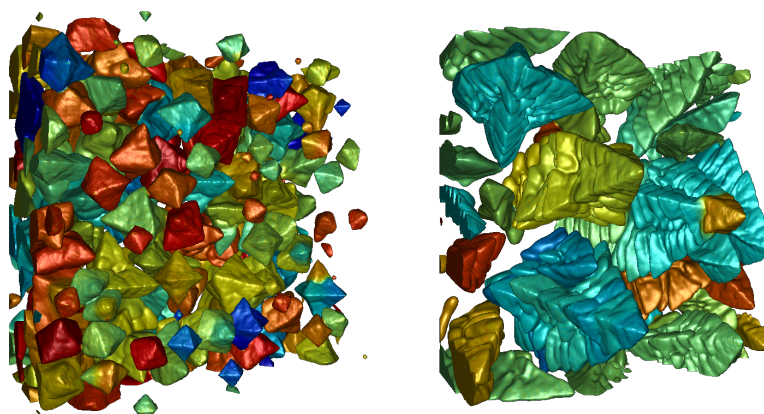


dc_338_11

A polikristályos megszilárdulás fázismező modellje - nukleáció és növekedés

MTA doktori értekezés tézisei

Pusztai Tamás



Magyar Tudományos Akadémia
Wigner Fizikai Kutatóközpont
Szilárdtest-fizikai és Optikai Intézet

2013. április 8.

dc_338_11

A kutatások előzménye

A legtöbb technikai szempontból fontos anyag kristályos szerkezetű. A kristályos anyagok előállítása során fontos szerepet játszik az olvadék állapotból történő megszilárdulás valamilyen formája. A megszilárdulás *nukleációval (csíráképződéssel)* kezdődik, és az ennek során kialakuló, kritikus méretet meghaladó heterofázisú fluktuációk, kristályszemcsék *növekedésével* folytatódik. A megszilárdulás ezen két fő lépése során alakul ki a fizikai tulajdonságokat nagyban meghatározó mikroszerkezet, azaz a polikristályos anyagot alkotó kristályszemcsék méret-, alak- és összetétel-eloszlása. Ettől függenek például a mechanikai és mágneses tulajdonságok, de a korrózióállóság is.

A mikroszerkezet kialakulásának megértése és kontrollálása tehát tudományos és gyakorlati szempontból is óriási jelentőségű. Bár az emberiség pl. a fémeszközök előállítása során több ezer éves tapasztalatra tett szert, a kialakult atomi- és mikroszerkezetek leírása, továbbá az előállítás során végbemenő folyamatok megértése nagyjából száz éve, az alapvető szerkezetkutatási módszerek felfedezésével (pl. röntgendiffrakció) kezdődött meg. Az azóta kifejlesztett elméleteknek és kísérleti technikáknak köszönhetően anyagtudományi ismereteink folyamatosan és gyorsan bővülnek. Az elméleti módszerek fejlődésének nagy lökést adott számítógépek sebességének legutóbbi időkben tapasztalható robbanásszerű növekedése. Olyan számításiigényes feladatok váltak megoldhatóvá amelyekről ezt korábban elképzelni sem lehetett. Manapság már lehetséges egy adott ötvözet termodinamikai tulajdonságainak, fázisdiagramjának számítógépen történő meghatározása [CALPHAD módszerek, pl. THERMOCALC], az anyag elektronszerkezetének kiszámítása [kvantumkémiai programok, pl. VASP], vagy akár a megszilárdulási folyamatok atomi szintű modellezése [molekuladinamika programok, pl. GROMACS].

