

УДК 669—405:539.3+536.21+536.631+536.651

**Т. І. Бабюк к. ф-м. н., доц.; С. Г. Авдєєв доц.**

**Т. И. Бабюк к. ф-м. н., доц.; С. Г. Авдеев доц.**

**T. Babiuck, Cand. Sc. (Eng.); S. Avdieiev, Cand. Sc. (Eng.)**

**ПРО МОЖЛИВОСТІ ОЦІНЮВАННЯ ПРУЖНИХ МОДУЛІВ Cu  
ЗА РЕНТГЕН-ДИФРАКТОМЕТРИЧНИМИ ДАНИМИ**

**О ВОЗМОЖНОСТИ ОЦЕНКИ УПРУГИХ МОДУЛЕЙ Cu ПО РЕНТГЕН-  
ДИФРАКТОМЕТРИЧЕСКИМ ДАННЫМ**

**ON POSSIBILITY OF CU ELASTIC MODULI EVALUATION BY X-RAY  
DIFFRACTOMETRY DATA**

*Використовуючи модель гране-центрованої кубічної (г. ц. к.) ґратки з центральною взаємодією в першій координаційній сфері, за відомими рентген-дифрактометричними даними проведено оцінювання пружних модулів  $C_{\mu\nu}$  Cu у гармонічному наближенні. З урахуванням впливу електронів провідності і нульових коливань на відхилення від співвідношень Коші результати розрахунку в розумних межах узгоджуються з експериментальними даними.*

*Используя модель гране-центрированной кубической (г. ц. к.) решетки с центральной взаимодействием в первой координационной сфере, по известным рентген-дифрактометрическим данным оценены упругие модули  $C_{\mu\nu}$  Cu в гармоническом приближении. С учетом влияния электронов проводимости и нулевых колебаний на отклонения от соотношений Коши, результаты расчета оказались в разумном согласии с существующими экспериментальными данными.*

*Using the model of face-centered cubic (f. c. c.) lattice with the central interaction in a first coordination sphere by known x-ray diffractometry data Cu  $C_{\mu\nu}$  elastic moduli in harmonic approximation were evaluated. Taking into account conductivity electrons and zero oscillations influence on deviations from Cauchy correlations the results of calculations appeared to be in reasonable correlation with experimental data.*

**Вступ і постановка задачі**

Відомо, що із даних температурної залежності інтенсивностей і зсуву рентгенівських інтерференцій можна отримати деяку інформацію про динаміку кристалічної ґратки: коефіцієнти термічного розширення  $\alpha(T)$ , величини рентгенівських характеристичних температур  $\theta_p$  і їхні температурні залежності  $\theta_p(T)$ .

У роботі [1] було показано, що  $\theta_p$  характеризує жорсткість зв'язку  $f \sim M\theta_p^2$ , принаймні, для центральних взаємодій у перших двох координаційних сферах. У свою чергу, залежність  $\theta_p(T)$ , власне кажучи, відображає зменшення пружних модулів  $C_{ijkl}$  кристала з ростом температури та може бути використана для визначення параметрів Грюнайзена і силових констант  $f, g, h$ , що фігурують у розкладанні ґраткового потенціалу за степенями зміщень [2, 3]. Далі, використовуючи модель г. ц. к. до ґратки з центральною взаємодією найближчих сусідів, можна оцінити значення  $C_{ijkl}$  і їх температурні залежності, якщо відомі  $f, g, h$  [4]. Цілком зрозуміло, що така модель є дуже спрощеною для Cu і твердих розчинів: із нейтронографічних досліджень відомо, що в металах

значну роль відіграють дальнодійні і нецентральні взаємодії [5]. Проте така модель є пружно стійкою [3], враховуючи явно атомну структуру, має дисперсію теплових коливань, а, отже, більш реалістична в порівнянні з континуальною моделлю. У певній мірі похибку такої моделі у визначенні  $f$  можна оцінити, порівнюючи числові значення модулів пружності  $C_{ij}$ , розраховані за значеннями  $C_{\mu\nu}$ , з експериментальними даними (див. таб. 2)

З огляду на це може викликати інтерес використання єдиного параметра  $f$ , визначеного з рентген-дифрактометричних даних, для розрахунку значення  $C_{ijkl}$   $C_{ij}$ , якщо  $T = 0$ . Надійність обчислень можна підвищити, врахувавши надалі вплив електронів провідності [6] і нульових коливань [4]. У даній роботі такий розрахунок  $C_{ijkl}$  проведений для  $C_{ij}$ . Вибір  $C_{ij}$  зумовлений тим, що для міді отримані рентген-дифрактометричними методами значення  $\theta_p$  і  $\theta_p(T)$  є найпоширенішими і добре корелюють між собою.

