



Výpočet difrakčního profilu vzorku s defekty

téma: difrakce a strukturní defekty krystalů, materiálový výzkum

experiment: nepovinný, případně rtg. difrakční měření

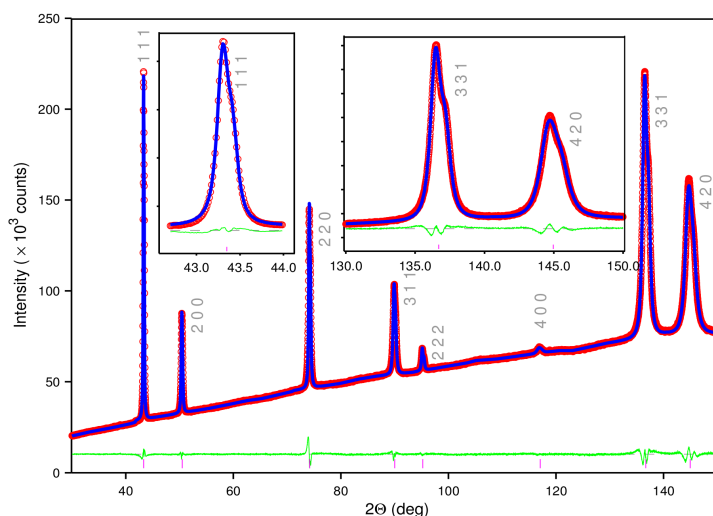
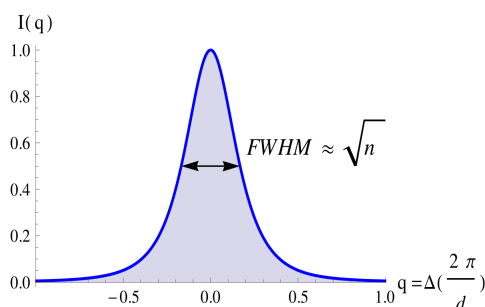
jádro práce: numerické (Monte-Carlo) simulace difrakčních píků od krystalů s defekty (v C/C++, Matlabu)

Defekty v krystalové mřížce kovových materiálů zásadně ovlivňují jejich mechanické vlastnosti, jako mez pevnosti, odolnost, pružnost, tažnost, tvárnost, i dlouhodobou stálost těchto vlastností. Velký zájem dnes patří vývoji materiálů s jemnozrnnou strukturou, které pak díky svým výjimečným vlastnostem nalézají uplatnění v automobilovém a leteckém průmyslu, nebo jako materiály pro implantáty v lékařství. Studium vzniku, projevu a vývoje defektů při deformaci materiálu je nakonec zajímavé i z teoretického pohledu.

Hustota defektů (např. dislokací) bývá ovšem v těchto materiálech tak vysoká, že je velmi složité takový stav nějak kvantitativně popsat. Je např. obtížné a velmi pracné přímo spočítat počet těchto defektů na jednotku plochy v obrázku z transmisního elektronového mikroskopu. Mimo jiné jenom samotné získání takového obrázku je experimentálně náročné. V takových případech je právě difrakce rentgenového záření vhodnou metodou k experimentálnímu studiu stavu materiálu. Naměření difrakčního záznamu je poměrně jednoduché. Netriviální je analýza dat. Difrakce je „nepřímá“ metoda. Hustota defektů se určuje ze šířky difrakčních „čar“. Konkrétně je šířka difrakčních linií úměrná odmocnině z hustoty defektů. To ale platí jen v nejjednodušším modelu náhodného rozložení defektů. Ty v reálných případech zaujímají spíše konfiguraci, kdy se deformační pole od jednotlivých defektů částečně vyruší. Taková konfigurace je pak spojena s menší elastickou energií uloženou v krystalu. V důsledku toho se vztah mezi šířkou čar a hustotou defektů komplikuje.

Předmětem práce bude uskutečnění numerických simulací tvaru a šířky difrakčních profilů od krystalu, který obsahuje defekty, konkrétně dislokace. Základem výpočtu je užití (a) hrubé síly metody Monte-Carlo na řešení celého problému, nebo (b) numerický výpočet několika netriviálních integrálů v jisté aproximaci problému.

Práce je vhodná jednak pro toho, kdo by na stejné, nebo podobné téma chtěl navázat v magisterském studiu. Nabytých zkušeností lze ale využít i při řešení jiných problémů – při studiu rtg. rozptylu na tenkých epitaxních vrstvách, nanostrukturách pro (opto)elektroniku – kvantových tečkách, drátech apod.



Kontakt: Zdeněk Matěj, matej@karlov.mff.cuni.cz
prof. Radomír Kužel, kuzel@karlov.mff.cuni.cz

budova: Ke Karlovu 5, [KFKL](#), v přízemí vlevo (poblíž výtahu, F042 – Rentgenová laboratoř)