

Doktori (PhD) értekezés tézisei

**Zsugorodás által indukált repedési  
folyamatok vizsgálata diszkrét elem  
modellezéssel**

Szatmári Roland

Témavezető: Dr. Kun Ferenc



DEBRECENI EGYETEM

Fizikai Tudományok Doktori Iskola

Debrecen, 2025



# Bevezetés

A kiszáradt tómedrek alján megjelenő poligonális repedési minták-tól<sup>1</sup> a Föld és a Mars permafroszt régiójában megfigyelhető, sokszor méteres átmérőjű felszíni fragmenseken át<sup>2</sup> egészen a három dimenziós oszlopos lávaelválásokig<sup>3,4,5</sup> a természetben számos, zsugorodás által okozott repedési mintával találkozhatunk. A jelenségekört laboratóriumi körülmények között leggyakrabban úgy vizsgálják, hogy sűrű paszta hordozóra felvitt rétegét szárítják<sup>6</sup>. A paszta száradás és megszilárdulás közben zsugorodik, ami mechanikai feszültséget kelt az anyagban és ezen feszültségek feloldására jönnek létre a repedések. Kísérleti vizsgálatok rámutattak, hogy az anyag rendezetlensége miatt a zsugorodás során létrejövő repedési mintázat celluláris szerkezettel rendelkezik<sup>6</sup>. A repedező rendszer dinamikai és statisztikai jellemzőit elemezve kiderült, hogy a repedések során keletkező fragmensek területének/tömegének eloszlása lognormális függvényalakkal rendelkezik<sup>7</sup>. Ennek oka az, hogy az összefüggő repedési hálózat kialakulása után bináris fragmentáció zajlik a rendszerben, aminek a határeloszlása lognormális.

A mikroelektronikai gyártástechnológiában a hordozóra felvitt vékonyrétegek fragmentációja általában elkerülendő. Ugyanakkor a közelmúlt vizsgálatai rámutattak, hogy számos lehetőségünk van az

---

<sup>1</sup>L. Goehring et al, *Desiccation Cracks and their Patterns: Formation and Modelling in Science and Nature*, (John Wiley & Sons, 2015).

<sup>2</sup>E. Forte, et al, *Permafrost Periglac* **33** (2022).

<sup>3</sup>A. Aydin, et al, *Science* **239**, 471-476 (1988).

<sup>4</sup>A. Lamur, et al, *Nat. Commun.* **9** (2018).

<sup>5</sup>B. Bourdin, et al, *Phys. Rev. Lett.* **112**, 014301 (2014).

<sup>6</sup>A. Nakahara, et al, *J. Stat. Mech.* **2006**, P07016 (2006).

<sup>7</sup>S. Ito, et al, arXiv:2009.13691 (2020).

egyedi repedések<sup>8</sup>, illetve a teljes repedési mintázat szerkezetének<sup>6</sup> kontrolljára. Az egyik ilyen vizsgálatban sűrű kalcium-karbonát és magnézium-hidroxid-karbonát pasztákat mechanikailag gerjesztettek, majd azt tapasztalták, hogy a gerjesztéssel bevitt képlékeny alakváltozás és sűrűségfluktuációk hatására anizotróp repedési mintázat jelenik meg az anyagban a szárítás során<sup>6</sup>. A paszta - szemcsés szerkezetéből adódóan - egy rendezetlen rendszer, amely száradás során a celluláris repedési mintázatot preferálja. Ám a kezdeti mechanikai perturbáció által okozott plasztikus deformáció a lokális teherbíróképességben irányfüggést okoz, s ennek hatása felülmúlja a rendezetlenségét, így a fragmentáció kezdeti fázisában a gerjesztés irányára merőlegesen indultak meg repedések<sup>9</sup>. Az idő előrehaladtával újabb, a már meglévő repedésekkel párhuzamos repedések jelentek meg mindaddig, míg a repedések közötti távolság a paszta rétegvastagságának nagyságrendjébe nem esett. Ezek után másodlagos repedések szegmentálták a hosszú, téglalap alakú fragmentumokat kisebb darabokra. Tehát a tapasztalat azt mutatja, hogy az anizotrópia bevitele az anyagi jellemzőkbe lehetőséget ad repedési mintázatok szerkezetének kontrolljára, aminek számos alkalmazása lehetséges a mikroelektronikai gyártástechnológiában<sup>8</sup>.

A lítium-ion akkumulátorok (LIB) kritikus szerepet játszanak a globális CO<sub>2</sub>-kibocsátás csökkentésére irányuló erőfeszítésekben, így kapacitásuk és élettartamuk növelése az energetikai iparág egyik fontos kihívása<sup>10,11</sup>. A Li-ion-akkumulátorok élettartamát korlátozó tényezők között az egyik legjelentősebb az elektródák anyagának

---

<sup>8</sup>K. Nam, et al, *Nature* **485**, 221-224 (2012).

<sup>9</sup>S. Kitsunezaki, et al, *Europhys. Lett.* **114**, 64002 (2016).

<sup>10</sup>M. Hoffert, et al, *Science* **298**, 981-987 (2002).

