|  |  |
| --- | --- |
| KOLONITS TAMÁS  Fizikus MSc, 1. félév  Eötvös Loránd Tudományegyetem Természettudományi Kar |  |

Témavezető:

|  |
| --- |
| Czigány Zsolt  tudományos főmunkatárs, MTA TTK MFA - Magyar Tudományos Akadémia Természettudományi Kutatóközpont Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Intézet Vékonyréteg Fizikai Osztály |

Nanoszemcsés anyagok elektrondiffrakciójának vizsgálata számítógépes szimulációval

Nanoszemcsés anyagok elektrondiffrakciója leírható az egyes szemcsék, mint nanoklaszterek, szórásának számításával. A szórt intenzitás függ többek közt a szemcsemérettől és annak eloszlásától. Azonban a diffrakció modellezéséhez nagyszámú atommal kell számolnunk, ezért gyakran a szuperszámítógépek lehetőségeit is meghaladó számítási kapacitásra lenne szükségünk.Például már egy relatíve apró – pár 10 nanométer átmérőjű – kristályszemcse is több százezer atomot tartalmaz. Ennyi atom modellezése elvben igen egyszerű, viszont beláthatatlan ideig tartana. Sok nanoszerkezetű anyag kutatása során felmerül az igény ekkora, akár nagyon szabálytalan elrendeződést mutató atomklaszterek, diffrakciós intenzitáseloszlásának kiszámítására. Az algoritmus gyorsítását a szakirodalomban közismert Debye-formula módosításával értem el. A gyorsítást az adja, hogy a módosított algoritmus számításigénye nem négyzetesen, hanem csak lineárisan nő a számításba vett atomok számával. Így elvégezhetővé válnak olyan részletes számítások, amelyekre eddig csak közelítő módszereket tudtunk alkalmazni, mivel a Debye-formulával gyakorlatilag megvalósíthatatlan ideig tartanának. A dolgozatban az algoritmus konvergenciáját vizsgálom pordiffrakció esetében, vagyis azt, hogy a megkövetelt pontosság függvényében hogyan nő a számítási idő. Továbbá vizsgálom azt, hogy hogyan kell megválasztani a szimuláció paramétereit (pl. megkövetelt pontosság, szemcseméret-eloszlás felbontásának finomsága) hogy minimális idő alatt elvégezhessük a feladatot.