить до збільшення його енергії і, відповідно, модулів пружності. Як показано в роботі [10], для більшості іонно-ковалентних кристалів модуль зсуву  $C_S$  визначає тільки величину розорієнтації гібридизованих орбіталей на деякий кут. Це й приводить до зменшення стійкості кристалічної ґратки і збільшення ступеня іонності. Однак протидія кристала деформації зсуву приводить до зміщення атомів в елементарній комірці. Така компенсація напруг у кристалі супроводжується відповідним вирівнюванням довжин хімічних зв'язків  $d$  і валентних кутів між гібридизованими орбіталами. Для перехідних металів, унаслідок особливостей гібридизації  $s$ -,  $p$ -,  $d$ -орбіталей, механізми пружної деформації значно складніші і потребують окремого дослідження.

## Висновки

1. За співвідношенням між модулями пружності  $C_{44}$  і зсуву  $C_S$  та формою характеристичної поверхні модуля Юнга досліджувані кристали, наведені в табл. 1, можна умовно розділити на три типи:

$C_S < C_{44}$ ;  $A > 1$ ; характеристична поверхня – деформований куб і  $E_{\langle 111 \rangle} > E_{\langle 110 \rangle} > E_{\langle 100 \rangle}$ ;

$C_S = C_{44}$ ;  $A = 1$ ; характеристична поверхня – сфера і  $E_{\langle 111 \rangle} = E_{\langle 110 \rangle} = E_{\langle 100 \rangle}$ ;

$C_S > C_{44}$ ;  $A < 1$ ; характеристична поверхня – деформований октаедр і  $E_{\langle 100 \rangle} > E_{\langle 110 \rangle} > E_{\langle 111 \rangle}$ ;

2. Основними механізмами зміни співвідношень між модулями пружності  $C_{ij}$  та

формування характеристичної поверхні модуля Юнга є:

- а) для металів першої групи елементів – зміна іонних радіусів і типу кристалічної ґратки (ОЦК→ГЦК);  
б) для напівпровідникових сполук і перехідних

металів –  $sp^3$  – і  $spd$  – гібридизації;

в) для лужно-галоїдних кристалів – перекриття хвильових функцій та поява ковалентної складової хімічного зв'язку.

- [1] R. Truell, Ch. El'baum, B. Chik, Ul'trazvukovye metody v fizike tverdogo tela (Mir, Moskva, 1972).  
[2] Ju. I. Sirotin, M. P. Shaskol'skaja, Osnovy kristallofiziki (Mir, Moskva, 1979).  
[3] S. P. Nikanorov, B. K. Kardashev, Uprugost' i dislokacionnaja neuprugost' kristallov (Nauka, Moskva, 1985).  
[4] M. D. Raransky, V. N. Balazyuk, V. M. Sergeev, M. I. Mel'nyk, *Jornal of Phys. studies.* 15(3), 3401 (2011).  
[5] M. D. Rarans'kyj, V. N. Balazyuk, M. I. Mel'nyk, Z. D. Kovaljuk, V. M. Frasanjak, *Metalofizyka i novitni tehnologii.* 33(8), 1137 (2011).  
[6] M. D. Rarans'kyj, V. N. Balazjuk, M. I. Mel'nyk, O. M. Kniginic'ka, I. M. Jurijchuk, *Metalofizyka i novitni tehnologii.* 34(7), 935 (2012).  
[7] M. D. Rarans'kyj, V. N. Balazjuk, M. I. Mel'nyk, I. G. Kurek, O. M. Gorda, M. M. Gun'ko, *Fizyka i himija tverdogo tila.* 14(4), 815 (2013).  
[8] *Fizicheskaja akustika. Dinamika reshetki, pod red. U. Mezona, per. s angl. pod red. I. L. Fabelinskogo* (Mir, Moskva, 1968).  
[9] I. N. Francevich, F. F. Voronov, S. A. Bakuta, *Uprugie postojannye i moduli uprugosti metallov i nemetallov* (Naukova Dumka, Kiev, 1982).  
[10] U. Harrison. *Elektronnaja struktura i svojstva tverdyh tel. t. 1, per. s angl. pod red. Zh. I. Aferova* (Mir, Moskva, 1983).  
[11] S. Haussuhl, *Phis. Kondens. Mater.* 6, 181 (1967).  
[12] V. P. Mihal'chenko, *FTT* 45(3), 429 (2003).

M.D. Raransky, V.N. Balazyuk, M.I. Melnyk, M.M. Gunko, Ya.S. Verebchan

## The Peculiarities of Young's Modulus Surfaces of Cubic Single Crystals Formation

*Yu. Fedkovych Chernivtsi National University, 2, Kotsybinsky Str., 50012 Chernivtsi, Ukraine,  
e-mail: ft2010@bigmir.net*

The analysis of the elastic properties of some metals, semiconductors and alkali halides was carried out. The features of Young's modulus characteristic surfaces formation were revealed. Extreme values of Young's modulus along the main crystallographic directions were determined. The mechanisms of characteristic surfaces formation of Young's modulus were established.