

Nanoszemcsés anyagok elektrondiffrakciójának vizsgálata számítógépes szimulációval

- avagy hogy lesz a 24 évből 24 óra?



Kolonits Tamás

TDK hallgató

Témavezető: Czigány Zsolt



A programterv

- Motiváció – előzmények
- Elméleti áttekintés
- Polikristályok modellje
- Célkitűzés: algoritmus optimalizálás
- Az „áttörés”
- Szimulációs eredmények és értelmezésük
- Összefoglalás

Motiváció

- OTKA 81808 (Czigány Zsolt, Geszti Olga, Misják Fanni, témavezető: Radnóczy György)
- Cu-Mn vékonyrétegek elektronmikroszkópos vizsgálata – nanoszemcsés fázis
- Elektrondiffrakció szimulálása

Elektrondiffrakció szimulálása

- Debye-formula

2 nm alatt

- Vonalkiszélesedés
konvolúció

10 nm felett

Kimaradó tartomány: 2-10 nm

Elméleti áttekintés

- Atomcsoport elektronszórása:



- Klaszter-modell:
a polikristály klaszterek együttese, az
intenzitások összegződnek

$$I_{\text{klaszter}} = \frac{1}{N} \sum_{i,j} I_{ij}$$

Gyakorlati probléma

- A Debye-formula egyszerű, mégsem nagyszerű: $T \approx N^{\frac{2}{3}} \cdot p \cdot f \cdot t_c$
- Példa:
 - 8760 atomos klaszter ($d=13$ nm) esetén egy átlag PC-nek ($t_0=100$ μ s) egy K irányba kb. 2 óra
 - Polikristály: mindez $p=1000$ orientációban
 - Intenzitás-eloszlásfüggvény: $f=100$ pont
 - Összesen kb. 24 év

Megoldás

- A Debye-formula átalakítása:

~~$$K^2 = \sum_j f_j K_j^2 \cos^2 \alpha_{jk}$$~~

- Képzetes rész kiesik, koszinusz tétel:

~~$$C^2 + S^2 = \sum_j f_j K_j^2 \cos^2 \alpha_{jk}$$~~

- Bevezetve: $C = \sum_j f_j K_j \cos \alpha_{jk}$

$$S = \sum_j f_j K_j \sin \alpha_{jk}$$

~~$$K^2 = \sum_i f_i K_i^2 \cos^2 \alpha_{ik}$$~~

- Azaz: $K^2 = C^2 + S^2$

Megoldás

- A Debye-formula átalakítva: $\underline{K} = C^2 + S^2$

$$C = \sum_j f_j K_j \omega_j$$

$$S = \sum_j f_j K_j v_j$$

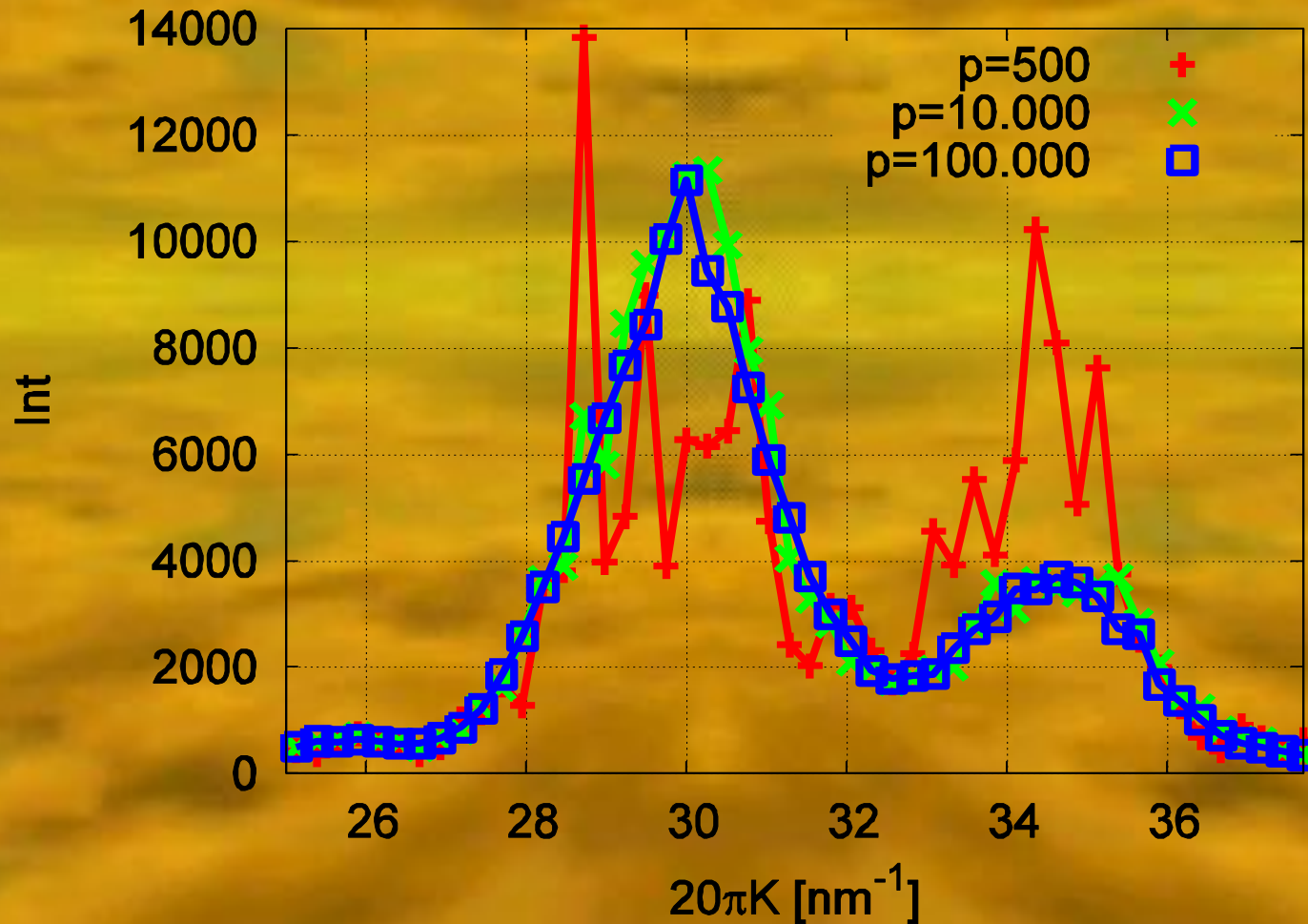
- Ez már $T = 2Npf \cdot t_0$ emészti csak az időnket

