

Összefoglaló

A 2000-es évek elején Elder és mtsai. létrehozták az atomisztikus fázismező-modellt (PFC) a szilárd-folyadék fázisátalakulás tanulmányozására, amely a jól megalapozott klasszikus sűrűségfunkcionál-elmélet (CDFT) egymódusú közelítéseként értelmezhető. Habár a CDFT használható igen pontosan, az jelentős számítási költséggel jár, amikor időfüggő numerikus megoldásra van szükség. Amellett, hogy kevésbé erőforrás igényes, mint a CDFT, a PFC modell számos előnnyel rendelkezik a nagyléptékű fázismező modellekkel szemben, mivel rendparamétere hordozza a szilárd fázis kristályszimmetriáit. Ez a rugalmasság és a termodinamika természetes csatolását eredményezi, ad hoc mezők használata nélkül.

1. A diffúzív PFC modellben gyorsított kísérleteket hajtok végre a prekursor állapot kialakulásának tanulmányozására. A lokális szerkezetmeghatározáshoz a Lechner és Dellago féle elsőszomszéd-átlagolt bondorientációs rendparamétereket használom. Elemzem a Tan és mtsai. által felismert középtávú kristályos rendet. Az átlagos rend elemzésének céljából összehasonlítom az amorf klaszterek radiális eloszlásfüggvényeit Hoang és Shibuta és mtsai. által végzett fém nanorészecskék molekuláris dinamika szimulációival. Összefoglalva, a dinamikus átlagtér elméleteket, mint a PFC modellt, nem korlátozzák a klasszikus nukleációs elmélet feltételezései és azt kapjuk, hogy a termodinamikailag legstabilabb szilárd fázis nagy túlhűtésnél nem közvetlenül, hanem egy szilárd amorf szerkezeten keresztül jelenik meg.
2. A nukleáció és a növekedési front kölcsönhatása meghatározó szerepet játszik a polikristályos növekedési formák, mint például a rendezetlen dendritek és a szferulitok szerkezetében. Az összetett polikristályos növekedési formák kialakulásának mechanizmusát növekedési front menti nukleációként (GFN) azonosították. Ez leírja az új orientációjú szemcsék kialakulását a haladó szilárd-folyadék határfelületen, a növekedési fronton. Habár ez a megközelítés - amely egy nagyléptékű orientációs mezőn alapul - igen sikeresnek bizonyult az összetett megszilárdulási mintázatok reprodukálásában, a GFN jelenség mikroszkopikus kinetikája nagyrészt rejtve maradt az ilyen jellegű modellekben. Mivel a hidrodinamikai PFC (HPFC) modellben a növekedési formák változnak a túlhűtéssel, ígéretesnek tűnik a GFN mikroszkopikus eredetének tanulmányozása a HPFC modellben. Ennek során olyan mechanizmusokat találok, amelyek nincsenek jelen a diffúzív PFC (DPFC) modellben és betekintést nyerek abba is, hogy milyen körülmények között válik polikristályos növekedési formává egy kezdeti egykristály.
3. Különböző körülmények között tanulmányozom az epitaxiális növekedési folyamatot a két-dimenziós DPFC modellben, a szubsztrát-epiréteg határfelületére merőleges metszetben. Megmutatom, hogy a kritikus rétegvastagság (h_c) növekszik a megnyúlás csökkenésével. Ez összhangban van a kísérletekkel és a statikus energiaegyensúlyon alapuló megközelítésekkel, mint például a van der Merwe (VDM), a Matthews-Blakeslee (MB) és a People-Bean (PB) modellekkel. Azonban jelentős eltéréseket találok, amikor a h_c és a megnyúlás közötti kapcsolatot elemzem a VDM, MB és PB modellek elméleti összefüggései alapján. Ezen kérdés feloldása érdekében a hibaképződés okait vizsgálom kinetikai perspektívából, az Asaro-Tiller-Grinfeld (ATG) instabilitás alapján. Végül arra a következtetésre jutok, hogy az ATG instabilitás dinamikus elmélete megfelelőbb megközelítés a növekedés során kialakuló hibaképződés tanulmányozására, mint a korábbi, energiaegyensúlyon alapuló statikus megközelítések.