

УДК 538.9

**В.А. Лиопо<sup>1</sup>, И.А. Лявшук<sup>2</sup>, Е.В. Овчинников<sup>3</sup>,  
А.В. Пушкарёв<sup>4</sup>, С.С. Секержицкий<sup>5</sup>**

<sup>1</sup>д-р физ.-мат. наук, проф., проф. каф. теоретической физики и теплотехники

Гродненского государственного университета имени Янки Купалы

<sup>2</sup>ст. преподаватель каф. информационных систем и технологий

Гродненского государственного университета имени Янки Купалы

<sup>3</sup>д-р техн. наук, доц., зам. декана по научной работе

факультета инновационных технологий машиностроения

Гродненского государственного университета имени Янки Купалы

<sup>4</sup>канд. физ.-мат. наук, ст. науч. сотрудник НППЦ НАН Беларуси по материаловедению

<sup>5</sup>канд. физ.-мат. наук, доц., доц. каф. общей и теоретической физики

Брестского государственного университета имени А.С. Пушкина

e-mail: [Sekerzhitsky@rambler.ru](mailto:Sekerzhitsky@rambler.ru)

## ФАКТОРЫ, ВЛИЯЮЩИЕ НА РАЗМЕРЫ УЗЛОВ ОБРАТНОЙ РЕШЕТКИ

*Исследованы причины изменения полуширины рентгеновского рефлекса. Значение ее размеров зависит от крупности кристаллитов в соответствии с известной формулой Шеррера, для которой в рамках кинематической теории рассеяния показано, что ее постоянный коэффициент строго равен единице. Установлено, что с увеличением угла дифракции данная полуширина всегда монотонно возрастает. При этом полуширина рентгеновского рефлекса может быть использована при иерархических оценках крупности или температуры.*

### Введение

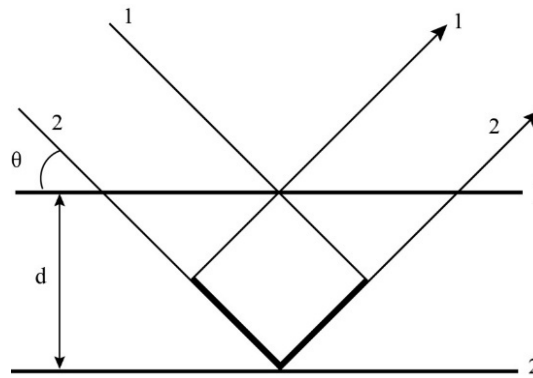
Решетка кристалла определяется трансляционной симметрией, т.е. может быть описана параллелограммом, построенным на трех некопланарных векторах  $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ , называемых репером Бравэ. Такой параллелограмм называется ячейкой решетки кристалла, и для ее геометрического описания необходимо знать три линейных параметра  $a, b, c$ , равных модулям соответствующих векторов в репере Бравэ, и трех угловых параметров  $\alpha = \angle \vec{b}, \vec{c}$ ,  $\beta = \angle \vec{a}, \vec{c}$ ,  $\gamma = \angle \vec{a}, \vec{b}$ . Одним из основных экспериментально определяемых параметров кристаллов является расстояние между ближайшими кристаллографическими плоскостями  $d(hkl)$ , где  $(hkl)$  – кристаллографические индексы плоскости. Межплоскостное расстояние описывается аксиальным вектором  $\vec{d}$ , который изображается в абстрактном пространстве точкой, радиус-вектор которой  $\vec{r}^* \parallel \vec{d}$ , а  $\vec{r}^* \cdot \vec{d} = \vec{d}^* \cdot \vec{r} = 1$ . Точка с радиусом-вектором  $\vec{r}^*$  называется узлом. Совокупность узлов  $r^*(hkl)$  называется обратной решеткой с параметрами  $a^*, b^*, c^*$ . Координаты атомов в ячейке кристалла описываются в кристаллографической системе, в которой  $a, b, c$  приняты за единицы. Узлы обратной решетки также определяются параметрами  $\vec{a}_i^*, i = 1, 2, 3$ , т.е. всегда целые. Эти координаты  $(hkl)$  и являются индексами отображаемой этим узлом кристаллографической плоскости.

### Основные формулы структурного анализа веществ

Для кристаллов первой основной формулой структурного анализа является условие Вульфа – Брэггов.

$$2d \sin \theta = n \lambda, \quad (1)$$

где  $\lambda$  – длина волны излучения,  $\theta$  – угол скольжения (рисунок 1).

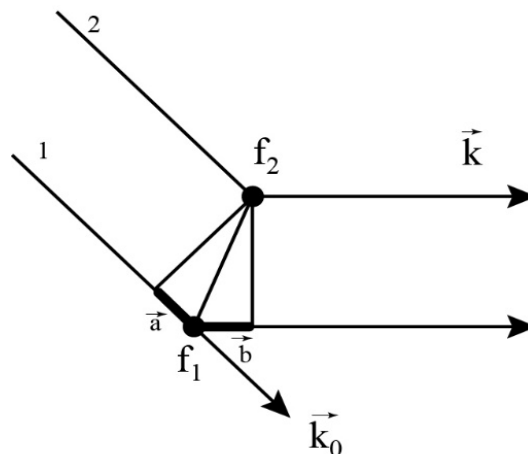


**Рисунок 1.** – Разность хода лучей 1, 2 (показана более жирными отрезками)

Формула (1) позволяет определять геометрические характеристики прямой и обратной решеток кристалла: параметры  $(a_i, a_i), i = 1, 2, 3$ ,  $(a_j^*, a_j^*), j = 1, 2, 3$ , индексы плоскостей  $(hkl)$ , сингонии, ячейки Бравэ [1–3]. Структуру кристалла, которая описывается взаиморасположением атомов в ячейке, по формуле (1) определить невозможно. Надо для этого учесть интенсивность  $I(hkl)$ -рефлекса, а не только его угловое положение ( $\theta$ ).