### Введение и постановка задачи

Известно, что из данных температурной зависимости интенсивностей и сдвига рентгеновских интерференций может быть получена определенная информация о динамике кристаллических решеток: коэффициенты термического расширения  $\alpha(T)$ , величины рентгеновских характеристических температур  $\theta_p$  и их температурные зависимости  $\theta_p(T)$ .

В работе [1] было показано, что  $\theta_p$  характеризует жесткость связи  $f \sim M\theta_p^2$ , по крайней мере, при центральных взаимодействиях в первых двух координационных сферах. В свою очередь, зависимость  $\theta_p(T)$ , по существу отражая уменьшение упругих модулей  $C_{ijkl}$  кристалла с ростом температуры, может быть использована для определения параметров Грюнаизена и силовых констант  $f, g, h$ , фигурирующих в разложении решеточного потенциала по степеням смещений [2, 3]. Далее, применяя модель г. ц. к. к решетке с центральным взаимодействием ближайших соседей, можно оценить значения  $C_{ijkl}$  и их температурные зависимости, если известны  $f, g, h$  [4]. Ясно, что такая модель является слишком упрощенной для  $C_{ij}$  и твердых растворов: из нейтронографических исследований известно, что в металлах определенную роль играют дальнедействующие и нецентральные взаимодействия [5]. Тем не менее такая модель является упруго устойчивой [3], учитывая явно атомную структуру, обладает дисперсией тепловых колебаний и, следовательно, более реалістична по сравнению с континуальной. В известной мере погрешность такой модели в определении  $f$  можно оценить, сопоставляя численные значения моделей упругости  $C_{ij}$ , рассчитанные по значениям  $C_{\mu\nu}$  с экспериментальными данными (см. табл. 2).

С этой точки зрения представляет интерес использование единственного параметра  $f$ , определяемого по рентген-дифрактометрическим данным, для расчета значений  $C_{ijkl}$   $C_{ij}$  при  $T = 0$ . Степень надежности расчета, очевидно, можно повысить, учтя в дальнейшем влияние электронов проводимости [6] и нулевых колебаний [4]. В данной работе такой расчет  $C_{ijkl}$  проведен для  $C_{ij}$ . Выбор  $C_{ij}$  обусловлен тем, что для меди рентген-дифрактометрические определения  $\theta_p$  и  $\theta_p(T)$  наиболее обширны и согласуются между собой.

### Introduction and statement of the problem

It is known, that from the data of temperature dependence intensities and x-ray interferences shift thermal dependencies data certain information regarding the dynamics of crystalline lattices can be obtained: coefficients of thermal expansion  $\alpha(T)$ , values of x-ray characteristic temperatures  $\theta_p(T)$  and their thermal dependencies  $\theta_p(T)$ .

In [1] it was showed, that  $\theta_p$  characterizes  $f \sim M\theta_p^2$  connection rigidity, at least at central interactions in first two coordination spheres. In its turn, the  $\theta_p(T)$  dependence, actually, reflecting the decrease of crystalline elastic moduli  $C_{ijkl}$  with the growth of temperature may be used for determination of Gruneisen parameters and force constants  $f, g, h$ , occurring in decomposition of lattice potential by displacements ranges [2, 3]. Further, using the f. c. c. lattice model with central interaction of nearest neighbours, one can evaluate the values of  $C_{ijkl}$  and their thermal dependencies, if  $f, g, h$  are known [4]. It is quite obvious, that the model is too simplified for  $C_{ij}$  and hard solutions: it is known from neutronographic research, that far acting and non-centralized interactions play certain role in metals [5]. Nevertheless such model is elastically stable [3], taking into

account explicitly atomic structure, possesses the dispersion of thermal oscillations and hence, is more realistic as compared with continual one. To certain degree the error of such model in determining of  $f$  can be evaluated, comparing numerical values of Cu elasticity, models calculated by  $C_{\mu\nu}$  values, with experimental data (see Table 2).

