# 项目名称

连续谱X射线衍射图案的卷积神经网络分析

# 项目英文名称

Applying convolutional neural networks to the analysis of polychromatic X-ray diffraction patterns

# 对学生的要求（最多600字）

对计算机技术有兴趣；有较强的英语阅读能力。

# 研究内容及意义（最多600字）

连续谱X射线衍射(又称Laue衍射)技术是一种重要的材料科学研究手段，其基本原理是将连续谱X射线照射在晶体上以得到漂亮的衍射图案，用以揭示晶体的取向和晶格畸变。

然而，由于连续谱X射线的衍射峰所对应的波长无法事先得知，因此其分析过程较为复杂，很难识别出晶体取向。对于纳米晶材料，入射光斑会同时覆盖多个晶粒，造成多个晶粒的衍射图案的重叠，增加了分析的难度。

最近兴起的卷积神经网络技术为连续谱X射线衍射图案的识别提供有力的工具。通过将模拟得到的连续谱X射线衍射图案进行标记，并输入到卷积神经网络中进行学习，有望训练出能自动识别晶粒取向的神经网络，提高衍射图案的分析效率；该神经网络也有望拓展到对纳米晶材料的表征，即分析多个晶粒衍射图案重叠的情况。

# 相关研究工作积累和已取得的成绩（最多600字）

连续谱X射线衍射分析技术是本人的博士研究课题。在先前的研究中，本人将数字图像相干（digital image correlation）技术用于衍射图案的分析，提高了晶格畸变的测量精度。

利用机器学习技术分析连续谱X射线衍射图案是本人开辟的新方向，并已经搭建起了神经网络的框架，对神经网络的优化工作还在进行中。。

# 预期目标（最多600字）

建立并训练出能识别连续谱X射线衍射图案的神经网络。

# 项目名称

对含缺陷的晶体的X射线衍射图案模拟

# 项目英文名称

Simulation of X-ray diffraction patterns from defected crystals

# 对学生的要求（最多600字）

对计算机技术有兴趣；对金属材料有初步的了解。

# 研究内容及意义（最多600字）

对于大多数金属多晶材料而言，由于原子的热运动，以及晶体的形成条件、冷热加工过程和其它辐射、杂质等因素的影响，实际晶体中原子的排列常偏离理想的晶体结构，即晶体缺陷。晶体缺陷对晶体的性能，尤其是对那些结构敏感的性能，如屈服强度、断裂强度、延伸率、电阻率有很大的影响。

# 相关研究工作积累和已取得的成绩（最多600字）

# 预期目标（最多600字）