

PACS numbers: 61.05.cp, 61.46.Hk, 61.66.Fn, 81.07.Bc, 81.10.Jt, 82.80.Fk

Дослідження структури нанокристалів сульфідів Кадмію

А. В. Лисиця¹, В. О. Мислінчук¹, М. В. Мороз², Б. Д. Нечипорук¹,
Н. С. Павлова¹, Б. П. Рудик², Б. А. Татарин³

¹Рівненський державний гуманітарний університет,
вул. Пластова, 31,
33000 Рівне, Україна

²Національний університет водного господарства і природокористування,
вул. Соборна, 11,
33000 Рівне, Україна

³Волинський національний університет ім. Лесі Українки,
проспект Волі, 13,
43025 Луцьк, Україна

Досліджено нанокристали сульфідів Кадмію, які були одержані електролітичним методом з використанням кадмійових електродів і водного розчину тіосульфату Натрію у якості електроліту. Проведено рентгеноструктурні дослідження; було визначено склад одержаних зразків, встановлено параметри кристалічної ґратниці, розраховано розміри нанокристалів за допомогою формули Дебая–Шеррера, методом Вільямсона–Голла та розмірно-деформаційним методом. Встановлено, що одержані нанокристали сульфідів Кадмію містять у собі дві фази — сфалерит і вюртцит; також визначено об'ємний вміст цих двох фаз.

In this work, cadmium-sulphide nanocrystals are studied, which are obtained by the electrolytic method using cadmium electrodes and an aqueous solution of sodium thiosulphate as an electrolyte. X-ray structural studies are carried out, and the composition of the obtained samples is determined. The parameters of the crystal lattice are established, and the sizes of the nanocrystals are calculated using the Debye–Scherrer formula, the Williamson–Hall method, and the size-deformation method. As revealed, the obtained cadmium sulphide nanocrystals contain two phases: sphalerite and wurtzite; the volume content of these two phases is also determined.

Ключові слова: нанокристали, сульфід Кадмію, електролітичний метод одержання нанокристалів, рентгеноструктурна аналіза, параметер кристалічної ґратниці, розміри наночастинок, формула Дебая–Шеррера,

метод Вільямсона–Голла, розмірно-деформаційний метод.

Key words: nanocrystals, cadmium sulphide, electrolytic method for fabrication of nanocrystals, x-ray diffraction analysis, crystal-lattice parameter, nanoparticle sizes, Debye–Scherrer formula, Williamson–Hall method, size-deformation method.

(Отримано 13 лютого 2026 р.)

1. ВСТУП

Напівпровідникові наночастинки — це важливий клас матеріалів, які набули широкого спектру технологічного використання завдяки своїм оригінальним властивостям. Фізичні властивості наночастинок займають проміжне положення між властивостями монокристалів та окремих молекул. Завдяки своїм квантовим властивостям наноматеріали широко використовують у виробництві сучасних мікросхем, фотовольтаїки, різноманітних датчиків, каталізаторів і керамік, у нелінійній оптиці та медицині [1–3].

Сульфід Кадмію (CdS) належить до прямозонних напівпровідників із шириною забороненої зони у 2,42 еВ (за кімнатної температури) [4]. CdS кристалізується та перебуває за кімнатної температури у стабільній гексагональній модифікації — вюртциту. За останні роки дослідники звернули увагу на дослідження його нестабільної фази — сфалериту, яку одержують як нанокристали або у вигляді тонких плівок [5, 6].

CdS має провідність *n*-типу, високий показник заломлення та показує високий коефіцієнт вбирання. Вже достатньо давно CdS використовують як основний матеріал у фотоелементах та інших фотопровідних пристроях, підсилювачах світла, підсилювачах зображення, люмінофорах та електролюмінесцентних пристроях, детекторах радіації, тонкоплівкових транзисторах і діодах, п'єзоелектричних ультразвукових перетворювачах і підсилювачах, п'єзоелектричних акустичних резонаторах і лазерах з електронно-променевим накачуванням [7, 8].

Метою даного дослідження є встановлення модифікації нанокристалів сульфиду Кадмію, одержаних електролітичним методом, та визначення їхніх розмірів.

2. МАТЕРІАЛИ І МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ

Для синтезу нанокристалів CdS був використаний скляний електролізер із електродами, виготовленими із кадмію марки «ЧДА». У якості електроліту використовувався розчин тіосульфату Натрію (кристалогідрат $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$) у дистильованій воді. Елект-

ролізер живився від стабілізованого джерела постійного струму із можливістю зміни вихідної напруги в межах 0–14 В. Будову установки для електролітичної синтези наночастинок і методику синтезу детально описано в роботах [6, 9]. Внаслідок анодного розчинення кадмійові електроди служили джерелом йонів Cd^{2+} , а електроліт — джерелом йонів S^{2-} . Синтезу наночастинок CdS проводили за температури у 98°C впродовж 3 годин; густина струму витримувалася рівною $1,7 \cdot 10^{-2} \text{ А/см}^2$.

Рентгеноструктурну аналізу (РСА) одержаних зразків нанокристалів і тонких плівок сульфідів Кадмію проводили за кімнатної температури із використанням рентгенівського дифрактометра ДРОН-4. Джерелом рентгенівського випромінювання слугувала рентгенівська трубка з мідною анодою. Оскільки для наночастинок дублет $\text{CuK}_{\alpha 1}$ і $\text{CuK}_{\alpha 2}$ на експериментальних дифрактограмах не розділяється, для подальших розрахунків бралася усереднена довжина хвилі рентгенівського випромінювання $\lambda_{\text{CuK}\alpha}$, яка складає 0,1541841 нм. Детально розрахунки описано у [10].

