

УДК 621.09

Е.В. Овчинников, В.А. Лиопо, В.А. Струк

Гродненский государственный университет, г. Гродно, Беларусь

## ЗАВИСИМОСТЬ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО СОСТОЯНИЯ НАНОКОМПОЗИТОВ ОТ РАЗМЕРА НАНОМОДИФИКАТОРОВ

Было установлено, уменьшение размеров кристаллита и нагревание объекта приводит к одинаковому эффекту, а именно к увеличению полуширины рефлекса низкоразмерных кристаллитов можно определить температуру кристалла, связанной с экспериментальным значением, полученной по формуле Шеррера. В процессе исследований показано, что коэффициент Шеррера строго равен 1 и увеличение рентгеновского рефлекса при нагревании кристалла обусловлено не фазовым, а амплитудными множителями структурной амплитуды. Показано, что наряду с условием существования поверхности наночастиц необходимым условием является изменение численных значений параметров физических свойств от размера частицы..

**Ключевые слова:** композиционные триботехнические материалы, кристаллит, коэффициент Шеррера, температура кристалла.

**Введение.** Проблема создания композиционных триботехнических материалов с оптимальными параметрами служебных характеристик является составной частью общей проблемы разработки методологических подходов к управлению структурой на различных уровнях организации с целью адаптирования изделия к определенным условиям эксплуатации. Развитие нанотехнологий и наноматериалов стимулирует поиск принципиально новых технических решений в электронике, приборостроении, вычислительной технике и других областях промышленности, определяющих современный уровень цивилизации. Одновременно развивается исследовательское оборудование для анализа физико-химических процессов, протекающих на принципиально новом уровне. Согласно современным представлениям различают нанофазные и нанокomпозиционные материалы [1-7]. Под первыми понимают материалы, у которых размер частиц, кристаллов или фаз не превышает 100 нм [1-7]. Нанокomпозиционные материалы (нанокomпозиты) представляют собой матрицу, в которой случайным образом распределены наноразмерные частицы (НРЧ) или их кластеры [1-7]. Нам представляется это определение более точным и соответствующим современным представлениям, принятым в физике и материаловедении. Нанокристаллическая частица обладает двумя основными свойствами: во-первых эта частица имеет границу, т.е. может быть выделена из смеси с другими веществами механическими способами. Во-вторых, параметры физических свойств этой частицы начинают зависеть от размера объекта, следовательно отличаются от табличных значений параметров. Существует размерная граница между макроскопическими и наноразмерным состояниями  $L_0$ -которая рассчитывается по формуле

$$L_0 = \frac{\sqrt{1.5h}}{\sqrt{km}} \Theta_D^{-1/2} = 2.3 \cdot 10^{-7} \left[ \text{мК}^{\frac{1}{2}} \right] \Theta_D^{-\frac{1}{2}} = 230 \Theta_D^{-1/2} [\text{нм}], \quad (1)$$

где  $h$ -постоянная Планка,  $k$ -постоянная Больцмана,  $m$ -масса электрона,  $\Theta_D$ -температура Дебая. Это формула позволяет получить значения, которые коррелируют с результатами различных исследований [1]. Зависимость параметра от физического свойства описывается формулой

$$S(r) = \frac{S_v}{\left| \exp \left[ \alpha \left( \frac{1-x}{x} \right)^{\frac{3}{2}} \right] \right|}, \quad (2)$$

где  $x=r/L_0$ ,  $\alpha$ -параметр, зависящий от изучаемого свойства,  $r$ -размер частицы. Изменение физических свойств в наноразмерном диапазоне обусловлено изменениями энергетического состояния. Дебаевская длина волны, которая определяет  $L_0$ , это линейный размер действия отдельного электрона на прилегающие к нему участки вещества [2]. Следовательно при  $r > L_0$  применима модель одноэлектронного приближения, при  $r < L_0$  надо использовать модель “электронного желе” [2,3].  $L_0$  не является резкой границей, но чем сильнее указанное неравенство, тем с большей достоверностью работает соответствующая модель. Изменение энергетического состояния при уменьшении объема частицы следует при учете поверхностной энергии. Для сферической частицы удельная поверхность определяется  $\sigma=3/r$ , следовательно полная энергия (с учетом ее поверхностной составляющей) больше для объема системы частиц по сравнению с макрообъектом того же объема.

