



УДК 548.0.536

Роздільне визначення амплітуди теплових коливань катіона і аніона в кристалічній ґратці типу NaCl

Я.І. Федішин¹, Д.І. Вадець², О.Я. Романів³, Т.Я. Федішин¹
fedyshyn.yaroslav@gmail.com

¹Львівський національний університет ветеринарної медицини та біотехнологій імені С.З. Гжицького,
вул. Пекарська, 50, м. Львів, 79010, Україна;

²Національний університет водного господарства та природокористування,
вул. Соборна, 11, м. Рівне, 33028, Україна;

³Житомирський державний технологічний університет,
вул. Чуднівська, 103, м. Житомир, 10005, Україна

Розглядається доцільність роздільного експериментального визначення середньоквадратичного динамічного зміщення (СКДЗ) $\overline{u_0^2}$ атомів (іонів) кристалічної ґратки рентгенівським методом. Від величини СКДЗ залежить значення рухливості іонів ґратки та стійкість кристалічної ґратки.

Обговорюються різні методи експериментального визначення числового значення СКДЗ рентгенівським способом. Зокрема, йдеться мова про визначення характеристичної температури Дебая Θ шляхом аналізу зміни інтенсивності дифракційних максимумів дифрактограм, знятих при двох температурах, наприклад, при кімнатній температурі та температурі рідкого азоту. Справа в тому, що за значенням Θ можна визначити температурний множник (фактор Дебая-Валлера)

e^{-2M} , де $2M = \frac{12h^2T}{mk\theta^2} \left[\phi\left(\frac{\theta}{T}\right) + \frac{1}{4} \frac{\theta}{T} \right] \frac{\sin^2 \vartheta}{\lambda^2}$, який зв'язаний з $\overline{u_0^2}$ співвідношенням $2M = \frac{16}{3} \pi^2 \overline{u_0^2} \frac{\sin^2 \vartheta}{\lambda^2}$, де h – постійна Планка,

k – постійна Больцмана, T – термодинамічна температура, m – маса атома, $\phi\left(\frac{\theta}{T}\right)$ – функція Дебая, ϑ – кут дифракції, λ – довжина хвилі рентгенівських променів.

Однак цей метод передбачає незмінність характеристичної температури. Цей недолік можна усунути методом високотемпературного рентгенографування шляхом аналізу зміни інтенсивності одного дифракційного максимуму (hkl), визначення залежності $\Theta(T)$ та $\overline{u_0^2}(T)$. Цей метод доцільно використовувати при дослідженні кристалів з односортними атомами, бо для кристалів, наприклад NaCl, потрібно вводити поняття маси гіпотетичного атома.

Метод визначення структурного множника F усуває вказані недоліки. В статті деталізований і доповнений цей метод поправками на теплове дифузне розсіяння (ТДР) рентгенівських променів. Суть цього методу полягає в тому, що квадрат структурної амплітуди для кристалів типу NaCl можна записати як $F_0^2 = c(f_{0k} \pm f_{0a})^2$, де f_{0k} , f_{0a} – атомні множники (фактори) катіона і аніона відповідно без врахування фактора Дебая-Валлера; c – множник, який пов'язаний зі структурою кристалу; знаки «+» і «-» належать всім парним індексам (hkl) і всім непарним відповідно. Аналізуючи інтенсивності дифракційних максимумів з парними і окремо з непарними індексами (hkl), можна знайти $f_{0k} e^{-M_k}$ та $f_{0a} e^{-M_a}$

роздільно при довільних значеннях $\frac{\sin^2 \vartheta}{\lambda^2}$, а потім $\overline{u_{0k}^2}$ та $\overline{u_{0a}^2}$. Методика застосована при дослідженні коливань іонів у ґратці NaCl.

Ключові слова: середньоквадратичні зміщення, характеристична температура Дебая, атомний фактор, структурний фактор, катіони і аніони, фактор Дебая-Валлера, температурний множник, роздільне визначення коливань атомів.

