

Válaszok Dr. Szabó György bíráló észrevételeire, az általa feltett kérdésekre

Mindenekelőtt nagyon köszönöm Dr. Szabó György, az MTA Doktora, gondos bírálói munkáját, elismerő szavait és pozitív bírálói véleményét.

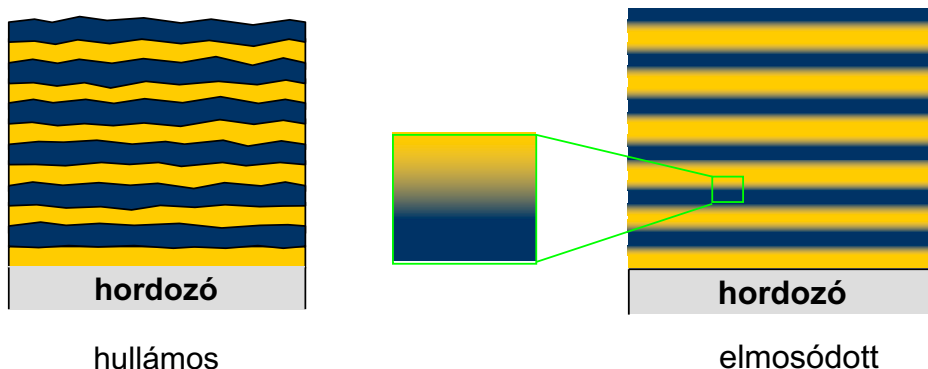
Feltett kérdéseire, észrevételeire a következő válaszokat adom:

„A magyar nyelven, könnyen olvasható stílusban írt dolgozat bevezetőjében Erdélyi Zoltán vázolja a vizsgált jelenségek összetettségét és a kitűzött kutatási célokat, majd ismerteti a számszerű elemzéshez nélkülözhetetlen matematikai modelleket és ezek továbbfejlesztett változatait. A dolgozat olvasója képet kap a modellek jóslatairól, a jóslt eredmények igazolásához választott kísérleti módszerekről illetve modell anyagokról. Az elméleti és kísérleti eredményeket, illetve azok egyezését szép ábrák illusztrálják. A dolgozat fejezeteinek végén a szerző világosan vázolja a saját eredményeit. Mindössze egy kritikai megjegyzésem van: az oldalankénti átlagosan egy elütés számát lehetett volna csökkenteni.”

Sajnálom, hogy többszöri újraolvasás ellenére sajtóhibák maradtak a dolgozatban, amiért megértést kérek.

„Milyen módszerekkel lehet számszerűsíteni a felület menti és az arra merőleges diffúziót és részecskeáramlást a matematikai modellekben és a kísérletekben?”

Egy réteges szerkezet esetében, a határfelületet alapvetően két mennyiséggel szokták jellemezni: hullámosság és elmosódottság, ahogyan az az alábbi ábrán látható.



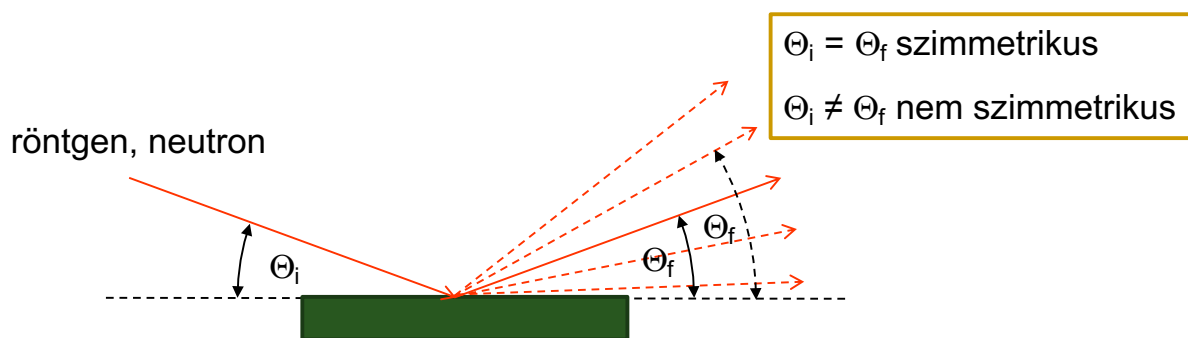
Természetesen hullámosság és elmosódottság egyszerre is fellephet. A hullámosság változásában felületmenti, míg az elmosódottság változásában az arra merőleges diffúzió játszik főszerepet. Ennek tanulmányozására pl. háromdimenziós, atomisztikus modellek, mint pl. kinetikus Monte Carlo, adnak lehetőséget. A hullámosság és az elmosódottság mértékének, illetve időbeli fejlődésének számszerűsítésére pedig matematikai modelleket

használnak. Például egyszerű esetben szinuszos hullámosságból indulnak ki, amelynek egyrészt a hullám amplitúdója $A(t)$, másrészt hullámhossza λ a karakterisztikus jellemzője. Ennek az alaknak az időbeli fejlődése (határfelület vastagsága) a [J.M. Roussel et al., PHYSICAL REVIEW B 73, 085403 2006]

$$h(x, t) = \frac{A(t)}{2} \left[1 + \sin \left(\frac{2\pi}{\lambda} x \right) \right] + B(t) \eta(x)$$

függvénnyel írható le, ahol $B(t)$ az elmosódottság mértékét írja le és független λ -tól, míg $\eta(x)$ egy $\frac{1}{2}$ középértékű véletlen szám a $[0,1]$ tartományban. Így $A(t)$ és $B(t)$ változása számszerű információt ad a felületmenti és az arra merőleges diffúzióról.