- Példa:

- 8760 atomos klaszter egy \underline{K} irányba 2 óra/4380 = 0.9 másodperc
- $p=1000$ orientációban, $f=100$ K értékre: 24 óra

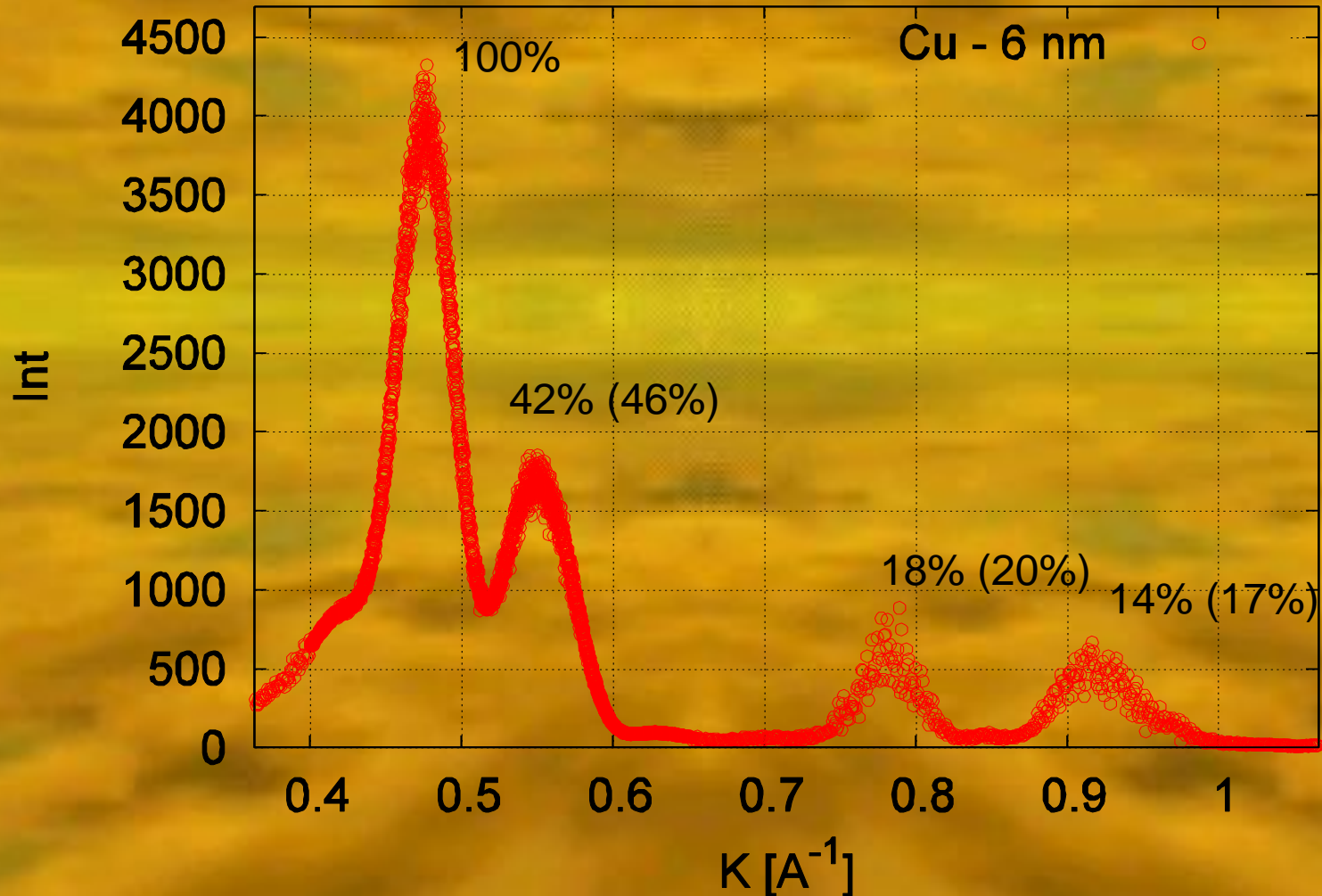
Hány orientáció kell?

- Az eloszlásfüggvény konvergál:



Hány orientáció kell?

- Jó helyre konvergál-e?