Целью данного исследования является анализ связей между энергетическими характеристиками и геометрическими параметрами наночастиц.

Для этого необходимо выбрать такой экспериментальный параметр, который был бы связан как с размером частицы, так и с его энергетическим параметром, например температурой. Для достижения этой цели анализировались формулы Шеррера и фактор Дебая-Валлера. Кроме этого подчеркивается, что влияние размера частиц на энергетическое состояние электрона следует из общего квантомеханического анализа кристаллов.

**Зависимость плотности значений волнового вектора от размера кристалла.** Энергетическое состояние электрона описывается уравнением Шредингера (3)

$$\hat{H}\psi = E\psi, \quad (3)$$

где  $\psi$ -волновая функция,  $E$ -полная энергия электрона,  $\hat{H}$  -оператор Гамильтона, имеющего вид

$$\hat{H} = \left[ -\frac{\hbar^2}{2} \Delta + U \right], \quad (4),$$

где  $U$ -оператор потенциала,  $\hbar$ -постоянная Планка,  $\Delta$ -оператор Лапласа вида:

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}. \quad (5)$$

Из формулы (3) следует, что  $\psi$ -является собственной функцией, а  $E$ -собственным значением оператора Гамильтона. Уравнение Шредингера может быть применено для отдельных электронов и волновая функция имеет вид:

$$\psi = \psi_0 \exp \frac{i}{\hbar} (Et - \vec{k}\vec{r}), \quad (6)$$

где  $\psi_0$ -амплитуда,  $t$ -время,  $\vec{k}$ -волновой вектор. Кристаллы – тела решетчатые, следовательно, если  $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ , -репер Бравэ, то точки с координатами  $(x,y,z) \equiv (x+m\vec{a}, y+n\vec{b}, z+p\vec{c})$ . Координатная система определяется сингонией кристалла,  $m,n,p$ -целые числа. Оператор трансляции  $\hat{T}$  определяется условием

$$\hat{T}\psi(x, y, z) = \psi(x + m\vec{a}, y + n\vec{b}, z + p\vec{c}) = \psi(x, y, z). \quad (7)$$

Если волновая функция является собственной функцией не только оператора Гамильтона, но и оператора трансляции, если эти два оператора коммутируют, т.е.

$$\hat{T}\hat{H} = \hat{H}\hat{T} \quad (8).$$

Это вытекает из определения указанных операторов (3), (7). Действительно

$$\hat{T}\hat{H}\psi(x, y, z) = \hat{T}E\psi(x, y, z) = E\hat{T}\psi(x, y, z) = E\psi(x + m\vec{a}, y + n\vec{b}, z + p\vec{c}) = \hat{H}\psi(x + m\vec{a}, y + n\vec{b}, z + p\vec{c}) = \hat{H}\hat{T}\psi(x, y, z) \quad (9)$$

Т.е. можно записать

$$\hat{T}\psi(x, y, z) = C\psi(x, y, z), \quad (10).$$

где  $C$ -собственное значение оператора трансляции, которая во-первых-определяется решеткой, т.е. не зависит от  $x, y, z$  и во-вторых  $|C|=1$ , (см. формулу (7)). В общем случае  $C$ -комплексная функция вида

$$C = U = \exp i\vec{K}\vec{t}, \quad (11).$$

где  $U$ -волновая функция Блоха,  $\vec{K}$ -волновой вектор Блоховской волны,  $\vec{t}$  – вектор трансляции. Рассмотрим одномерный случай

$$U_x = \exp iK_x m a. \quad (12).$$

Из формулы (7) следует, что  $K_x m a = 2\pi$  [2]. Очевидно, что если размер кристаллов вдоль оси  $X$  равен  $A$ , то максимальное значение  $m=M$  определяется условием  $A/a$ . Следовательно, общее число волновых векторов для одномерного случая равно  $M$  и на одно линейное значение в пространстве волнового вектора приходится отрезок  $2\pi/A$ . Отсюда линейная плотность  $K_x = A/2\pi$ , это значит, что объемная плотность  $\vec{K}$  в пространстве волнового вектора равна:

$$\frac{ABC}{(2\pi)^3} = \frac{V}{8\pi^3}, \quad (13),$$

где  $A, B, C$ -размеры монокристаллов вдоль осей  $x, y, z$  соответственно. Так как  $K_1 = 2\pi/a = 2\pi/a$ , то все векторы  $K_x = mK_1$ , т.е. находятся внутри первой зоны Бриллюэна. Волновая функция электрона с учетом трансляции имеет вид

$$\psi = \exp i\vec{K}\vec{t} \psi(r), \quad (14)$$

То есть амплитуда волновой функции свободного электрона модулируется волновой функцией Блоха [2]. Уравнение (14) носит название теоремы Блоха. Так как импульс и энергия электрона в блоховской волне связаны со значением ее волнового вектора, то из (14) следует, что размер кристалла влияет на его энергетические характеристики. Известно, что при уменьшении размера кристалла увеличивается полуширина рентгеновского рефлекса  $(\Delta\varphi) = (\Delta 2\vartheta)$ ,  $\varphi$  - угол дифракции,  $\vartheta$  - брэгговский угол. Нагревание макрокристалла также увеличивает полуширину рентгеновского рефлекса. Если полуширина вызванная нагреванием  $(\Delta 2\vartheta)_T$  и полуширина рефлекса определяемая размером  $((\Delta\varphi)_L = (\Delta 2\vartheta)_L)$  равны друг другу, то можно найти температурный «эквивалент» размера кристалла.

**Формула Шеррера.** Формула Шеррера выведенная из геометрической модели рассеяния рентгеновских лучей и имеет вид [3,4]

$$(\Delta 2\vartheta) = q \frac{\lambda}{L \cos \vartheta}, \quad (15),$$

где  $\lambda$  - длина волны рентгеновского излучения,  $q$ -постоянная Шеррера, которая в зависимости от геометрической модели рассеяния может меняться в интервале от 0,8 до 2 [3,4]. Точные значения постоянной Шеррера можно найти на основе общей теории дифракции. Амплитуда рассеянного рентгеновского излучения описывается формулой (16):

$$A(\vec{s}) = \sum f_j \exp 2\pi i(\vec{s}\vec{r}_j), \quad (16),$$

где  $\vec{s}, \vec{r}$  – радиусы векторы прямого и обратного пространства соответственно,  $f_j$  – рассеивающая способность  $j$ -го рассеивающего центра, суммирование выполняется по атомам ячейки кристалла. Вектор  $\vec{s}$  – коллинеарен вектору межплоскостного расстояния ( $\vec{d}$ ) и определяется условием (17):

$$s = \frac{1}{d} = \frac{2 \sin \theta}{\lambda}. \quad (17)$$

В качестве рассеивающего центра рассмотрим плоскость, тогда формула 16 примет вид

$$A(s) = \sum_{n=0}^{N-1} F_n(s) \exp 2\pi i s n d_n, \quad (18),$$

где  $N$ -число атомных плоскостей в кристалле.

Так как  $F_n(s) = F(s)$  для всех плоскостей и  $d_n = nd$ , то

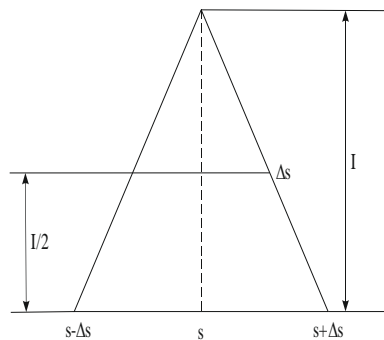
$$A(s) = F(s) \sum_{n=0}^{N-1} \exp 2\pi i s n d, \quad (19)$$

Сумма членов данной геометрической прогрессии, знаменатель которой  $e^{2\pi i s d}$ , равна:

$$C_N = \frac{1 - \exp 2\pi i s N d}{1 - \exp 2\pi i s d}. \quad (20)$$

Условие (19) с учетом (20) примет вид:

$$A(s) = F(s) \cdot \frac{1 - \exp 2\pi i s N d}{1 - \exp 2\pi i s d}. \quad (21)$$