A megszilárdulási folyamatok leírására többféle modell is használható. Az atomi szintű folyamatok jól modellezhetők *molekuladinamika* programokkal, amelyek az atomok vagy molekulák közti potenciál felhasználásával számot adnak a rendszer összes atomjának helyéről és mozgásáról [1, 2]. Ebből a részletességből adódóan azonban a molekuladinamika erősen méret- és időlimitált; elsősor-

ban nanoméretű objektumok, ill. nanoskálán végbemenő folyamatok, pl. szilárd-folyadék határfelület tulajdonságainak és a csíráképződés folyamatának modellezésére alkalmas. Szintén atomi felbontást nyújt a kb. egy évtizede bevezetett és azóta dinamikusan terjedő *atomisztikus fázismező elmélet* (ismertebb angol néven Phase Field Crystal, azaz PFC elmélet) [3]. Ez a módszer – a molekuladinamikával ellentétben – már több nagyságrenddel hosszabb, diffúziós időskálán dolgozik, ugyanakkor még mindig atomi szintű felbontást ad. Ha atomok helyett kolloidrészecskékre alkalmazzák [4], akkor akár a mikrométeres ill. milliméteres tartományokat is elérhetővé teszi.

A polikristályos megszilárdulási formák leírása esetén az atomi szintű felbontás nem cél, sőt, a jellemzően mikrométer skálán kialakuló struktúrák hatékony leírásának érdekében kifejezetten kerülendő. Ilyenkor több atomra kiátlagolt mennyiségekkel, rendparaméterekkel dolgozhatunk. A megszilárdulási folyamatok mikrométeres skálán történő leírására kifejezetten alkalmasnak bizonyult a Fix [5], Langer [6] és mások [7, 8] által kidolgozott *fázismező elmélet*. Ez egy klasszikus térelméleti modell, amely az első- és másodrendű fázisátalakulások átlagtér elméletéből származik. A rendszer jellemzése megfelelően választott rendparaméterek segítségével történik, tulajdonságait a rendszer rendparamétereinek és azok gradienseinek segítségével felírt szabadenergiájából határozzuk meg. A fázismező elméletet sikeresen alkalmazták komplex megszilárdulási morfológiák leírására (dendritek [9, 10], celluláris frontok [9, 11], eutektikus lamellák [12], peritektikus szerkezetek [13]), de a polikristályos megszilárdulási formák általános kezeléséhez a modelltől néhány alapvető mechanizmus még hiányzott.

A fázismező modellek már kezdetben is alkalmasak voltak a túlhűtött olvadékban termikus fluktuációk hatására kialakuló kristálycsírák modellezésére. A folyadék-tartomány belsejében lezajló homogén csíráképződés [14, 15] mellett az idegen felületeken történő heterogén nukleációt is képesek voltak leírni, de csak a legegyszerűbb, 90° -os nedvesítési szögnek megfelelő, ún. no-flux határfeltétel használatával [16]. Más nedvesítési szögekkel jellemezhető felületek fázismező modellezése, azaz a gyakorlatban a homogénnál sokkal jelentősebb heterogén nukleáció hangolása kutatásaim megkezdése előtt még nem volt megoldott.

Polikristályos szerkezetek képződhetnek több, eltérő orientációjú szilárd egykris-

tály nukleációjával és növekedésével, de előfordulhat az is, hogy már a növekvő szilárd részecskén belül alakulnak ki különböző orientációjú tartományok, azaz szemcsék [17, 18]. Az egy részecskén belüli polikristályos szerkezet kialakulásának mechanizmusa a *növekedési front menti nukleáció (NFN)*. Ennek során a megszilárdulási front mentén orientációs hibák fagynak be, azaz a növekedési front mentén a növekvő kristályétől különböző orientációjú új szemcse keletkezik.

A polikristályos anyagok modellezéséhez elengedhetetlenül szükséges a kristályorientáció jellemzése. Ezt a fázismező elméleten belül eleinte az egyes részecskékhez ill. orientációkhoz tartozó külön rendparaméterek bevezetésével oldották meg [19, 20, 21]. A komplex polikristályos megszilárdulási formák kialakulásának leírásához azonban alkalmasabb egy másik megközelítés, amely az *orientációs mező* bevezetésén alapszik [22, 23, 24]. Ennek az új rendparaméternek az értelmezése eleinte két dimenzióra és csak a szilárd fázisra korlátozódott. Az orientációs mező folyadékra történő kiterjesztése lehetővé tette a véletlen orientációjú kristálymagok képződésének konzisztens szimulációját [15]. Az így kiterjesztett modell képezte a disszertációmban bemutatott, polikristályos növekedéssel kapcsolatos munkáim alapját.