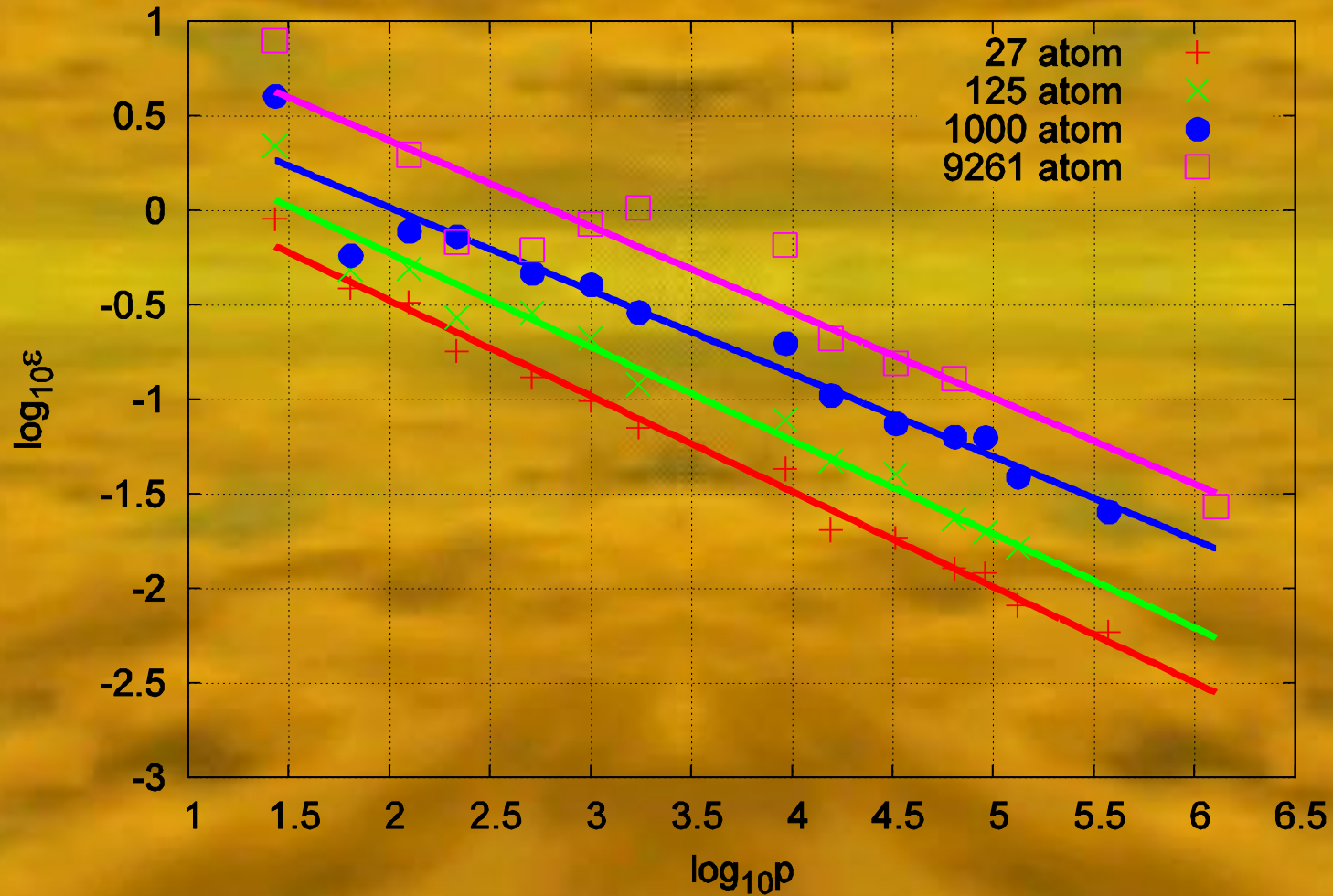
Konvergencia mérése

- „Pontosság” def.:

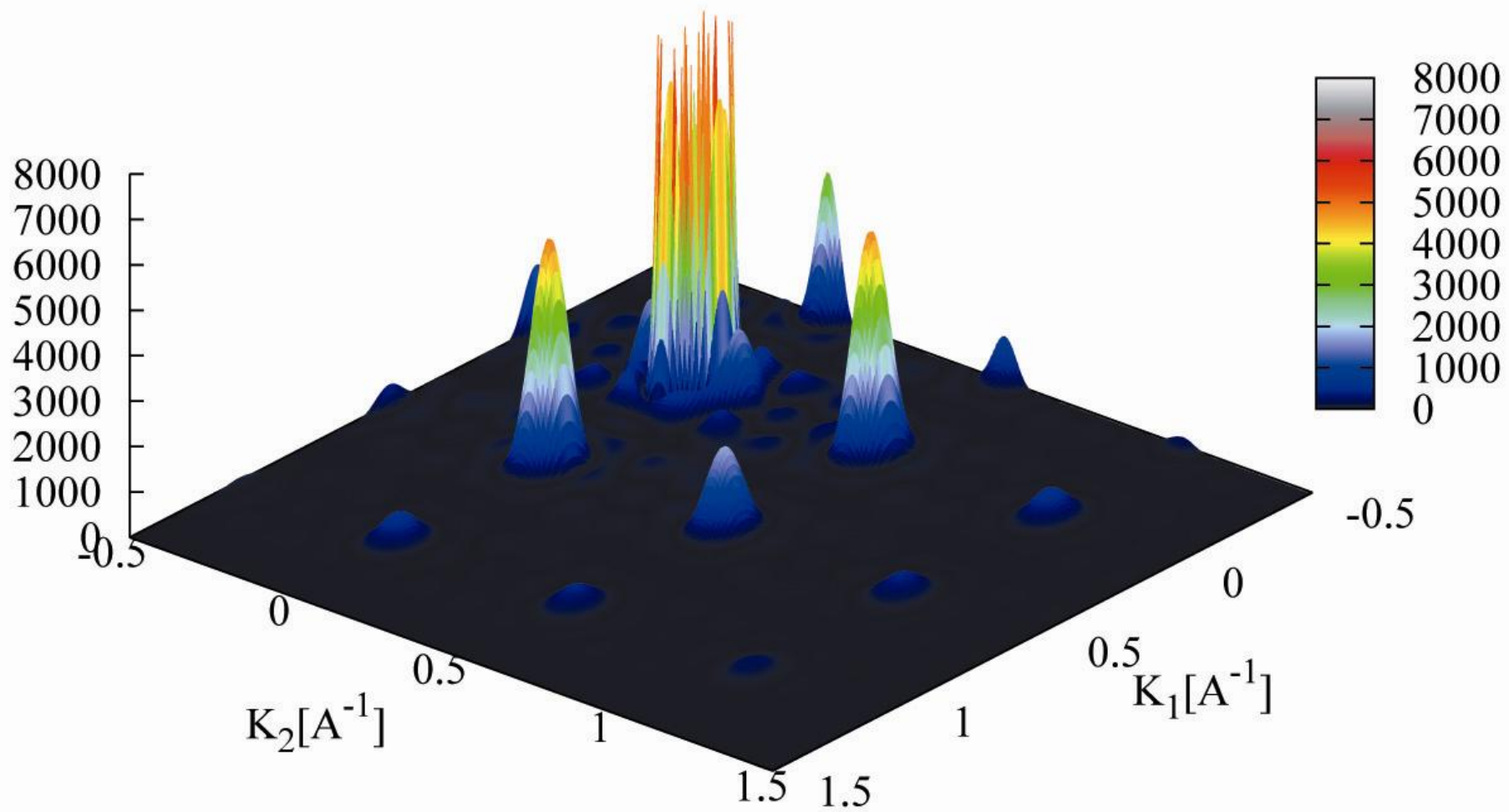
$$\varepsilon = \frac{\int_{K_1}^{K_2} |I_p(K) - I_{2p}(K)| dK}{\int_{K_1}^{K_2} I_{2p}(K) dK}$$