From this point of view it may be interesting to apply the single parameter  $f$ , obtained from x-ray diffractometry data, to calculate values of Cu  $C_{ijkl}$  at  $T = 0$ . The level of calculation reliability may be increased by taking into account the influence of electrons of conductivity [6] and zero oscillations [4]. In this work such calculation of  $C_{ijkl}$  is provided for Cu. The choice of Cu is caused by a reason, that for copper x-ray diffractometry  $\theta_p$  and  $\theta_p(T)$  data are most extensive and are in good correlation.

### Результати розрахунку і їх обговорення

Згідно з [7] для г. ц. к. ґратки в гармонічному наближенні пружні модулі в позначеннях Фойгта ( $C_{ijkl} \rightarrow C_{\mu\nu}$ ) відповідно рівні

$$C_{11} = 2fa; \quad C_{12} = fa; \quad C_{44} = fa, \quad (1)$$

де  $a$  — період решітки (период решетки; lattice parameter),  $f$  — параметр жорсткості зв'язку (параметр жесткости связи; link rigidity parameter), визначений як  $f = 0,15 (k/\hbar)^2 m\theta_p^2(0)$  [3] (у стандартних позначеннях).

При температурі  $T = 0$  параметр  $f$ , згідно з [3], визначається як

$$f = 0,1397(k/\hbar)^2 m\theta_\infty^2, \quad (2)$$

де  $k$  і  $\hbar$  — сталі Больцмана та Планка (постоянные Больцмана и Планка; Boltzman and Plank constants),  $m$  — маса (масса; mass),  $\theta_\infty$  — характеристична температура (характеристическая температура; characteristic temperature).

Для визначення гармонічних значень параметрів  $\tilde{f}$  і  $C_{\mu\nu}$  необхідно використовувати величини  $\tilde{a}(0)$  і  $\tilde{\theta}_p(0)$ , отримані шляхом лінійної екстраполяції експериментальних залежностей  $a(T)$  і  $\theta_p(T)$  з області високих температур  $T > \theta_p$  на  $T = 0$  К [4]. Така екстраполяція правомірніша для  $\theta_p(T)$ , ніж для  $\theta_D(T)$  (калориметричної), оскільки на температурній залежності першої з них практично не позначаються низькотемпературні аномалії, обумовлені відмінністю реальної функції спектрального розподілу частот  $g(\omega)$  від дебаївської параболи [3]. Як показано в [2],

$$\theta(T) = \theta_p(0) (1 - 2\gamma\beta(T - T_0)), \quad (3)$$

де  $\beta$  — коефіцієнт об'ємного термічного розширення (коэффициент объемного термического расширения; volumetrical thermal expansion coefficient),  $\gamma$  — параметр Грюнайзена (параметр Грюнайзена; Gruneisen parameter).

Необхідні рентген-дифрактометричні дані і результати розрахунку  $C_{\mu\nu}$  по (1) для Cu наведені в таблиці 1.

Таблиця 1

метал (металл, metal)	$\theta_p$ K	$\gamma_G$	$\beta \cdot 10^6$ K <sup>-1</sup>	$\theta_p(0)$	$\tilde{a}(0) \cdot 10^{10}$ , м (m)	$f \cdot 10^4$ , ерг/см <sup>2</sup> (erg/cm <sup>2</sup> )
<b>Cu</b>	298	1,96	54,42	317	3,5940	2,763
$\tilde{C}_{\mu\nu} \cdot 10^{-12}$ , дин/см <sup>2</sup> (dyn/cm <sup>2</sup> )						
$C_{11}$		$C_{12}$		$C_{44}$		
1,538		0,769		0,769		

Оскільки для металів співвідношення Коші не виконується, є сенс врахувати нецентральної взаємодії, використовуючи відому модель Де-Лоне [6], відповідно до якої для металів кубічної симетрії

$$C_{12} - C_{44} = K_{el}, \tag{4}$$

де  $K_{el}$  — модуль стискання електронного газу провідності (модуль сжатия електронного газу проводимости, conductivity electron gase pressing module).

