# 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规则分布的斑点所组成的衍射图案，用以揭示晶体的取向和晶格畸变。连续谱X射线衍射相比单色光X射线衍射相比，其实验过程中无需旋转试样或探测器便可得到多个衍射峰，因而其效率和精度都更高。

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，因此其分析过程更为复杂，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

对含位错的晶体的X射线衍射图案模拟

# 项目英文名称

Simulation of X-ray diffraction patterns from crystals containing dislocations

# 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，由于晶体在其凝固过程、塑性成形过程中及受辐射等因素的影响，实际晶体中包含了大量位错，使原子的排列偏离理想的晶体结构。位错对晶体的性能，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。

尽管可以用高分辨电镜直接观察位错，但其制样过程繁琐且会引入位错。利用X射线衍射的方式可以无损、间接地反映位错分布，其基本原理是，位错会引起附近晶格的畸变，从而造成衍射峰形的变化。

然而，衍射峰形还只能定性地推断位错的分布。本项目拟从虚拟的位错网络出发，模拟其对应的衍射峰形，并分析衍射峰形的量化指标（例如半峰全宽）与位错网络的统计指标（例如净Burgers矢量、位错密度）之间的联系，为下一步用机器学习从衍射峰形自动识别位错分布奠定基础。

# 相关研究工作积累和已取得的成绩（最多600字）

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。

本人已经通过位错动力学模拟建立起了位错结构网络，可以用于对其衍射图案的模拟中。

# 预期目标（最多600字）

模拟一个位错网络所对应的衍射峰形，建立衍射峰形的量化指标（例如半峰全宽）与位错网络的统计指标（例如净Burgers矢量、位错密度）之间的联系。