$s$ - положение максимума,  $\Delta s$  – полуширина максимума

Рис. 1. «Размытый» узел обратной решетки

Интенсивность рассеянного луча равна (см. (22))

$$I(s) = A(s) \cdot A^*(s) = \frac{(1 - e^{2\pi i s N d}) \cdot (1 - e^{-2\pi i s N d})}{(1 - e^{2\pi i s d}) \cdot (1 - e^{-2\pi i s d})} = F^2(s) \cdot \frac{(1 - \cos 2\pi s N d)}{(1 - \cos 2\pi s d)} = F^2(s) \cdot \frac{\sin^2 \pi s N d}{\sin^2 \pi s d}. \quad (22)$$

Если вектор  $\vec{s}$  соответствует положению узла обратной решетки, то  $sd=1$ . Профиль рентгеновского рефлекса соответствует профилю узла обратной решетки, имеющего плоское сечение в виде вытянутого треугольника (рисунок 1).

Рассмотрим условие, при котором  $I(s) = 0$ . Для этого необходимо вместо  $s$  в формуле (22) подставить  $(s \pm \Delta s)$  и принять условие  $I(s \pm \Delta s) = 0$ . Это требование будет выполнено при:

$$\sin^2 \pi N d \Delta s = 0, \quad (23)$$

Так как

$$\sin \pi N d (s \pm \Delta s) = \pm \sin \pi N d \Delta s. \quad (24)$$

То на основании (22) и (23) получим

$$\frac{\sin^2 \pi N d \cdot \Delta s}{\sin^2 \pi d \cdot \Delta s} = 0$$

Это выполняется при условии  $\pi N d \cdot \Delta s = \pi$ . Тогда

$$\Delta s \cdot N d = \Delta s \cdot L = 1.$$

Так как  $s = \frac{2 \sin \vartheta}{\lambda}$ , то

$$\Delta s = \frac{2 \cos \vartheta \cdot \Delta \vartheta}{\lambda} = \frac{\cos \vartheta \cdot (\Delta 2\vartheta)}{\lambda}. \quad (26)$$

Таким образом, на основании общей теории рассеяния рентгеновского излучения

$$L = \frac{\lambda}{\cos \vartheta (\Delta 2\vartheta)}. \quad (27)$$

Если из геометрических моделей, основанных на уравнении Вульфа-Брэггов следует, что коэффициент  $q$  может иметь различные значения, то с учетом анализа интенсивностей рефлексов  $q=1$ .

#### Фактор Дебая-Валлера.

Т.к. векторы  $\vec{S}, \vec{r}$  для кристалла имеют вид

$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{S} = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^* \\ \vec{r} = \vec{a}x + \vec{b}y + \vec{c}z \end{array} \right\}, \quad (28)$$

где  $h, k, l$ -кристаллографические индексы (Мюллера),  $a^*, b^*, c^*$ ;  $a, b, c$ -то же векторы реперы Бравэ обратной и прямой решеток. Так как

$$\vec{a}_i^* \vec{a}_j = \vec{a}_j \vec{a}_i^* = \delta_{ij}, \quad (29)$$

где  $\delta_{ij}$ -функция Дирака.

Тогда формула (16) примет вид

$$A(\vec{S}) \Rightarrow F(h, k, l) = \sum_{j=1}^N f_j(xyz) \exp 2\pi i (hx_j + ky_j + lz_j), \quad (30)$$

где  $F(h, k, l)$  структурная амплитуда  $N$ -число атомов ячейки,  $x, y, z$ -кристаллографические координаты. В рамках модели Дебая-Валлера полагается, что межатомные расстояния возрастают, т.е. структурная амплитуда примет вид

$$F(h, k, l) =$$

$$\sum_{j=1}^N f_j \exp 2\pi i [h(x + \Delta x)_j + k(y + \Delta y)_j + l(z + \Delta z)_j] = \sum_{j=1}^N f_j \exp 2\pi i (hx_j + ky_j + lz_j) \exp 2\pi i (h\Delta x_j + k\Delta y_j + l\Delta z_j) \quad (31)$$

Предполагается, что

$$\Delta x = \Delta y = \Delta z \Rightarrow \Delta r. \quad (32)$$

Тогда

$$F(hkl) = F_0(hkl) \exp(-M), \tag{33}$$

где  $F_0(h,k,l)$ -начальная структурная амплитуда,  $\exp(-M)$  –множитель, появившийся при учете увеличения межатомных расстояний. При переходе к интенсивности этот множитель примет вид  $\exp(-2M)$  и носит название фактора Дебая-Валлера. Так как данный фактор уменьшает максимальную интенсивность рентгеновского рефлекса при нагревании, а его интегральная интенсивность сохраняется, то полуширина рефлекса увеличивается. Однако, вывод Мравного (34)

$$M = \frac{1}{3} 2\pi^2 s^2 (\Delta x)^2, \tag{34}$$

основан на ошибочном предположении.