Величину  $K_{el}$  можна розрахувати, визначаючи енергію Фермі  $\mu_0$  колективізованих електронів для  $T = 0$  К,

$$K_{el} = 2/3 \mu_0 / V, \tag{5}$$

де  $\mu_0 = \frac{h}{2m} \left( \frac{3Nn_0}{8\pi V} \right)^{\frac{2}{3}}$ ;  $V$  — об'єм елементарної комірки (объем элементарной ячейки; elementary cell volume),  $N$  — число вільних електронів (число свободных электронов; number of free electrons).

З іншого боку, навіть для  $T = 0$  К і центральних взаємодій порушення співвідношення Коші обумовлено існуванням нульових коливань, які до того ж ангармонічні. Врахувавши цю обставину, можна провести відповідні обчислення, використовуючи з [4] співвідношення (15.27),

$$C_{12} - C_{44} = \frac{9U(T)\gamma^2}{NV_Z}, \tag{6}$$

де  $N$  — число Авогадро (число Авогадро; Avogadro number);  $V_Z$  — об'єм елементарної комірки (объем элементарной ячейки; elementary cell volume);  $U(T)$  — енергія коливань ґратки (энергия колебаний решетки; lattice oscillations energy).

$U(T)$  дорівнює нульовій  $U(0) = 9/8 Nk\theta_d$  для  $T = 0$  у наближенні Дебая. Оскільки для  $T \rightarrow 0$  заміна  $g(\omega) \rightarrow g_d(\omega)$  є гарним наближенням, то параметр  $\gamma$  у (6) можна прийняти рівним звичайному параметрові Грюнайзена  $\gamma_G$ , наведеному в табл. 1.

З (4) і (6) видно, що вплив електронів провідності і нульових коливань на відхилення від співвідношень Коші вимагає урахування їх сумарного внеску. Процедура уточнення наведених у табл. 1 значень  $C_{\mu\nu}$  для Си викладена нижче.

Використовуючи відомі числові значення  $V_z$ ,  $n_0$ , і  $m^*$ , маємо  $\mu_0 = 7,1$  еВ,  $K_{el} = 0,769 \cdot 10^{12}$  дин/см<sup>2</sup>. Далі, врахувавши (4) і (6) отримаємо

$$C_{12} - C_{44} = 0,244 \cdot 10^{12} \text{ дин/см}^2 \text{ (dyn/cm}^2\text{)}. \tag{7}$$

Використовуючи дані табл. 1, знаходимо з (7):

$$C_{12} = 1,013 \cdot 10^{12} \text{ дин/см}^2, \quad C_{44} = 0,769 \cdot 10^{12} \text{ дин/см}^2.$$

Узгодженість результатів такого уточнення розрахунку  $C_{\mu\nu}$  легко перевірити шляхом визначення модулів Юнга  $E$  і зсуву  $G$ . Чисельні значення модулів пружності, розраховані за значеннями  $C_{\mu\nu}$ , Си, наводяться у табл. 2.

Таблиця 2

Визначення (определение; definition)	$C_{\mu\nu} \cdot 10^{-12}$ дин/см <sup>2</sup> (дин/см <sup>2</sup> ; dyn/cm <sup>2</sup> )			Модулі пружності (модули упругости; elastic moduli), дин/см <sup>2</sup> (дин/см <sup>2</sup> ; dyn/cm <sup>2</sup> )		
	$C_{11}$	$C_{12}$	$C_{44}$	$E$ $10^{-12}$	$G$ $10^{-12}$	$K$ $10^{-12}$
Розрахунок (расчет; calculation)	1,538	1,013	0,769	1,234	0,507	1,188
Експериментальна екстраполяція на (экспериментальная экстраполяция на; experiment extrapolated by) $T = 0$ [8]	1,762	1,249	0,817	1,374	0,514	1,420

Уточнені таким чином значення пружних модулів  $C_{ij}$  необхідно, зрозуміло, порівнювати з гармонічними величинами  $C_{\mu\nu}(T)$  з області високих температур при  $T = 0$  К. Таке порівняння відображено в таблиці 2, де  $C_{\mu\nu}$  і модулі пружності  $C_{ij}$  взяті з [8].

З таблиці видно, що хоча оцінювання значень  $C_{\mu\nu}$  проводились із використанням спрощених теоретичних моделей, їх результати, проте, в розумних межах корелюють з експериментальними даними для  $C_{ij}$  і максимальне відхилення складає  $\sim 10\%$ .