Параметри зйомки дифрактограм: напруга на рентгенівській трубці — 41 кВ, струм — 21 мА, крок сканування — $0,05^\circ$, час експозиції — 5 с.

3. ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНІ РЕЗУЛЬТАТИ ТА ЇХ ОБГОВОРЕННЯ

Дифрактограму одержаних електролітичним методом зразків сульфідів Кадмію показано на рис. 1. На дифрактограмі присутні три широкі інтенсивні рефлексії, що свідчить про малі розміри нанокристалів, і декілька рефлексів малої інтенсивності. Сульфід Кадмію може існувати в двох модифікаціях: кубічній і гексагональній, причому за кімнатної температури стабільною вважається саме гексагональна сингонія [5]. Згідно з аналізою дифрактограми встановлено, що було одержано нанокристали сульфідів Кадмію саме у кубічній сингонії. Міллерові індекси трьох інтенсивних рефлексів складають (111), (220), (311). Більшість дослідників у роботах [6, 10, 11] аналогічно індексують дифрактограми сфалериту CdS.

Для детальної аналізи дифрактограми кожний рефлекс був описаний Гауссовою та Лорентцевою функціями, у результаті чого було одержано числові значення таких параметрів рефлексу, як кутове положення 2θ , півширина β й інтегральна інтенсивність I . Також було проведено розділення найбільш інтенсивного рефлексу на два, що дало можливість одержати параметри рефлексів (111) і (200). Цю інформацію було використано для обчислення розмірів досліджуваних нанокристалів. Усі інші рефлексії експериментальної дифрактограми, які мали малу інтенсивність, ми не описували Гауссовою та Лорентцевою функціями і не ви-

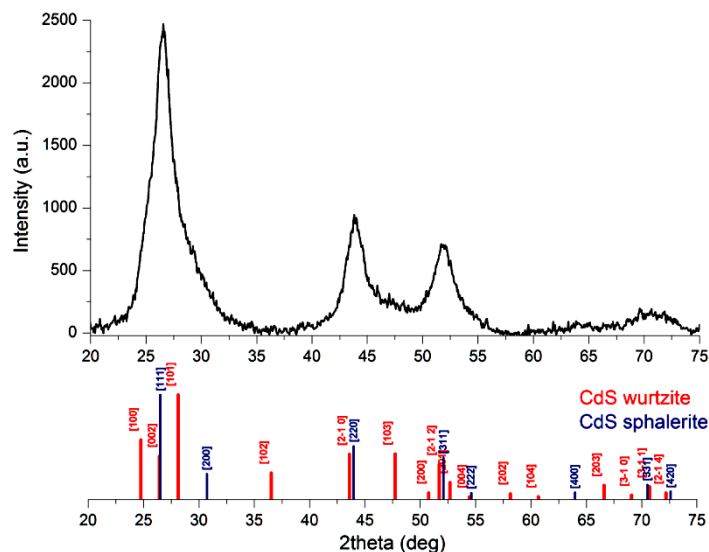


Рис. 1. Дифрактограма нанокристалічного зразка CdS (зверху), рентгеноструктурні стандарти для гексагональної та кубічної фази CdS (внизу).¹

користували в розрахунках.

Параметри елементарної комірки є фундаментальними величинами: для ідентифікації кристалічних речовин, визначення довжин хемічних зв'язків, дослідження фазових переходів твердих розчинів, дефектів кристалів саме ці параметри є визначальними. На точність визначення кристалографічних параметрів зразка мають вплив декілька чинників, зокрема такі: вибирання в речовині зразка, заломлення Рентгенових променів, розбіжність первинного пучка, поляризація, дисперсія, Лорентців фактор, температура тощо [12]. Саме тому, для визначення кристалографічних параметрів стопів найліпше використовувати монокристали. У випадку нанокристалічних зразків задача ускладнюється значною півшириною та малою інтенсивністю рефлексів. Крім того, навіть в області великих кутів дифракції не спостерігається розділення дублету $\text{Cu}K_{\alpha 1}$ – $\text{Cu}K_{\alpha 2}$. Через наведені вище причини, для оцінки параметрів елементарних комірок нами був використаний метод екстраполяції, оскільки майже всі систематичні похибки рентгенівських мірянй прямують до нуля, якщо кут дифракції $\theta = 90^\circ$ [12]. Нанокристали зразків CdS, дифрактограми яких показано на рис. 1, кристалізуються в структуру сфалериту; отже, використавши формулу Вульфа–Брегга та квадратичну форму для кубічної сингонії [13], можна розрахувати значення параметра елементарної комірки:

$$\frac{1}{d^2} = \frac{h^2 + k^2 + l^2}{a^2},$$

де a — параметер кристалічної ґратниці, h, k, l — Міллерові індекси кристалографічних площин.

В якості екстраполяційної функції ми використали функцію, запропоновану Нельсоном і Райлі [12]:

$$f(\theta) = 0,5 \left(\frac{\cos^2 \theta}{\sin \theta} + \frac{\cos^2 \theta}{\theta} \right).$$

На рисунку 2 показано залежність параметра елементарної комірки нанокристалів CdS, визначеного за різними рефlekсами, від значення екстраполяційної функції. Видно відхилення експериментальних точок від лінійної залежності; тому екстраполяційну пряму знаходили методом найменших квадратів. Одержані значення параметра елементарної комірки з розрахунків становлять $a = 0,5774$ нм, що узгоджується з літературними даними для монокристалічного сульфідy Кадмію ($a = 0,5825$ нм [14]).