В формуле 30 приведены кристаллографические координаты. Например в базоцентрированной решетке (рис.2а) при нагревании изменились и линейные, и угловые параметры (рис.2б), то кристаллографические координаты атомов ((001)(? ? 0)) не меняются следовательно формула 31 некорректна.

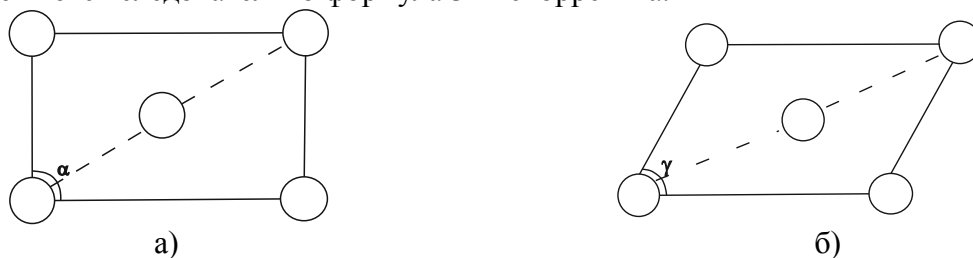


Рис. 2. Неизменность кристаллографических координат (000) (? ? 0): а-исходная ячейка, б-полученная нагреванием ячейка

Следовательно, при нагревании фазовый множитель в формуле структурной амплитуды остается неизменным. Формула (31) в качестве рассеивающего центра рассматривает атом. Если перейти к электронной плотности, то структурная амплитуда примет вид:

$$F(hkl) = \iiint_{000} \rho(xyz) \exp 2\pi i(hx + ky + lz) dx dy dz \tag{35}$$

и для отдельного атома

$$f_j = \iiint_{V_{ат}} \rho(xyz) \exp 2\pi i(hx + ky + lz) dx dy dz, \tag{36}$$

где интегрирование проводится по объему атома.

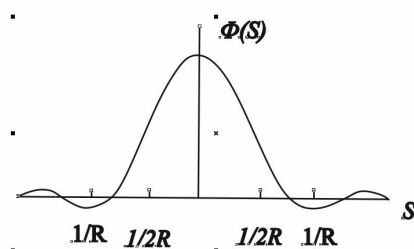


Рис. 3. Трансформанта сферической функции

При нагревании увеличивается радиус сферы внутри которой, совершаются термические колебания атомов, что приводит к увеличению межатомных расстояний, но не меняет кристаллографических координат. Следовательно, атомная амплитуда рассеяния является трансформантой функции электронной плотности атома.

На рисунке 3 представлено плоское сечение трансформанты Фурье сферической функции с радиусом  $R$  [5]. Следовательно “увеличение” размера атома при нагревании приведет к увеличению полуширины угла обратной решетки. Средний квадрат отклонения атомов от идеального положения  $\langle \Delta \rangle^2$  для моноэлементных кристаллов имеет вид:

$$\langle x \rangle^2 = \frac{9h^2}{4\pi^2 k \text{ (а.е.м.)}} \cdot \frac{1}{\mu\theta_D} \Phi(T/\theta_D), \quad (37)$$

где,  $\mu$  - атомная масса в углеродных единицах,  $\theta_D$  - температура Дебая,  $T$  - температура кристалла, (а.е.м.) - атомная единица массы. График функции  $\Phi(T/\theta_D)$  приведен на рисунке 4 [4].