<sup>11</sup>J. B. Goodenough, *Acc. Chem. Res.* **46**, 1053-1061 (2013).

repedezése<sup>12</sup>. A töltés-kisütés folyamata során a lítium be-, illetve kivándorlása térfogatváltozást idéz elő az elektródák felületi rétegeiben, ami inhomogén feszültségteret hoz létre<sup>13</sup>. Ez a mechanikai feszültség repedések keltésével relaxálódik, ami kezdetben az akkumulátor energiatárolási kapacitásának csökkenéséhez vezet, de később az akkumulátor végleges tönkremenetelét is okozhatja<sup>14</sup>. A közelmúlt laboratóriumi vizsgálatai rámutattak, hogy az akkumulátorok elektródáinak repedezése akusztikus zajt eredményezhet, így a degradációs folyamat az akusztikus jelek sorozatának mérésével nyomon követhető. Az akusztikus emissziós technika<sup>15</sup> egy ígéretes roncsolásmentes vizsgálati módszer, amely valós idejű információt szolgáltat a degradációs folyamatról. A technológia megalapozásához a repedésképződés mikroszkopikus folyamatainak mélyreható megértése elengedhetetlen.

---

<sup>12</sup>A. Mukhopadhyay, Prog. Mater. Sci. **63**, 58-116 (2014).

<sup>13</sup>V. A. Sethuraman, J. Power Sources **195**, 5062-5066 (2010).

<sup>14</sup>J. Christensen, J. Solid State Electrochem. **10**, 293-319 (2006).

<sup>15</sup>S. Schweidler, Sci. Rep. **11**, 23381 (2021).

## Célkitűzések

Doktori munkám során a kontrollált repedésképződés folyamatának mélyebb megértésére, valamint a zsugorodás által hajtott repedezés intermittens dinamikájának feltárására végeztem elméleti vizsgálatokat. Potenciális ipari alkalmazása miatt tisztázni szerettem volna, hogy az anyag rendezetlenségének és a mechanikai jellemzők kezdeti anizotrópiájának versengése hogyan befolyásolja a repedések keletkezését és a kialakuló repedési mintázat szerkezetét hordozóhoz csatolt vékonyrétegekben. Célom volt annak feltárása, hogy a kezdeti anizotrópiával rendelkező vékonyrétegekben a lamelláris repedési mintázat időfejlődése milyen fázisokon keresztül történik az anizotrópia különböző erőssége mellett. Fontos célom volt annak megértése is, hogy az anizotrópia hogyan befolyásolja a fragmensek alakját, valamint tömeg- és méreteloszlásukat.

Az akkumulátorok töltés-kisütés ciklusai alatt, valamint szerkezeti anyagok megszilárdulása közben mért akusztikus repedési zaj hátterének feltárásához célom volt a vékonyrétegben keletkező repedések terjedési mechanizmusának megértése, és ezen keresztül a repedési sokaság zajos időfejlődésének mennyiségi jellemzése. Fontos kihívás volt a repedési kaszkádok statisztikus leírása, valamint annak tisztázása, hogy a rendszer mérete és a zsugorodás sebessége hogyan befolyásolja a repedési zaj eloszlásainak skálaviselkedését. Akusztikus emissziós vizsgálatok rámutattak, hogy a zsugorodás által okozott repedések zaj eseményei hatványfüggvény méret- és időeloszlásokkal jellemezhetők, ahol az exponensek függenek a rendszer több paraméterétől. Számítógépes szimulációimmal széles skálán változtatva a rendszerméretet és a zsugorodás sebességét, szerettem vol-

na megérteni a nem univerzális viselkedés hátterét. A rendszerben megjelenő repedések időbeli és térbeli korrelációjának vizsgálatával igyekeztem feltárni az exponensek közötti kapcsolatot. Célom volt a különböző rendszerméreteknél és deformációs rátáknál kapott exponensek között olyan törvényszerűséget keresni, amely egységesen le tudja írni a zsugorodás által okozott törések zajjellemzőinek skálaviselkedését.

Vizsgálataimhoz diszkrét elem modellezést használtam, amely képes nagyszámú, szimultán terjedő repedés hatékony kezelésére. A számítógépes modellezés fontos kihívása a vizsgált réteg anizotróp mechanikai és törési jellemzőinek reprezentációja. Célom volt annak részletes elemzése, hogy a modellben a diszkretizációhoz használt véletlen rács geometriai transzformációjával hogyan kontrollálható a vizsgált rendszer mechanikai anizotrópiája.

## Vizsgálati módszerek

A heterogén anyagok törési jelenségeinek elméleti leírása a vizsgálat céljától függően különböző megközelítési módokat igényel. A legfontosabb kihívás, hogy megragadjuk a lokális fizikai jellemzők részleteit, miközben figyelembe vesszük a hosszú hatótávolságú kölcsönhatások révén kialakuló inhomogén feszültségteret is. A vizsgált fizikai rendszerek komplexitása jelentősen korlátozza az analitikus vizsgálatok lehetőségeit, így a statisztikus fizikai megközelítés elsősorban sztochasztikus számítógépes modellekre épül. A számítógépes megközelítés nagy előnye, hogy a rendszert jellemző paraméterek egymástól függetlenül változtathatók, és így könnyen feltárható szerepük a rendszer viselkedésében. Ezek a modellek általában mezoskopikus skálán építik fel a vizsgált rendszer struktúráját körültekintően meghatározott kölcsönhatásokkal a rendszer elemei között. A sztochasztikus modellek egyik legfontosabb típusa a Diszkrét Elem Modell (DEM), amely képes nagyszámú repedés egyidejű fejlődésének pontos kezelésére.