Célkitűzések

Az értekezésben bemutatott munkám célja a polikristályos megszilárdulás folyamatainak megértése, és egy olyan fázismező elmélet létrehozása, amely lehetővé teszi a természetben előforduló polikristályos növekedési formák leírását. Ez részben új modellek kidolgozását, részben pedig a már meglévő modellünk továbbfejlesztését jelentette. A heterogén csíráképződés általános leírásához szükséges volt egy olyan módszer kidolgozása, amellyel a nukleáció helyeként szolgáló idegen felület tulajdonságait szabályozni lehet. Ezt a legegyszerűbb módon, a határfeltételeken keresztül, és a klasszikus elméletekben már megismert nedvesítési szög koncepciójának átvételével kívántam megvalósítani. További célom volt a növekedési front menti nukleáció mechanizmusainak a polikristályos megszilárdulási

formák kialakulásában meghatározott szerepének célzott vizsgálata a kétdimenziós fázismező modell segítségével. Ezt a már meglévő modellünk alkalmazásával, ill. az adott szögű elágazással növekvő szerkezetek leírása esetén annak kisebb módosításával kívántam elérni. Végül annak érdekében, hogy a valóságban előforduló háromdimenziós növekedési formákat is leírassuk, a fázismező modellünk, ill. annak leglényegesebb részeként az orientációs mező háromdimenziós elméletének és számítógépes modelljének kidolgozását tűztem ki célul.

Vizsgálati módszerek

A polikristályos megszilárdulás lépéseit és a megszilárdulás során kialakuló növekedési formákat fázismező modellek segítségével tanulmányoztam. A fázismező elméletekben a rendszer szabadenergiáját megadó szabadenergia-funkcionált egy vagy több rendparaméter segítségével fejezzük ki. Amennyiben a rendszer egyensúlyi helyzeteit keressük, akkor a szabadenergia szélsőértékét adó rendparaméter-eloszlásokat kell meghatározni, ha viszont a rendszer időfejlődésének leírása a cél, akkor a rendparaméterekre vonatkozó, a szabadenergia-funkcionálból megfelelő módon származtatott mozgásegyenleteket kell megoldanunk. Mindkét eset parciális differenciálegyenletek megoldására vezet, de az alkalmazott módszereket illetően a két eset alapvetően különbözik.

Az egyensúlyi helyzetek, azaz az időfüggetlen megoldások meghatározása elliptikus differenciálegyenletek megoldását igényli. Egyszerű esetekben – pl. a sík, egyensúlyi szilárd folyadék határreteg esetén – a megoldás analitikusan is meghatározható. Bonyolultabb problémák – pl. az értekezésemben a heterogén csíráképződéssel foglalkozó részben az adott nedvesítési szöghöz tartozó kritikus méretű kristálycsíra meghatározása – azonban csak numerikus módszerekkel vizsgálhatók. Ezeket a feladatokat a Matlab programozási környezet [MATLAB] parciális differenciálegyenlet csomagjának segítségével, annak beépített algoritmusait használva oldottam meg. Ezek a számítások nem időigényesek, egy hengerszimmetrikus háromdimenziós, azaz egy két dimenzióban kezelhető rendszer egyensúlyi helyzete egyetlen számítógépen is néhány pár perc alatt meghatározható.