Citation:

Fedyshyn, Ya.I., Vadets, D.I., Romaniv, O.Ya., Fedyshyn, T.Ya. (2017). Separate definition of the amplitudes of thermal vibrations of cation and anion in the crystal lattice type NaCl. *Scientific Messenger LNUVMB*, 19(80), 3–7.

Раздельное определение амплитуды тепловых колебаний катиона и аниона в кристаллической решетке типа NaCl

Я.И. Федышин¹, Д.И. Вадец², О.Я. Романив³, Т.Я. Федышин¹
fedyshyn.yaroslav@gmail.com

¹Львовский национальный университет ветеринарной медицины и биотехнологий имени С.З. Гжицького,
ул. Пекарская, 50, г. Львов, 79010, Украина;

²Национальный университет водного хозяйства и природопользования,
ул. Соборная, 11, г. Ровно, 33208, Украина;

³Житомирский государственный технологический,
ул. Чудновская, 103, г. Житомир, 10005, Украина

Рассматривается целесообразность раздельного определения среднеквадратичного динамического смещения (СКДС) $\overline{u_0^2}$ атомов (ионов) кристаллической решетки рентгеновским методом. От величины СКДС зависят подвижности ионов решетки и устойчивость кристаллической решетки.

Обсуждаются различные методы экспериментального определения числового значения СКДС рентгеновским методом. В частности идет речь об определении характеристической температуры Дебая Θ путем анализа изменения интенсивности дифракционных максимумов дифрактограмм, снятых при двух температурах, например, при комнатной температуре и температуре жидкого азота. Дело в том, что по значениям Θ можно определить температурный множитель (фактор Дебая-Валлера) e^{-2M} , где $2M = \frac{12h^2T}{mk\theta^2} \left[\phi\left(\frac{\theta}{T}\right) + \frac{1}{4} \frac{\theta}{T} \right] \frac{\sin^2 \vartheta}{\lambda^2}$, который связан с $\overline{u_0^2}$ соотношением $2M = \frac{16}{3} \pi^2 \overline{u_0^2} \frac{\sin^2 \vartheta}{\lambda^2}$, где h – постоянная Планка, k – постоянная Больцмана, T – термодинамическая температура, m – масса атома, $\phi\left(\frac{\theta}{T}\right)$ – функция Дебая, ϑ – угол дифракции, λ – длина волны рентгеновских лучей.

Однако этот метод предполагает неизменность характеристической температуры. Этот недостаток можно устранить методом высокотемпературного рентгенографирования путем анализа изменения интенсивности одного дифракционного максимума (hkl), определить зависимости $\Theta(T)$ и $\overline{u_0^2}(T)$. Этот метод целесообразно применять при исследовании кристаллов с односортными атомами, так как для кристаллов, например NaCl, нужно вводить понятие массы гипотетического атома.

Метод определения структурного множителя F устраняет указанные недостатки. В статье детализирован и дополнен этот метод поправками на тепловое диффузное рассеяние (ТДР) рентгеновских лучей. Смысл этого метода заключается в том, что квадрат структурной амплитуды для кристаллов типа NaCl можно записать как $F_0^2 = c(f_{0k} \pm f_{0a})^2$, где f_{0k} , f_{0a} – атомные множители (факторы) катиона и аниона соответственно без учета фактора Дебая-Валлера; c – множитель, который связан со структурой кристалла; знаки «+» и «-» принадлежат всем четным индексам (hkl) и всем нечетным соответственно. Анализируя интенсивности дифракционных максимумов с парными и отдельно с нечетными индексами (hkl), можно найти $f_{0k} e^{-M_k}$ и $f_{0a} e^{-M_a}$ раздельно при произвольных значениях $\frac{\sin^2 \vartheta}{\lambda^2}$, а потом $\overline{u_{0k}^2}$ и $\overline{u_{0a}^2}$. Методика применена при исследовании колебаний ионов в решетке NaCl.