Vizsgálataim során merev hordozóra felvitt vékonyréteg zslugorodás által okozott repedési folyamatait tanulmányoztam diszkrét elem módszerrel. A DEM egy kölcsönható részecskerendszer időfejlődését a részecskék klasszikus mechanikai mozgásegyenleteinek numerikus megoldásával állítja elő. A módszer pontosan megragadja a törési folyamatok legfontosabb alkotóelemeit, és lehetővé teszi az anyag heterogenitásának hatékony reprezentációját és kontrollját. Kutatómunkám során a modellezés legfontosabb kihívása a vékonyréteg kezdeti anizotrópiájának reprezentációja volt, amelyre két lehetőséget tekintettem: mind a diszkrét elemek közötti kohézív kontaktus

erősségének irányfüggése, mind a diszkretizációra szolgáló véletlen szerkezetű poligonális rács geometriai transzformációja sikeres módszernek bizonyult.

Számolásaim során a statisztikus fizika, a fázisátalakulások elméletének, valamint a komplex rendszerek fizikájának eszköztárát használtam a kapott eredmények kiértékelésére és értelmezésére.

## Új tudományos eredmények

1. A szabályozott repedéskeltés lehetőségeinek feltárása érdekében megvizsgáltam egy hordozóhoz tapadt vékonyréteg zsugorodás okozta repedezését, amelyben az anizotrópiát a réteg kezdeti mechanikai perturbációja (például rezgés) okozza. Heterogén vékonyrétegek egy korábban bevezetett diszkrét elem modelljéből indultam ki, amelyben az anizotrópiát a kohézióv kontaktusok erősségének irányfüggésével vettem figyelembe. Számítógépes szimulációkat végeztem széles tartományon változtatva az anizotrópia erősségét.

(a) A számítógépes szimulációk során kapott mikrorepedések időbeli és térbeli sorozatának feldolgozására egy algoritmust dolgoztam ki, amellyel azonosítottam a rendszerben kialakuló makrorepedéseket. A repedési mintázat szerkezetének elemzésével meghatároztam a rendszer időfejlődésének fázisait, és feltérképeztem a rendszer fázisdiagramját az anizotrópia - károsodás síkon. Vizsgálataink megmutatták, hogy létezik egy küszöb anizotrópia, amely alatt az anyag rendezetlensége dominálja a repedések keletkezését és növekedését, ami egy sejtes repedésmintázatot eredményez, hasonlóan a teljesen izotróp esethez. Ha az anizotrópia megfelelően magas, a repedési mintázat fejlődése három jól elkülönülő fázison keresztül történik: a folyamat kezdetén erősen rendezett, párhuzamos repedések dominálnak, amelyek felszeletelik a réteget. A keresztirányú repedésképződés egy kritikus károsodási ér-

téknél kezdődik meg, ami a szeletelt területek szegmentálódását eredményezi. A repedések összeolvadása egy teljesen összefüggő repedéshálózat kialakulásához vezet, amely mentén a réteg nagyszámú darabra esik szét. Ez egy második kritikus károsodási értéknél következik be, amely után a további zsugorodás bináris fragmentációhoz vezet, tovább darabolva a fragmenseket. Megállapítottam, hogy a kezdeti anizotrópia növelésével, az egyes fázisok közötti átmenethez tartozó kritikus károsodások magasabb értékek felé tolnak [3].

- (b) A repedési hálózat szerkezetének elemzésével azt találtam, hogy a réteg kezdeti anizotrópiája jelentősen befolyásolja a keletkező fragmensek geometria jellemzőit. Az anizotrópia erősségével a fragmensek egyre elnyúltabbá válnak, így alakjuk egy határoló téglalappal jól közelíthető. Az alaki anizotrópia az összefüggő repedéshálózat kialakulásának kritikus pontjánál a legnagyobb, majd az ezt követő bináris fragmentáció fokozatosan csökkenti az elnyúltság mértékét. Az elemzések arra is rávilágítottak, hogy a repedezési folyamat fejlődésével a rendszer egy stabil fragmensalakhhoz tart, amelyet a határoló téglalap egy aszimptotikus oldalaránya jellemez. Megmutattam, hogy az aszimptotikus oldalarány az anizotrópia növelésével csökken és egy, a réteg anyagának Poisson-számától függő konstanshoz tart [3].