Любой атом (ион, молекула, радикал и т.д.) характеризуется своей рассеивающей способностью. Рассеивающая способность электрона принята за единицу.  $f = \frac{A}{A_g}$ , где  $A$  – амплитуда рентгеновской волны рассеянной на объекте,  $A_g$  – амплитуда рентгеновского луча, рассеянного на свободном электроне для того же исходного луча и при одинаковых направлениях рассеяния лучей. Значения  $f$  атомов, ионов (табличные величины) также измеряются в электронных единицах [1].

Для вывода второй основной формулы структурного анализа рассмотрим два рассеивающих центра  $f_1$  и  $f_2$ .



**Рисунок 2.** – К выводу второй основной формулы структурного анализа

Амплитуда рассеянного излучения на центрах 1 и 2 имеет вид:

$$A_{12} = f_1 \exp\{i\varphi_1\} + f_2 \exp\{i\varphi_2\} = \sum_{j=1}^2 f_j \exp\{i\varphi_j\} \quad (2)$$

где  $\varphi_1, \varphi_2$  – фазы лучей, рассеянных на  $f_1$  и  $f_2$  соответственно.

Разность фаз  $\varphi_1 - \varphi_2 = \Delta\varphi$  определяется разностью хода:

$$\Delta = a + b. \quad (3)$$

Здесь  $a$  и  $b$  – это не параметры ячейки. Определим направление падающего и рассеянного лучей векторами  $\vec{k}_0$  и  $\vec{k}$  соответственно, при этом их величины  $k_0 = k = 1$ . Положение рассеивающего центра  $f_2$  относительно рассеивающего центра  $f_1$  определим вектором  $\vec{r}$ , тогда:

$$\begin{aligned} a &= -r \cos \angle \vec{k}_0, \vec{r} = -(\vec{r} \vec{k}_0) \\ b &= r \cos \angle \vec{k}, \vec{r} = (\vec{r} \vec{k}). \end{aligned}$$

В соответствии с формулой (3) получим  $\Delta = (\vec{r}(\vec{k} - \vec{k}_0))$ , следовательно:

$$\Delta\varphi = \frac{2\pi\Delta}{\lambda} = 2\pi r S,$$

где  $\vec{S} = \vec{k} - \vec{k}_0$

Следовательно, формула (2) может быть записана в виде:

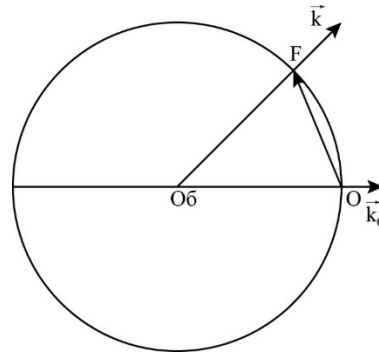
$$A_2(S) = \sum_{j=1}^2 f_j \exp\{2\pi i S r_j\}. \quad (4)$$

Если имеется три рассеивающих центра, то в качестве одного из них надо взять пару, рассеивающая способность которой равна  $A_2(s)$  и т.д. до учета всех рассеивающих центров ( $N$ ):

$$A_N(S) = \sum_{j=1}^N f_j \exp\{2\pi i S r_j\}. \quad (5)$$

Эта формула справедлива для любого вещества с произвольной структурой [1,2,3,4]. Если анализировать кристалл, то достаточно определения  $A(S)$  для одной ячейки. В этом случае  $A(S) = F(hkl)$  и называется структурной амплитудой.

Физический смысл вектора  $\vec{S}$  рассмотрим в рамках модели, предложенной Эвальдом, которая основана на построениях в обратном пространстве.

Рисунок 3. – Смысл вектора  $\vec{S}$ 

Пусть в точке  $F$  на поверхности сферы с центром в образце ( $Oб$ ) и радиусом  $\frac{1}{\lambda}$  находится узел обратной решетки  $F$ . Очевидно, что вектор  $\overline{(Oб, O)} = \frac{\vec{k}_0}{\lambda}$ , а вектор  $\overline{(Oб, F)} = \frac{\vec{k}}{\lambda}$ . Вектор  $\frac{(\vec{k} - \vec{k}_0)}{\lambda} = \vec{r}^*$  по определению угол  $\angle \vec{k}_0 \vec{k} = \varphi = 2\theta$ . Из треугольника  $(O, F, Oб)$  следует:

$$\vec{r}^* = \frac{2 \sin \theta}{\lambda} = \frac{1}{d} = \frac{\vec{d}}{d^2}. \quad (6)$$

При этом вектор  $\vec{d}$  и вектор  $\vec{r}$  перпендикулярны биссектрисе угла  $\angle OFOб$ , которая является следом отражающей плоскости.