Ключевые слова: среднеквадратичные смещения, характеристическая температура Дебая, атомный фактор, структурный фактор, катионы и анионы, фактор Дебая-Валлера, температурный множитель, раздельное определение колебаний атомов.

Separate definition of the amplitudes of thermal vibrations of cation and anion in the crystal lattice type NaCl

Ya.I. Fedyshyn¹, D.I. Vadets², O.Ya. Romaniv³, T.Ya. Fedyshyn¹
fedyshyn.yaroslav@gmail.com

¹Stepan Gzhytskyi National University of Veterinary Medicine and Biotechnologies Lviv,
Pekarska Str., 50, Lviv, 79010, Ukraine;

²National University of Water Management and Nature Management,
Soborna Str., 11, Rivne, 33028 Ukraine;

³Zhytomyr State Technical University,
Chudnivska Str., 103, Zhytomyr, 10005, Ukraine

The expediency of a separate experimental determination of medium-quadratic dynamic displacement (MQDD) $\overline{u_0^2}$ of atoms (ions) of crystal lattice using the X-ray method is considered. From the value of the MQDD depends the value of the mobility of lattice ions and stability of crystalline lattice.

Different methods of experimental determination of the numerical value of MQDD by X-ray method are discussed. In particular, it is a question of determining the characteristic temperature of Debye Θ by analyzing the change in the intensity of the diffraction maxima of diffractograms, taken at two temperatures, for example, at room temperature and liquid nitrogen temperature. The fact is that by value of Θ you can determine the temperature factor (Debye-Waller factor) e^{-2M} which is related to $2M = \frac{12h^2T}{mk\theta^2} \left[\phi\left(\frac{\theta}{T}\right) + \frac{1}{4} \frac{\theta}{T} \right] \frac{\sin^2 \vartheta}{\lambda^2}$ the ratio $\overline{u_0^2}$, $2M = \frac{16}{3} \pi^2 \overline{u_0^2} \frac{\sin^2 \vartheta}{\lambda^2}$ where h – is constant. Lath, k – constant of Boltzman, T – thermodynamic temperature, m – atomic mass, $\phi\left(\frac{\theta}{T}\right)$ – Debye function, ϑ diffraction angle, λ the wavelength of X-rays.

However, this month implies immutability of the characteristic temperature. This defect can be eliminated by the method of high-temperature X-ray by analyzing the change in the intensity of one diffraction of maximum (hkl), determination of dependence $\Theta(T)$ and $\overline{u_0^2}(T)$. This method is appropriate for the study of crystals with a single-member atom, because for the crystals, for example NaCl it is necessary to introduce the concept of the mass of a hypothetical atom.

The method for determining the structural multiplier F eliminates these disadvantages. The article is detailed and complemented by this method of correction on thermal diffusion scattering (TDS) of X-ray. The essence of this method is that the square of the structural amplitude for crystals of type NaCl can be written as $F^2 = c(f_{0k} \pm f_{0a})^2$, where f_{0k}, f_{0a} – Atomic sets (factors) of cation and anion respectively, without taking into account the factor Debye-Waller; c – multiplier which is related to the structure of the crystal; signs «+» and «-» belong to all paired indexes (hkl) and to all odd respectively. Analyzing the intensity of the diffraction maximums with paired and separately with odd indices (hkl), can be found $f_{0k} e^{-M_k}$ and $f_{0a} e^{-M_a}$ separately for arbitrary values $\frac{\sin^2 \vartheta}{\lambda^2}$, and later $\overline{u_{0k}^2}$ and $\overline{u_{0a}^2}$. The method is applied in the study of ion fluctuations in a lattice NaCl.

Key words: mean square offsets, characteristic temperature Debye-Waller, atomic factor, structural factor, cations and anions, Debye-Waller factor, temperature factor, a separate definition of atomic vibrations.

Вступ

Роздільне визначення середньоквадратичних динамічних зміщень атомів (іонів) кристалічних речовин має як теоретичне, так і практичне значення. Насамперед це стосується дослідження рухливості іонів при різних температурах речовини, а також при температурах фазових переходів як з першого, так і другого родів.