На закінчення відзначимо, що використання  $\theta_p$  як міри жорсткості зв'язку ( $f \sim M \theta_p^2$ ) відповідно з фізичною аргументацією, викладеною нами в [1] може виявитися прийнятним і в прикладному сенсі. Зрозуміло, що описаний вище процес оцінювання  $C_{\mu\nu}$  за рентген-дифрактометричними даними не може бути універсальним методом. Однак для таких об'єктів як альфа-тверді розчини на основі  $Cu$ ,  $Ag$  та ін. металів з відомою електронною концентрацією такі попередні оцінки  $C_{\mu\nu}$  безумовно можуть виявитися корисними.

### Результаты расчета и их обсуждение

В соответствии с [7] для г. ц. к. решетки в гармоническом приближении, упругие модули в обозначениях Фойгта ( $C_{ijkl} \rightarrow C_{\mu\nu}$ ) соответственно равны: (1).

При температуре  $T = 0$  параметр  $f$ , в соответствии с [3], определяется как (2).

Для определения гармонических значений параметров  $\tilde{f}$  и  $C_{\mu\nu}$  необходимо использовать величины  $\tilde{a}(0)$  и  $\tilde{\theta}_p(0)$ , полученные путем линейной экстраполяции экспериментальных зависимостей  $a(T)$  и  $\theta_p(T)$  из области высоких температур  $T > \theta_p$  на  $T = 0$  К [4]. Такая экстраполяция более правомерна для  $\theta_p(T)$ , чем для  $\theta_d(T)$  (калориметрической), поскольку на температурной зависимости первой из них практически не сказываются низкотемпературные аномалии, обусловленные отличием реальной функции спектрального распределения частот  $g(\omega)$  от дебаевской параболы [3]. Как показано в [2], (3). Необходимые рентген-дифрактометрические данные и результаты расчета  $C_{\mu\nu}$  по (1) для  $Cu$  приведены в табл. 1.

Поскольку для металлов соотношение Коши не выполняется, имеет смысл учесть нецентральные взаимодействия, используя известную модель Де-Лоне [6], согласно которой для металлов кубической симметрии (4).

Величину  $K_{el}$  можно рассчитать, определяя энергию Ферми  $\mu_0$  коллективизированных электронов при  $T = 0$  К, (5).

С другой стороны, даже при  $T = 0$  К и центральных взаимодействиях нарушение соотношения Коши обусловлено существованием нулевых колебаний, которые, к тому же, ангармоничны. Учитывая это обстоятельство можно провести соответствующие вычисления, используя из [4] соотношение (15.27), (6).

$U(T)$  равняется нулевой  $U(0) = (9/8) Nk\theta_d$  при  $T = 0$  в приближении Дебая. Поскольку при  $T \rightarrow 0$  замена  $g(\omega) \rightarrow g_d(\omega)$  является хорошим приближением, то параметр  $\gamma$  в (6) можно положить равным обычному параметру Грюнайзена  $\gamma_G$ , приведенному в табл. 1.

Из (4) и (6) следует, что влияние электронов проводимости и нулевых колебаний на отклонение от соотношений Коши требует учета их суммарного вклада. Процедура уточнения приведенных в табл. 1 значений  $C_{\mu\nu}$  для  $Cu$  изложена ниже.

Используя известные числовые значения  $V_z$ ,  $n_0$ , и  $m^*$ , имеем  $\mu_0 = 7,1$  эВ,  $K_{el} = 0,769 \cdot 10^{12}$  дин/см<sup>2</sup>. Далее, учтя (4) и (6) получаем (7).

Используя данные табл. 1, находим по (7):  $C_{12} = 1,013 \cdot 10^{12}$  дин/см<sup>2</sup>,  $C_{44} = 0,769 \cdot 10^{12}$  дин/см<sup>2</sup>.

Согласованность результатов такого уточнения расчета  $C_{\mu\nu}$  легко проверить путем определения модулей Юнга  $E$  и сдвига  $G$ . Численные значения модулей упругости, рассчитанные по значениям  $C_{\mu\nu}$ ,  $C_{ij}$ , приведены в табл. 2.