На сферу Эвальда может выходить любая точка обратного пространства кристалла. Если выходит узел, то по его радиусу-вектору возникает рефлекс. Любая точка обратного пространства описывается вектором обратного пространства  $S = \frac{2 \sin \theta}{\lambda}$ , где  $\theta = \frac{\varphi}{2}$ . Если эта точка имеет ненулевой «вес», то он определяет амплитуду рассеянного луча, которая в общем виде приведена формулой (5).

С учетом того, что  $(xyz)$  и  $(hkl)$  измерены в единицах параметров соответствующих ячеек, а также с учетом  $a_j^* a_i = \delta_{ij}$  формула (5) примет вид:

$$F(hkl) = \sum_{i=1}^N f_i \exp\{2\pi i(hx_j + ky_j + lz_j)\}, \quad (7)$$

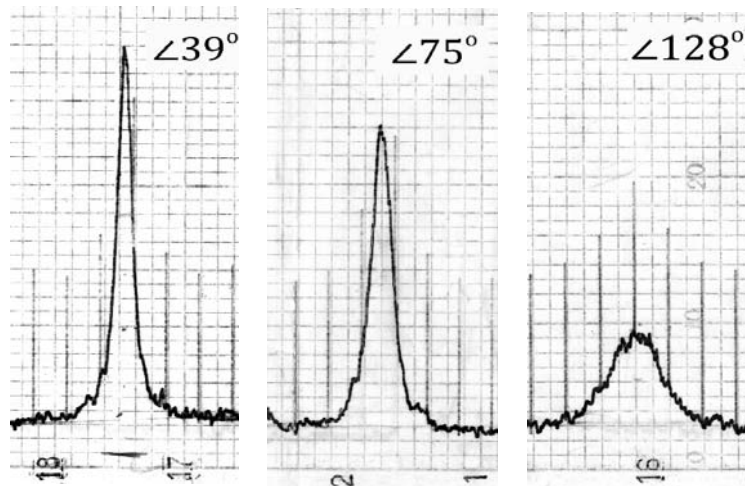
где  $N$  – число атомов в ячейке кристалла. Если в качестве рассеивающих центров брать любые точки кристалла с электронной плотностью  $\rho(xyz)$ , то (7) записывается в виде:

$$F(hkl) = \int_0^1 \int_0^1 \int_0^1 \rho(xyz) \exp\{2\pi i(hx + ky + lz)\} dx dy dz . \quad (9)$$

Интегрирование проводится по ячейке кристалла. Выражения (7), (8) являются двумя формами записи второй основной формулы структурного анализа [1; 3]. Чем больше значение  $F(hkl)$ , тем больше интенсивность рефлекса при выходе узла  $(hkl)$  на сферу Эвальда. Поэтому  $F(hkl)$  является весом узла  $(hkl)$ . Чем больше «вес», тем интенсивнее рефлекс.

**Увеличение объема узла обратной решетки с увеличением его радиус-вектора**

Формула (7), как и вся модель обратной решетки, предполагает, что узел обратной решетки – это точка в обратном пространстве. Рентгеновский рефлекс возникает только в том случае, когда эта точка находится на сфере. Любое смещение узла от сферы должно привести к исчезновению рефлекса. Однако рентгеновские рефлексы не бесконечно тонкие (в этом случае их просто нельзя было бы обнаружить), но еще и увеличивают свою полуширину с увеличением угла дифракции, что подтверждается экспериментально (рисунок 4).



**Рисунок 4. – Три фрагмента рентгеновской дифрактограммы для разных значений угла дифракции**

Этот хорошо известный экспериментальный факт требует, на наш взгляд, объяснения. Если узел обратной решетки не является точкой, а занимает какой-то объем, то при выходе его на сферу Эвальда рассеянный луч определяется углом расходимости ( $\delta$ ).

В идеальном кристалле атом – точечный объект. В реальных – атом объект конечный, и распределение электронной плотности сосредоточено в интервале  $r_j \pm \delta r_j$ . Рассмотрим случай  $r + \delta r$ , тогда точечный узел обратной решетки кристалла смещается на величину  $(-\Delta\varphi)$ . Т.е. ненулевой «вес» узла будет в интервале  $S_{ид} \pm \Delta S$ , где  $\Delta S$  – полуширина узла, определяемая полушириной рефлекса,  $S_{ид}$  – положение максимума рефлекса.

Рассмотрим одно из слогаемых уравнения (5). Показатель экспоненты примет вид  $2\pi(S_{\text{ид}} - \Delta S)(r + \delta r)$ . Как и в идеальном случае,  $S_{\text{ид}} \cdot r = 1$ . Тогда для выполнения условия получения дифракционного максимума  $(S_{\text{ид}} - \Delta S)(r + \delta r) = 1$ , отсюда

$$S_{\text{ид}} \cdot r + S_{\text{ид}} \cdot \delta r - r\Delta S - \Delta S\delta r = 1$$

или

$$\frac{\Delta S}{S_{\text{ид}}} = \frac{\delta r}{r + \delta r}. \quad (10)$$

Так как правый член уравнения (10) определяется только кристаллом, то  $\frac{\Delta S}{S} = \text{const}$ . Т.е. с увеличением  $S$  увеличивается размер узла обратной решетки, что приводит к увеличению полуширины рефлекса с ростом угла дифракции  $\varphi = 2\theta$ . Это и наблюдается экспериментально.

