

Válaszok Tajkov Zoltán kérdéseire

- Q1:** 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?
- A1:** A PFC modell rendparamétere, a sűrűségmező a folyadék állapotban konstans, a szilárd állapotban pedig rácsperiodikus oszcillációt mutat, egyetlen domináns Fourier-komponenssel. Ezért használjuk gyakran a kifejezést, miszerint a PFC modell a klasszikus sűrűségfukcionál-elmélet egymódus közelítése. A sűrűségeloszlás lokális maximumaival azonosítjuk a szilárd állapotbeli atomok pozícióit, amiket numerikus interpolációval határozzunk meg, így azok rácsfelbontásnál nagyobb pontossággal ismertek. Ezek a pozíciók elég érzéketlenek a rácsfelbontásra, így a szerkezetmeghatározás is az. Abban vagyunk motiváltak, hogy adott erőforrások mellett a legnagyobb/leggyorsabb szimulációt futtassuk azaz a legkevesebb diszkrét változóval legyen dolgunk. A térbeli differenciáloperátorokat Fourier-transzformáció segítségével kiértékelve a korrektség megőrzése mellett ez praktikus azt jelenti, hogy egy rácsállandót elég 8-10 rácspontra diszkrétizálnunk.
- Q2:** 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?
- A2:** Az irodalomban korábban publikált határértékeket vettük át a saját eredményeink kiértékeléséhez, hogy az összehasonlíthatóságot elősegítsük. Ezek a viszonylag önkényesen választható határértékek validálhatóak azzal, hogy ideális szerkezeteket perturbálunk Gauss-zajjal, de ennek az eljárásnak inkább a rendezett szerkezetek megkülönböztethetőségénél van jelentősége. A $\bar{q}_6$ rendparaméter nagyon jó szeparációt mutat a BCC és amorf/folyadék szerkezet között, amint azt a dolgozat 5.2-es ábráján demonstrálom. A kétlépcsős nukleáció ténye nem a határértékek függvénye, hiszen a PFC modell használatával abban a szerencsés helyzetben vagyunk, hogy a szilárd és a folyadék állapot között a sűrűségmező amplitúdója tesz különbséget.
- Q3:** 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?
- A3:** A 6. fejezetben taglalt vizsgálódások két dimenzióban történtek, mivel a korábbi, motivációul szolgáló fazismező-elméleten (phase-field theory) alapuló eredményekkel terveztük az összehasonlítást és ezek főleg olyan rendszerekre vonatkoztak, amik kristályosodása

valamilyen okból két dimenzióban zajlik. Ezt a növekedési anizotrópiát a PFC modellben úgy értük el, hogy kétdimenziós modellezésre szorítkoztunk. A háromdimenziós szimulációknak nincs akadálya (kérdés marad persze a növekedési anizotrópia kezelése), bár a nagyobb memóriaigény jelentősen lecsökkenti ilyenkor a szimulálható probléma lineáris méretét.

- Q4:** 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?
- A4:** A PFC modell alapjául az egyensúlyi klasszikus sűrűségfunkcionál-elmélet szolgál, ezért a gyors hőmérsékleti kvencsek folyadékállapotra kifejtett hatását nem képes figyelembe venni, a dolgozatban használt mozgásegyenletektől függetlenül. A folyadék részecskék öndiffúziója egy termikusan aktivált folyamat, ami a leírás ezen szintjén nem kerül modellezésre, ad hoc módon a diffúziós állandó/viszkozitás paraméterek explicit hőmérsékletfüggésével lehetne figyelembevenni. A megszilárdulási front sebessége egyrészt ennek a kinetikai együtthatónak másrészt a termodinamikai hajtóerőnek a szorzataként áll elő. A PFC modellben ezt a hajtóerőt hangolhatjuk a modellparaméterek változtatásával. A megszilárdulás sebessége limitálva van nagy hajtóerőknél, ugyanis egy kinetikus spinodális határba ütközünk, itt a termodinamikailag stabil fázis feltétel nélkül, a jelenlévő termikus inhomogenitás hatására megjelenik és a frontsebesség értelmezhetetlenné válik ezen a határon túl.
- Q5:** 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?
- A5:** Valóban, ahogy egy szubsztráton megindul az epitaxiális rétegek növekedése, amihez más rácsállandó tartozna a tömbi fázisban, kezdetben felveszi a szubsztrát rácsállandóját, ezt hívjuk koherens növekedésnek. Ahogy a rétegek száma növekszik, ez a rácstorzulás (az ideálistól való eltérés) egyre nagyobb területet érint. A kritikus vastagság vizsgálata pontosan azt jelenti, hogy hány réteg után következik be a diszlokációk megjelenése, amik ahhoz vezetnek, hogy az epitaxiális rétegek rácsállandója közelebb kerül az egyensúlyi, tömbi értékéhez és a rendszer alacsonyabb szabadenergiájú állapotba kerül. Ezek a rácshibák felelősek azért, hogy a makroszkopikus skálán ne jelenjen meg feszültség a mintában.