

Függelék 2: Diplomamunka és TDK kutatás összefoglalása

Kustár Gergely

June 17, 2022

Diplomadolgozatomban megírásához végzett tudományos feladatomban a sztochasztikus kinetikus átlagtérmodell és a hozzátartozó szimulációs kód fejlesztése volt. A modell kétkomponensű nanorészecskék atomisztikus szimulációjára alkalmas. A korábbi SKMF modellekhez képest általam bevezetett fejlesztések a kétféle határfelület, illetve a kötési energiák összetételfüggővé tétele volt. A modell elméleti fejlesztése során levezettem az új összetételfüggő KMF egyenleteket, a bennük megjelenő paramétereknek fizikai jelentést adtam. A kétféle határfelület bevezetése lehetővé tette hordozó felületén levő részecskék szimulációját.

A szimulációs kód fejlesztése az új egyenletek használatát, illetve egy növekedési funkció bevezetését jelentette. Az új szimulációs kód amit kifejlesztettem képes volt nanorészecskéket atomonként lehelyezve szimulálni, változó lerakási sebességgel, részecskemérettel.

Diplomamunkám a modell és szimulációs kód fejlesztéséről szól, illetve annak funkcióiról tartalmaz demonstratív szimulációs eredményeket.

TDK munkám során réz-ezüst kétkomponensű rendszereket vizsgáltam, konkrétan erre a rendszerre felparaméterezett szimulációk futtatásával. Bemutattam, hogy szimulációm a korábbi verzióknál a CALPHAD számításokból eredő oldékonysági görbére jobban illeszkedő oldékonysági értékeket ad. Bemutattam, hogy a rendszerben az oldékonyságra a részecskeméret hatással van. Majd bemutattam, hogy kódom képes korábbi mérési tapasztalatok helyes reprodukálására, illetve hogy a keletkező nanorészecskék szerkezetére a kodepozíciós sebesség is hatással van. Mindezek után egy valós, kísérletben tapasztalható jól dokumentált jelenséggel, az oxigén indukált felületi segregációval foglalkoztam. Beláttam, hogy programom képes a jelenség szimulációjára. Továbbá előrevetítettem, hogy a TDK dolgozatomban feltárt jelenségek és új szimulációs eredmények a jövőben kísérleti ellenőrzésre kerülnek,

hogy a modell által feltárt új fizikai jelenségek, és ezáltal az új modell is kísérletileg validált legyen.