Знаючи кутове положення θ , півширину рефлексів β , можна визначити розміри наночастинок, використовуючи різноманітні методи: метод Дебая–Шеррера, модифікований метод Дебая–Шеррера, метод Вільямсона–Голла, розмірно-деформаційний метод тощо [15–18]. Метод Дебая–Шеррера передбачає, що зростання півширини рентгенівських рефлексів зумовлене лише «розмірним ефектом». Методи Вільямсона–Голла та розмірно-деформаційний пояснюють збільшення півширини одночасним внеском як «розмірного ефекту», так і дією механічних напружень у досліджуваних зразках.

Метод Дебая–Шеррера ґрунтується на використанні формули

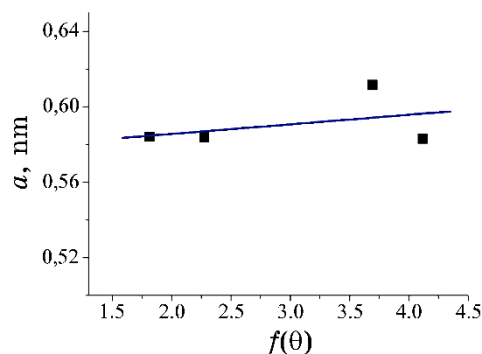


Рис. 2. Графічна екстраполяція для функції f визначення параметра кристалічної ґратниці нанокристалів сульфідy Кадмію.²

$$D = \frac{0,89\lambda}{\beta \cos \theta},$$

де λ — довжина хвилі рентгенівського випромінення, θ — кут дифракції, β — фізична півширина рефлексу [15]. Фізичне значення півширини обчислено за формулою $\beta = (\beta_1^2 - \beta_2^2)^{1/2}$, де β_1 — експериментальне значення півширини рентгенівського рефлексу, β_2 — інструментальне значення півширини рентгенівського рефлексу. Інструментальне значення півширини рентгенівських рефлексів визначалося на основі аналізу рентгенівських дифрактограм еталонних порошків кремнію й Al_2O_3 . Ці дифрактограми було одержано за кімнатної температури за ідентичних інструментальних умов.

В методі Вільямсона–Голла [16] півширина рефлексу записується як сума двох складових:

$$\beta = \frac{0,89\lambda}{D \cos \theta} + 4\varepsilon \operatorname{tg} \theta,$$

де λ — довжина хвилі рентгенівського випромінення, ε — відносне видовження. У виразі перший доданок показує, який внесок у півширину вносить розмірний ефект, а другий — зумовлений внеском механічних напружень. Перепишемо останню залежність, вважаючи, що механічні напруження є ізотропними:

$$\beta \cos \theta = \frac{0,89\lambda}{D} + 4\varepsilon \sin \theta.$$

Якщо побудувати графік цієї залежності у системі координат $4\varepsilon \sin \theta - \beta \cos \theta$ (рис. 3), одержуємо пряму лінію, з параметрів якої можна знайти розмір нанокристалів D і відносне видовження ε .

За Гуковим законом за пружних деформацій механічне напру-

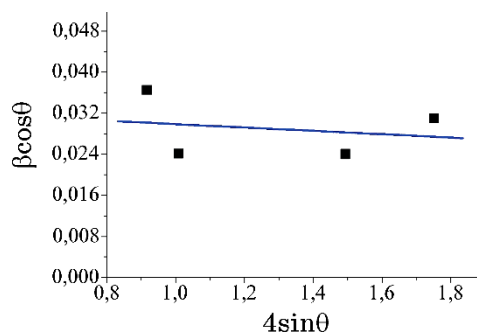


Рис. 3. Використання методу Вільямсона–Голла (рефлекси було описано Гауссовою функцією).³

ження дорівнює $\sigma = E\varepsilon$, де E — модуль Юнга. Визначивши відносне видовження із Гукового закону, одержуємо залежність

$$\beta \cos \theta = \frac{0,89\lambda}{D} + \frac{4\sigma \sin \theta}{E}.$$

Побудувавши залежність у системі координат $4E^{-1}\sin\theta - \beta\cos\theta$, одержуємо пряму лінію, з якої можна знайти розмір нанокристалів D і механічне напруження σ .

Для монокристалічних тіл модуль Юнга буде залежати від напрямку всередині монокристалу, тобто від значень Міллерових індексів $(h\ k\ l)$ і типу кристалічної системи. Для сульфідів Кадмію, який належить до кубічної сингонії, ця залежність описується формулою [19]

$$E^{-1} = s_{11} - (2s_{11} - 2s_{12} - s_{44}) \frac{h^2 k^2 + k^2 l^2 + l^2 h^2}{h^2 + k^2 + l^2},$$

де s_{11} , s_{12} , s_{44} — коефіцієнти пружної податливості. Використавши відомі коефіцієнти пружної податливості для CdS [14], а також Міллерові індекси рефлексів, котрі спостерігаються на експериментальних дифрактограмах, ми розрахували значення модуля Юнга для наших рефлексів.