Уточненные таким путем значения упругих модулей  $C_{ij}$  необходимо, разумеется, сравнивать с гармоническими величинами  $C_{\mu\nu}(T)$  из области высоких температур при  $T = 0$  К. Такое сравнение отражено в таблице 2, где  $C_{\mu\nu}$  и модули упругости  $C_{ij}$  заимствованы из [8].

Из таблицы видно, что хотя оценка  $C_{\mu\nu}$  выполнена с привлечением упрощенных теоретических моделей, результаты их, тем не менее, находятся в разумном согласии с экспериментальными данными для  $C_{ij}$  и максимальное отклонение составляет  $\sim 10\%$ .

В заключение отметим, что использование  $\theta_p$  как меры жесткости связи ( $f \sim M\theta_p^2$ ) в соответствии с физической аргументацией, изложенной нами в [1], может оказаться приемлемым и в прикладном смысле. Совершенно ясно, что описанная выше процедура оценки  $C_{\mu\nu}$  по рентгенодифрактометрическим данным не может быть универсальным методом. Однако для таких объектов как альфа-твердые растворы на основе Cu, Ag и др. металлов с известной электронной концентрацией подобные предварительные оценки  $C_{\mu\nu}$  несомненно могут оказаться полезными.

### Results of calculation and discussion

According to [7] for f. c. c. lattice in harmonic approximation, elastic moduli in Voigt designations ( $C_{ijkl} \rightarrow C_{\mu\nu}$ ) correspondingly are equal to (1). At temperature  $T = 0$  parameter  $f$ , in accordance with (3), is determined as (2).

For determination of harmonic values for  $\tilde{f}$  and  $C_{\mu\nu}$  parameters one must use  $\tilde{a}(0)$  and  $\tilde{\theta}_p(T)$  (0) quantities, obtained by means of linear extrapolation of experimental dependencies  $a(T)$  and  $\theta_p(T)$  from the region of high temperatures  $T > \theta_p$  to  $T = 0$  K [4]. Such extrapolation is more rightful for  $\theta_p(T)$ , than for  $\theta_d(T)$  (calorimetric), because thermal dependence of the first of them actually is not influenced by low-thermal anomalies, conditioned by the difference of the real function of spectral distribution of frequencies  $g(\omega)$  from Debye parabola [3]. As showed in [2] (3).

The necessary x-ray diffractometry data, obtained by calculations of Cu after (1) are presented in Table 1.

Since for metals the Cauchy ratio is not accomplished, one may have a reason to take into account non-central interactions, using the known De-Launey model [6], according to which for metals of cubic symmetry (4).

The value of  $K_{el}$  may be calculated by determination of Fermi energy  $\mu_0$  of collectivized electrons at  $T = 0$  K.

On the other hand, even at  $T = 0$  K and central interactions the violation of Cauchy relation is conditioned by the existence of zero oscillations, which in addition are unharmonic. Taking into account this condition necessary computations can be performed using from [4] relation (15.27) (6).  $U(T)$  equals zero  $U(0) = 9/8Nk\theta_d$  at  $T = 0$  in Debye approximation.

Since at  $T \rightarrow 0$  the substitution of  $g(\omega) \rightarrow g_d(\omega)$  proves to be good approximation, then parameter  $\gamma$  in (6) may be taken equal to ordinary Grüneisen parameter  $\gamma_G$ , given in Table 1.

It follows from (4) and (6), that the influence of conductivity electrons and zero oscillations on deviation from Cauchy ratios requires the accounting of their total contribution. The procedure of specification of presented in Table 1 values of  $C_{\mu\nu}$  for Cu is given below.

Using known numerical values of  $V_z$ ,  $n_0$ , and  $m^*$ , one can obtain  $\mu_0 = 7.1$  eV,  $K_{el} = 0.769 \cdot 10^{12}$  dyn/cm<sup>2</sup>. Further, taking into account (4) and (6), we have obtained (7).

Using data of Table 1 one may find by (7)  $C_{12} = 1.013 \cdot 10^{12}$  dyn/cm<sup>2</sup>,  $C_{44} = 0,769 \cdot 10^{12}$  dyn/cm<sup>2</sup>.

Coordination of results for such revision of  $C_{\mu\nu}$  calculation may be verified by determining Young module  $E$  and  $G$  shift. Numerical values of elastic module, calculated by values of  $C_{\mu\nu}$ , Cu, are given in Table 2.