- Rögzített tartományon
- Adott N-re

Monoszemcsés konvergencia

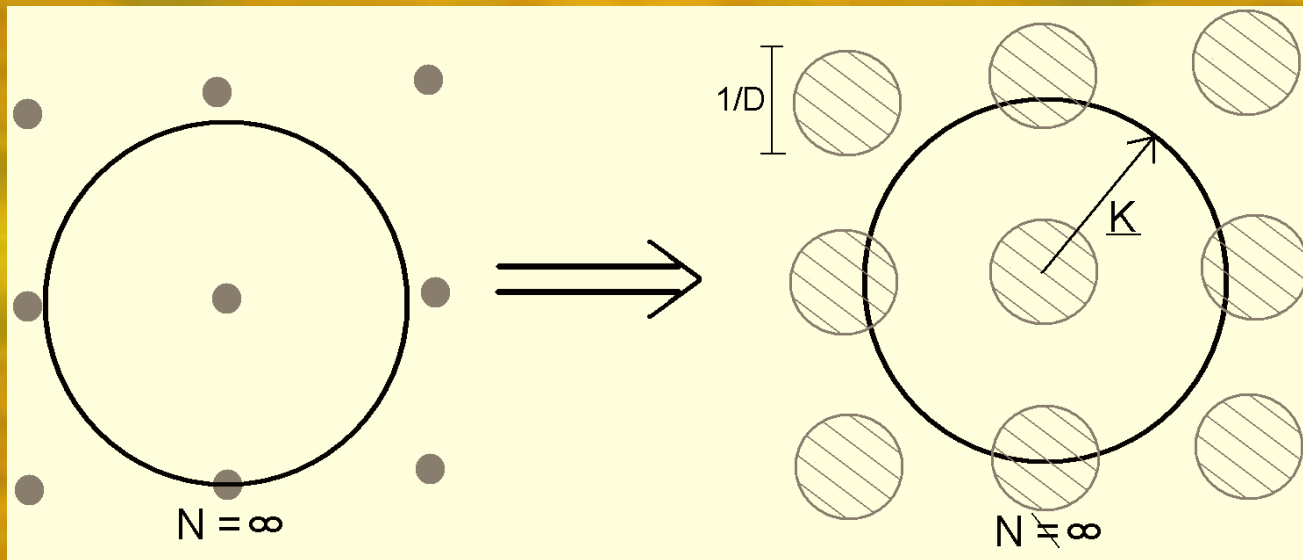


Cu - 60 atom



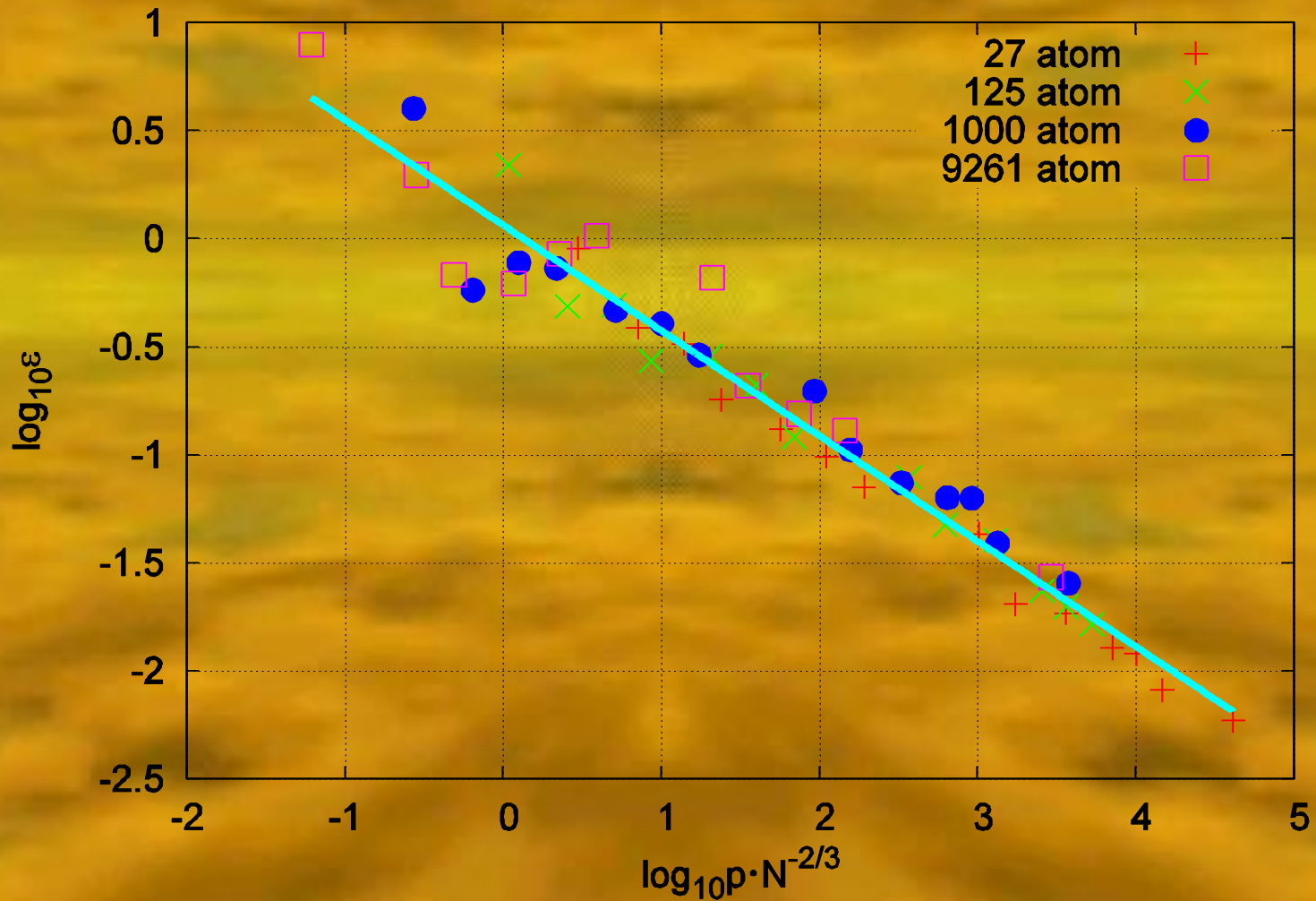
Miért $N^{2/3}$?