Также экспериментально установлено, что при нагревании происходит увеличение полуширины рефлекса. Теория этого явления основана на следующем.

При нагревании, когда в образце отсутствуют температурные градиенты, то вследствие тепловых колебаний атомов межатомные расстояния увеличиваются. Отсюда делается вывод, что  $F(hkl)$  должна рассчитываться не по формуле (7), но нужно учесть увеличение  $x, y, z$ , на значения  $\Delta x_j, j = 1, 2, 3$  [1; 3; 4].

Т.е. (7) приобретает вид:

$$F(hkl) = \sum_{j=1}^N f_j \exp\{2\pi i [h(x_j + \Delta x) + k(y_j + \Delta y) + l(z_j + \Delta z)]\}. \quad (11)$$

Однако это ошибочное предположение. Если отсутствуют температурные градиенты и фазовые переходы, то кристаллографические координаты не меняются [2; 5]. Будет увеличиваться размер объема, в котором колеблется атом. В этом случае изменение амплитуды рассеяния зависит от вектора обратной решетки по условию:

$$A(S) = \int_{R_0}^{R_0+\delta} \rho(T) \exp\{2\pi iSr\} dr. \quad (12)$$

В этой формуле  $S$  и  $r$  заданы в кристаллографической системе координат, где  $R_0$  – размер атома при начальной температуре,  $\delta$  – тепловое расширение атома  $\delta = R(1 + \alpha\Delta T)$ , где  $\alpha$  – коэффициент термического расширения, так как функция  $\rho(T)$  зависит только от температуры, причем термическое расширение не будет существенно влиять на изменение электронной плотности, и условие (12) можно записать в виде:

$$A(S) = \rho(T) \int_{R_0}^{R_0+\delta} \exp\{2\pi iSr\} dr,$$

отсюда

$$A(S) = \rho(T) \frac{1}{2\pi iS} \exp\{2\pi iSr\} \Big|_{R_0}^{R_0+\delta} = \frac{\exp\{2\pi iSR_0\}}{2\pi iS} (\exp\{2\pi iS\delta\} - 1). \quad (13)$$

Так как  $I = A \cdot A^*$ , то:

$$I(S) = \frac{\rho^2(T)}{\pi^2 S^2} \sin^2 \pi S \delta. \quad (14)$$

Т.е.  $I_{MAX} = (\rho_0)^2$ , где  $\rho_0$  – электронная плотность при  $\Delta T = 0$ . Обозначим полуширину рентгеновского рефлекса  $\Delta = (\Delta 2\theta)$ . Введем обозначение  $\tau = \frac{\Delta 2\theta}{2}$ .

Рассмотрим условие:

$$\frac{I(S) + \tau}{I_{MAX}} = \frac{1}{2}. \quad (15)$$

Так как  $\frac{\rho(T)}{\rho_0} \approx 1$ , то  $\frac{I(S)}{I_{MAX}} = \frac{\sin^2 \pi \delta (S + \tau)}{\pi^2 (S + \tau)^2} = \frac{1}{2}$ , т.е.

$$\frac{\sin \pi \delta (S + \tau)}{\pi (S + \tau)} = \frac{\sqrt{2}}{2}. \quad (16)$$

Но  $\sin \pi \delta (S + \tau) = \sin \pi \delta S \cdot \cos \pi \delta \tau + \cos \pi \delta S \cdot \sin \pi \delta \tau \approx \pi \delta S$ , с учетом малых значений  $\tau$  и  $\delta$ . Поэтому формулу (16) запишем в виде:  $\frac{\pi \delta S}{\pi (S + \tau)} = \frac{\delta S}{S + \tau} = \frac{1}{\sqrt{2}}$ , отсюда  $\sqrt{2} S \delta = S + \tau$ , т.е. с учетом принятых допущений получим:

$$1 + \frac{\Delta 2\theta \lambda}{2 \sin \theta} = \sqrt{2} \delta = \frac{\sqrt{2} \alpha \Delta T}{R_0}. \quad (17)$$

Из формулы (17) следует, что с увеличением температуры полуширина рентгеновского рефлекса возрастает и чем больше угол дифракции, тем это возрастание больше.

На полуширину рентгеновского рефлекса оказывает влияние размер кристаллического образца. Зависимость между размером ( $D$ ) и полушириной рефлекса описывается формулой Шеррера [6; 7]:

$$\Delta 2\theta = \frac{c\lambda}{D \cos \theta}. \quad (18)$$

Формула Шеррера обычно выводится из геометрической модели, но при этом ( $C$ ) может принимать значения в интервале  $0,8 \div 2,0$  [5]. В этих моделях не учитывается интенсивность рефлекса. Рассмотрим модели в кинематическом рассеянии. В качестве

рассеивающего центра берется плоскость  $(hkl)$ , рассеивающая способность которой определяется по формуле (5).

