Válasz Geszti Tamás bírálatára

Köszönöm szépen Geszti Tamásnak az értekezésem gondos elolvasását, végső értékelését, továbbá a dolgozatomat és a munkámat illető elismerő megjegyzéseit.

A bírálatban feltett kérdésekre a következő válaszokat adom:

1. *A morfológiák szemmel való követésén túl elképzelhető-e az eredmények összevetése kisszögű röntgen- vagy neutron-szóráskísérletekkel is?*

   A kisszögű diffrakciós kísérletek a méréshez használt sugárzás hullámhosszánál lényegesen nagyobb (10–1000 Å) méretskálájú szerkezetekről adnak információt. Csak a méretskáláját tekintve elvileg ilyen lehetne a dolgozatomban bemutatott polikristályos anyagok szemcseszerkezete is. De mivel esetünkben az egyes szemcsék csak a krisztallográfiai orientációjukban különböznek, a mérhetőség szempontjából lényeges kontrasztot biztosító átlagos elektronsűrűség (röntgen) ill. szórási hossz (neutron) az egyes szemcsékben és az esetlegesen még meg nem szilárdult folyadékban is hasonló, ezek a kisszögű diffrakciós módszerek a szemcseszerkezet vizsgálatára mégsem alkalmasak.

   A megszilárdulási morfológiák kétdimenziós kísérleti megfigyelésének legelterjedtebb módszere a direkt képeket szolgáltató elektronmikroszkópia, ill. nagyobb méretek esetén akár az optikai mikroszkópia is („szemmel követés"). Az egyes szemcsék orientációjáról is nyerhetünk információt visszaszórt-elektron diffrakcióval (EBSD) és polarizációs mikroszkóppal. A polikristályos anyag mikroszerkezetének teljes, háromdimenziós rekonstruálása is lehetséges, ez azonban az előbbieknél lényegesen nehezebb és eszközigényesebb feladat. Ilyen – tomográfiai és diffrakciós elveket kombináló – méréseket szinkrotronok mellett végeznek, amelyek során a háromdimenziós szerkezetet a különböző helyzetekben mért kétdimenziós képekből egy numerikus algoritmus segítségével rekonstruálják.

2. *Használható lehet-e a modell hideg megmunkálással létrejövő szerkezetek elemzésére ?*

   Nem, a modell csak az első szilárd csírák megjelenésétől az anyag teljes megszilárdulásáig tartó folyamat leírására alkalmazható. Már a szilárd fázison belüli szemcsehatár-dinamika vizsgálata is az orientációs modell kis változtatását tenné szükségessé, de a hideg megmunkálás során fellépő deformációk, feszültségek teljes mértékben hiányoznak a bemutatott modellből. Létezik fázismező-elmélet, amely az anyagban fellépő kismértékű deformációkat és feszültségeket is tartalmazza, de a hideg megmunkálás során fellépő extrém hatásokat, amelyek során akár a minta alakja is teljesen megváltozik, még az ilyen modellek sem tudják kezelni.

3. *A dendrites növekedés sokszor többé-kevésbé fraktális geometriát követ : a csúcs előrehaladásával egyidőben növekednek az oldalágak, és sokszor ezek ütközhetnek bele szennyező szigetekbe. Mennyire lényeges oldala ez a folyamatnak, és leírja-e a bemutatott elmélet ?*

   A modell nem tesz különbséget az elsődleges dendritcsúcs és az annak oldalágaiból esetlegesen kifejlődő további dendritcsúcsok között ; a szennyező részecskékkel történő kölcsönhatás minden esetben ugyanúgy zajlik le. Ezek a kölcsönhatások akkor lehetnek jelentősek a kialakuló szerkezet szempontjából, ha az ilyen másodlagos (vagy még további) dendritágak nagy számban vannak jelen. Ilyen, tűszerű dendritágakból álló, erősen elágazó szerkezetek megjelenését nagy növekedési sebesség és nagy anizotrópia mellett várhatjuk.

4. *A Ginzburg-Landau szabadenergiában miért nem szerepel $\nabla\phi \cdot \nabla c$ alakú szorzat ? A koncentráció-gradiens, mint vektori hajtóerő valóságos fizikai effektus lehet.*

   Valóban, a fázismező elméletekben használt szabadenergia funkcionálokban szerepelhetne egy $\nabla\phi \cdot \nabla c$ alakú tag is. Ilyen típusú tag használata azonban nem szokás, sőt, tudtommal az elméletnek ilyen változata nincs is. Ennek magyarázata az, hogy a megszilárdulási folyamatok jelentős részét már a legegyszerűbb, csak $(\nabla\phi)^2$-et tartalmazó szabadenergia is jól leírja, de ha szükség van a koncentráció-gradiens hatásának figyelembevételére, azt is egy $(\nabla c)^2$-es tag hozzáadásával tesszük meg.

5. *A spinodális bomlás lehetősége itt úgy jelenik meg, mint a leírás érvényességi határa, pedig a kristályos fázis anizotrópiája miatt ez a határ sokszor elmosódott: keverékek nukleációs alapú szétválását és spinodális bomlását egyaránt a diffúzió kontrollálhatja, és nagyon hasonló morfológiákhoz vezethetnek. Benne van-e ez a lehetőség az elméletben?*

   Igen, a fázismező-elmélet a spinodális bomlás leírására is alkalmas lehet. Ha egy egyszerű, binér fázismező-modell szabadenergia-funkcionálja tartalmazza az előző válaszomban említett $(\nabla c)^2$-es tagot, akkor a homogén, tömbi fázisokban a modell mozgásegyenletei a spinodális bomlás leírására használt Cahn-Hilliard egyenletre redukálódnak. Spinodális bomlás természetesen ilyenkor is csak az arra hajlamos rendszerekben következik be, azaz a rendszer termodinamikáját tekintve további feltétel még egy olyan koncentráció-tartomány létezése, ahol a megfelelő tömbi fázis $f(c)$ szabadenergia-függvényének második deriváltja negatív.

Budapest, 2014. április 22.

Pusztai Tamás
MTA Wigner FK