У методі Вільямсона–Голла фізичне значення півширини розглядають як суму внесків «розмірного ефекту» та впливу механічних напружень. *Припустимо*, що квадрат фізичного значення півширини дорівнює сумі квадратів цих внесків. Тоді

$$\beta^2 = \left(\frac{0,89\lambda}{D \cos \theta} \right)^2 + (4\varepsilon \operatorname{tg} \theta)^2.$$

Тоді, помноживши на $\cos^2 \theta$, одержуємо

$$\beta^2 \cos^2 \theta = \left(\frac{0,89\lambda}{D} \right)^2 + 16\varepsilon^2 \sin^2 \theta.$$

Поділивши на $\sin^2 \theta$, одержуємо

$$\frac{\beta^2 \cos^2 \theta}{\sin^2 \theta} = \left(\frac{0,89\lambda}{D} \right)^2 \left(\frac{1}{\sin^2 \theta} \right) + 16\varepsilon^2.$$

Врахувавши, що $\sin \theta = \lambda/(2d)$, одержуємо

$$4d^2 \beta^2 \frac{\cos^2 \theta}{\lambda^2} = \left(\frac{0,89\lambda}{D} \right)^2 \left(\frac{4d^2}{\lambda^2} \right) + 16\varepsilon^2,$$

а поділивши на 4, одержуємо

$$\left(\frac{d\beta \cos \theta}{\lambda}\right)^2 = \left(\frac{0,89}{D}\right)^2 d^2 + 4\varepsilon^2.$$

Міжплощинна віддаль у випадку кубічної сингонії визначається з квадратичної форми

$$\frac{1}{d^2} = \frac{h^2 + k^2 + l^2}{a^2}.$$

Якщо у системі координат $d^2 - (d\beta \cos \theta / \lambda)^2$ побудувати графік останньої залежності, то можна визначити розмір D і відносне видовження ε . Подібний метод визначення розмірів і механічних напружень використовували автори робіт [17, 18]. На рисунку 4 наведено приклад використання графічного розмірно-деформаційного методу для зразка сульфідів Кадмію. Результати визначення розмірів наночастинок і механічних напружень у них вищеописаними методами наведено у табл. 1.

З таблиці 1 видно, що різні методи визначення розмірів і механічних напружень приводять до різних, але близьких результатів. З використанням Лорентцової функції для опису рефлексів

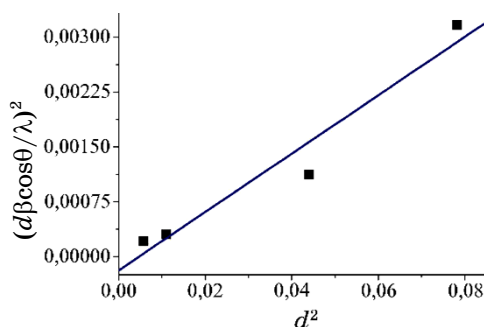


Рис. 4. Використання графічного розмірно-деформаційного методу (рефлекси було описано Лорентцовою функцією).⁴

ТАБЛИЦЯ 1. Результати розрахунків розмірів і механічних напружень.⁵

Функція для опису рефлексів	Гауссова функція			Лорентцова функція		
Метод:	$D, \text{ нм} \cdot 10^{-3} \sigma \cdot 10^8, \text{ Па}$			$D, \text{ нм} \cdot 10^{-3} \sigma \cdot 10^8, \text{ Па}$		
Дебая–Шеррера	3,9	—	—	4,0	—	—
Вільямсона–Голла	4,1	–3,3	—	4,5	–2,7	—
Вільямсона–Голла	3,8	—	–2,56	4,3	—	–1,72
розмірно-деформаційний	3,8	9,9	—	4,4	–6,9	—

дифрактограм було одержано результати, що відрізнялися від результатів з використанням Гауссової функції: одержано більші розміри нанокристалів, а механічні напруження — навпаки, менші.

Автори робіт [20, 21] одержали наночастинки сульфідів Кадмію електрохімічним методом. Вони використовували кадмійові електроди й електроліт у вигляді розчину хлориду Натрію та тіомочевини. Густина струму складала $0,19 \text{ А/см}^2$, що на порядок менше, ніж у наших експериментах. Зовнішній вигляд дифрактограм їхніх зразків вказував на кристалізацію CdS в структуру вюртциту. Більш детальні дослідження показали, що у досліджуваних зразках були присутні дві фази: вюртциту та сфалериту. Із зміною концентрації хлориду Натрію вміст вюртциту складав 73–90%, а сфалериту — 10–27% [21].

З рисунку 1 видно, що: на рефлекс сфалериту (111) накладаються рефлекси вюртциту (100), (002), (101); на рефлекс сфалериту (220) — рефлекс вюртциту (210); на рефлекс сфалериту (311) — рефлекси вюртциту (200), (112), (201). Тому для визначення об'ємного вмісту обох модифікацій CdS можна використати рефлекси сфалериту (200) і вюртциту (103); останній займає кутове положення між рефлексами сфалериту (220) і (311).

Інтегральна інтенсивність рефлексів (для плоских зразків) визначається за формулою [22]

$$I = I_0 \frac{e^4 \lambda^3 l}{32 \pi m^2 c^4 R} \frac{N^2}{2\mu} PLGp|F|^2 A,$$

де I_0 — інтенсивність падного рентгенівського випромінювання, e і m — заряд і маса електрона, λ — довжина рентгенівського випромінювання, l — довжина шляху відбитого проміння в лічильнику, c — швидкість світла, R — радіус гоніометра, N — число елементарних комірок в одиниці об'єму, μ — лінійний коефіцієнт вбирання, PLG — кутовий множник, p — фактор повторюваності, $|F|$ — модуль структурної амплітуди, A — абсорбційний множник.