Если в кристаллите гранями являются эти плоскости  $(hkl)$  с межплоскостным расстоянием  $d$  и толщиной образца  $D$ , то число таких плоскостей равно  $N = \frac{D}{d}$ . Амплитуда рентгеновского рефлекса равна:

$$A(S) = F(S) \sum_{n=0}^{N-1} \exp\{2\pi i n d\}. \quad (19)$$

Сумма членов геометрической прогрессии в (19) равна:

$$\sum_{n=0}^{N-1} \exp\{2\pi i S n d\} = \frac{1 - \exp\{2\pi i S N d\}}{1 - \exp\{2\pi i S d\}}. \quad (20)$$

Интенсивность рефлекса равна:

$$I(S) = F(S) F^*(S) = F^2(S) \frac{\sin^2 \pi S N d}{\sin^2 \pi S d}. \quad (21)$$

Если  $\Delta S$  – полуширина узла обратной решетки, то  $I(S_m \pm \Delta S) = 0$ , где  $S_m$  – положение максимума рефлекса. По определению,  $S \cdot d = 1$ , т.е.  $S N d = 1$  и  $D S = 1$ . Из уравнения (21) следует:

$$\sin \pi N d (S \pm \Delta S) = \sin N S d \cdot \cos \pi N d \Delta S \pm \cos N S d \cdot \sin \pi N d \Delta S = 0. \quad (22)$$

С учетом  $\sin \pi N S d = 0$ ,  $\cos \pi N S d = \pm 1$  (22) примет вид  $\sin \pi N \Delta S d = \sin \pi D \Delta S = 0$ , отсюда:

$$\pi D \Delta S = \pi, \quad (23)$$

так как  $S = \frac{2 \sin \theta}{\lambda}$ , то  $\Delta S = \frac{2 \cos \theta (\Delta \theta)}{\lambda} = \frac{\cos \theta (\Delta 2\theta)}{\lambda}$ , т.е. (23) запишется:

$$D = \frac{\lambda}{\cos \theta (\Delta 2\theta)}, \quad (24)$$

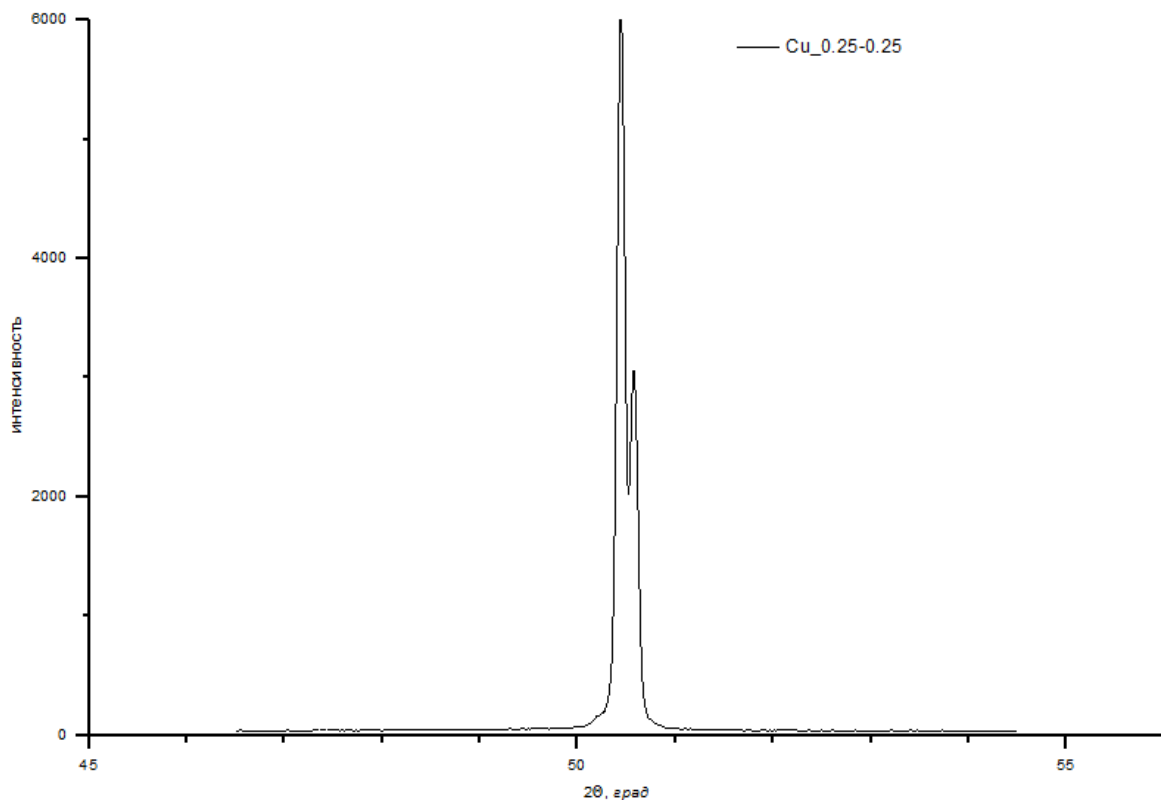
Уравнение Шеррера, выведенное на основе кинематической теории, утверждает, что постоянная  $(C)$  равна точно единице. Указанные три причины изменения полуширины рентгеновского рефлекса показывают, что, во-первых, узлы обратной решетки кристаллов имеют не только различный «вес», определяемый структурной амплитудой  $F(hkl)$ , но и увеличение размера в зависимости от увеличения  $r^*$ . Все это, на наш взгляд, позволяет говорить о том, что параметр  $(\Delta 2\theta)$  для определения структурно-химических особенностей кристалла надо использовать только для оценки иерархии различий: дефектности, размера, энергии колебаний атомов и т.д.