Azokban az esetekben, amikor a rendszer időfejlődésének tanulmányozása volt a cél – azaz a dolgozatom teljes növekedéssel foglalkozó részében – egy csatolt, nemlineáris, parabolikus differenciálegyenlet-rendszer megoldására volt szükség. Ezekhez a feladatokhoz csoportunkban kifejlesztett C nyelvű programokat használtam, amelyek a legegyszerűbb, de jól párhuzamosítható véges differencia módszerrel, explicit időléptetéssel működnek. Annak érdekében, hogy ezeket a meglehetősen számításigényes szimulációkat megfelelő méret- és időskálán, ill. megfelelő számban tudjuk elvégezni, egy azóta is folyamatosan bővülő számítógépfürtöt építettem, és a programjainkat párhuzamosítva alkalmassá tettem a számítógépfürt által megsokszorozott számítási teljesítmény kihasználására. A polikristályos növekedés szimulációi két dimenzióban tipikusan 10-40 számítógépen néhány órától néhány napig, míg a három dimenzióban már 100-200 számítógépen pár naptól akár több hétig is futottak.

Összefoglalás, tézispontok

Az értekezésben bemutatott munkám célja egy olyan modell létrehozása volt, amely lehetővé teszi a természetben előforduló komplex polikristályos alakzatok kialakulásának leírását. Ehhez a modellnek tartalmaznia kell a megszilárdulási folyamatok első két fő lépésének, a szilárd anyag nukleációjának és növekedésének főbb mechanizmusait. Munkámat arra a csoportunkban kifejlesztett kétdimenziós polikristályos fázismező modellre alapoztam, amely ezeknek a kívánalmaknak már részben eleget tett. A modell képes volt a homogén nukleáció kezelésére: az új részecskék a modellben bevezetett orientációs rendparaméternek köszönhetően már véletlen orientációval jöhettek létre, azaz a modell le tudta írni a különböző orientációjú kristályszemcsék növekedésével és felütközésével keletkező polikristályos anyagokat. A fázismező elmélet jól kezelte a diffúziós instabilitásokat, amelyek szerepe alapvető fontosságú a dendritek ill. egyéb mintázatok kialakulásában. Nem volt azonban még lehetőség a homogén nukleációnál a gyakorlatban sokkal dominánsabb heterogén nukleáció általános modellezésére. Hiányzott még azoknak a felületi nukleációs mechanizmusoknak a leírása is, amelyek során a polikristályos szerkezet már a növekvő részecskéken belül kialakul. A teljes álta-

lánosság érdekében szükséges volt az orientációs mező – és így az egész polikristályos modell – kiterjesztésére három térdimenzióra is.

Munkám során ezeket a modelltől még hiányzó elemeket dolgoztam ki lépésről lépésre. Végeredményül egy olyan modellhez jutottam, amely különösen alkalmas számos, kísérletekben megfigyelhető komplex megszilárdulási forma leírására.

Az értekezés főbb tudományos eredményeit a következő tézispontokban foglalom össze:

1. Meghatározó szerepem volt egy olyan fázismező elmélet kidolgozásában, amely lehetővé teszi a különböző nedvesítési tulajdonságokkal rendelkező felületek kezelését és így a heterogén nukleáció általános modellezését. Ezt a határfeltételeken keresztül, egy alkalmas felületi függvény használatával („A” modell), a fázismező felületi értékének rögzítésével („B” modell) vagy a fázismező gradiensének felületre merőleges komponensének előírásával („C” modell) értük el. A javasolt három határfeltétel nukleációs tulajdonságait a kritikus méretű kristálycsíra meghatározásával tanulmányoztam. Megoldottam a megfelelő Euler-Lagrange egyenleteket a három modell szerinti határfeltételek mellett, majd a megoldásokhoz tartozó képződési szabadenergiák kiértékelésével meghatároztam a nukleációs gátmagasságokat. A kapott eredményeket összehasonlítottam a heterogén nukleáció klasszikus elméletének eredményeivel. Megállapítottam, hogy az „A” modell a klasszikus elmélettel jó egyezést ad, míg a „B” és „C” modellek nemklasszikus viselkedést mutatnak. Az utóbbi két modell esetén megmutattam, hogy a kontroll paramétereik egy tartományában a nukleációs gát eltűnik, a felületeken a növekedés magától beindul, azaz a felület spinodális viselkedést mutat [PRL2007, JPCM2008, PRB2009].
2. A kétdimenziós polikristályos fázismező modellel polimer vékonyrétegek kristályos szennyezők jelenlétében történő megszilárdulását modelleztem úgy, hogy a szimulációs tartományban a szennyezőknek megfelelő, véletlenszerű eloszlású pontokban az orientációs mező értékét rögzítve *orientációt rögzítő (pinning) centrumokat* hoztam létre. Azt tapasztaltam, hogy a szennyezők jelenléte nélkül fejlődő, szabályos dendrites egykristályok he-

