

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 наноконпозиционные материалы [1-7]. Под первыми понимают материалы, у которых размер частиц, кристаллов или фаз не превышает 100 нм [1-7]. Наноконпозиционные материалы (наноконпозиты) 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, Θ_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 $x=r/L_0$, α -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 ψ -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, Δ -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 ψ -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 ψ_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 $(\Delta\varphi) = (\Delta 2\vartheta)$, φ - угол дифракции, ϑ - 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 λ - 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

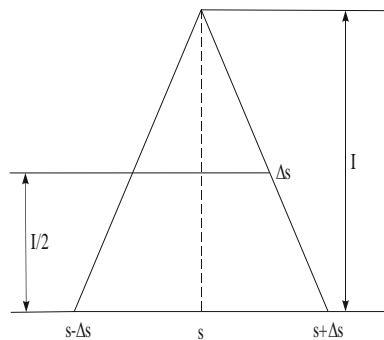
$$A(s) = F(s) \sum_{n=0}^{N-1} \exp 2\pi i s n d, \quad (19)$$

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, Δs – 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 δ_{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

$$F(hkl) = F_0(hkl) \exp(-M), \quad (33)$$

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)

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

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.

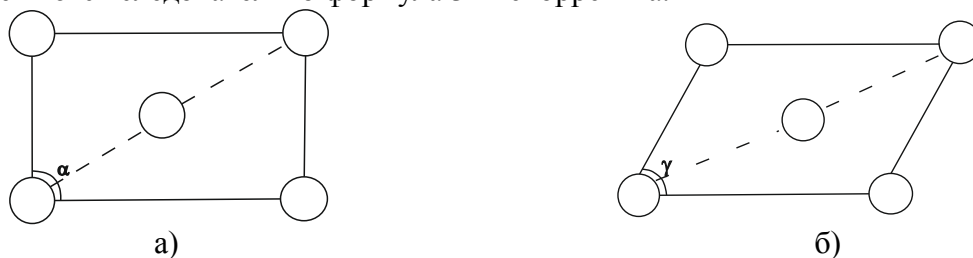


Рис. 2. Неизменность кристаллографических координат (000) (? ? 0): а-исходная ячейка, б-полученная нагреванием ячейка

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:

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

и для отдельного атома

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

где интегрирование проводится по объему атома.

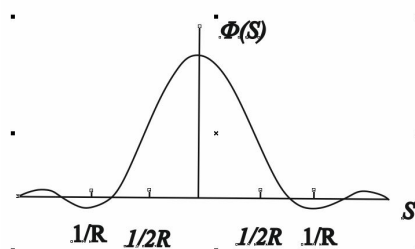


Рис. 3. Трансформанта сферической функции

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

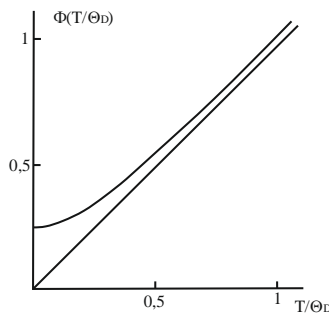


Рис. 4. График функции $\Phi(T/\theta)$

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 энергетическом «эквиваленту».

Проведенные исследования по изучению взаимосвязи между геометрическими характеристиками частиц и физическими параметрами нанокпозиционных материалов показали наличие таких связей. Так установлена зависимость между параметрами фактора формы и зарядовой активности нанокпозиционных 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 плоскости и значениями. Для исследований применялись частицы получаемые диспергированием по различных технологиям. Согласно данных 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

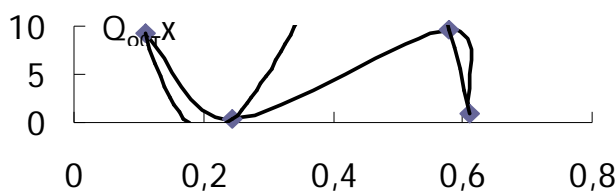


Рис. 5. Зависимость остаточного заряда механоактивированных частиц от фактора формы низкоразмерных частиц (таблица)

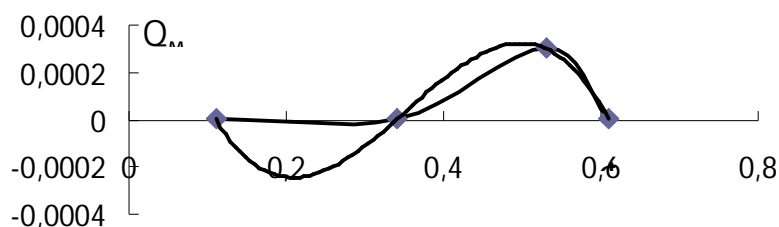


Рис. 6. Зависимость заряда, оставшегося в момент достижения максимума тока от фактора формы низкоразмерных частиц (таблица)

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 нанокomпозиционных 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 НАНОКОМПОЗИТІВ ВІД РОЗМІРУ НАНОМОДИФІКАТОРІВ

Було встановлено, зменшення розмірів кристаліта і нагрівання об'єкта призводить до однакового ефекту, а саме до збільшення полуширини рефлексу низькорозмірних кристалітов 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.*