Якщо амплітуди теплових коливань іонів досягають 10% від періоду кристалічної ґратки, то її структура змінюється аж до зміни агрегатного стану речовини.

Найбільш доступним способом роздільного визначення амплітуд теплових коливань іонів кристалічної речовини є рентгенографічний метод. Суть цього методу зводиться до визначення фактора Дебая-Валлера e^{-2M} , точніше показника ступеня $2M$, зв'язаного з середньоквадратичним динамічним зміщенням іонів від положення рівноваги.

Матеріал і методи дослідження

Для кристалічних кубічних структур з односортними атомами за співвідношенням

$$2M = \frac{16}{3} \pi^2 \overline{u_0^2} \frac{\sin^2 \vartheta}{\lambda^2} \quad (1)$$

можна визначити середньоквадратичне динамічне зміщення $\overline{u_0^2}$ атома від положення рівноваги. В (1) ϑ – брегівський кут відбивання, λ – довжина хвилі рентгенівських променів. Аналізуючи експериментальні і розрахункові значення інтенсивності брегівських рефлексів (hkl), можна отримати лінійне рівняння типу

$$y = b + \frac{16}{3} \overline{u_0^2} \cdot x, \quad (2)$$

де y – відомі значення, b – постійна величина, $x = \frac{\sin^2 \vartheta}{\lambda^2}$. За нахилом прямої (2) визначають $\overline{u_0^2}$.

Знаючи характеристичну температуру Дебая Θ , можна також визначити $2M$ за співвідношенням:

$$2M = \frac{12h^2T}{mk\theta^2} \left[\phi\left(\frac{\theta}{T}\right) + \frac{1}{4} \frac{\theta}{T} \right] \frac{\sin^2 \vartheta}{\lambda^2}, \quad (3)$$

де h – постійна Планка, k – постійна Больцмана, T – термодинамічна температура, $\phi\left(\frac{\theta}{T}\right)$ – функція Дебая, m – маса атома.

Для визначення Θ потрібно зняти дифрактограму при двох температурах, наприклад, при кімнатній та температурі рідкого азоту, побудувати графік залежності відносних інтенсивностей ліній (hkl) від $\frac{\sin^2 \vartheta}{\lambda^2}$ і гранично знайти Θ (Kushta, 1959; Mirkin, 1961).

Однак цей метод передбачає незалежність Θ від температури. По-перше, Θ залежить від термодинамічної температури T . По-друге, через Θ можна визначити $2M$, але потрібно для кристалів з різносортними атомами ввести поняття маси гіпотетичного атома.

Щоб врахувати залежність $\Theta(T)$, необхідно провести високотемпературне рентгенографування. Проаналізувавши інтенсивності однієї дифракційної лінії (hkl) при різних температурах за методом Чіпмана (Chipman, 1960), можна визначити Θ при різних температурах. За залежністю $\Theta(T)$ визначають $\overline{u_0^2}$ односортних атомів кристалічної ґратки. У випадку кристалів з різносортними атомами за цим методом можна лише оцінити $\overline{u_0^2}$ для різних атомів. Найчастіше так і роблять.

З метою усунення вищезазначених недоліків користуються методом роздільного визначення $\overline{u_0^2}$. Цей метод достатньо описаний в періодичній науковій

літературі (Dzhejms, 1950; Bublik et al., 1968), ми ж конкретизуємо і доповнюємо його.

З метою роздільного визначення амплітуди теплових коливань іонів кристалічної ґратки типу NaCl необхідно зняти дифрактограму досліджуваної речовини при даній температурі, визначити індекси дифракційних ліній (hkl), визначити кути відбивання ϑ рентгенівських променів, прецизійно знайти параметр кристалічної ґратки a .

Очевидно, між вимірними $I_{\text{вим}}$ і обчисленими $I_{\text{обч}}$ відносними інтенсивностями дифракційних максимумів (hkl) існує певна відповідність.