lyett ilyenkor rendezetlen polikristályos formák, „szédelgő” dendritek nőnek. A szimulációs eredmények nagy hasonlóságot mutattak a munkát motíváló kísérletileg megfigyelt morfológiákkal. Azonosítottam a polikristályos növekedés és a rendezetlenség kialakulásának mechanizmusát: a dendritcsúc és a rögzített orientációjú idegen részecske kölcsönhatása eredményeként a dendrit csúcsában egy új szemcsehatár ill. szemcse alakul ki, és a dendrit az új szemcsének megfelelő irányban nő tovább [NMAT2003, NMAT2004, JPCM2004].

3. Megfigyeltem, hogy az 2. tézispontban leírt polikristályos, rendezetlen dendrites szerkezetet az orientációs mobilitás értékének csökkentésével tiszta anyagban is el lehet érni. A polikristályos szerkezet és a rendezetlenség kialakulásának módja az előző tézispontban tárgyalthoz hasonló: a növekedési front mentén új, megváltozott orientációjú szemcsék születnek, amelyek már nem az eredeti irányban nőnek tovább. A szemcsehatárok keletkezésének oka az, hogy a megszilárdulási front előtti rendezetlen folyadék a csökkentett orientációs mobilitás miatt már nem mindig képes a növekvő kristály orientációját felvenni, azaz a szerkezetbe orientációs hibák fagynak be. Mindkét mechanizmust *növekedési front mentén lezajló nukleációként (NFN)* azonosítottam, amelynek során nem új részecskék, hanem a részecske peremén új kristályszemcsék keletkeznek. Az előző tézispontban említett mechanizmust az idegen részecskék szerepe miatt az NFN heterogén, az ebben a tézispontban említett mechanizmust pedig az NFN homogén módjaként különböztettem meg [NMAT2004, JPCM2004].
4. A 3. tézispontban tárgyalt NFN egy újabb homogén módját állítottam elő az orientációs mező szabadenergia-járulékanak módosításával oly módon, hogy abban egy előre meghatározott orientációs különbség értéknél lokális minimumot hoztam létre. Ezzel elértem, hogy az orientációs hibák nem véletlenszerűen, hanem szabályozott módon, a kitüntetett értéknek megfelelően fagynak be. Ezek az orientációs hibák a további növekedés során adott szögű elágazásokat okoznak. Az NFN különböző módjainak segítségével sikeresen modelleztem az első és második kategóriájú szferolitok, ill. egyéb polikristályos növekedési formák széles skáláját [JPCM2004, PRE2005,

PM2006].

5. Kidolgoztam a háromdimenziós polikristályos fázismező elméletet. Az orientációs mező kezelésére nem a szokásos Euler-szögeket, hanem a matematikailag sokkal jobban kezelhető kvaterniókat használtam. Az orientációs mező szabadenergia-járulékanak kifejezésekor egy ésszerű közelítés alkalmazásával sikerült az egyenleteket ebben a kétdimenziósnál lényegesen bonyolultabb esetben is egyszerű formában megadni. Így az irodalomban elsőként, egy rendkívül elegáns modellhez jutottam [EPL2005, MSEA2005, JPCM2008].
6. A háromdimenziós polikristályos fázismező modellemmel sikeresen reprodukáltam a kétdimenziós modellnél megfigyelt növekedési formákat. Modelleztem több eltérő orientációval nukleált szemcse növekedését és felütöközését. A kétdimenziós modellhez hasonlóan „szédelgő dendriteket” növesztettem orientációs pinning centrumok lerakásával ill. az orientációs mobilitás csökkentésével. Három dimenzióban is sikeresen növesztettem első és második kategóriás szferolitokat, továbbá nagy térbeli és időbeli méretskálán modelleztem az Al-Ti ötvözetben irányított megszilárdulás során fellépő, oszloposról ekvixiális növekedésre történő átmenet (elterjedt angol néven: Columnar to Equiaxed Transition, CET) jelenségét [EPL2005, JPCM2008].