- Reciprok összefüggés: csúcskiszélesedés



- Adott K -ra: $R \propto \frac{1}{D^3} = \frac{1}{D^3} N^{2/3}$

Méret szerint „normálva”



(ϵ, N, p) összefüggések

- Ha a meredekség -0.5

- A pontosság: $\epsilon = 10^{-\frac{N^{1/3}}{\sqrt{p}}}$

- Megfordítva: $p = 10^{\frac{N^{2/3}}{\epsilon^2}}$

- A számítási idő: $T_{\epsilon, p} = 10^{\frac{N^{2/3}}{\epsilon^2}}$

Nem egyforma szemcsék

- Nem monoszemcsés polikristály esetén súlyozunk a szemcseméret eloszlás szerint
- Rész-szemcsék: hogy bánjunk velük?

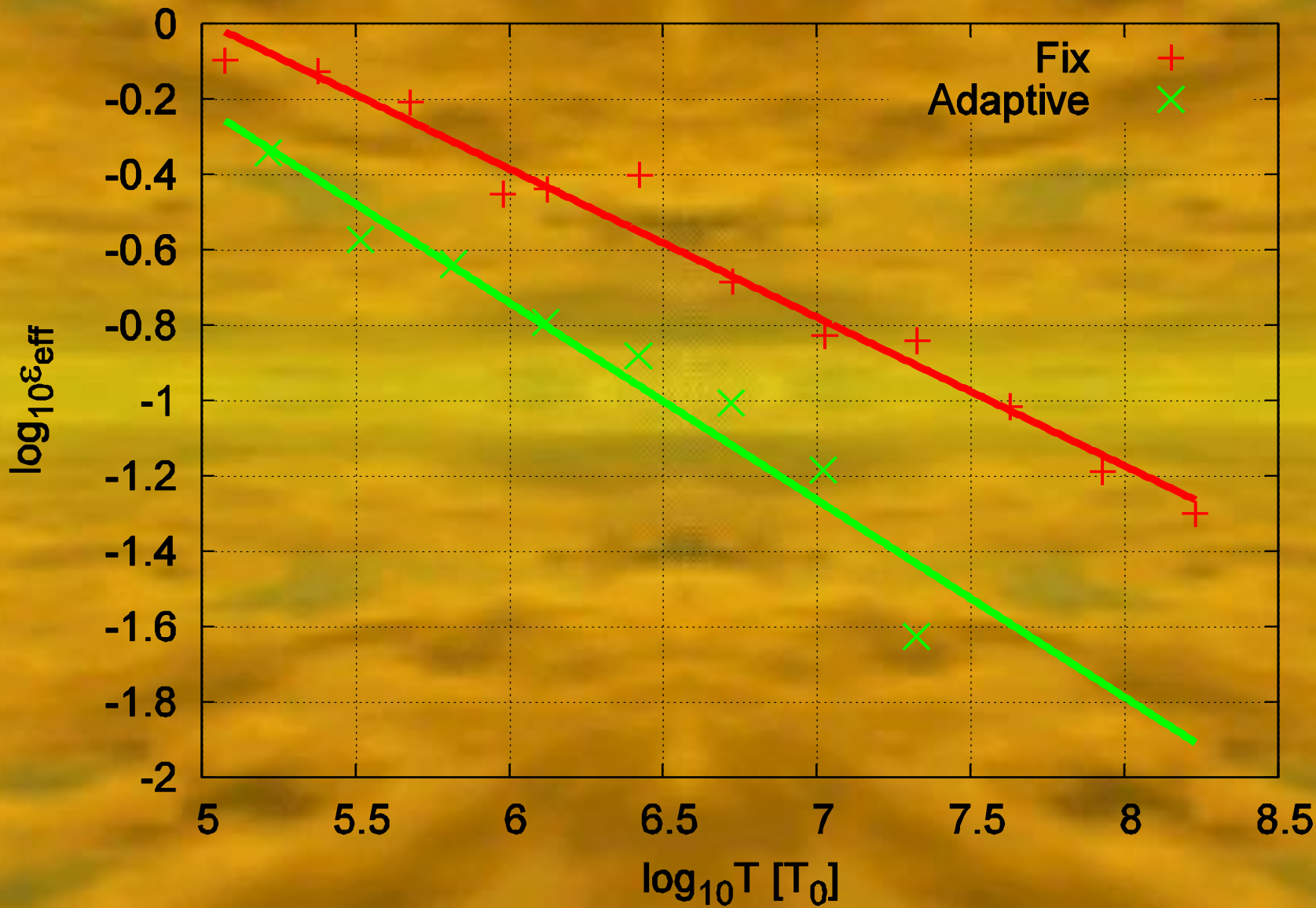