Но есть еще один фактор, который существенно влияет на величину полуширины рефлекса. Этим фактором являются условия проведения эксперимента. В гониометрах рентгеновских дифрактометрах обязательно есть элементы, фиксирующие падающий на образец луч, и луч, входящий в счетчик [2]. Нами анализировались профили одного и того же рефлекса при одинаковой установке образца и одинаковых режимах работы рентгеновской трубки и счетчика. Образцом являлась поликристаллическая медь. Излучение  $CuK_{\alpha}$  – фильтрованное монохроматором, установленным между образцом и счетчиком. Анализировался рефлекс 200. Для примера приведем четыре результата при сочетании размеров щели на входе в гониометр  $C_r$  и на входе в счетчик  $C_{сч}$ .

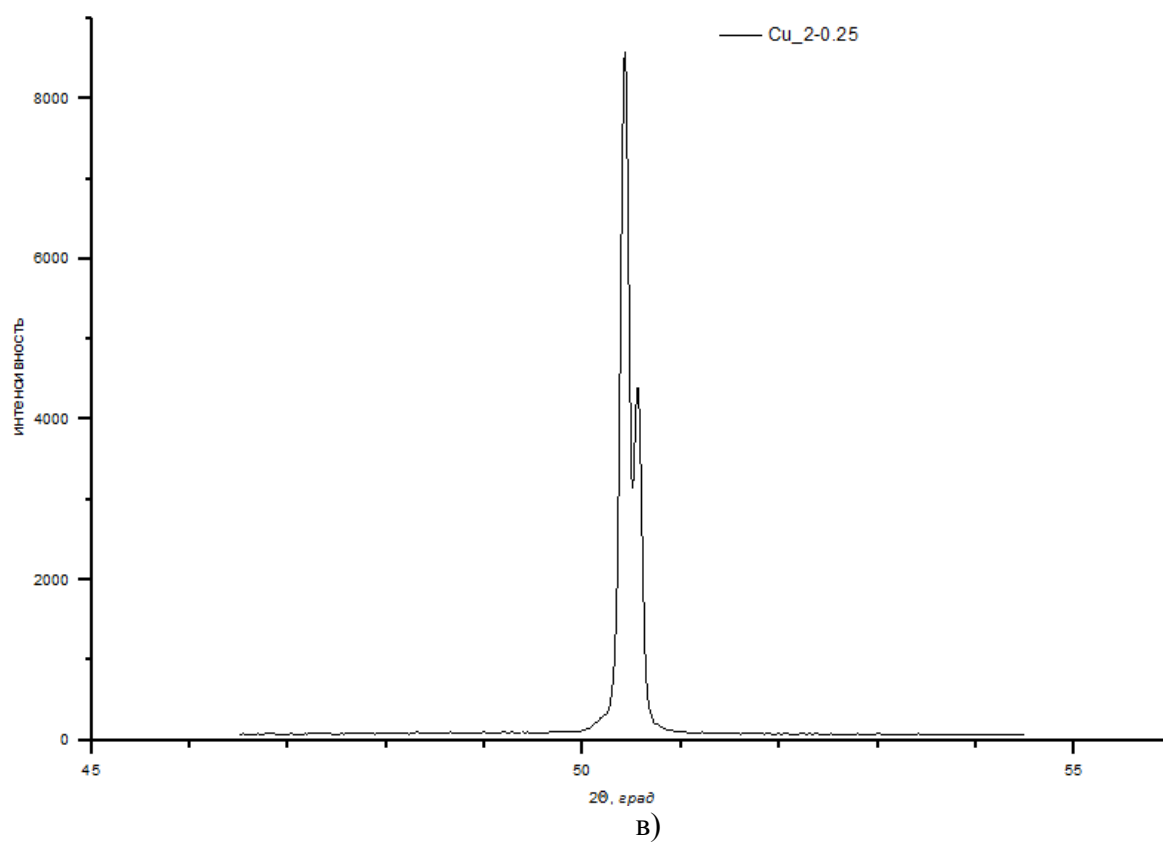
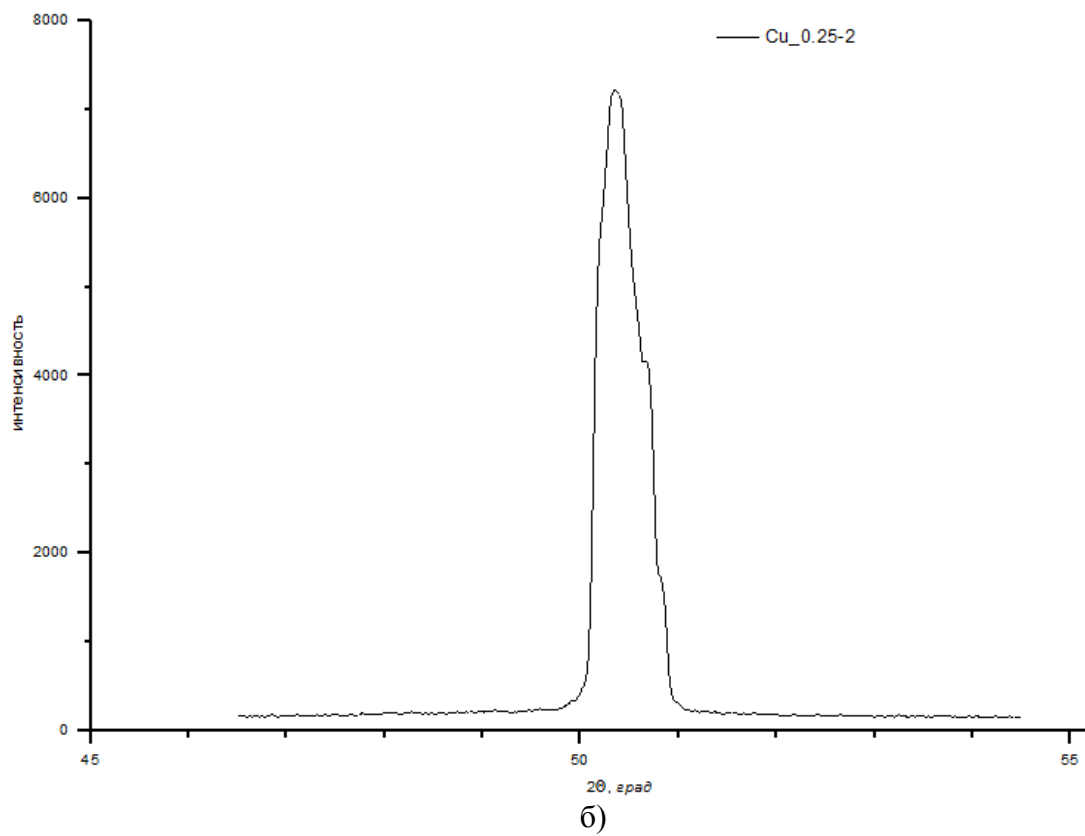
Таблица. – Описание комбинаций щелей гониометра ( $\Gamma$ ) и счетчика ( $C$ ) (ширина щелей в мм)