Az eredmények gyakorlati hasznosulása

A disszertációmban tárgyalt munka célja a polikristályos megszilárdulás mechanizmusainak megértése volt, ezért az elvégzett munka alapkutatásnak tekinthető. Az eredmények és a kifejlesztett modellek azonban közel állnak a gyakorlati felhasználhatósághoz. A mikroszerkezet jóslása ill. kontrollálása olyan gyakorlati jelentőséggel bír, hogy nagy igény van az olyan módszerek iránt, amelyek ebben segítséget nyújthatnak. Ezt bizonyítják azok a nemzetközi projektek, amelyekbe résztvevőként meghívást kaptunk és amelyek egy részében a magyar csoport témavezetője is voltam. Ezek mindegyike újabb, jobb tulajdonságú anya-

gok kifejlesztésével kapcsolatos. Az energiafelhasználás, a környezetszennyezés és a CO₂ emisszió csökkentése érdekében járműveink tömegét csökkenteni kell, amelynek egyik módja az alkatrészekben szokásosan használt acél vagy nikkelt ötvözetek kiváltása könnyebb, Al és Mg alapú ötvözetekkel ill. nanokompozit anyagokkal [EXOMET]. Mikroszerkezet szimulációim eredményeit felhasználták egy olyan projektben is, amelyben a korábbinál sokkal könnyebb, magasabb hőmérsékleten működőképes Al-Ti alapú repülőgép-turbinalapátot fejlesztettek ki [IMPRESS]. Más szimulációim az acéleszközök gyártásának optimalizálását segítik [COMET-K2]. Egy adott anyag mechanikai tulajdonságai általában javulnak, ha az azt felépítő kristályszemcsék méretét csökkentjük és eloszlásukat egyenletesebbé tesszük [EXOMET, GRADECET], amit esetenként a kristálycsírák képződését elősegítő idegen részecskék olvadékba juttatásával és egyenletes eloszlásával érhetünk el [EXOMET, METCOMP]. Modelljeinkkel segítettük a különleges optikai tulajdonságokkal bíró ún. metaanyagok eutektikus önszerveződésen alapuló előállítását [ENSEMBLE], továbbá lágymágneses anyagok fázisszelekció kontrollálásán keresztül való javítását [MAGNEPHAS], melynek kapcsán részt veszünk a Nemzetközi Űrállomáson a elvégzendő kísérletek kiértékelésében.

A tézispontokhoz kapcsolódó publikációk

- [EPL2005] T. Pusztai, G. Bortel, L. Gránásy. “Phase field theory of polycrystalline solidification in three dimensions”. In: *EPL (Europhysics Letters)* 71 (2005), p. 131.
- [JPCM2004] László Gránásy, Tamás Pusztai, James A. Warren. “Modelling polycrystalline solidification using phase field theory”. In: *Journal of Physics: Condensed Matter* 16 (2004), R1205.
- [JPCM2008] Tamás Pusztai, György Tegze, Gyula I. Tóth, László Környei, Gurvinder Bansal, Zhungyun Fan, László Gránásy. “Phase-field approach to polycrystalline solidification including heterogeneous and homogeneous nucleation”. In: *Journal of Physics: Condensed Matter* 20 (2008), p. 404205.