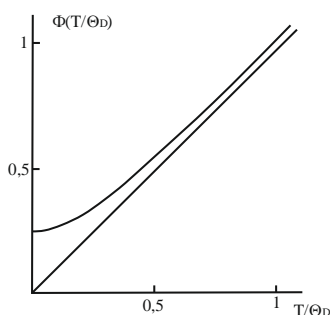


Рис. 4. График функции  $\Phi(T/\theta)$

Функция  $\Phi(T/\theta_D)$  для значений  $T > \theta_D$  практически равна 1 (рис.4). В формуле (37) первый множитель включает табличные значения, после подстановки которых получим:

$$\langle x \rangle^2 = \frac{9(6,63)^2}{4\pi^2 \cdot 1,38 \cdot 1,66} \cdot 10^{-18} \cdot \frac{1}{\mu\theta_D} \cdot \Phi(T/\theta_D) = 4,35 \cdot 10^{-18} [M^2 \cdot k] \cdot \frac{1}{\mu\theta} \cdot \Phi(T/\theta_D) \quad (38)$$

Из квантовой механики следует, что среднее квадратичное отклонение атома от положения равновесия вызванное нагреванием кристалла определяется формулой (39) и при  $\Phi(T/\theta) = T/\theta$ , получим

$$\langle x \rangle \approx 2,1 [нм \cdot k] \cdot \frac{1}{\sqrt{\mu\theta_D}} \cdot (T/\theta_D)^{1/2} \quad (39)$$

Таким образом, взяв значения полуширины рентгеновского рефлекса при исследовании низкоразмерных поликристаллических объектов и подставив в формулу зависимости полуширины от температуры получим температурный «эквивалент» линейного размера частицы от которого можно перейти и к энергетическому «эквиваленту».

Проведенные исследования по изучению взаимосвязи между геометрическими характеристиками частиц и физическими параметрами нанокomпозиционных материалов показали наличие таких связей. Так установлена зависимость между параметрами фактора формы и зарядовой активности нанокomпозиционных материалов. Фактор формы определяется как безразмерная величина, представляющая комбинацию характеристик размеров и формы частицы или структурной составляющей, например, отношение длины к ширине или квадрата периметра к площади и значениями. Для исследований применялись частицы получаемые диспергированием по различных технологиям. Согласно данным растровой

электронной микроскопии в данных материалах всегда присутствуют низкоразмерные частицы. Результаты определения фактора формы и ориентации для низкоразмерных частиц приведены в таблице 1.

Таблица 1. Значения факторов, определяющих габитус зарядовых частиц

Наименование исследуемого образца	Трепел	Кремень	Дисперсные частицы стекла	Отходы металлургического производства	Механоактивированные частицы аэросил+полиамид 6
Значения фактора формы	0,5288	0,3441	0,384	0,6086	0,11

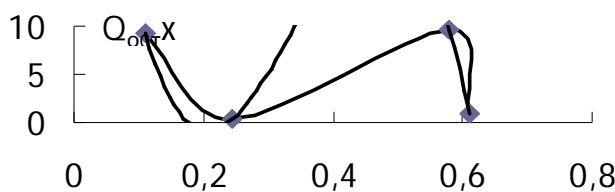


Рис. 5. Зависимость остаточного заряда механоактивированных частиц от фактора формы низкоразмерных частиц (таблица)

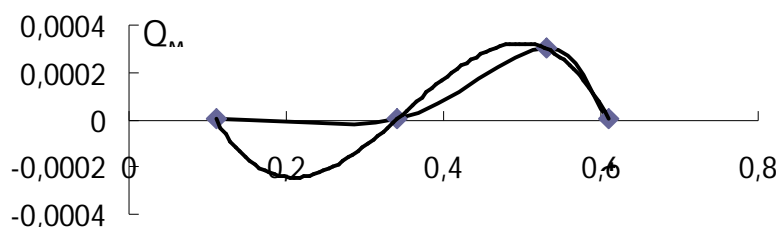


Рис. 6. Зависимость заряда, оставшегося в момент достижения максимума тока от фактора формы низкоразмерных частиц (таблица)

Исходя из представленных данных на рисунках 5-6 представлена взаимосвязь между основными параметрами характеризующими зарядовую активность частиц и внешней формы частицы.

