

Válasz Radnóczy György bírálatára

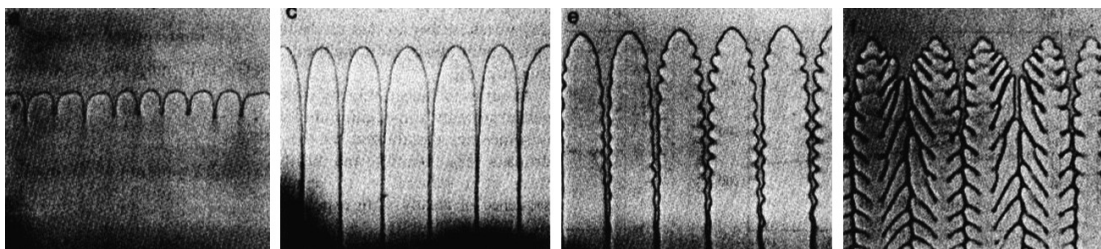
Köszönöm bírálómnak a gondos munkáját, az értekezés elolvasására és a bírálat elkészítésére fordított idejét. Bírálóm megjegyzései és kérdései a dolgozat fejezetei szerinti tagolásban szerepelnek, válaszaimat is ennek megfelelően készítettem el.

Bevezetés

1. *Ebben a fejezetben röviden bemutatásra kerül a dolgozat témaköre és annak a dolgozat témáját érintő terminológiája. A fejezet hasznosan járul hozzá a dolgozat további megértéséhez. Annyit azonban már itt megjegyzek, hogy a fogalmazás egy kicsit a szakterület bennfenteseinek szól, nekem, mint csak közeli és kísérleti területen dolgozónak néha a fogalmak használata kicsit idegen. Mi a cellás növekedés morfológiája?*

Különböző szakterületek szóhasználatában akadhatnak kisebb eltérések, legtöbb esetben ezek az írt vagy mondott szöveg pontos értelmezését nem akadályozzák. Az eltérő szóhasználat miatti félreértéseket a megfelelő pontokban tisztázom.

Az ún. cellás növekedés jellemzően irányított megszilárdulás, azaz a minta rögzített hőmérséklet-gradiensben adott sebességgel történő húzása vagy hűtése által meghatározott sebességgel történő kristálynövekedés során figyelhető meg. Ha a sík front növekedési sebességét a Mullins-Sekerka instabilitás által meghatározott kritikus érték fölé emeljük, akkor a front mentén eleinte kisebb befűződések alakulnak ki, amelyek nagyobb sebességek esetén egyre mélyülnek (1. ábra). Az így kialakuló cellás növekedési morfológia jellemzője a tompa, félgömbszerű csúcs és a szilárd anyag kristályszerkezetétől és krisztallográfiai orientációjától függetlenül az alkalmazott hőmérséklet-gradiens irányába történő növekedés. A sebesség további emelésével ez a cellás növekedési forma dendrites morfológiába vált, ahol a növekedés irányát és a kialakuló morfológiát már a megszilárduló anyag krisztallográfiai orientációja és a szilárd-folyadék határfelület anizotropiája is befolyásolja.

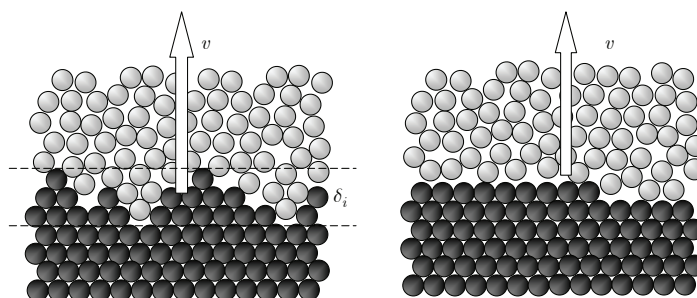


1. ábra. SCN-Salol keverék irányított megszilárdulása során a húzási sebesség növelésével megfigyelhető cellás és dendrites növekedési morfológiák. $G = 4.5 \text{ K/mm}$, $v = 0.57, 2.0, 5.7, 7.6 \mu\text{m/s}$. (J. A. Dantzig and M. Rappaz: Solidification, EPFL Press, 2009)

A fázismező-modell alapjai

2. A 4. ábrán a folyadék kristály határátmenet leírására (néhány atomnyi vastag) folytonos átmenetet ábrázol. Van kísérleti bizonyítéka ennek az átmenetnek, vagy ez feltételezés? Miért nem lépcső jellegű átmenetet használ atomi szinten? A kristályok atomrétegenkénti növekedésével nem ez lenne jobban összhangban?

