

## ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОЕ ПРИМЕНЕНИЕ УРАВНЕНИЯ ДЕБАЯ И УРАВНЕНИЯ ШЕРРЕРА ДЛЯ ВЫЧИСЛЕНИЯ РАЗМЕРОВ ЧАСТИЦ

Бокуняева А.О.<sup>1,2</sup>, Ворох А.С.<sup>1</sup>

<sup>1)</sup> Институт химии твёрдого тела Уральского отделения Российской академии наук,  
Екатеринбург, Россия

<sup>2)</sup> Уральский федеральный университет, Екатеринбург, Россия

E-mail: [a.o.bokuniaeva@urfu.ru](mailto:a.o.bokuniaeva@urfu.ru)

## COMBINATION OF THE DEBYE EQUATION AND THE SCHERRER FORMULA FOR EVALUATION OF PARTICLE SIZE

Bokuniaeva A.<sup>1,2</sup>, Vorokh A.<sup>1</sup>

<sup>1)</sup> Institute of Solid State Chemistry of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences,  
Ekaterinburg, Russia

<sup>2)</sup> Ural Federal University, Ekaterinburg, Russia

The particle size parameter affects properties of substance. The Scherrer formula and the Debye equation are used for particle size evaluation. The current paper describes the approach based on the joint use of these relations allowing to avoid limitations typical for them, taken individually.

Размер частиц сильно влияет на физические и химические свойства веществ. Уравнение Шеррера часто используется для определения размеров частиц порошковых образцов, если есть данные дифракции [1]. Результат, получаемый при использовании уравнения Шеррера, является лишь приблизительным, поскольку эта формула учитывает расширение пиков исключительно за счёт размерного эффекта. Использование уравнения Шеррера обеспечивает более точный результат в случае, когда одному пику соответствует единственный дифракционный максимум. В случае одной фазы, одному пику часто соответствует отражение от нескольких семейств атомных плоскостей, а в случае образца, состоящих из нескольких фаз, одному пику часто соответствуют рефлексы сразу нескольких фаз, что затрудняет расчёт.

Уравнение Дебая может также использоваться для вычисления размера частиц [2]. Это уравнение позволяет вычислить теоретические дифракционные пики по параметрам решетки, координатам атомов и размерам частиц всех фаз, входящих в состав образца. Если экспериментальные и теоретические дифракционные пики совпадают, то размеры частиц, используемые при расчёте теоретических пиков, соответствуют действительным значениям. Результат, получаемый с помощью уравнения Дебая, более точный, поскольку он учитывает рассеяние в любой точке, а не только в брэгговских углах, как в случае уравнения Шеррера. Ещё одно преимущество уравнения Дебая заключается в том, что его можно применять к аморфным образцам. Использование данного уравнения для определения размеров частиц занимает много времени.

В данной работе описывается метод определения размера частиц основан на совместном использовании формулы Шеррера и уравнения Дебая. Теоретические пики были получены с помощью программного пакета DIANNA, а разложение экспериментальных пиков осуществлено с помощью алгоритма, написанного на Python.

Представленный метод состоит из трёх этапов, представленных на Рис. 1. Первый этап заключается в применении формулы Шеррера к отдельному пику и получения начальных величин размеров частиц. Следующий шаг заключается в уточнении полученных значений с помощью уравнения Дебая. Далее необходимо вычислить R-фактор. Этот параметр показывает разницу между теоретическими и экспериментальными дифракционными данными. Если R-фактор не обеспечивает требуемой точности, то необходимо вернуться к предыдущему шагу и уточнить значения размеров частиц ещё раз. Этот шаг необходимо повторять до тех пор, пока точность не достигнет приемлемого значения. Результат, полученный с помощью предложенного метода, более точен, чем тот, который может быть вычислен только из уравнения Шеррера, и вычисления занимают меньше времени чем в случае использования только уравнения Дебая. Настоящий метод может применяться к любым данным дифракции, полученным с порошковых образцов.



Рис. 1. Схематическое описание предложенного метода вычисления размера частиц.

Работа поддержана Российским научным фондом, проект №17-79-20165.

1. Scherrer, P. Bestimmung der Grosse und der inneren Struktur von Kolloidteilchen mittels Rontgenstrahlen (Gottingen: Nachrichten Gesellschaft Wissenschaft Gottingen), 98–100 (1918).
2. Debye, P. Ann. Phys. B, 46, 809-823 (1915).