

Saját eredmények

Kustár Gergely

TDK munkám során réz-ezüst kétkomponensű nanorészecskéket vizsgáltam. A diplomadolgozatomban fejlesztett sztochasztikus kinetikus átlagtér modellt, és az ahhoz tartozó szimulációs kódrendszer segítségével. A modell képes a nanorészecskében növekedés közben, hordozó és környezet jelenlétében lezajló jelenségek szimulálására.

Kutatásom célja az volt, hogy az általános érvényességű modellt alkalmazva, a paramétereket a réz-ezüst rendszerhez illesztve szimulációkat végezzek, az eredményeket összevetsem valós mérési, vagy CALPHAD számításokból származó eredményekkel.

Tudományos vizsgálódásom gyümölcsét az alábbi pontokban foglalom össze.

- Szimulációs eredményekkel támasztottam alá, hogy a diplomamunkám során fejlesztett modell a korábbi SKMF eredményeknél a CALPHAD számításokhoz, ezzel valós mérési értékekhez jobb illeszkedést mutat.
- Demonstráltam, hogy a nanorészecske mérete is hatással van azok egyensúlyi összetételére.
- Megmutattam, hogy a növesztés során kialakuló kétkomponensű részecske szerkezete nem csak méretüktől, hanem a kodepozíció sebességétől is függ.
- Felismertem, hogy a kialakuló részecske szerkezetére a környezet minősége is hatással van. Illetve, hogy a réz-ezüst rendszerekben ismert oxigén indukált felületi szegregáció jelenségét is képes a modell helyesen visszaadni.