Mérésekben szintén lehetőség van a hullámosság és elmosódottság különválasztására, így azok időbeli változásának vizsgálatára. Egyrészt pl. atompróba tomográfia (APT) módszerével már három dimenzióban tárhatjuk fel az anyagot lényegében atomi felbontással. Az értekezésben is található ilyen mérés, pl. a határfelület élesedésének APT-s vizsgálatát bemutató részben. Így elviekben ott is elvégezhető az előzőekben bemutatott analízishez hasonló kiértékelés. A röntgen és neutron reflektometriás módszerek esetében gyakoribb azonban a szimmetrikusan (spekuláris) és a nem szimmetrikusan reflektált (diffúz) részek analízise. A szimmetrikus rész információt hordoz a határfelület szélességéről, de nem tudunk különbséget tenni, hogy ez a szélesség milyen mértékben származik a hullámosságból és milyen mértékben az elmosódottságból. A Bragg-csúcs diffúz kiszélesedése viszont a hullámosságból származik. A kiszélesedés mértéke a hullámosság korrelációs hosszával arányos, lényegében azt mondhatjuk, hogy annak „átlagos” hullámhosszával.



Reflektometriai mérés sematikus vázlata



Hullámosság korrelációs hosszának és a Bragg-csúcs diffúz (transzverzális, q_x , irányú) kiszélesedésének sematikus ábrája.

„A gömbhéjas szerkezeteknél a héjak különböző mértékű tágulása hézagok keletkezéséhez vezethet. Milyen hatása van ennek, illetve az ezzel ellentétes folyamatnak? Hogyan befolyásolják a jelenségeket a görbületi sugarak és a rétegvastagságok?

A héjak különböző mértékű tágulása mechanikai feszültségek felépüléséhez vezet. Ennek egyik eredménye az lehet, hogy hézagok keletkeznek, aminek következtében a felépült feszültségtér relaxálódni tud. Annak függvényében, hogy a felszakadás, milyen mértékű, tönkre is mehet a minta, egyszerűen leválik a rétegszerkezet a hordozóról vagy a rétegek elválnak egymástól. Ekkor egyébként, ha addig nem is vennénk ezt észre, az APT mérések során a minta „lerepül” a tűről. Ha ez nem történik meg, mert a feszültségtér nem elég nagy ahhoz, hogy hézagok képződjenek, vagy a rétegek különböző tágulása éppen segít a rétegépítés során „beépült” feszültségek relaxációjában, akkor a minta szerkezetileg stabilabb lehet és a feszültségtér visszahatása a diffúzióra kisebb mértékű lesz.

A görbületi sugarak és a rétegvastagságok jelentősen befolyásolják a jelenségeket. Az T5.1 közleményben megmutattuk, hogy a modellünk végtelen görbületi sugarak esetében Stephenson sík geometriára felírt modelljével válik azonossá. Sík geometriában pedig pl. az értekezésben is tárgyalt A/B/A (vagy B/A/B) hármás réteg teljesen szimmetrikus, így ebben az esetben nem kaphatunk eltérő fázisnövekedési gyorsaságot a két határfelületnél, ahogyan azt gömbi geometriában kaptuk. Ezt ellenőriztük is, és valóban azonos ütemben növekszik a fázis a két határfelületnél, rétegtől függetlenül, amit APT mérések is igazoltak [G. Schmitz et al. Acta Materialia, 57(9):2673 – 2683, 2009]. Noha részletes vizsgálatokat nem folytattunk, néhány modellszámolást futtattunk, amelyek azt mutatták, hogy ha a T5.1 közleményben és az értekezésben is szereplő 30 nm-es belső sugár helyett 300 nm-t választunk, de ugyanúgy 3x15 nm hármásréteget építünk fel, akkor már gyakorlatilag nem figyelhető meg az összetétel profilon a fázis eltérő ütemű növekedése a két határfelületnél. Valószínűleg a 300 nm-es belső sugár esetében is növelhetnénk az aszimmetriát, ha növelnénk a középső réteg vastagságát, mivel összességében az sejthető, hogy minél nagyobb a külső és a belső határfelületek görbületi sugarainak az aránya, annál inkább várható, hogy a fázis nem azonos ütemben növekszik a két határfelületnél. Talán annyit érdemes még megjegyezni, hogy APT mérések esetében azonban korlátozott a minta külső görbületi sugarának mérete, ami behatárolja a vizsgálható mintageometriai lehetőségeket.

Debrecen, 2016. szeptember 27.

.....
Erdélyi Zoltán