$\Gamma \setminus C$	$0,25 C_1$	$2,00 C_2$
$0,25 \Gamma_1$	$\Gamma_1 C_1$	$\Gamma_1 C_2$
$2,00 \Gamma_2$	$\Gamma_2 C_1$	$\Gamma_2 C_2$

На рисунке 5 в качестве примера влияния щелей гониометра ( $\Gamma$ ) и счетчика ( $C$ ) на профиль рефлекса взяты сочетания  $\Gamma, C - 0,25 \text{ мм}, 2,00 \text{ мм}$ . Очевидно, что любые параметры, для расчета которых необходимо значение  $(\Delta 2\theta)$ , могут на порядок отличаться друг от друга при различных условиях получения дифрактограммы.



а)



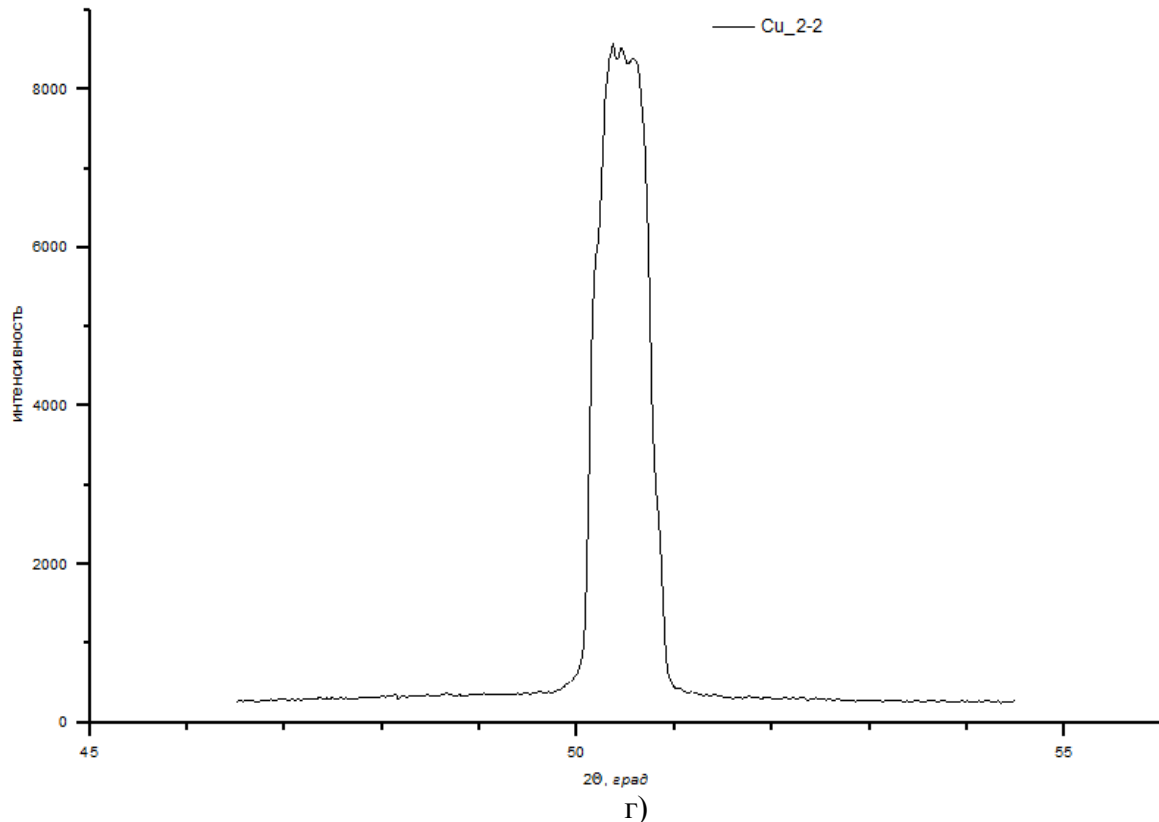


Рисунок 5. – Профили рефлекса меди 200  
при  $\Gamma_1 = 0,25$ ;  $\Gamma_2 = 2,00$ ;  $C_1 = 0,25$ ;  $C_2 = 2,0$ , мм

### Заключение

Описана кинематическая теория рассеяния рентгеновского излучения на кристаллах, из которой получены следующие выводы:

1. Так как «вес» узла  $(hkl)$  обратной решетки кристалла определяется структурной амплитудой соответствующей ему плоскости  $(hkl)$ , то профиль  $(hkl)$  описывает геометрию узла, который в теории рассматривается как точка, но, в соответствии с моделью Эвальда, он имеет ненулевое поперечное сечение.

2. При увеличении размера узла обратной решетки увеличивается полуширина рентгеновского рефлекса.

3. На полуширину рефлекса оказывают влияние три основных фактора: структурно-химические дефекты, увеличение температуры, размер кристаллитов.

4. Дефекты вызывают искажения структуры кристалла, приводящие к изменению кристаллографических координат атомов, т.е. влияют на фазовый множитель в формуле расчета структурной амплитуды, что приводит к появлению дополнительного фазового множителя, объясняющего увеличение  $(\Delta 2\theta)$ .

5. При нагревании, когда в образце устанавливается равновесие, т.е.  $grad T = 0$  во всех точках, на величину  $(\Delta 2\theta)$  оказывает влияние амплитудный множитель в формуле расчета  $F(hkl)$ , что обусловлено увеличением амплитуд колебаний атомов.

6. Формула Шеррера, выведенная на основе кинематической теории рассеяния, содержит множитель Шеррера, строго равный единице.

7. Экспериментальный параметр ( $\Delta 2\theta$ ) зависит от геометрии съемки рентгенограммы, так как вариации входных щелей гониометра и счетчика изменяют полуширину рефлекса.