- [MSEA2005] T. Pusztai, G. Bortel, L. Gránásy. “Phase field modeling of polycrystalline freezing”. In: *Materials Science and Engineering: A* 413–414 (2005), pp. 412–417.
- [NMAT2003] László Gránásy, Tamás Pusztai, James A. Warren, Jack F. Douglas, Tamás Börzsönyi, Vincent Ferreiro. “Growth of ‘dizzy dendrites’ in a random field of foreign particles”. In: *Nature Materials* 2 (2003), pp. 92–96.
- [NMAT2004] László Gránásy, Tamás Pusztai, Tamás Börzsönyi, James A. Warren, Jack F. Douglas. “A general mechanism of polycrystalline growth”. In: *Nature Materials* 3 (2004), pp. 645–650.
- [PM2006] L. Gránásy, T. Pusztai, T. Börzsönyi, G. I. Tóth, G. Tegze, J. A. Warren, J. F. Douglas. “Polycrystalline patterns in far-from-equilibrium freezing: a phase field study”. In: *Philosophical Magazine* 86 (2006), pp. 3757–3778.
- [PRB2009] James A. Warren, Tamás Pusztai, László Környei, László Gránásy. “Phase field approach to heterogeneous crystal nucleation in alloys”. In: *Phys. Rev. B* 79 (2009), p. 014204.
- [PRE2005] László Gránásy, Tamás Pusztai, György Tegze, James A. Warren, Jack F. Douglas. “Growth and form of spherulites”. In: *Phys. Rev. E* 72 (2005), p. 011605.
- [PRL2007] László Gránásy, Tamás Pusztai, David Saylor, James A. Warren. “Phase Field Theory of Heterogeneous Crystal Nucleation”. In: *Phys. Rev. Lett.* 98 (2007), p. 035703.

Általános irodalomjegyzék

- [1] B. J. Alder, T. E. Wainwright. “Studies in Molecular Dynamics. I. General Method”. In: *J. Chem. Phys.* 31 (1959), p. 459.
- [2] A. Rahman. “Correlations in the Motion of Atoms in Liquid Argon”. In: *Phys. Rev.* 136 (1964), A405–A411.

- [3] K. R. Elder, Mark Katakowski, Mikko Haataja, Martin Grant. “Modeling Elasticity in Crystal Growth”. In: *Phys. Rev. Lett.* 88 (2002), p. 245701.
- [4] Sven van Teeffelen, Rainer Backofen, Axel Voigt, Hartmut Löwen. “Derivation of the phase-field-crystal model for colloidal solidification”. In: *Phys. Rev. E* 79 (2009), p. 051404.
- [5] G. J. Fix. In: *Free Boundary Problems: Theory and Applications*. Ed. by M. Primicerio A. Fasano. Vol. 79. Boston: Pitman, 1983, pp. 580–589.
- [6] J. S. Langer. “Instabilities and pattern formation in crystal growth”. In: *Reviews of Modern Physics* 52 (1980), pp. 1–28.
- [7] J. B. Collins, H. Levine. “Diffuse interface model of diffusion-limited crystal growth”. In: *Phys. Rev. B* 31 (1985), pp. 6119–6122.
- [8] G. Caginalp. “Surface tension and supercooling in solidification theory”. In: *Applications of field theory to statistical mechanics*. Ed. by L. Garrido. Berlin: Springer, 1984, pp. 216–226.
- [9] Ryo Kobayashi. “Modeling and numerical simulations of dendritic crystal growth”. In: *Physica D* (1993), pp. 410–423.
- [10] A.A. Wheeler, B.T. Murray, R.J. Schaefer. “Computation of dendrites using a phase field model”. In: *Physica D* 66 (1993), pp. 243–262.
- [11] Blas Echebarria, Roger Folch, Alain Karma, Mathis Plapp. “Quantitative phase-field model of alloy solidification”. In: *Phys. Rev. E* 70 (2004), p. 061604.
- [12] Alain Karma. “Phase-field model of eutectic growth”. In: *Phys. Rev. E* 49 (1994), pp. 2245–2250.
- [13] J. Taden, B. Nestler, H.J. Diepers, I. Steinbach. “The multiphase-field model with an integrated concept for modelling solute diffusion”. In: *Physica D* 115 (1998), pp. 73–86.