(c) Arra az eredményre jutottam, hogy ugyan az anizotrópia erősen befolyásolja a fragmensek alakját, azok tömegének statisztikája nagyfokú robusztusságot mutat: vizsgálva a fragmensek tömegének eloszlását az anizotrópia és károsodás széles tartományán, univerzális viselkedést tapasztaltam. A különböző károsodásoknál kapott tömegeloszlások a fragmensek átlagos tömegével egymásra skálázhatók, az így kapott skálafüggvény pedig jól leírható a lognormális eloszlással a kezdeti anizotrópia teljes tartományán. A lognormális tömegeloszlás összhangban van a fragmensek kaszkádszerűen lejátszódó bináris darabolódásával [3].

2. Az anizotróp tulajdonságokkal rendelkező vékonyrétegek mechanikai viselkedésének és repedési folyamatainak számítógépes modellezésére bevezettünk egy újszerű módszert, ahol az anizotrópiát a réteg diszkretizációján keresztül vesszük figyelembe. Analitikus számításokkal és számítógépes szimulációkkal elemeztem a model makroszkopikus válaszát, valamint a zsugorodás közben keletkező repedési mintázatát.

(a) A modell keretében a vékonyréteget Voronoi-konstrukció segítségével konvex poligonok térkitöltő, véletlenszerű rácsaként diszkretizáljuk, amelybe anizotrópiát a rács egy irány menti nyújtásával, vagy zsugorításával viszünk be. Az anizotrópia mértékét a nyújtási (zsugorítási) aránnyal, míg a poligon rács rendezetlenségét a Voronoi-konstrukció egy paraméterével kontrolláljuk. A rendszer mechanikai válaszának jellemzéséhez a rendszer egytengelyű nyújtá-

sát vizsgáltam a geometriai transzformáció irányában és arra merőlegesen. Meghatároztam a réteg Young-modulusának és Poisson-számának anizotrópia- és rendezetlenség-függését. Analitikus számításaim kimutatták, hogy a rendezetlenség nulla határértékében az effektív Young-modulus megegyezik a rúdelemek Young-modulusával. Nagyobb rendezetlenségi értékeknél az effektív Young-modulus az anizotrópia erősségének hatványfüggvényeként növekszik. Megállapítottam, hogy a geometriai transzformációra merőleges irányú terhelés esetén az effektív Young-modulus az anizotrópia paraméter csökkenő hatványfüggvénye, ahol az exponens megegyezik a másik irányban kapott eredményekkel. A Poisson-szám a geometriai transzformációra merőleges irányban csökkenő, azzal párhuzamosan pedig növekvő hatványfüggvénnyel írható le az anizotrópia függvényében. A két irány exponensei ekkor is megegyeznek egymással [1].

- (b) A repedési mintázat és a keletkező fragmensek jellemzőit összevetettem a korábban kidolgozott modellel, ahol az anizotrópia a kohézív kontaktusok teherbíró képességébe van beépítve. Megmutattam, hogy az anizotrópia reprezentációjának mindkét módszere esetén a makrorepedések szögeloszlása erős csúccsal rendelkezik a károsodás kezdeti értékeinél az erős irány mentén, ám a másodlagos repedések csúcsát nagy szögek esetében jobban megragadta az új modell. Az eredmény alapján azt a következtetést vontam le, hogy törésmechanikai vizsgálatokra előnyösebb a poligonális rács geometriai transzformáció-

jára épülő eljárás [1].

(c) Részletesen elemeztem az új modellben a zsugorodás által keltett repedési mintázat struktúráját, valamint a fragmensek jellemzőit, amelyeket összevetettem a korábbi modellben kapott eredményekkel. Megmutattam, hogy a poligonális rács geometriai transzformációjával bevezetett anizotrópia a korábbi modellhez hasonlóan elnyúlt fragmensalakokat eredményez, ahol az oldalarányt a nyújtási faktorról kontrollálhatjuk. A fragmenstömegekre vonatkozó vizsgálataim arra is rámutattak, hogy hasonlóan a korábban tapasztaltakhoz, a tömegeloszlás robusztusan viselkedik és lognormális eloszlással jellemezhető [1].

3. A zsugorodó vékonyréteg törési folyamatát kísérő akusztikus zaj jellemzőinek megértésére számítógépes szimulációkkal vizsgáltam a fokozatos repedezés időbeli lefolyását. Vizsgálataimmal igyekeztem feltárni a repedési zaj keletkezési mechanizmusát, valamint statisztikus jellemzőinek a rendszer méretétől és a zsugorodás sebességétől való függését.

(a) Egy homogén, izotróp vékonyréteg zsugorodás által indukált repedezésének diszkrét elem szimulációjával megmutattam, hogy a repedezés nem sima, hanem egy intermittens folyamat. A modellben a mikrorepedések időbeli korrelációja alapján definiáltam a globális repedési aktivitás úgynevezett pulzusait, amelyek megfeleltethetők a laboratóriumi mérések akusztikus eseményeinek. Megmutattam, hogy az aktivitás pulzusok méret- és időtartameloszlása hatványfüggvény viselkedést mutat, de az ex-

ponenseik nem univerzálisak: növelve a rendszer méretét vagy a zsugorodás sebességét a nagyméretű pulzusokat jellemző exponensek csökkennek, míg a kis pulzusok tartományát jellemző exponens állandó marad [2].