**Заключение.** Наряду с условием существования поверхности наночастиц необходимым условием является изменение численных значений параметров физических свойств от размера частицы. Показано, что эта зависимость вытекает из квантово-механического анализа электронных свойств у объектов с периодическим потенциалом. Это влияние определяется теоремой Блоха. Из которой, к сожалению функциональной зависимости, между энергетическими свойствами кристалла и его размерами получить невозможно. Так как уменьшение размеров кристаллита и нагревание объекта приводит к одинаковому эффекту, а именно к увеличению полуширины рефлекса низкоразмерных кристаллитов можно определить температуру кристалла, связанной с экспериментальным значением, полученной по формуле Шеррера. В процессе исследований показано, что коэффициент Шеррера строго равен 1



и увеличение рентгеновского рефлекса при нагревании кристалла обусловлено не фазовым, а амплитудными множителями структурной амплитуды.

#### **Список литературы:**

1. Прогрессивные машиностроительные технологии. Том II. Коллективная монография. / С.В. Авдейчик, А.Н. Афонин, В.В. Воропаев, В.П. Иванов, А.В.Киричек, Г.А. Костюкович, В.И. Кравченко, В.А. Лиопо, Л.В. Михайлова, А.В.Морозова, Е.В. Овчинников, А.А. Рыскулов, А.А. Скаскевич, В.А. Струк, Е.И. Эйсымонт; Под ред. А.В. Киричека. - М.: Издательский дом «Спектр», 2012. - 336 с.
2. Анималу А. Квантовая теория кристаллических твердых тел Москва, Мир, 1981. - 576 с.
3. Nanostructures and nanomaterials: Synthesis, Properties, and Applications. Guozhong Cao. Ying Wang. World scientific 2011. - p. 518
4. В.А. Лиопо Температура Дебая в нанофизике и ее определение рентгенографическим методом/Сборник докладов Международной научной конференции «Актуальные проблемы физики твердого тела» 15-18 октября 2013г. – с. 42-44.
5. Гинье А. Рентгенография кристаллов. Теория и практика. Из-во: Государственное издательство физико-математической литературы, 1961. С. 604.
6. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. Из-во: Наука- 1978. С. 789.
7. Введение в физику нанокмпозиционных машиностроительных материалов: монография / Под научной редакцией В.А. Лиопо, В.А. Струка. – Гродно: ГГАУ, 2009. – 439 с.

Надійшла до редакції 21.06.2014

**Е.В. Овчинников, В.А. Ліопо, Струк В.А.**

#### **ЗАЛЕЖНІСТЬ ЕНЕРГЕТИЧНОГО СТАНУ НАНОКОМПОЗИТИВ ВІД РОЗМІРУ НАНОМОДИФІКАТОРІВ**

*Було встановлено, зменшення розмірів кристаліта і нагрівання об'єкта призводить до однакового ефекту, а саме до збільшення полуширини рефлексу низькорозмірних кристалітів можна визначити температуру кристала, пов'язану з експериментальним значенням, отриманим за формулою Шеррера. У процесі досліджень показано, що коефіцієнт Шеррера строго дорівнює 1 і збільшення рентгенівського рефлексу при нагріванні кристала обумовлено не фазовим, а амплітудними множниками структурної амплітуди. Показано, що поряд з умовою існування поверхні наночастинок необхідною умовою є зміна чисельних значень параметрів фізичних властивостей від розміру частки.*

**Ключові слова:** композиційні триботехнічні матеріали, кристаліт, коефіцієнт Шеррера, температура кристала.

**E. Ovchinnikov, V. Liopo, V. Struck**

#### **DEPENDENCE OF THE ENERGY STATES OF THE SIZE NANOCOMPOSITES NANOMODIFIKATOROV**

*It was established that reducing the size of the crystallite of the object and heating leads to the same effect, namely to increase the half-width of the reflex is possible to determine the crystallite of low-dimensional crystal temperature associated with the experimental value obtained by the Scherrer formula. While studies have shown that the coefficient Scherrer strictly equal to 1 and an increase in the X-ray crystal is heated at reflex is not due to the phase and amplitude factors of the structure factor. Show sthere lationship between the parameter sdefining the formoflow-dimensional particle sand physical properties.*

**Keywords:** composite tribological materials, crystals, Scherrer coefficient, the temperature of the crystal.