Згідно з літературними даними (Mirkin, 1961) обчислена інтенсивність інтерференційних (дифракційних) максимумів дифрактограми $I_{\text{обч}}$ дорівнює:

$$I_{\text{обч}} = k(PLG) \cdot A(\vartheta) \cdot p F_0^2 e^{-2M} = k(PLG) \cdot A(\vartheta) \cdot p c(f_{0k} \pm f_{0a})^2 \cdot e^{-2M}, \quad (4)$$

де k – коефіцієнт пропорційності (для всіх максимумів однаковий); PLG – добуток кутових множників: P – поляризаційний множник, L – множник Лоренца, G – геометричний множник умов рентгенографування; p – множник повторюваності; $A(\vartheta)$ – абсорбційний множник; F_0 – структурна амплітуда, рівна для кристалів типу NaCl $F_0^2 = c(f_{0k} \pm f_{0a})^2$; f_{0k}, f_{0a} – атомні множники (фактори) катіона і аніона відповідно; c – множник, який пов'язаний зі структурою кристалу; e^{-2M} – температурний множник (фактор Дебая-Валлера).

При дослідженні на іонізаційній установці абсорбційний множник не залежить від кута відбивання від плоских зразків, тому його можна не враховувати при відносних вимірюваннях інтенсивності (Mirkin, 1961).

Позначимо через z добуток

$$PLG \cdot A \cdot p \cdot c = z. \quad (5)$$

Тому вираз (4) можна записати як

$$\sqrt{I_{\text{обч}}} = \sqrt{k} \cdot \sqrt{z} \cdot (f_{0k} e^{-M_k} \pm f_{0a} e^{-M_a}). \quad (6)$$

Очевидно, можна записати для всіх парних індексів (hkl):

$$Y^n = \sqrt{\frac{I_{\text{вим}}}{z}} = \sqrt{k} \cdot (f_{0k} e^{-M_k} + f_{0a} e^{-M_a}). \quad (7)$$

І для всіх ліній з непарними індексами (hkl) відповідно:

$$Y^n = \sqrt{\frac{I_{\text{вим}}}{z}} = \sqrt{k} \cdot (f_{0k} e^{-M_k} - f_{0a} e^{-M_a}). \quad (8)$$

Побудувавши графіки залежності Y^n і Y^H від $\frac{\sin \vartheta}{\lambda}$ та знявши з них при $\frac{\sin \vartheta_1}{\lambda}$ і при $\frac{\sin \vartheta_2}{\lambda}$ значення відповідно Y^n та Y^H , одержимо:

$$Y_1^n = \sqrt{k} \cdot (f_{0k1} e^{-M_{1k}} + f_{0a1} e^{-M_{1a}}); \quad (9)$$

$$Y_1^H = \sqrt{k} \cdot (f_{0k1} e^{-M_{1k}} - f_{0a1} e^{-M_{1a}}). \quad (10)$$

Відповідно:

$$Y_2^n = \sqrt{k} \cdot (f_{0k2} e^{-M_{2k}} + f_{0a2} e^{-M_{2a}}); \quad (11)$$

$$Y_2^H = \sqrt{k} \cdot (f_{0k2} e^{-M_{2k}} - f_{0a2} e^{-M_{2a}}). \quad (12)$$

Склавши суму і різницю Y^n і Y^H окремо при $\frac{\sin \vartheta_1}{\lambda}$ і при $\frac{\sin \vartheta_2}{\lambda}$, одержимо:

$$Y_1^n + Y_1^H = 2\sqrt{k} \cdot f_{0k1} e^{-M_{1k}}; \quad (13)$$

$$Y_1^n - Y_1^H = 2\sqrt{k} \cdot f_{0a1} e^{-M_{1a}}; \quad (14)$$

$$Y_2^n + Y_2^H = 2\sqrt{k} \cdot f_{0k2} e^{-M_{2k}}; \quad (15)$$

$$Y_2^n - Y_2^H = 2\sqrt{k} \cdot f_{0a2} e^{-M_{2a}}. \quad (16)$$

На основі (13) – (16) можна розглянути математичні вирази:

$$\ln \frac{Y_1^n + Y_1^H}{Y_2^n + Y_2^H} = \ln \frac{2\sqrt{k} f_{0k1} e^{-M_{1k}}}{2\sqrt{k} f_{0k2} e^{-M_{2k}}} = \ln \frac{f_{0k1}}{f_{0k2}} + (M_{2k} - M_{1k}); \quad (17)$$

$$\ln \frac{Y_1^n - Y_1^H}{Y_2^n - Y_2^H} = \ln \frac{2\sqrt{k} f_{0a1} e^{-M_{1a}}}{2\sqrt{k} f_{0a2} e^{-M_{2a}}} = \ln \frac{f_{0a1}}{f_{0a2}} + (M_{2a} - M_{1a}). \quad (18)$$

Оскільки у факторі Дебая-Валлера

$$M = \frac{8}{3} \pi^2 u \frac{\sin^2 \vartheta}{\lambda^2}, \quad (19)$$

то

$$\ln \frac{Y_1^n + Y_1^H}{Y_2^n + Y_2^H} = \ln \frac{f_{0k1}}{f_{0k2}} + \frac{8}{3} \pi^2 u \left(\frac{\sin^2 \vartheta_2}{\lambda^2} - \frac{\sin^2 \vartheta_1}{\lambda^2} \right), \quad (20)$$

звідси для катіона

$$\frac{1}{u} = \frac{\ln \frac{Y_1^n + Y_1^H}{Y_2^n + Y_2^H} \cdot \frac{f_{0k2}}{f_{0k1}}}{\frac{8}{3} \pi^2 \left(\frac{\sin^2 \vartheta_2}{\lambda^2} - \frac{\sin^2 \vartheta_1}{\lambda^2} \right)}, \quad (21)$$

відповідно для аніона середньоквадратичне динамічне зміщення від положення рівноваги буде:

$$\frac{1}{u} = \frac{\ln \frac{Y_1^n - Y_1^H}{Y_2^n - Y_2^H} \cdot \frac{f_{0a2}}{f_{0a1}}}{\frac{8}{3} \pi^2 \left(\frac{\sin^2 \vartheta_2}{\lambda^2} - \frac{\sin^2 \vartheta_1}{\lambda^2} \right)}. \quad (22)$$

З урахуванням поправок на теплове дифузне розсіювання (ТДР) рентгенівських променів у кристалах фактор Дебая-Валлера набуває вигляду $e^{-2M(1-\beta)}$, де поправка для гранецентрованих кубічних (ГЦК) ґраток (Chirpan, Paskin, 1959)

$$\beta = \frac{\left(\frac{\pi}{3} \right)^{1/3} \cdot a \cdot \Delta \vartheta \cdot \cos \vartheta}{2\lambda}, \quad (23)$$

де $\Delta \vartheta$ – кутова ширина основи дифракційних максимумів дифрактограми.

Тому у формулах (21) і (22) знаменники набувають вигляду:

$$\frac{8}{3} \pi^2 \left\{ [1 - \beta(\vartheta_2)] \frac{\sin^2 \vartheta_2}{\lambda^2} - [1 - \beta(\vartheta_1)] \frac{\sin^2 \vartheta_1}{\lambda^2} \right\}. \quad (24)$$

Результати та їх обговорення

Вищезазначений метод роздільного визначення амплітуд коливань іонів ми застосували для NaCl. Для цього були запозичені експериментальні дані параметра кристалічної ґратки та інтенсивності дифракційних ліній (hkl) при кімнатній температурі з довідника (Mirkin, 1961). Розрахунки дали значення

$$\sqrt{u_{\text{ок}}^2} = 0,25 \text{ \AA}, \quad \sqrt{u_{\text{оа}}^2} = 0,29 \text{ \AA}, \quad \text{тобто } \sqrt{u_{\text{ок}}^2} < \sqrt{u_{\text{оа}}^2}.$$

В ранніх роботах Джеймса і Валлера (Waller and James, 1927) показано, що при кімнатній температурі $\sqrt{u_{\text{Cl}}^2} = 0,22 \text{ \AA}$, а $\sqrt{u_{\text{Na}}^2} = 0,24 \text{ \AA}$, тобто $\sqrt{u_{\text{Cl}}^2} > \sqrt{u_{\text{Na}}^2}$.