- (b) A mikrorepedések térbeli korrelációjának figyelembe vételével mikrorepedések lokális lavináit azonosítottam, amelyek a makrorepedések intermittens növekedési lépései. A szimulációval nyert adatok feldolgozásával megmutattam, hogy a lokális lavinák méretének és időtartamának valószínűség eloszlása hatványfüggvény viselkedést mutat univerzális exponensekkel, amelyek nem függenek sem a rendszer méretétől, sem a zsugorodási rátától. Arra a következtetésre jutottam, hogy a homogén, izotróp réteg zsugorodása közben a lokális lavinák kipattanását az anyag belső rendezetlensége határozza meg, így időbeli előfordulásuk Poisson-folyamatként írható le, ahol a rendszerméret és a zsugorodás sebessége a lavinák nukleációs rátáját kontrollálja [2].
- (c) Elemezve a lokális lavinák közötti várakozási idő statisztikáját, valamint a várakozási idő és a lavinák időtartamának viszonyát megmutattam, hogy a globális aktivitás pulzusok változó statisztikáját és csökkenő exponenseit az időben átfedő lokális lavinák szuperpozíciója okozza. Numerikus eredményeim alapján lineáris kapcsolatot állapítottam meg a pulzusok hatványfüggvény exponense és a lokális lavinák nukleációs rátája között. Kis rendszerméret és lassú zsugorodás határesetében a pulzusok jellemző

exponensei megegyeznek a lokális lavinák exponenseivel,  
összhangban az eltűnő átlapolódással [2].



Nyilvántartási szám: DEENK/129/2025.PL  
Tárgy: PhD Publikációs Lista

Jelölt: Szatmári Roland  
Doktori Iskola: Fizikai Tudományok Doktori Iskola  
MTMT azonosító: 10078414

## A PhD értekezés alapjául szolgáló közlemények

### Idegen nyelvű tudományos közlemények külföldi folyóiratban (3)

1. **Szatmári, R.**, Halász, Z., Nakahara, A., Kitsunezaki, S., Kun, F.: Discrete element model for the anisotropic cracking of shrinking material layers.  
*Int. J. Solids Struct.* 299, 1-14, 2024. ISSN: 0020-7683.  
DOI: <http://dx.doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2024.112890>  
IF: 3.4 (2023)
2. **Szatmári, R.**, Nakahara, A., Kitsunezaki, S., Kun, F.: Scale-free bursting activity in shrinkage induced cracking.  
*Sci. Rep.* 14 (1), 1-8, 2024. EISSN: 2045-2322.  
DOI: <http://dx.doi.org/10.1038/s41598-024-57368-5>  
IF: 3.8 (2023)
3. **Szatmári, R.**, Halász, Z., Nakahara, A., Kitsunezaki, S., Kun, F.: Evolution of anisotropic crack patterns in shrinking material layers.  
*Soft Matter.* 17 (44), 10005-10015, 2021. ISSN: 1744-683X.  
DOI: <http://dx.doi.org/10.1039/D1SM01193F>  
IF: 4.046

**A közlő folyóiratok összesített impakt faktora: 11,246**

**A közlő folyóiratok összesített impakt faktora (az értekezés alapjául szolgáló közleményekre):  
11,246**

A DEENK a Jelölt által a Tudóstérbe feltöltött adatok bibliográfiai és tudánymetriai ellenőrzését a tudományos adatbázisok és a Journal Citation Reports Impact Factor lista alapján elvégezte.

Debrecen, 2025.04.03.





Short thesis for the degree of doctor of  
philosophy (PhD)

**Investigation of shrinkage-induced  
cracking processes using discrete element  
modelling**

by Roland Szatmári

Supervisor: Dr. Ferenc Kun



UNIVERSITY OF DEBRECEN

Doctoral School of Physics

Debrecen, 2025



# Introduction

From the polygonal crack patterns of dried lake beds<sup>1</sup>, to the fragments often several metres in diameter observed in the permafrost regions of Earth and Mars<sup>2</sup>, to the three-dimensional columnar lava flows<sup>3,4,5</sup>, a wide range of shrinkage-induced crack patterns can be seen in nature. The phenomenon is most commonly studied in the laboratory by drying a layer of dense paste on a substrate<sup>6</sup>. As the paste dries, it solidifies and shrinks, creating mechanical stresses in the material, and these stresses are released by the formation of cracks. Experimental studies have shown that due to the disordered nature of the material, the crack pattern formed during shrinkage has a cellular structure<sup>6</sup>. The analysis of the dynamic and statistical characteristics of the cracking system revealed that the area/mass distribution of the fragments generated during cracking leads to a lognormal distribution<sup>7</sup>. This is due to the fact that after the formation of the connected crack network, binary fragmentation takes place in the system, which limit distributions' is lognormal.

In microelectronics manufacturing technology, fragmentation of thin films on a substrate is usually undesired. However, recent studies have shown that there are many possibilities to control the structure of individual cracks<sup>8</sup> or the overall crack pattern<sup>6</sup>. In one

---

<sup>1</sup>L. Goehring et al, *Desiccation Cracks and their Patterns: Formation and Modelling in Science and Nature*, (John Wiley & Sons, 2015).

