

1. függelék: Saját munka és eredmények

Kustár Gergely

* Saját fejlesztésű szimulációs kódom segítségével réz-ezüst kétkomponensű nanorendszerek fázisdiagram-pontjainak kimérése, a kapott fázispontok összevetése ismert CALPHAD oldékonysági görbékkel, korábbi SKMF szimulációs eredményekkel.
- Az új, fejlesztett szimuláció a korábbiaknál az irodalmi CALPHAD görbéhez jobban illeszkedő oldékonysági értékeket mutat réz-ezüst rendszerben.

* A szimulációs kód segítségével a réz-ezüst nanorészecske méretének, az oldékonyságra való hatásának vizsgálata.
- Szimulációs eredményekkel támasztottam alá a tényt, miszerint kétkomponensű nanorészecskékben az alkotók egymásra vett oldékonyságát befolyásolja a részecske mérete, méghozzá minél kisebb a részecske annál nagyobb az oldékonyság ugyanolyan hőmérsékleten.

* A szimulációs kód növekedési funkciójának bekapcsolásával a növesztési sebesség hatásának vizsgálata réz-ezüst rendszerekben. A kapott szimulációs eredmények összevetése korábban publikált kísérleti eredményekkel.
- A szimulációs eredmények alapján a méret mellett a növesztési sebesség is hatással van a kialakuló nanorészecske szerkezetére. Ez egy eddig nem figyelembevett jelenség, ennek kísérleti ellenőrzése a jövőben megtörténik, de ez túlmutat a dolgozatom keretein.

* Réz-ezüst rendszerre jellemző, valós kísérleti körülmények között bekövetkező jelenségek szimulációja. Az oxigén-indukált felületi szegregáció jelenségének számítógépes modellezése.
- Bemutattam, hogy programom képes kísérletileg dokumentálni, nem külön erre a célra létrehozott atomisztikus szimulációs kódokban korábban még nem szimulált jelenségeket is szimulálni, megfelelő paraméterezés mellett.

Összességében bemutattam, hogy kódom a továbbiakban alkalmas réz-ezüst nanorendszerek pontos szimulációjára, a továbbiakban akár gyártástechnikában is használható, konkrét nanorészecske előállítási körülmények mellett a részecske keletkező szerkezetének jóslására.