В пізніших роботах Рейтнера та Райченка (Rejtner, 1958) показано, що при температурах, нижчих ніж 200 К $\sqrt{u_{\text{Cl}}^2} > \sqrt{u_{\text{Na}}^2}$, при $T > 200 \text{ K}$ $\sqrt{u_{\text{Cl}}^2} < \sqrt{u_{\text{Na}}^2}$. У нашому випадку при кімнатній температурі теж спостерігається така ж тенденція. Це свідчить про те, що температуру інверсії потрібно шукати при низьких температурах.

За здоровим глуздом слід було очікувати для іонних кристалів при масах іонів $m_k < m_a$, що амплітуди теплових коливань повинні бути у співвідношеннях $\sqrt{u_{\text{Cl}}^2} > \sqrt{u_{\text{Na}}^2}$. За методом високотемпературного рентгенографування за умови введення понять маси гіпотетичного атома так і отримується, тобто $0,26 \text{ \AA} > 0,21 \text{ \AA}$, бо формально приймається однакова Θ для обох іонів.

Висновки

За методом роздільного визначення амплітуд коливань іонів абсолютні похибки складають порядку $\Delta\sqrt{u_{\text{Cl}}^2} = \pm 0,04 \text{ \AA}$. Ці похибки можна зменшити при ретельному визначенні інтенсивностей дифракційних максимумів (hkl), при наявності згладжуючих аналітичних залежностей від $\frac{\sin \theta}{\lambda}$ відповідних величин, при виборі $\frac{\sin \theta_1}{\lambda}$ і $\frac{\sin \theta_2}{\lambda}$ з великим інтервалом, при врахуванні поправок на ТДР. У розрахунках ми не враховували поправки на ТДР, оскільки нам були

невідомі кутові ширини в основі фотометричних максимумів (hkl).

Вище описаний метод роздільного визначення амплітуд теплових коливань іонів має право на існування.

Бібліографічні посилання

- Kushta, H.P. (1959). Renthnohrafiaa metaliv. Lviv: Vydvo Lvivskoho un-tu (in Ukrainian).
- Mirkin, L.I. (1961). Spravochnik po rengenostрукturnomu analizu polikristallov. Moskva: Fizmatgiz (in Russian).
- Chipman, D.R. (1960). Temperature Dependence of the Debye Temperatures of Aluminum, Lead, and Beta Brass by an X-Ray Method. J.of Appl.Phys. 31(11), 408–421.
- Dzhejms, R.V. (1950). Opticheskie principy diffrakcii rengenovskih lucej. Moskva: Izdatel'stvo inostranoj literatury (in Russian).
- Bublik, V.T., Gorelik, S.S., Kapustina, M.D. (1968). Srednekvadratichnye smeshhenija dlja podreshetok soedinenij CdTe, HgTe i tverdogo rastvora (20% mol CdTe). Izvestija vuzov. Fizika. 11, 142–145 (in Russian).
- Chipman, D.A., Paskin, A. (1959). X-Ray investigation solid solutions. J.Appl.Phys. 30(12), 1952–1959.
- Waller, J., James, R.W. (1927). On the temperature factor of X-Ray reflexion for sodium and chlorine in the rock-salt crystal. Proc.Roy.Soc. A 117(62), 214–223.
- Rejtner, A.M. (1958). Kristallografija. 3(6), 740–742 in Russian).

Received 17.08.2017

Received in revised form 7.09.2017

Accepted 11.09.2017