- [14] A. Roy, J. M. Rickman, J. D. Gunton, K. R. Elder. “Simulation study of nucleation in a phase-field model with nonlocal interactions”. In: *Phys. Rev. E* 57 (1998), pp. 2610–2617.
- [15] László Gránásy, Tamás Börzsönyi, Tamás Pusztai. “Nucleation and Bulk Crystallization in Binary Phase Field Theory”. In: *Phys. Rev. Lett.* 88 (2002), p. 206105.
- [16] Mario Castro. “Phase-field approach to heterogeneous nucleation”. In: *Phys. Rev. B* 67 (2003), p. 035412.
- [17] J. H. Magill. “Spherulites: A personal perspective”. In: *J. Mater. Sci.* 36 (2001), pp. 3143–3164.
- [18] G. Ryschenkow, G. Faivre. In: *J. Non-Cryst. Solids* 87 (1988), p. 221.
- [19] L.-Q. Chen, W. Yang. “Computer simulation of the domain dynamics of a quenched system with a large number of nonconserved order parameters: The grain-growth kinetics”. In: *Phys. Rev. B* 50 (1994), pp. 15752–15756.
- [20] D. Fan, L.-Q. Chen. “Computer simulation of grain growth using a continuum field model”. In: *Acta Materialia* 45 (1997), pp. 611–622.
- [21] I. Steinbach, F. Pezzolla, B. Nestler, M. Seeßelberg, R. Prieler, G.J. Schmitz, J.L.L. Rezende. “A phase field concept for multiphase systems”. In: *Physica D* 94 (1996), pp. 135–147.
- [22] R. Kobayashi, J. A. Warren, W. C. Carter. “Vector-valued phase field model for crystallization and grain boundary formation”. In: *Physica D* 119 (1998), pp. 415–423.
- [23] R. Kobayashi, J. A. Warren, W. C. Carter. “A continuum model of grain boundaries”. In: *Physica D* 140 (2000), pp. 141–150.
- [24] J. A. Warren, R. Kobayashi, W. C. Carter. “Modeling grain boundaries using a phase-field technique”. In: *J. Crystal Growth* 211 (2000), pp. 18–20.

Egyéb rövidítések

- [CALPHAD] *Computer Coupling of Phase Diagrams and Thermochemistry*,
<http://www.calphad.org>
- [GROMACS] <http://www.gromacs.org>
- [MATLAB] *The Language of Technical Computing*,
<http://www.mathworks.com/products/matlab>
- [THERMOCALC] *Thermo-Calc Software*, <http://www.thermocalc.com>
- [VASP] *Vienna Ab initio Simulation Package*, <http://www.vasp.at>

Projektek

- [COMET-K2] COMET K2 Project A1.1, *Numerical Investigation on Dendritic Mushy Zones*, 2009-2011
- [ENSEMBLE] EU FP7 Collaborative Project, NMP4-SL-2008-213669, *Engineered self-organised multi-component structures with novel, controllable electromagnetic functionalities*, 2008–2012
- [EXOMET] EU FP7 Large-Scale Integrating Collaborative Project, NMP-2011-LARGE-5-280421, *Physical processing of molten light alloys under the influence of external fields*, 2012–2016
- [GRADE CET] ESA MAP Project, *Gravity dependence of columnar to equiaxed transition in peritectic Ti-Al alloys*, 2011–2014
- [IMPRESS] EU FP6 Integrated Project, NMP3-CT-2004-500635, *Intermetallic Materials Processing in Relation to Earth and Space Solidification*, 2004–2009
- [MAGNEPHAS] ESA MAP Project, *Nucleation and Phase Selection in Undercooled Melts: Magnetic Alloys of Industrial Relevance*, 2005–2009, 2011–2014
- [METCOMP] ESA MAP Project, *Metastable Solidification of Composites: Novel Peritectic Structures and In-Situ Composites*, 2005–2009