– Egyformán: fix-p

$$\varepsilon_0 = 1 + \frac{N^{\frac{1}{3}}}{\sqrt{p}}$$

– Korábbi eredmény: adaptív-p

$$p = 1 + \frac{N^{\frac{2}{3}}}{\varepsilon_0^2}$$

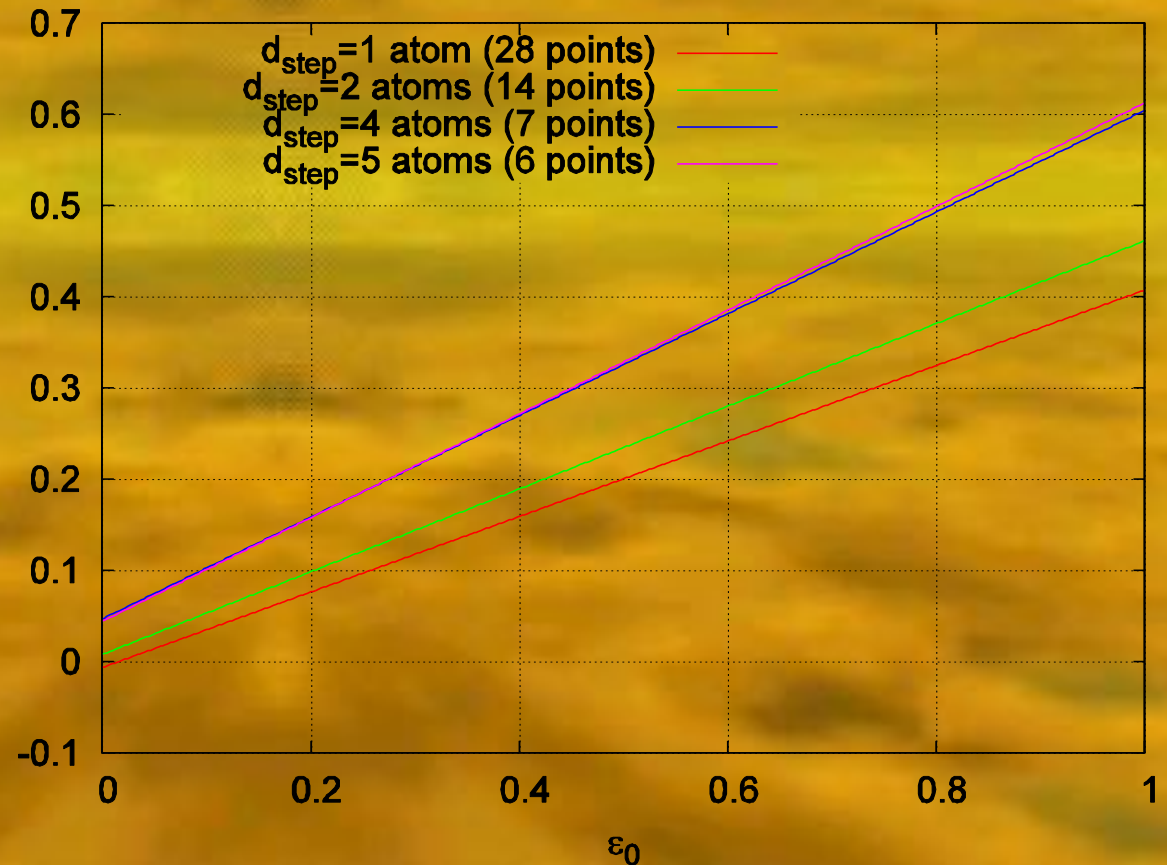
Fix VS adaptive p values - $d_{\text{avg}}=2$ nm



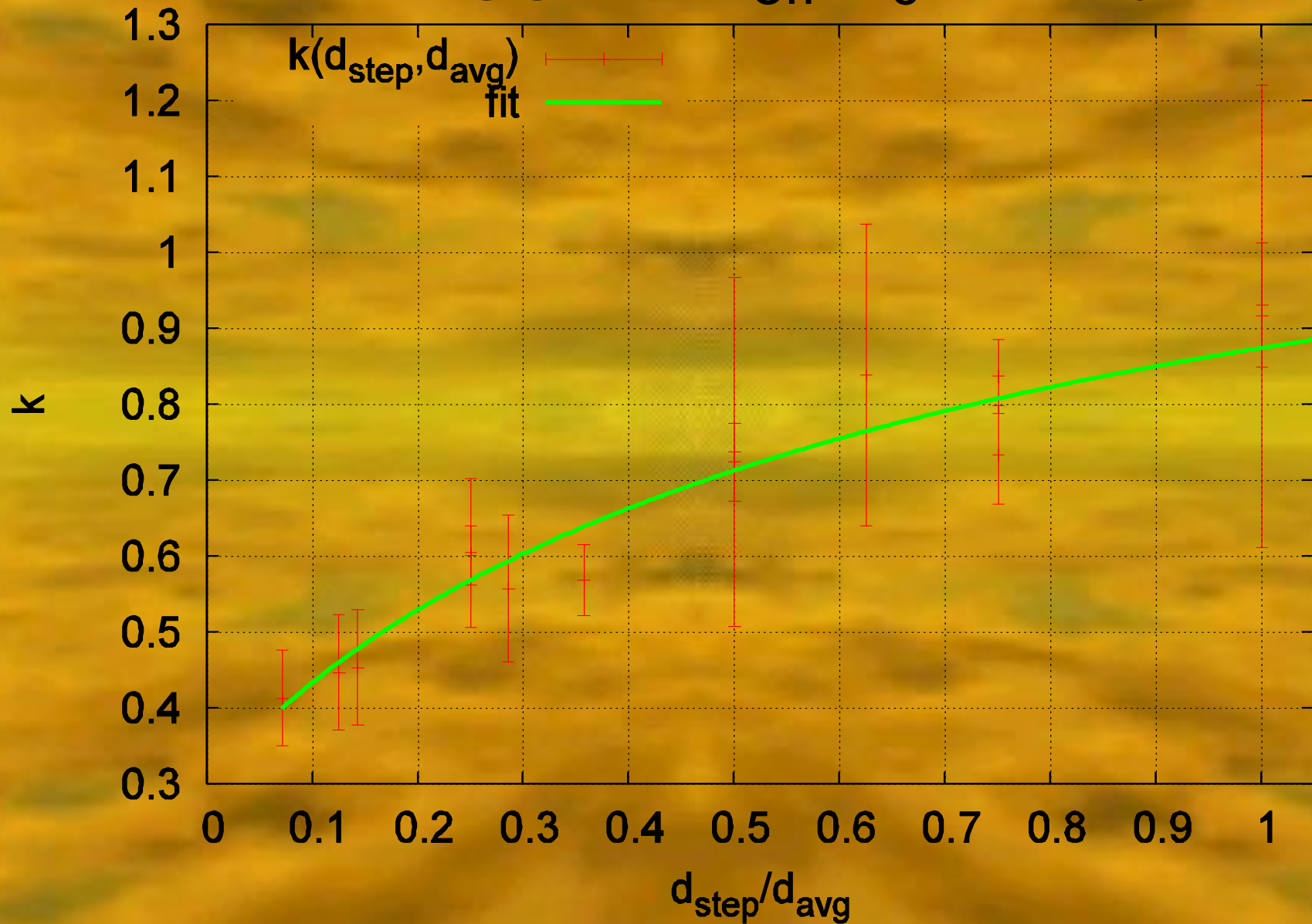
Effektív pontosság

- Sok kis rész-szemcse összessége pontosabb-e?

- d_{step} —
A vizsgált
részszemcsék ε_{eff}
közti különbség



Mitől függ az $\varepsilon_{\text{eff}} - \varepsilon_0$ arány?



Mitől függ az $\varepsilon_{\text{eff}} - \varepsilon_0$ arány?