<sup>2</sup>E. Forte, et al, *Permafrost Periglac* **33** (2022).

<sup>3</sup>A. Aydin, et al, *Science* **239**, 471-476 (1988).

<sup>4</sup>A. Lamur, et al, *Nat. Commun.* **9** (2018).

<sup>5</sup>B. Bourdin, et al, *Phys. Rev. Lett.* **112**, 014301 (2014).

<sup>6</sup>A. Nakahara, et al, *J. Stat. Mech.* **2006**, P07016 (2006).

<sup>7</sup>S. Ito, et al, arXiv:2009.13691 (2020).

<sup>8</sup>K. Nam, et al, *Nature* **485**, 221-224 (2012).

such study, dense calcium carbonate and magnesium hydroxide carbonate pastes were mechanically excited and it was found that the plastic deformation and density fluctuations introduced by the excitation resulted in an anisotropic crack pattern in the material during drying<sup>6</sup>. The paste, due to its granular structure, is a disordered system that prefers a cellular cracking pattern during drying. However, the plastic deformation caused by the initial mechanical perturbation causes a directional dependence in the fracture strength, and its effect overcomes the disorder, so that cracks were initiated in the initial phase of fragmentation perpendicular to the direction of excitation<sup>9</sup>. As time progressed, new cracks appeared parallel to the existing cracks until the distance between the cracks fell to the order of the paste layer thickness. Secondary cracks then segmented the long rectangular fragments into smaller pieces. Thus, experience shows that the introduction of anisotropy into material properties offers the possibility of controlling the structure of crack patterns, with a number of potential applications in microelectronics manufacturing technology<sup>8</sup>.

Lithium-ion batteries (LIBs) play a critical role in efforts to reduce global CO<sub>2</sub> emissions, so increasing their capacity and lifetime is an important challenge for the energy industry<sup>10,11</sup>. One of the most significant factors limiting the lifetime of Li-ion batteries is cracking of the electrode material<sup>12</sup>. During the charge-discharge process, lithium migration in and out of the electrodes causes a volume change in the surface layers of the electrodes, creating an inhomogeneous

---

<sup>9</sup>S. Kitsunozaki, et al, *Europhys. Lett.* **114**, 64002 (2016).

<sup>10</sup>M. Hoffert, et al, *Science* **298**, 981-987 (2002).

<sup>11</sup>J. B. Goodenough, *Acc. Chem. Res.* **46**, 1053-1061 (2013).

<sup>12</sup>A. Mukhopadhyay, *Prog. Mater. Sci.* **63**, 58-116 (2014).

stress field<sup>13</sup>. This mechanical stress is relaxed by crack initiation, which initially leads to a reduction in the energy storage capacity of the battery, but may later lead to permanent battery failure<sup>14</sup>. Recent laboratory studies have shown that cracking of battery electrodes can result in acoustic noise, so the degradation process can be monitored by measuring a series of acoustic signals. The acoustic emission technique<sup>15</sup> is a promising non-destructive testing method that can provide real-time information on the degradation process. An in-depth understanding of the microscopic processes of crack formation is essential to establish the technology.

---

<sup>13</sup>V. A. Sethuraman, *J. Power Sources* **195**, 5062-5066 (2010).

<sup>14</sup>J. Christensen, *J. Solid State Electrochem.* **10**, 293-319 (2006).

<sup>15</sup>S. Schweidler, *Sci. Rep.* **11**, 23381 (2021).

## Objectives

In my doctoral thesis, I conducted theoretical investigations to gain a deeper understanding of the controlled crack formation process and to explore the intermittent dynamics of shrinkage-driven cracking. Because of its potential industrial application, I wanted to clarify how the competition between the disorder of the material and the initial anisotropy of the mechanical properties affects the crack initiation and the structure of the resulting crack pattern in thin layers attached to a substrate material. My aim was to explore the time evolution of the lamellar crack pattern in thin films with initial anisotropy through which phases the lamellar crack pattern evolves under different anisotropy strengths. Another important goal was to understand how anisotropy affects the shape of fragments and their mass and size statistics.

To investigate the background of the acoustic crack noise measured during the charge-discharge cycles of batteries and during the solidification of structural materials, I aimed to understand the propagation mechanism of cracks in thin films and, through this, to quantify the intermittent time evolution of the cracking process. An important challenge was to describe the crack cascades statistically and to clarify how the size of the system and the shrinkage rate affect the scaling behaviour of the crack noise distributions. Acoustic emission studies have shown that shrinkage induced crack noise events can be characterized by a power law function of size and time distributions, where the exponent depends on several parameters of the system. By varying the system size and the shrinkage rate over a wide range of parameters in my computer simulations, I aimed

to understand the background of this non-universal behaviour. By investigating the temporal and spatial correlation of cracks in the system, I sought to explore the relationship between the exponents. My aim was to search for a regularity between the exponents obtained for different system sizes and deformation rates that could uniformly describe the scaling behaviour of the noise characteristics of shrinkage induced fractures.