У випадку суміші речовин, інтегральна інтенсивність пропорційна об'ємному вмісту компонентів. У дифрактометрії фокусування Рентгенових променів, відбитих від плоскої пластинки, робить вбирання незалежним від кута θ через те, що воно послаблює інтенсивність усіх дифрагованих жмутів у однакове число разів і тому не впливає на відносні інтенсивності, а отже, абсорбційний множник і лінійний коефіцієнт вбирання можна не враховувати [23].

У нашому випадку, система складається з двох фаз, а тому відношення інтегральних інтенсивностей рефлексів сфалериту та вюртциту дорівнює

$$\frac{I_1}{I_2} = \frac{c_1 PLG_1 p_1 |F_1|^2 N_1^2}{c_2 PLG_2 p_2 |F_2|^2 N_2^2},$$

де нижній індекс 1 відповідає сфалериту, а індекс 2 — вюртциту.

Крім того, очевидно, що сума об'ємних концентрацій компонентів — $c_1 + c_2 = 1$. Отже, розв'язавши систему двох рівнянь, ми знайдемо невідомі об'ємні концентрації c_1 і c_2 сфалериту та вюртциту в досліджуваних зразках.

Для розрахунку об'ємних концентрацій сфалериту та вюртциту було обрано рефлекси із відповідними значеннями кутів дифракції 2θ : (200) і (103). Кутовий множник розраховували за наступною формулою:

$$PLG = \frac{1 + \cos^2 2\theta}{\sin^2 \theta \cos \theta}.$$

Для сфалериту та вюртциту характерні кубічна та гексагональна сингонії відповідно з точковими групами $T_d^2 - F\bar{4}3m$ і $C_{6v}^4 - P6_3mc$ відповідно [24]; тому фактор повторюваності для них дорівнює 6 і 12 відповідно [12, 13].

У загальному випадку, структурна амплітуда є комплексним числом, яке визначається за формулою [23]

$$F = \sum_n f_n \cos(2\pi(hx_n + ky_n + lz_n)) + j \sum_n f_n \sin(2\pi(hx_n + ky_n + lz_n)),$$

де x_n, y_n, z_n — координати атомів, виражені в долях тих ребер, яких обрано за осі координат, f_n — фактор атомового розсіювання кожного атома для значення $\sin \theta / \lambda$, яке відповідає Міллеровим індексам (h, k, l) , а $j = \sqrt{-1}$ — уявна одиниця.

Використавши відомі координати атомів [13], Міллерові індекси, кутові положення рефлексів і фактори атомового розсіювання кожного атома, ми розраховували структурні амплітуди для сфалериту та вюртциту. Детальний приклад такого розрахунку наведено в роботі [22]. Значення модулів структурних амплітуд для сфалериту та вюртциту наведено у табл. 2.

Число елементарних комірок в одиниці об'єму дорівнює $N \propto 1/V$, де V — об'єм елементарної комірки. Тому замість відношення чисел елементарних комірок можна використати відношення їхніх об'ємів: $N_1/N_2 = V_2/V_1$. Об'єми елементарних комірок кубічної та гексагональної систем визначаються за формулами [12]:

$V = a^3$, де a — параметер елементарної комірки кубічної сингонії;

$V = a^2 c \omega$, де a і c — параметри елементарної комірки гексагональної сингонії, а $\omega = \sqrt{3}/2$.

ТАБЛИЦЯ 2. Числові величини, необхідні для розрахунку вмісту сфалериту та вюртциту в досліджуваних зразках.⁶

	Сфалерит	Вюртцит
$(h\ k\ l)$	(2 0 0)	(1 0 3)
2θ	29,21°	43,89°
I , в.о.	639	1363
PLG	11,75	10,61
a , нм	0,5825	0,41367
c , нм		0,67161
p	12	6
V , нм ³	0,19765	0,09953
$ F ^2$	30032	7300
β , г/см ³	4,855	4,8208

В результаті розрахунків, ми одержали наступні результати: об'ємні відсотки сфалериту та вюртциту у досліджуваному зразку нанокристалів сульфідів Кадмію складають 85% і 15% вмісту відповідно. Схожими виявилися результати аналізу дифрактограми зразка з використанням безкоштовного ПЗ «PowderCell for Windows v.2.4» [25] — у 80% і 20% для сфалериту та вюртциту відповідно.

4. ВИСНОВКИ

Нанокристали сульфідів Кадмію, що одержані електролітичним методом, складаються з двох фаз — сфалериту та вюртциту.

Об'ємний вміст сфалериту (85%) в досліджуваних зразках істотно переважає вміст вюртциту (15%).

Різні методи визначення розмірів нанокристалів дають різні, але близькі значення.

Використання для опису рентгенівських рефлексів Лорентц-вої функції приводить до одержання більших розмірів нанокристалів, але менших механічних напружень у порівнянні з описом Гауссовою функцією.

ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. Rajeev R. Prabhu and M. Abdul Khadar, *Bull. Mater. Sci.*, **31**: 511 (2008); <https://doi.org/10.1007/s12034-008-0080-7>
2. Cristian T Matea, Teodora Mocan, Flaviu Tabaran, Teodora Pop, Ofelia Mosteanu, Cosmin Puia, Cornel Iancu, and Lucian Mocan, *Int. J. Nanomed.*, **2017**: 5421 (2017); <https://doi.org/10.2147/IJN.S138624>
3. P. K. Ghosh, R. Maity, and Chattopadhyay, *J. Nanosci. Nanotechnol.*, **5**,

- No. 2: 300 (2005); <https://doi.org/10.1166/jnn.2005.042>
4. Hui Zhang, Deren Yang, Xiangyang Ma, Yujie Ji, Shen Zhong Li, and Duanlin Que, *Mater. Chem. Phys.*, **93**, Iss. 1: 65 (2005); <https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2005.02.011>
5. V. Sivasubramanian, A. K. Arora, M. Premila, C. S. Sundar, V. S. Sastry, *Phys. E*, **31**, Iss. 1: 93 (2006); <https://doi.org/10.1016/j.physe.2005.10.001>
6. Н. Б. Данілевська, М. В. Мороз, Б. Д. Нечипорук, М. Ю. Новоселецький, В. О. Юхимчук, *Ж. нано-електрон. фіз.*, **8**, №2: 02041 (2016); [https://doi.org/10.21272/jnep.8\(2\).02041](https://doi.org/10.21272/jnep.8(2).02041)
7. H. Yildizay, *J. Optoelectron. Adv. Mater.*, **24**, Iss. 1–2: 64 (2022); <https://joam.inoe.ro/articles/layer-by-layer-production-of-cds-thin-films-by-chemical-bath-deposition/fulltext>
8. I. V. Vakaliuk, R. S. Yavorskyi, L. I. Nykyruy, B. P. Naidych, and Ya. S. Yavorskyi, *Phys. Chem. Solid State*, **23**, Iss. 4: 669 (2022); <https://doi.org/10.15330/pcss.23.4.669-677>
9. N. B. Danilevska, M. V. Moroz, B. D. Nechiporuk, S. H. Haievskaya, M. Yu. Novoseletskyi, M. V. Prokhorenko, N. P. Yarema, V. O. Yukhymchuk, Fiseha Tesfaye, and O. V. Reshetnyak, *J. Nano-Electron. Phys.*, **12**, Iss. 4: 04035 (2020); [https://doi.org/10.21272/jnep.12\(4\).04035](https://doi.org/10.21272/jnep.12(4).04035)
10. Zhandos Shalabayev, Matej Baláž, Natalya Khan, Yelmira Nurlan, Adrian Augustyniak, Nina Daneu, Batukhan Tatykayev, Erika Dutková, Gairat Burashev, Mariano Casas-Luna, Rybert Džunda, Radovan Bureš, Ladislav Celko, Aleksandr Ilin, and Mukhambetkali Burkitbayev, *Nanomaterials*, **12**: 1250 (2022); <https://doi.org/10.3390/nano12081250>
11. Shuang-Ding Wu, Zhengang Zhu, Zhongping Zhang, and Ling Zhang, *Materials Science and Engineering B*, **90**, Iss. 1–2: 206 (2002); [https://doi.org/10.1016/S0921-5107\(01\)00923-0](https://doi.org/10.1016/S0921-5107(01)00923-0)
12. С. І. Мудрий, Ю. О. Кулик, А. С. Якимович, *Рентгеноструктурний аналіз у матеріалознавстві* (Львів: ЛНУ: 2017).
13. З. З. Зиман, *Основи структурної кристалографії: Навчальний посібник для студентів вищих навчальних закладів* (Харків: ХНУ: 2008).
14. Sadao Adachi, *Handbook on Physical Properties of Semiconductors. II–VI Compound Semiconductor* (New York: Springer: 2004), vol. 3; <https://doi.org/10.1007/1-4020-7821-8>
15. V. D. Mote, Y. Purushotham, and B. N. Dole, *J. Theor. Appl. Phys.*, **6**, No. 1: 1 (2012); <https://doi.org/10.1186/2251-7235-6-6>
16. P. Bindu and Sabu Thomas, *J. Theor. Appl. Phys.*, **8**, Iss. 4: 123 (2014); <https://doi.org/10.1007/s40094-014-0141-9>
17. С. І. Драпак, С. В. Гаврилюк, Ю. Б. Халавка, В. Д. Фотій, П. М. Фочук, О. І. Федів, *Укр. фіз. журн.*, **67**, №9: 671 (2022); <https://doi.org/10.15407/ujpe67.9.671>
18. Md. Sahadat Hossain, Monika Mahmud, Mashrafi Bin Mobarak, Sazia Sultana, Md. Aftab Ali Shaikh, and Samina Ahmed, *Chemické Zvesti*, **76**: 7245 (2022); <https://doi.org/10.1007/s11696-022-02377-9>
19. М. Д. Раранський, В. Н. Балазюк, М. І. Мельник, М. М. Гунько, Я. С. Верещан, *ФХТТ*, **15**, №4: 721 (2014).
20. О. М. Янчук, О. В. Марчук, І. А. Мороз, О. А. Vyshnevskyi, A. M. El Nagggar, A. A. Albassam, I. V. Kityk, and P. Czaja, *J. Mater. Sci.*:

- Mater. Electron.*, **30**: 17741 (2019); <https://doi.org/10.1007/s10854-019-02124-z>
21. O. V. Smitiukh, O. M. Yanchuk, O. V. Marchuk, Ju. O. Khmaruk, M. M. Yatsyshyn, Oleksii A. Vyshnevskiy, and I. I. Velymchanitsa, *J. Nano-Electron. Phys.*, **17**, No. 1: 01015 (2025); https://jnep.sumdu.edu.ua/download/numbers/2025/1/articles/jnep_17_1_01015.pdf
 22. С. Ю. Капітула, Б. Д. Нечипорук, Н. Б. Данілевська, Б. А. Татарин, *Ж. нано-електрон. фіз.*, **7**, №3: 03050-1 (2015); https://jnep.sumdu.edu.ua/download/numbers/2015/3/articles/jnep_2015_V7_03050.pdf
 23. H. Lipson and H. Steeple, *Interpretation of X-Ray Powder Diffraction Patterns* (London: Macmillan, St.: 1970).
 24. В. О. Хмелевський, В. О. Дяків, *Рентгенометричний визначник мінералів: навчальний посібник для студентів та аспірантів геологічного факультету* (Львів: ЛНУ: 2014); <https://geology.lnu.edu.ua/wp-content/uploads/2016/06/%D0%A0%D0%B5%D0%BD%D1%82%D0%B3%D0%B5%D0%BD%D0%BE%D0%BC%D0%B5%D1%82%D1%80%D0%B8%D1%87%D0%BD%D0%B8%D0%B9-%D0%B2%D0%B8%D0%B7%D0%BD%D0%B0%D1%87%D0%BD%D0%B8%D0%BA-%D0%BC%D1%96%D0%BD%D0%B5%D1%80%D0%B0%D0%BB%D1%96%D0%B2.pdf>
 25. <https://powdercell-for-windows.software.informer.com/2.4/>

REFERENCES

1. Rajeev R. Prabhu and M. Abdul Khadar, *Bull. Mater. Sci.*, **31**: 511 (2008); <https://doi.org/10.1007/s12034-008-0080-7>
2. Cristian T Matea, Teodora Mocan, Flaviu Tabaran, Teodora Pop, Ofelia Mosteanu, Cosmin Puia, Cornel Iancu, and Lucian Mocan, *Int. J. Nanomed.*, **2017**: 5421 (2017); <https://doi.org/10.2147/IJN.S138624>
3. P. K. Ghosh, R. Maity, and Chattopadhyay, *J. Nanosci. Nanotechnol.*, **5**, No. 2: 300 (2005); <https://doi.org/10.1166/jnn.2005.042>
4. Hui Zhang, Deren Yang, Xiangyang Ma, Yujie Ji, Shen Zhong Li, and Duanlin Que, *Mater. Chem. Phys.*, **93**, Iss. 1: 65 (2005); <https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2005.02.011>
5. V. Sivasubramanian, A. K. Arora, M. Premila, C. S. Sundar, V. S. Sastry, *Phys. E*, **31**, Iss. 1: 93 (2006); <https://doi.org/10.1016/j.physe.2005.10.001>
6. N. B. Danilevska, M. V. Moroz, B. D. Nechiporuk, M. Yu. Novoseletskyi, and V. O. Yukhymchuk, *Zh. Nano-Elektron. Fiz.*, **8**, No. 2: 02041 (2016); [https://doi.org/10.21272/jnep.8\(2\).02041](https://doi.org/10.21272/jnep.8(2).02041)
7. H. Yildizay, *J. Optoelectron. Adv. Mater.*, **24**, Iss. 1–2: 64 (2022); <https://joam.inoe.ro/articles/layer-by-layer-production-of-cds-thin-films-by-chemical-bath-deposition/fulltext>
8. I. V. Vakaliuk, R. S. Yavorskyi, L. I. Nykyruy, B. P. Naidych, and Ya. S. Yavorskyi, *Phys. Chem. Solid State*, **23**, Iss. 4: 669 (2022);