8. Полуширина рефлекса может быть использована для иерархических оценок в серии образцов, рентгенограммы которых получены при одинаковых условиях, но даже в этом случае вероятны ошибочные заключения. Например, при диспергировании в образце изменяется не только размер кристалла, но и его дефектность.

#### СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Гинье, А. Рентгенография кристаллов. Теория и практика / А. Гинье. – М. : Гос. изд-во физ.-мат. лит., 1961. – 604 с.
2. Практическая рентгеновская дифрактометрия / В. А. Лиопо [и др.]. – Иркутск : Изд-во ИГУ, 2010. – 159 с.
3. Ladd, M. Structure Determination by X-ray Crystallography / M. Ladd, R. Palmer. – Berlin : Springer, 2013. – 756 p.
4. Ramakanth Hebbar, K. Basics of X-Ray Diffraction and its Applications / K. Ramakanth Hebbar. – New Delhi : I. K. International Publishing House Pvt. Ltd, 2007. – 257 p.
5. Лиопо, В. А. Температурный эквивалент наноразмерности / В. А. Лиопо, В. А. Струк // Весн. Гродз. дзярж. ун-та імя Я. Купалы. Сер. 2, Матэматыка. Фізіка. – 2009. – Т. 82, № 2. – С. 84–89.
6. Cao, G. Nanostructures and Nanomaterial Synthesis, Properties, and Applications / G. Cao, Y. Wang. – New York : World Scientific, 2011. – 581 p.
7. Mitin, V. V. Quantum Mechanics for Nanostructures / V. V. Mitin, D. I. Sementsov, N. Z. Vagidov. – Cambridge : Cambridge University Press, 2010. – 488 p.

Рукапіс паступіў у рэдакцыю 13.02.2018

#### ***Liopo V.A., Liaushuk I.A., Auchynnikau Y.V., Pushkarev A. V., Sekerzhitsky S.S. Factors Influencing the Size of the Reciprocal Lattice***

*The reasons for the change in the half-width of the X-ray reflex are investigated. The value of its dimensions depends on the size of the crystallites in accordance with the well-known Scherrer formula, for which we have shown in the kinematic scattering theory that its constant coefficient is strictly equal to one. It is found that with increasing diffraction angle this half-width always monotonically increases. In this case, the half-width of the X-ray reflex can be used only for hierarchical estimates of the size or temperature*