It is clear, that such revision of elastic module values for Cu must be compared with harmonic values  $C_{\mu\nu}(T)$  from the region of high temperatures at  $T = 0$  K. Such comparison is presented in Table 2, where  $C_{\mu\nu}$  and elastic moduli Cu are taken from [8].

From the Table one may see, that although the evaluation of  $C_{\mu\nu}$  is made using simplified theoretical models, their results, nevertheless, are in reasonable correlation with experimental data for Cu and the maximal deviation is  $\sim 10\%$ .

Let us note in conclusion, that the using of  $\theta_p$  as a measure of rigidity of ( $f \sim M\theta_p^2$ ) connection, in accordance with physical argumentation, suggested in [1], may be useful also in applied context. It is obvious, that described above process of  $C_{\mu\nu}$  evaluation by x-ray diffractometry data can not be regard as the universal method. Nevertheless, for such objects as alpha-solid solutions on the base of Cu, Ag and other metals with known electron concentration, such preliminary evaluations of  $C_{\mu\nu}$ , with no doubt may be useful.

## Висновки

1. Показано можливість оцінки пружних модулів Cu за відомими рентген-дифрактометричними даними, використовуючи модель г. ц. к. ґратки з центральною взаємодією.
2. Значення пружних модулів, отримані з урахуванням впливу електронів провідності і нульових коливань на відхилення від співвідношень Коші, в розумних межах узгоджуються з існуючими експериментальними даними.

## Выводы

1. Показана возможность оценки упругих модулей Cu по известным рентген-дифрактометрическим данным, с использованием модели г. ц. к. решетки с центральным взаимодействием.
2. Значения упругих модулей, полученные с учетом влияния электронов проводимости и нулевых колебаний на отклонения от соотношений Коши, в разумных пределах согласуются с существующими экспериментальными данными.

## Conclusions

1. The possibility of Cu elastic moduli evaluation by known x-ray diffractometry data using the model of f. c. c. lattice with central interaction has been showed.
2. The values of elastic moduli obtained taking into account the influence of conductivity electrons and zero oscillations influence on deviations from Cauchy ratios, are in reasonable correlation with experimental data.

## СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

### REFERENCES

1. Михальченко В. П., Лотоцкий В. Б. Об использовании рентгеновской характеристической температуры ванадия для оценки межатомной связи в кристаллической решетке // Физика металлов и металловедение. — 1971. — Т. 32. — № 6. — С. 1300—1305
2. Михальченко В. П., Кушта Г. П. Определение постоянной Грюнаизена 12 %-хромистого феррита рентгенографическим методом // Украинский физический журнал. — 1963. — Т. 8. — № 7. — С. 779—785.
3. Михальченко В. П. Об оценке ангармонических коэффициентов третьего и четвертого порядков по экспериментальными данным температурной зависимости интенсивности рентгеновских интерференций // Украинский физический журнал. — 1965. — Т. 10. — № 4. — С. 436—442
4. Ludwig W. Springer Tract in Modern Physics, ed. By E. Hohler. — Berlin, Heidelberg, New-York, 1967. — V. 43.
5. Рассеяние тепловых нейтронов / Под. ред. И. Игнелстаффа. — М.: Атомиздат, 1970.
6. De-Launey. On specific Heat of Solids. Solid State Phys. — 1956. — V. 2. — P. 219.
7. Лейбфрид Г. Микроскопическая теория механических и тепловых свойств кристаллов. — М.—Л.: 1963.
8. Францевич И. Н., Воронов Ф. Ф., Бакута С. А. Упругие постоянные и модули упругости металлов. — Киев: Наукова думка, 1982. — С. 286.

Рекомендована кафедрою фізики

Надійшла до редакції 29.03.06  
Рекомендована до друку 25.04.06

**Бабюк Тодор Ілліч** — доцент, **Авдеев Сергій Григорович** — доцент,  
Кафедра фізики, Вінницький національний технічний університет

**Бабюк Тодор Ільич** — доцент, **Авдеев Сергей Григорьевич** — доцент.  
Кафедра физики, Винницкий национальный технический университет

**Todor Babiuck** — Assistant Professor, **Sergiy Avdieiev** — Assistant Professor.  
Chair of Physics, Vinnytsia National Technical University