

Válaszok Ispánovity Péter Dusan kérdéseire

- Q1:** Milyen eljárások léteznek a megfigyelt prekursor fázis potenciális kísérleti igazolására a BCC fázis kialakulásakor? Történtek-e esetleg ilyen kísérleti vizsgálatok az irodalomban?
- A1:** A jelenség kísérleti megfigyelése (a dolgozat 5.2-es fejezetében hivatkozva Zhang et al. és Tan et al. munkáit) kolloid rendszerekben történt meg, amikben konfokális pásztázó mikroszkóp segítségével az egyes részecskék közvetlenül nyomonkövethetőek a nukleációs folyamat során.
- Q2:** A (3.3) egyenletben a PFC funkcionálban megjelenő c_0 és c_1 konstansok fizikai eredetét részletesen taglalja a jelölt. Nem világos azonban, hogyan kerülnek bevezetésre a HPFC modellben használt (4.6) összefüggésben megjelenő állandók. Ezek empirikus paraméterek, vagy itt is meg lehet találni a pontos fizikai jelentéseket?
- A2:** A PFC modellnek több paraméterezése található meg párhuzamosan az irodalomban. A 3.3 egyenletben szereplő felírás van legközelebb a sűrűségfunkcionál-elméletből származó levezetéshez. Szokásos, hogy az ideális gázból származó szabadenergia járulék együtthatóit (a, b) szabad paraméterként kezelik, amivel a modell fázisdiagramja illeszthetővé válik valós anyagokra. A direkt korrelációs függvényből származó paraméterek (c_0, C_2, C_4) a 4.6 egyenletben egyértelmű kapcsolatban vannak a 3.3-as felírás (c_0, c_1) paraméterezésével a hossz dimenziótlanítása után ($k_{\max} = 1$), ugyanazt az illesztést fogalmazzák meg, praktikusan ezek is illeszthető paraméterek a folyadék kompresszibilitásán és a szilárd állapot rugalmas állandóján/felületi feszültségén keresztül.
- Q3:** A szerző a 6.2.4 fejezetben bemutatja, hogy nagy túlhűtés esetén a sarkoknál történő gyorsabb növekedés inhomogén rácsállandóhoz vezet, mely felületi feszültségként jelenik meg az oldalélek középső részeinél, ahogy a 6.12-es ábrán látható. Megfigyelhető azonban egy sugárirányú fluktuáció is, melyre a szerző nem tér ki. Mi lehet ennek az oka ill. van-e/lehet-e ennek szerepe a növekedési folyamatokban?
- A3:** A sarkoknál tapasztalható gyorsabb növekedést úgy kell értelmezni, hogy a kristályél újabb rétegei a sarkoktól indulva épülnek fel a folyadékatomokból. Ez összhangban van azzal, hogy a folyadék és a szilárd állapot közötti sűrűségkülönbség a sarkoknál minimális, szemben az élek közepével, ahol maximális. A dolgozatban kiürített réteggént hivatkozok erre, ez analóg a diffúzív PFC modellben megfigyelhető sűrűségtranszport-limitált növekedéssel. A propagáló szilárd-folyadék határfelületben a tömbi fázistól eltérő állapot uralkodik egyrészt a folyadékbeli inhomogén átlagsűrűség, másrészt a szilárd atomok redukált számú szomszédai miatt. A kristályszemcse anizotrópiájával kiegészítve ezek a hatások együttesen eredményezik a rácsállandó irányfüggő eltérését az ideálistól. A megszilárduló határfelület ezeket a viszonyokat, mint egy peremfeltétel kényszeríti a kristályszemcsére, ami a látható oszcilláció szerint relaxál a tömbi rész homogén körülményeihez.
- Q4:** A dolgozat szövege és a 6.10 ábra alapján a felépülő belső feszültségek misfit diszlokációk megjelenéséhez vezetnek. Mi a diszlokációk megjelenésének fizikai feltétele? Létezik-e egy küszöbfeszültség érték vagy esetleg itt is egy különleges mechanizmus során jönnek ezek létre? Mi befolyásolja a létrejövő diszlokációk sűrűségét?