A folytonos szilárd-folyadék határfelület általánosan elfogadott, molekuladinamika szimulációkban is jól megfigyelhető kép. A szilárd-folyadék határréteg vastagsága a folyadék és szilárd fázisok szerkezetének hasonlóságától függ. Ha a két fázisban az atomtávolságok eltérése néhány százalékon belül van és a lokális rend is hasonló, azaz a két fázis moláris entrópia különbsége kicsi, akkor a szilárd-folyadék határfelület atomi szinten durva és az átmenet folytonosan, néhány atomtávolságon belül következik be (2. ábra, bal oldal). Ez az eset jellemző pl. a legtöbb fémre. A szilárd fázis növekedésére ilyenkor nem atomrétegenként történik. Bonyolultabb szerkezetű molekulák, pl. oxidok, karbidok, polimerek, stb. esetén a folyadék és szilárd fázisok lokális szerkezete és moláris entrópiája jelentősen különböző lehet. Ilyenkor atomi szinten is sima, a kristálysíkok által meghatározott irányú, fazettált szilárd-folyadék határfelületek alakulnak ki (2. ábra, jobb oldal). A bíráló által említett atomrétegenkénti növekedés ezekre a szerkezetekre jellemző.



2. ábra. Atomi szinten durva (bal oldal) és sima (jobb oldal) szilárd-folyadék határfelület sematikus képe. Az előbbiek jellemzően a $\Delta S_f^m < 2R$, míg az utóbbiak a $\Delta S_f^m > 2R$ esetben figyelhetők meg, ahol ΔS_f^m a két fázis közötti moláris entrópiakülönbség, R pedig az univerzális gázállandó. (J. A. Dantzig and M. Rappaz: Solidification, EPFL Press, 2009)

Fel szeretném hívni a figyelmet arra, hogy a folytonos szilárd-folyadék határréteg a fázismező-modellek alapvető tulajdonsága. Sőt, a modell numerikus szempontból annál hatékonyabb, minél vastagabb határréteget (és így nagyobb szimulációs cellákat) használhatunk a szimulációk során. Éppen ezért esetenként akár még az előbb említett néhány atomi réteg vastagságnál is nagyságrendekkel nagyobb határrétegvastagságot alkalmazunk. Az ilyen esetekre kifejlesztett, ún. kvantitatív fázismező-modellek még ilyen nagy határrétegvastagságok esetén is helyesen, a klasszikus éleshatár-moddellel egyezően írják le a megszilárdulás kinetikáját.

Csíráképződés

3. *A 30. oldal utolsó sorában: úgy tudtam, hogy kT az átlagos energia (nem a fluktuációké). A 40. oldalon (első sor) találtam egy betűhibát: „az klasszikus”, helyesen „a klasszikus”. Ugyanez a hiba előfordul a 41. oldalon a 9. ábra szövegében („az numerikus”).*

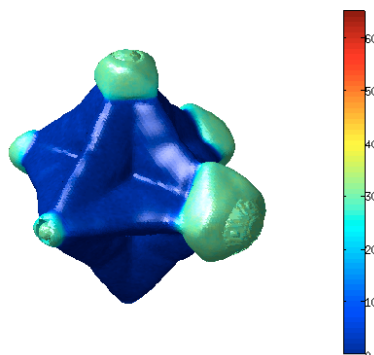
Valóban, a hivatkozott szövegrész téves, a kT mennyiség az energia, nem pedig az energia fluktuációinak várható értékét jellemzi (az ekvipartíció tétele alapján az egy szabadsági fokra jutó energia $1/2 kT$). A betűhibák észrevételét is köszönöm. Sajnos ezeknek a hibáknak a javítása a dolgozatban már nem lehetséges.

Növekedés

4. *Az 51. oldalon a 14. ábrához fűzött értelmezésben több dolog keveredik, és ez is mutatja a dolgozatnak a kísérleti eredményekhez való kissé ambivalens viszonyát. A 14b. ábrán bemutatott „dendrit” növekedéséhez fűzött magyarázat nem konzekvens. Szennyezőről beszél, de itt a szennyezőnek saját felülete van. Felülete fázisnak, idegen testnek van. Tehát a növekedő „dendrit” útjába kerülő anyag-részecskék nem szennyezők, hanem egy második fázis részecskéi, így növekedést egy kétfázisú rendszerben kell leírni. A második fázis hatását lényegében helyesen látja a szerző: a második fázis részecskéi akadályozzák a kialakult kristály növekedését. Erre a kristálynak két választása lehet: vagy másik irányban tovább nő (az orientáció nem változik, hiszen az egykristály megmarad), vagy nem nő tovább. Az utóbbi esetben az idegen részecske felületén egy új kristály(mag) képződik és növekedik, tetszőleges vagy a második fázis kristályszerkezete által stimulált orientációval. Az eredmény: polikristály alakul ki. Lényegében ez látszik a 14b. ábrán is, ahol egy dendritekből álló polikristályt látunk. Ezt alátámasztja a 15. ábra alsó sorának orientációs térképe is, ott is polikristály nőtt (a szerző szerint is), és én nem is javasolnám ezt a képződményt dendritnek nevezni, a dendrit ugyanis egykristály. Amit a 15. ábra orientációs térképén látunk az egy dendritkristályokból felépülő szferolit. Szferolit a 14b.*

ábrán látható képződmény is. A 15. ábrához fűződik egy kérdésem is. Mi az oka annak, hogy a felső sorban mutatott dendrit szerkezete „balcsavarra” emlékeztet? Azaz, mi az oka, hogy mind a négy központból induló ág elágazásai egyformán aszimmetrikusak, a növekedés irányában balra sokkal nagyobb ágak nőnek ki, mint jobbra?

