



Bírálat Podmaniczky Frigyes „Phase-Field Crystal Modeling of Nucleation and Growth Processes” c. PhD disszertációjáról

Podmaniczky Frigyes doktori dolgozatában kristályosodási és növekedési folyamatokat vizsgálta molekuláris szinten a fázismező kristály (PFC) modell segítségével. A kutatás érdekes és releváns, mert a modern társadalmak technológiai fejlődése szorosan összefügg az anyagtudomány terén szerzett ismereteinkkel és az új, mérnökiileg tervezett anyagok kifejlesztésével.

A dolgozat szerkezete áttekinthető, logikus, megfogalmazása világos, jól olvasható. Véleményem szerint a jelölt helyesen alkalmazza a szakmai nyelvet, és az értekezés megfelel az angol nyelv helyesírási követelményeinek.

A dolgozat 7 fejezetből áll. Az első 4 fejezet bevezetésül szolgál, amelyekben bemutatja a korábbi kutatások során elért eredményeket és a saját kutatásában használt technikai és fogalmi eszközöket. Az 5. fejezetben az amorf prekursorok képződését vizsgálja a PFC modell segítségével, bemutatva, hogy nagy túlhűlések esetén az amorf szerkezetek jelennek meg először, majd később alakulnak ki a BCC kristályos régiók, megerősítve, hogy a kristályosodás nem közvetlenül a legstabilabb fázissal kezdődik. Ezután a 6. fejezetben két kiterjesztett DPFC modell segítségével vizsgálja a kristályosodási kinetikát túlhűtött molekuláris folyadékokban, bemutatva, hogy a HPFC modellben az alacsony túlhűlésnél izotróp, míg magas túlhűlésnél erősen anizotróp növekedési formák jelennek meg, valamint feltárva a polikristályos növekedés mechanizmusait és az alacsony hőmérsékletű nukleáció dinamikáját szilárd alapon. Az utolsó, 7. fejezetben Frigyes a heteroepitaxiális kritikus vastagságot (h_c) vizsgálta kétdimenziós PFC szimulációk segítségével, és kimutatta, hogy h_c a csökkenő feszültséggel növekszik, amely összhangban van a statikus modellek (VDM, MB, PB) kvalitatív eredményeivel, de eltérések figyelhetők meg a h_c és a feszültség közötti kapcsolat kvantitatív elemzésekor. Az Asaro-Tiller-Grinfeld (ATG) instabilitás alapján végzett kinetikai vizsgálatok azt mutatták, hogy a hibaképződés dinamikája és a megszilárdulási sebesség döntő szerepet játszik h_c meghatározásában, amit a statikus modellek nem vesznek figyelembe. Ezen felül a szimulációk felfedték, hogy a h_c értéke aszimmetrikusan változik a pozitív és negatív feszültségek függvényében, amit a statikus elméletek nem tudnak megmagyarázni.

Szakmai kérdéseim a jelölthöz:

Ötödik fejezettel kapcsolatos kérdések:

1. Milyen hatással van a szimulációk eredményeire a szimulációs rács felbontásának változtatása? Hogyan befolyásolja a rácsfelbontás a finom szerkezeti részletek, mint például az amorf fázisok vagy a különböző kristályszerkezetek megkülönböztetését a szimulációkban? Van-e ismert kompromisszum a rácsfelbontás és a szimulációk futási ideje, illetve pontossága között a PFC modell esetében?

2. A dolgozatában a q_4 és q_6 kötési sorrend paraméterek küszöbértékeit használja a folyadékszerű, amorf és kristályos fázisok elkülönítésére. Hogyan változnának az eredményei, ha pl. a $q_6 \leq 0.28$ helyett más határértéket alkalmazna a folyadékszerű szerkezetek meghatározására? Mennyire érzékenyek az eredmények ezekre a küszöbértékekre, és mit gondol, hogyan befolyásolná a kétlépcsős nukleáció értelmezését, ha magasabb vagy alacsonyabb határértékeket választana? Van-e lehetőség ezen küszöbértékek finomhangolására az anyagspecifikus tulajdonságok függvényében?

Hatodik fejezettel kapcsolatos kérdések:

3. A dolgozatában említi, hogy a szimulációk két dimenzióban készültek a számítási kapacitás korlátai miatt. Ki tudná fejteni, hogy milyen kihívások akadályozzák a háromdimenziós szimulációk megvalósítását? A számítási erőforrásokon túl vannak-e egyéb nehézségek, mint például a határfeltételek kezelése, a topológiai hibák modellezése, vagy más? Hogyan befolyásolná a háromdimenziós tér a HPFC keretein belül a kétdimenziós szimulációk eredményeiből levont következtetéseket?

4. A HPFC modell által leírt kristályosodási folyamatok esetében milyen mértékben befolyásolja a hőmérsékletváltozás nagysága és annak sebessége a kristályosodási front viselkedését és a fononok diszperzióját? Hogyan változik a modell által leírt növekedési sebesség és polikristályos szerkezetek kialakulása különböző hűlési sebességek mellett, és ezek milyen hatással vannak a termodinamikai és kinetikai paraméterekre?

Hetedik fejezettel kapcsolatos kérdés:

5. A mikroszkopikus szinten kialakuló misfit esetében azt feltételezzük, hogy az egyik rács hozzáigazodik a másikhoz. Hogyan egyeztethető össze ez a jelenség a makroszkopikus skálával? Kijelenthető-e, hogy a mikroszinten létrejövő rácstorzulás nem okoz nagyobb feszültségeket makroszinten, különösen akkor, ha a rétegek vastagsága vagy a misfit aránya nő?

Véleményem szerint a dolgozatban bemutatott tudományos kutatómunka alapos és színvonalas. A feltett kérdésektől függetlenül úgy gondolom, hogy a témaválasztás, az alkalmazott módszerek, a Jelölt által elért új tudományos eredmények és a disszertáció egyaránt megfelelnek a PhD fokozatszerzés általános követelményeinek. A Jelölt eredményeit 3 tézispontban foglalta össze, melyeket új tudományos eredményeknek fogadok el. A jelölt folyóiratban megjelent publikációiban megfelelő formában szerepelnek a dolgozatban ismertetett eredmények. Javaslom a dolgozat nyilvános vitára való kitűzését.

.....
Tajkov Zoltán

Budapest, 2024.10.07.

Tajkov Zoltán