- A4:** Heteroepitaxiális növekedés esetén az epirétegek a szubsztrát hatását peremfeltételként érzékelik, az ideálistól eltérő rácsállandó a növekedő rendszerre kényszerítve van. Ettől eltérően, a 6.10 ábrán látható növekedő kompakt kristályszemcse belső okok (növekedés sajátosságai) következtében kerül feszültség alá. A dolgozatban megjegyzem, hogy zaj hatására az első hibák megjelenésének ideje jelentősen lecsökken, ez a tény összhangban van az ATG hibaképződés mechanizmusával. Feltehetőleg a lokális rend deformációja ad lehetőséget a hibák megjelenésére, azonban további vizsgálatot igényel a mechanizmus pontos leírása. A keletkező diszlokációk sűrűsége összefügg a szemcse lokális orientációjával, ezért első közelítésben azt mondhatjuk, hogy a hibák a 6.12 ábrán bemutatott lokális orientációs különbségeket igyekeznek kiegyenlíteni.
- Q5:** A jelölt két helyen is említi, hogy a misfit definíciója az irodalomban nem egységes. Miért tartja ezt ilyen fontosnak kihangsúlyozni ill. mekkora hibákat okozhat a különböző definíciók használata?
- A5:** Fontos kihangsúlyozni, mert a téves definíció eltér a rugalmasságtanban megszokottól és nemlinearitást hoz be. A relatív hiba a misfit kalkulált értékében közel maga a misfit értéke, tehát pl. $f = 0.15$ esetén 17% és $f = -0.15$ esetén -13%.
- Q6:** A 7.8 ábra alsó sorában a PFC modell szigetes növekedést jósol (bal oldali panel). A Voronoi-szerkesztés azonban tökéletes kristályt mutat. Pontosan milyen értelemben beszélhetünk szigetek kialakulásáról, hogyan lehetne a jelenséget kvantifikálni?
- A6:** A Voronoi analízis az elsőszomszédok száma szerint színezi a Voronoi cellákat. Jelentősen torzulhat a rács, mielőtt megváltozik a konnektivitása, azaz a sárga szín - ami 6 szomszédot jelöl - megváltozik. A sárgára színezett hatszögek erősen deformáltak és eltérnek a szabályos hatszögtől azokon a helyeken, ahol a sűrűségmezőt ábrázolva szemcsehatárt várnánk, a kérdéses ábrán két ilyen szemcsehatáron akkora a deformáció, hogy 5-ös és 7-es szomszédságú cellák is megjelennek. A dolgozatban a két panel képei akkor hozhatók egymással fedésbe, ha az egyiket a vízszintes tengelyre tükrözzük, tehát valamelyik hibásan került beillesztésre.
- Q7:** A 7.2.4 fejezetben a jelölt a 7.11 ábra alapján megállapítja, hogy $7\lambda = 92\sigma_{\text{film}}$. Hogyan jutott erre a következtetésre? A 7.11 ábra alapján a moduláció amplitúdója kisebb, mint egy rácsállandó. Kapcsolatba hozható-e egy ilyen kis amplitúdójú moduláció az ATG instabilitással, azaz alkalmazható-e egy kontinuum elméletből származtatott jelenség az atomi méretskálán?
- A7:** A szimulációs doboznak kevesebb, mint a felét látjuk függőleges (y) irányban, a teljes hossz $L_y = 100\sigma_{\text{st}} = 92\sigma_{\text{film}}$. Az ábraaláírás szerint erre a hossza 8 extra atom jut, de csak 7 diszlokáció keletkezik. Tehát ezt a függőleges irányú kiterjedést felírhatom a diszlokációk közötti távolság λ segítségével $L_y = 7\lambda = 92\sigma_{\text{film}}$. A hiba megképződése előtti állapotot vizsgálva, a határfelület x -irányú modulációjának amplitúdója legalább két rácsállandó, az ATG instabilitás jól megfigyelhető, az tetszőlegesen kicsi értékről növekszik, ha a feltételek adottak. Egy diszkrét leírásban is az atomok pozíciója egy folytonos változó, melyek perturbációja tetszőlegesen kicsi, folytonos érték lehet.
- Q8:** A 7.16 ábra alapján a lineáris stabilitásanalízis azt jósolná, hogy a függvény maximumához tartozó hullámhossz valósul meg az ATG instabilitás során. Milyen kapcsolatban

van ez a hullámhossz azzal, amit a misfit diszlokációk egyensúlyi távolsága ad meg (a 102. oldal második bekezdésében)?

- A8:** Az ATG elmélet kontinuum leíráson alapszik, nem veszi figyelembe a rugalmas közeg diszkrét felépítését, ezért nem tartalmazza a rácsállandót, mint hosszskálát. A teljes relaxáció, mint extra feltétel került bevezetésre, plauzibilis kritériumként a diszlokációk közötti távolság meghatározására, amit a szimulációk alátámasztanak. A lehetséges legnagyobb hullámhosszú moduláció éppen a szimulációs doboz y -irányú kiterjedése L_y a periodikus peremfeltétel miatt. Az ATG növekedési faktor maximuma valószínűleg ennél nagyobb hullámhosszhoz tartozik, bár ez nem került kiszámításra. További kutatómunkára van szükség ahhoz, hogy megértsük, mi áll a megjelenő hibák számának hátterében.
- Q9:** A dolgozat egyik eredménye, hogy a diszlokációk keletkezésének leírásához nem elegendő az energiaminimum elv alkalmazása, hanem a hibakeletkezés dinamikai folyamatát is meg kell érteni. Ez utóbbi hogyan változna 3D-ben? Várna-e a jelölt jelentős különbségeket az eredményekben 3D-s szimulációk esetén?
- A9:** Az epitaxiális növekedés esetén keletkező diszlokációk leírásának fontos eleme a szubsztrát megfelelő figyelembevétele. Háromdimenziós problémát feltételezve, ha a szubsztrát felülete tökéletes atomi rendet mutat, a diszlokációk megjelenéséhez elengedhetetlen az epiréteg-folyadék határfelület modulációinak tanulmányozása. Ezzel szemben ha diszlokációk végződnek a szubsztrát felületén, azok forrásai lehetnek az epirétegekben haladó diszlokációknak, ilyen esetben alkalmazhatók az energiaminimalizálásra épülő modellek. Három dimenzióban mindenképp gazdagabb viselkedést kapunk, ami a PFC modell keretein belül továbbra is modellezhető.