- <https://doi.org/10.15330/pcss.23.4.669-677>
9. N. B. Danilevska, M. V. Moroz, B. D. Nechyporuk, S. H. Haievska, M. Yu. Novoseletskyi, M. V. Prokhorenko, N. P. Yarema, V. O. Yukhymchuk, Fiseha Tesfaye, and O. V. Reshetnyak, *J. Nano- Electron. Phys.*, **12**, Iss. 4: 04035 (2020); [https://doi.org/10.21272/jnep.12\(4\).04035](https://doi.org/10.21272/jnep.12(4).04035)
 10. Zhandos Shalabayev, Matej Baláž, Natalya Khan, Yelmira Nurlan, Adrian Augustyniak, Nina Daneu, Batukhan Tatykayev, Erika Dutková, Gairat Burashev, Mariano Casas-Luna, Rybert Džunda, Radovan Bureš, Ladislav Celko, Aleksandr Ilin, and Mukhambetkali Burkitbayev, *Nanomaterials*, **12** 1250 (2022); <https://doi.org/10.3390/nano12081250>
 11. Shuang-Ding Wu, Zhengang Zhu, Zhongping Zhang, and Ling Zhang, *Materials Science and Engineering B*, **90**, Iss. 1–2: 206 (2002); [https://doi.org/10.1016/S0921-5107\(01\)00923-0](https://doi.org/10.1016/S0921-5107(01)00923-0)
 12. S. I. Mudryi, Yu. O. Kulyk, A. S. Yakymovych, *Rentgenostrukturnyi Analiz u Materialoznavstvi* (Lviv: LNU: 2017).
 13. Z. Z. Zyman, *Osnovy Strukturnoi Krystalografii: Navchalnyi Posibnyk dlya Studentiv Vyshchykh Navchalnykh Zakladiv* (Kharkiv: KhNU: 2008).
 14. Sadao Adachi, *Handbook on Physical Properties of Semiconductors. II–VI Compound Semiconductor* (New York: Springer: 2004), vol. 3; <https://doi.org/10.1007/1-4020-7821-8>
 15. V. D. Mote, Y. Purushotham, and B. N. Dole, *J. Theor. Appl. Phys.*, **6**, No. 1: 1 (2012); <https://doi.org/10.1186/2251-7235-6-6>
 16. P. Bindu and Sabu Thomas, *J. Theor. Appl. Phys.*, **8**, Iss. 4: 123 (2014); <https://doi.org/10.1007/s40094-014-0141-9>
 17. S. I. Drapak, S. V. Havryliuk, Yu. B. Khalavka, V. D. Fotii, P. M. Fochuk, and O. I. Fediv, *Ukr. Fiz. Zhurn.*, **67**, No. 9: 671 (2022); <https://doi.org/10.15407/ujpe67.9.671>
 18. Md. Sahadat Hossain, Monika Mahmud, Mashrafi Bin Mobarak, Sazia Sultana, Md. Aftab Ali Shaikh, and Samina Ahmed, *Chemické Zvesti*, **76**: 7245 (2022); <https://doi.org/10.1007/s11696-022-02377-9>
 19. M. D. Raranskyi, V. N. Balaziuk, M. I. Melnyk, M. M. Hunko, and Ya. S. Verebchan, *FKhTT*, **15**, No. 4: 721 (2014).
 20. O. M. Yanchuk, O. V. Marchuk, I. A. Moroz, O. A. Vyshnevskyi, A. M. El Naggar, A. A. Albassam, I. V. Kityk, and P. Czaja, *J. Mater. Sci.: Mater. Electron.*, **30**: 17741 (2019); <https://doi.org/10.1007/s10854-019-02124-z>
 21. O. V. Smitiukh, O. M. Yanchuk, O. V. Marchuk, Ju. O. Khmaruk, M. M. Yatsyshyn, Oleksii A. Vyshnevskyi, and I. I. Velymchanitsa, *J. Nano-Electron. Phys.*, **17**, No. 1: 01015 (2025); https://jnep.sumdu.edu.ua/download/numbers/2025/1/articles/jnep_17_1_01015.pdf
 22. S. Yu. Kapitula, B. D. Nechyporuk, N. B. Danilevska, and B. A. Tataryn, *Zh. Nano- Elektron. Fiz.*, **7**, No. 3: 03050-1 (2015); https://jnep.sumdu.edu.ua/download/numbers/2015/3/articles/jnep_2015_V7_03050.pdf
 23. H. Lipson and H. Steeple, *Interpretation of X-Ray Powder Diffraction Patterns* (London: Macmillan, St.: 1970).
 24. V. O. Khmelevskyi and V. O. Diakiv, *Rentgenometrychnyi Vyznachnyk Min-*

erialiv: *Navchalnyi Posibnyk dlya Studentiv ta Aspirantiv Geologichnogo Fakultetu* (Lviv: LNU: 2014); [https://geology.lnu.edu.ua/wp-](https://geology.lnu.edu.ua/wp-content/uploads/2016/06/%D0%A0%D0%B5%D0%BD%D1%82%D0%B3%D0%B5%D0%BD%D0%BE%D0%BC%D0%B5%D1%82%D1%80%D0%B8%D1%87%D0%BD%D0%B8%D0%B9-%D0%B2%D0%B8%D0%B7%D0%BD%D0%B0%D1%87%D0%BD%D0%B8%D0%BA-%D0%BC%D1%96%D0%BD%D0%B5%D1%80%D0%B0%D0%BB%D1%96%D0%B2.pdf)

- con-
tent/uploads/2016/06/%D0%A0%D0%B5%D0%BD%D1%82%D0%B3%D0%B5%D0%BD%D0%BE%D0%BC%D0%B5%D1%82%D1%80%D0%B8%D1%87%D0%BD%D0%B8%D0%B9-%D0%B2%D0%B8%D0%B7%D0%BD%D0%B0%D1%87%D0%BD%D0%B8%D0%BA-%D0%BC%D1%96%D0%BD%D0%B5%D1%80%D0%B0%D0%BB%D1%96%D0%B2.pdf
25. <https://powdercell-for-windows.software.informer.com/2.4/>

¹*Rivne State University of Humanities,
31 Plastova Str.,
UA-33000 Rivne, Ukraine*

²*National University of Water and Environmental Engineering,
11, Soborna Str.,
UA-33000 Rivne, Ukraine*

³*Lesya Ukrainka Volyn National University,
13, Voli Ave.,
UA-43025 Lutsk, Ukraine*

¹ Fig. 1. Diffractogram of the nanocrystalline sample of CdS (top), x-ray structural standards for the hexagonal and cubic phases of CdS (bottom).

² Fig. 2. Graphical extrapolation for function f of determination of the crystal-lattice parameter of cadmium-sulphide nanocrystals.

³ Fig. 3. Using the Williamson–Hall method (reflexes were described by the Gaussian function).

⁴ Fig. 4. Using the graphical size-deformation method (reflexes were described by the Lorentz function).

⁵ TABLE 1. Results of calculations of sizes and mechanical stresses.

⁶ TABLE 2. Numerical values necessary for calculating the content of sphalerite and wurtzite in the studied samples.