- A lehetséges legkevesebb azaz 1 szemcse figyelembevételkor az arányosság 1

$$\frac{d_{\text{step}}}{d_{\text{avg}}} \approx 1$$


- Az összesnél nem tudunk több szemcsét figyelembe venni

$$\frac{d_{\text{step}}}{d_{\text{avg}}} \approx 0.99$$




- A=1.07 B=0.92 AB=0.99

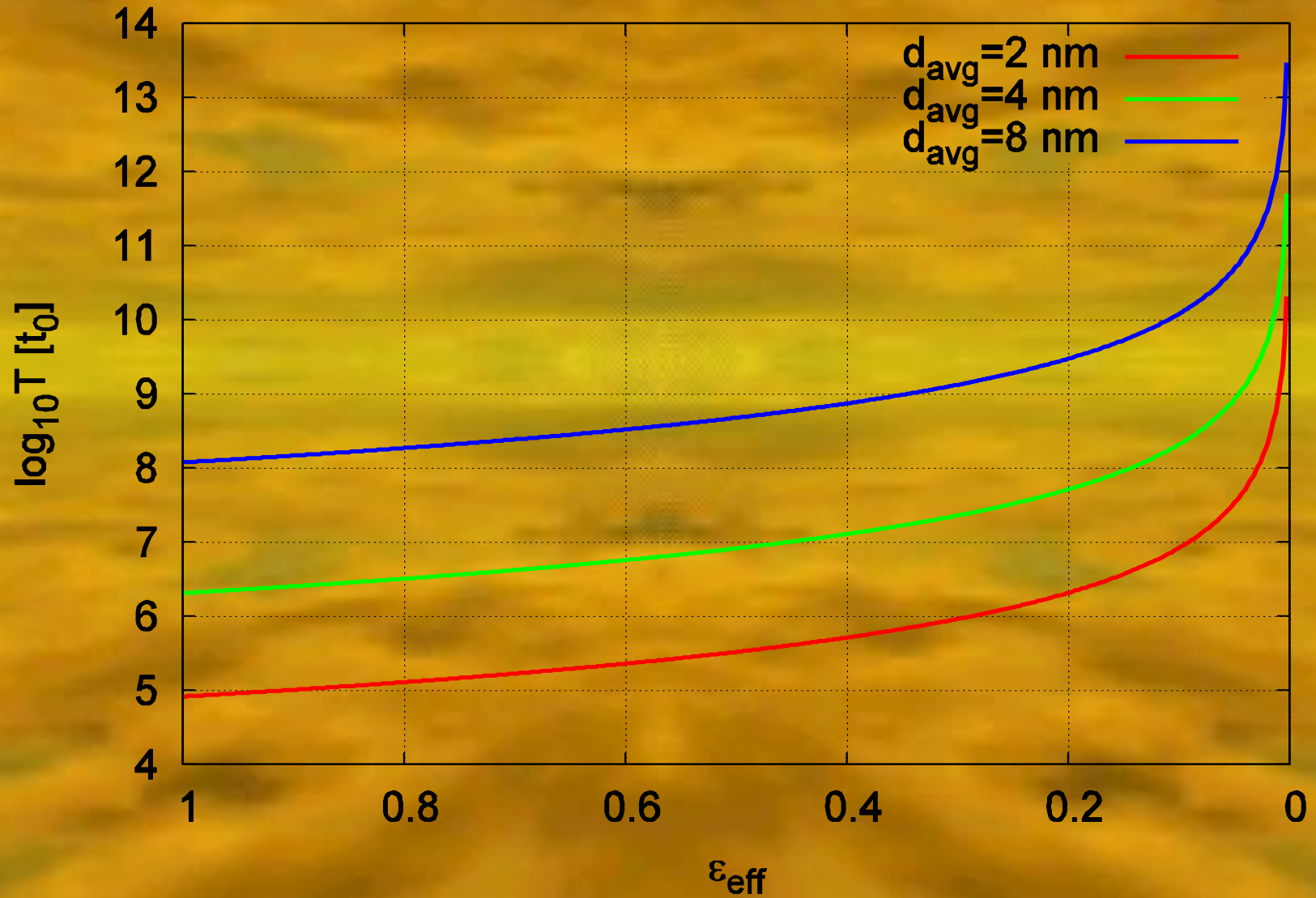
Számítási idő

- A monoszemcsés formula általánosítva:



- d^5 szumma: Bernulli számok $\sum d^5 \sim d^6$

Számítási idő



Optimalizálás

- Még egy szabad paraméter: d_{step}

$$\epsilon_{\text{eff}} = \epsilon_0 \left(\frac{d}{d_{\text{step}}} \right)^2$$

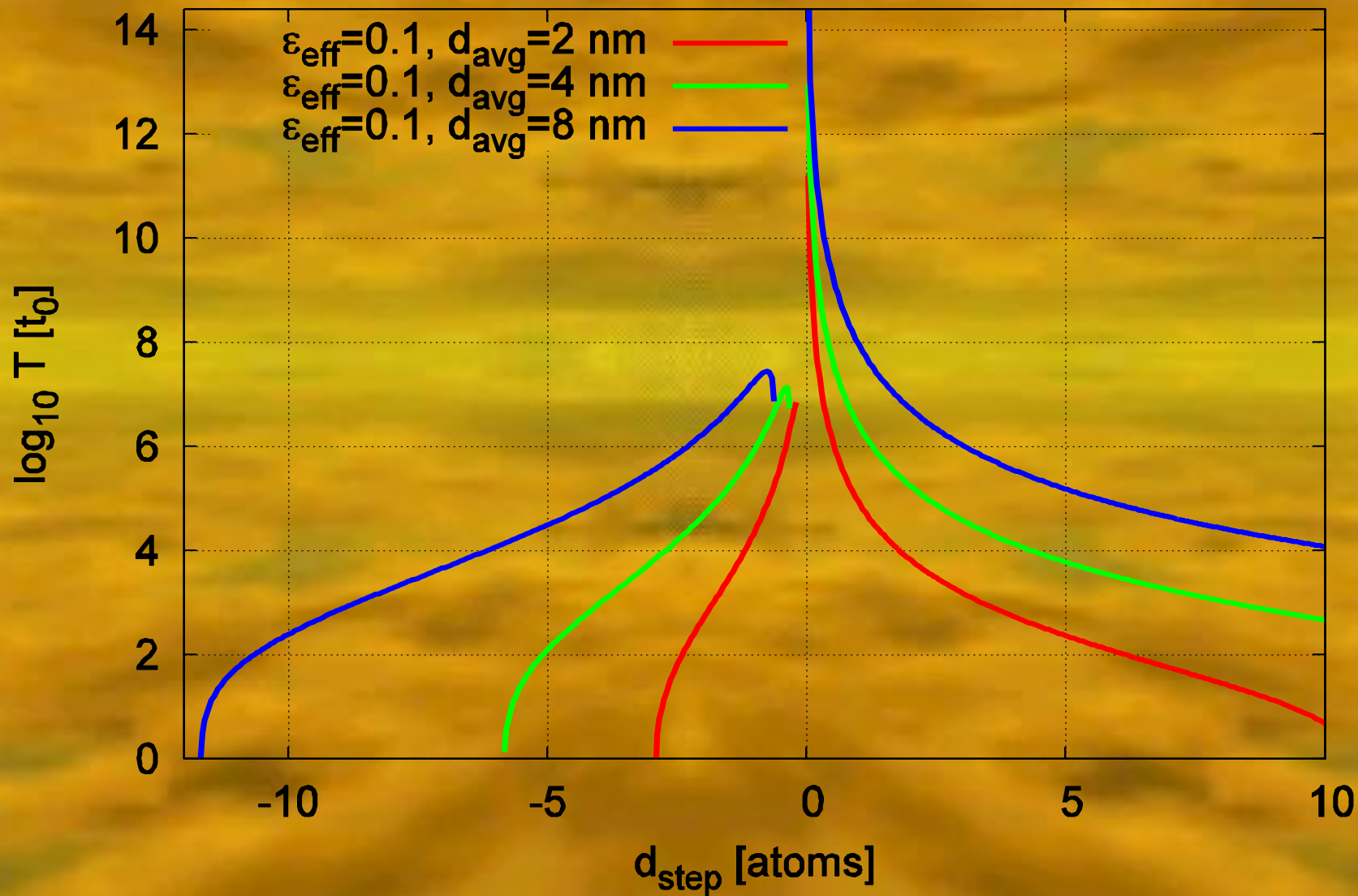
$$\sum d^5$$

T nő

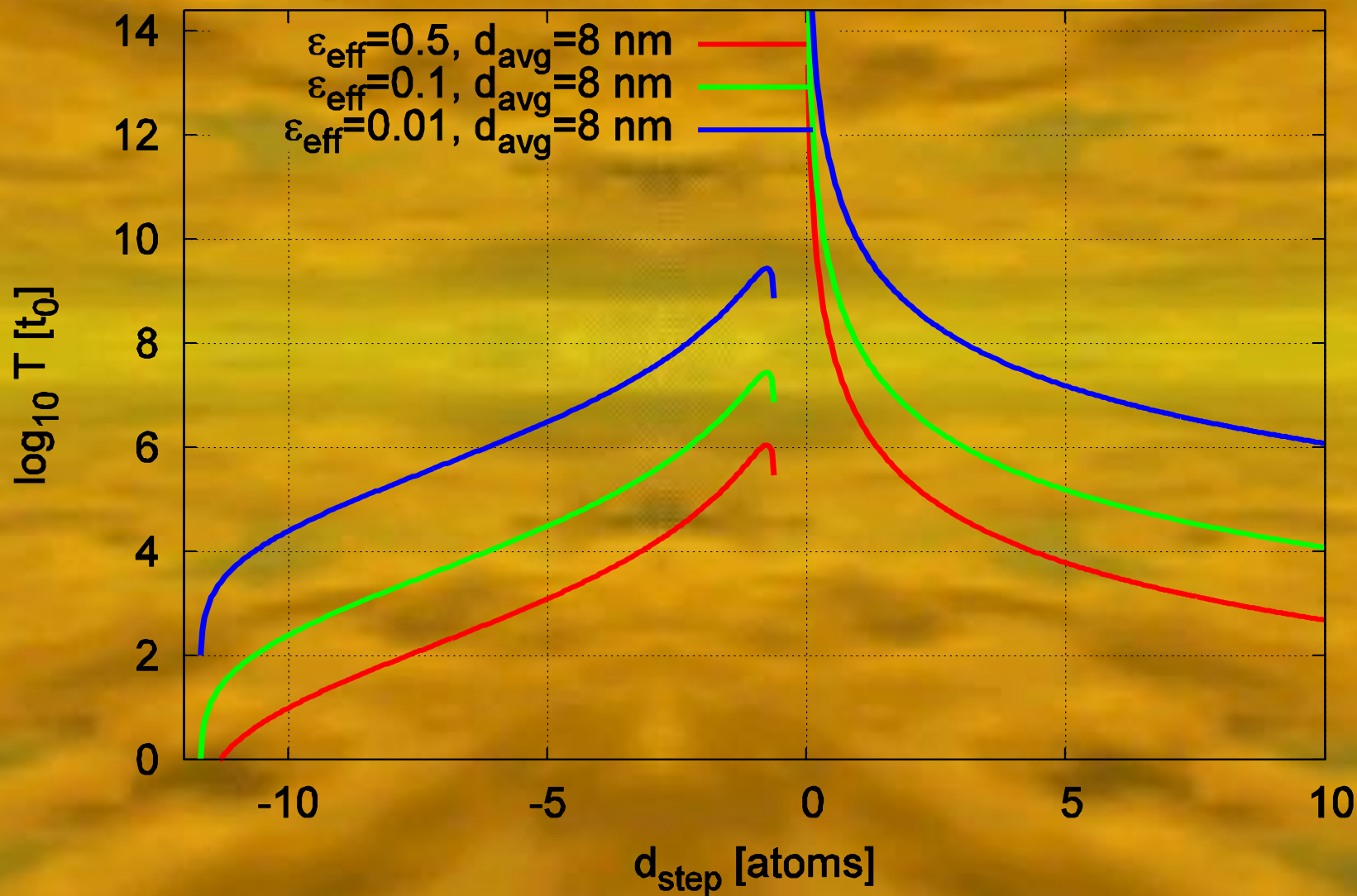
T csökken

- Kiegyensúlyozható-e ez a két hatás?
- Sajnos nem

(Nem) optimalizálás



(Nem) optimalizálás



Összefoglalás

- A Debye-formula felgyorsítható
- Elérhetővé válik egy új mérettartomány
- Polikristályos minták esetén véletlen faktor
- A eredmények konvergensek
- Monoszemcsés esetben: $T \sim d^8 \rightarrow T \sim d^5$
- Adaptív orientációs szám: $T \sim d^6$

Vége?

- A munkának nem
- Az előadásnak igen

Köszönöm a figyelmet!

Cu fcc polikristály