In my work, I used discrete element modelling, which can efficiently handle a large number of simultaneously propagating cracks. An important challenge of computer modelling is the representation of the anisotropic mechanical and fracture properties of the investigated layer. My aim was to analyse in detail how the mechanical anisotropy can be controlled by the geometric transformation of the random grid used for discretisation in the model.

## Methods of investigation

The theoretical description of the fracture phenomena of heterogeneous materials requires different approaches depending on the purpose of the investigation. The key challenge is to capture the details of the local physical properties while taking into account the inhomogeneous stress field created by long-range interactions. The complexity of the physical systems under investigation significantly limits the possibilities of analytical investigations, so the statistical physics approach relies mainly on stochastic computer models. A major advantage of the computer approach is that the parameters characterising the system can be varied independently of each other, so that their role in the behaviour of the system can be easily explored. These models usually build up the structure of the system under study on a mesoscopic scale with carefully defined interactions between the elements of the system. One of the most important types of stochastic models is the Discrete Element Model (DEM), which is capable of accurately numerically handling the simultaneous evolution of a large number of cracks.

I have studied the cracking processes caused by shrinkage of a thin film on a rigid substrate using the discrete element method. The time evolution of an interacting particle system is generated by DEM by numerically solving the classical mechanical equations of motion of particles. The method accurately captures the key components of fracture processes and allows efficient representation and control of material heterogeneity. In my research, the main modelling challenge was the representation of the initial anisotropy of the thin film, for which I considered two possibilities: both the directional dependence

of the cohesive contact strength between discrete elements and the geometric transformation of a random-structure polygonal lattice for discretisation proved to be successful methods.

In my calculations, I used the tools of statistical physics, the theory of phase transitions and critical phenomena, and the physics of complex systems to evaluate and interpret the results obtained by computer simulation.

## New scientific results

1. In order to explore the possibility of controlled crack initiation, I investigated shrinkage-induced cracking of a thin film attached to a substrate, in which anisotropy is caused by an initial mechanical perturbation of the film (e.g. vibration). I started from a previously introduced discrete element model of heterogeneous thin films, in which I considered the anisotropy as a function of the direction of the strength of cohesive contacts. I performed computer simulations varying the strength of anisotropy over a wide range.

- (a) I developed an algorithm to process the time and space series of microcracks obtained from computer simulations to identify the macrocracks that form in the system. By analyzing the crack pattern structure, I determined the phases of the system's evolution over time and constructed a phase diagram of the system in the anisotropy-damage plane. Our studies have shown that there exists a threshold anisotropy below which material disorder dominates crack initiation and growth, resulting in a cellular crack pattern similar to the fully isotropic case. When the anisotropy is sufficiently high, the crack pattern development occurs through three distinct phases: at the beginning of the process, highly ordered parallel cracks dominate, which slice the layer. Transverse crack formation starts at a critical damage value, resulting in segmentation of the sliced areas. The merging of cracks leads to the formation of a fully connected crack network along

which the layer breaks up into a large number of fragments. This occurs at a second critical damage value, after which further shrinkage leads to binary fragmentation, further fragmenting the fragments. I have found that as the initial anisotropy increases, the critical damage associated with the transition between each phase shifts towards higher values [3].

- (b) By analysing the structure of the fracture network, I found that the initial anisotropy of the layer has a significant effect on the geometry of the resulting fragments. As the anisotropy increases, the fragments become more elongated, so that their shape can be approximated by a bounding box. The anisotropy of shape is greatest at the critical point of the formation of a connected crack network, and subsequent binary fragmentation gradually reduces the degree of elongation. The analyses have also shown that as the cracking process evolves, the system converges to a stable fragment shape characterized by an asymptotic aspect ratio of the bounding box. I have shown that the asymptotic aspect ratio decreases with increasing anisotropy and converges to a constant that depends on the Poisson's ratio of the layer material [3].
- (c) I found the result that, although anisotropy strongly influences the shape of fragments, their mass statistics show a high degree of robustness: by examining the distribution of fragment mass over a wide range of anisotropy and damage, I found universal behaviour. The mass dis-

tributions obtained at different damages can be scaled by the average mass of the fragments, and the resulting scale function can be well described by the lognormal distribution over the full range of initial anisotropy. The lognormal mass distribution is consistent with the binary splitting of the fragments which gives rise to a cascade process of fragment creation [3].

2. A novel method for computer modelling of the mechanical behaviour and cracking processes of thin layers with anisotropic properties has been introduced, where anisotropy is considered through the discretisation of the layer. Analytical calculations and computer simulations were used to analyse the macroscopic response of the model and the crack pattern during shrinkage.

- (a) In the framework of the model, the thin layer is discretized as a random lattice of convex polygons filling the space using the Voronoi construction, where anisotropy is introduced by stretching or shrinking the lattice in one direction. The degree of anisotropy is controlled by the stretching (shrinkage) ratio, while the disorder of the polygon grid is controlled by a parameter of the Voronoi construction. To characterize the mechanical response of the system, the uniaxial stretching of the system in the direction of and perpendicular to the geometric transformation was examined. I determined the anisotropy and disorder dependence of the Young's modulus and Poisson's ratio of the layer. My analytical calculations have

shown that in the zero disorder limit, the effective Young's modulus is equal to the Young's modulus of the beam elements. At higher disorder values, the effective Young's modulus increases as a power law of the anisotropy strength. It is found that, for loading in the direction perpendicular to the geometric transformation, the effective Young's modulus is a decreasing power function of the anisotropy parameter, where the exponent is the same as the results obtained in the other direction. The Poisson's ratio can be described by a decreasing power law in the direction perpendicular to the geometric transformation and an increasing power law in the anisotropy direction. Here again, the exponents of the two directions are equal [1].

- (b) I compared the crack pattern and the resulting fragment characteristics with a previously developed model where anisotropy is introduced into the threshold of cohesive contacts. I showed that for both approaches to implementing anisotropy, the angular distribution of macrocracks has a strong peak at the initial values of damage along the strong direction, but the peak of secondary cracks at large angles is better captured by the new model. Based on the result, I concluded that for fracture mechanics studies, it is preferable to use a method based on the geometric transformation of the polygonal lattice [1].

- (c) I have analysed in detail the structure of the shrinkage induced crack pattern in the new model, as well as the characteristics of the fragments, which I have compared with the results obtained in the previous model. I have shown that the anisotropy introduced by the geometric transformation of the polygonal lattice results in elongated fragment shapes similar to the previous model, where the aspect ratio can be controlled by the stretching factor. My studies on fragment mass also showed that, similar to what was observed previously, the mass distribution behaves robustly and is characterized by a lognormal distribution [1].
3. To understand the acoustic noise characteristics accompanying the shrinkage thin film fracture process, I used computer simulations to investigate the time evolution of gradual cracking. My investigations aimed at revealing the mechanism of crack noise generation and its statistical dependence on the system size and the shrinkage rate.
- (a) Using discrete element simulations of shrinkage induced cracking of a homogeneous isotropic thin layer, I have shown that cracking is not a smooth but an intermittent process. Based on the temporal correlation of microcracks in the model, I defined so-called pulses of global cracking activity that correspond to acoustic events in laboratory measurements. I have shown that the size and duration distributions of the activity pulses exhibit power law behaviour, but that their exponents are not universal:

as the system size or shrinkage rate increases, the exponents characterizing the large pulses decrease, while the exponent characterizing the range of small pulses remains constant [2].

- (b) Taking into account the spatial correlation of microcracks, I identified local avalanches of microcracks, which are intermittent growth steps of macrocracks. By processing simulated data, I show that the probability distributions of the size and duration of local avalanches exhibit power law behavior with universal exponents that do not depend on either system size or shrinkage rate. I conclude that the bursting of local avalanches during the shrinkage of a homogeneous isotropic layer is determined by the internal disorder of the material, so that their temporal occurrence can be described as a Poisson process, where the system size and the shrinkage rate control the nucleation rate of the avalanches [2].
- (c) By analyzing the statistics of the waiting time between local avalanches and the relationship between waiting time and avalanche duration, I have shown that the changing statistics and decreasing exponents of global activity pulses are caused by the superposition of local avalanches overlapping in time. Based on my numerical results, I found a linear relationship between the power law exponent of pulses and the nucleation rate of local avalanches. In the limit of small system size and slow shrinkage, the characteristic exponents of the pulses are equal to the

exponents of the local avalanches in agreement with the vanishing overlap [2].



Registry number: DEENK/129/2025.PL  
Subject: PhD Publication List

Candidate: Roland Szatmári  
Doctoral School: Doctoral School of Physics  
MTMT ID: 10078414

### List of publications related to the dissertation

#### Foreign language scientific articles in international journals (3)

1. **Szatmári, R.**, Halász, Z., Nakahara, A., Kitsunezaki, S., Kun, F.: Discrete element model for the anisotropic cracking of shrinking material layers.  
*Int. J. Solids Struct.* 299, 1-14, 2024. ISSN: 0020-7683.  
DOI: <http://dx.doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2024.112890>  
IF: 3.4 (2023)
2. **Szatmári, R.**, Nakahara, A., Kitsunezaki, S., Kun, F.: Scale-free bursting activity in shrinkage induced cracking.  
*Sci. Rep.* 14 (1), 1-8, 2024. EISSN: 2045-2322.  
DOI: <http://dx.doi.org/10.1038/s41598-024-57368-5>  
IF: 3.8 (2023)
3. **Szatmári, R.**, Halász, Z., Nakahara, A., Kitsunezaki, S., Kun, F.: Evolution of anisotropic crack patterns in shrinking material layers.  
*Soft Matter.* 17 (44), 10005-10015, 2021. ISSN: 1744-683X.  
DOI: <http://dx.doi.org/10.1039/D1SM01193F>  
IF: 4.046

**Total IF of journals (all publications): 11,246**

**Total IF of journals (publications related to the dissertation): 11,246**

The Candidate's publication data submitted to the Tudóstér have been validated by DEENK on the basis of the Journal Citation Report (Impact Factor) database.

03 April, 2025