Valószínűleg itt a bíráló mást értett szennyező alatt, mint amire én gondoltam. A dolgozatban szennyező alatt mindig egy kicsi, de az atomi méreteket jóval meghaladó, helyhez kötött, külön fázisnak tekinthető, rögzített orientációjú idegen részecskét értettem. Ebben az értelemben mégis helyes azt mondani, hogy a növekvő dendrit útjába szennyezők kerülnek, de ezek valójában – a bíráló megállapításával összhangban – egy új fázist jelentenek. A növekvő dendrit és a szennyező kölcsönhatása komplex folyamat, amelynek többféle eredménye lehet. Ha a dendrit csúcsa eltalálja a részecskét, akkor részecske bizonyos értelemben valóban akadályozza a kristály növekedését, hiszen annak a szabad növekedési lehetősége megszűnik. De olyat még soha nem tapasztaltam, hogy emiatt a dendrit növekedése ténylegesen le is állt volna. A szilárd fázis valahogy mindig „körbenövi” a részecskét, de ez a részecske nedvesítési tulajdonságaitól függően különbözőképpen következhet be. Jól nedvesítő részecskék esetén, azaz amikor a kontakt szög kicsi, a szilárd fázis növekedése az idegen részecske felülete mentén gyorsan előreszalad. Ilyenkor, mivel a részecskét körbeölelő szilárd fázis már sokkal nagyobb felületen érintkezik a részecskével, mint azzal a dendrittel, ahonnét a növekedése kiindult, a krisztallográfiai orientációja is könnyen a részecskéének megfelelően módosul (3. ábra). A megváltozott krisztallográfiai orientáció pedig a növekedési irány megváltozását és egy új szemcsehatár kialakulását is jelenti. Nem-nedvesítő részecskék esetén a növekvő szilárd fázis nem szívesen érintkezik a részecskével, gyakran a részecske és a szilárd fázis között egy vékony folyadékréteg is megfigyelhető. Ilyenkor a szilárd fázis nem is vesz tudomást az idegen részecske orientációjáról, ezért a növekvő dendrit krisztallográfiai orientációjában és így a növekedési irányában sem következik be változás.



3. ábra. Dendritcsúcs és idegen részecske kölcsönhatásának illusztrálása egy 3D szimuláció alapján. A felületek színezése a lokális orientáció szerint történt, a feltüntetett, fokban kifejezett színskála szerint. A növekvő dendritcsúcsok elé különböző méretű, gömb alakú, jól nedvesítő részecskéket helyeztem, amelyek a növekvő dendrit orientációjához képest 30° -kal el vannak forgatva. A pillanatfelvétel azt az állapotot mutatja, amikor a növekvő dendrit (kék) csúcsa már elérte az idegen részecskét (zöld golyó), és annak felülete mentén gyorsan végigszaladva egy vékony szilárd réteget hoz létre, amelynek orientációja már az idegen részecskéét követi (zöld), nem pedig a dendritét (kék).

Az elnevezésekkel kapcsolatban pedig meg szeretném védeni a szóhasználatomat. Annak ellenére, hogy a 15. ábra alsó sorában látható növekedési forma nem egykristály, mint ahogy az dendritek esetén várható lenne, a szerkezet a dendritek minden egyéb jellemző tulajdonságát bírja. Gondolok itt pl. a parabolikus csúcsra, továbbá az elsődleges és másodlagos oldalágakra. Véleményem szerint a „polikristályos dendrit” kifejezés jobban kifejezi ennek a szerkezetnek a lényegét, mint a bíráló által javasolt „dendritekből álló polikristály”. Számomra az utóbbi elnevezés félrevezető, mert a dendritek kifejezés (többes számban) különálló részecskéket szokott jelenteni, azaz a „dendritekből álló polikristály” elnevezés olyan szerkezetet sugall, amely több növekedési centrumból kiinduló, más-más orientációval növekvő dendrit felütközésével alakult ki.

A megjegyzések végén feltett kérdésre válaszolva: Úgy gondolom, hogy a 15. ábrán az összes dendritág egy irányú csavarodása csupán véletlen. A növekedési irány eltérülését meghatározó dendrit-szennyező kölcsönhatás kifejezetten lokális kölcsönhatás, így nehezen képzelhető el, hogy arra a szomszédos dendritkarok bármilyen hatással lennének. Ezzel összhangban a 20. ábrán több olyan szimuláció is látható, ahol egyes dendritágak egymással ellentétes irányba csavarodnak.

5. *A 16. és 17 ábrák eredménye igazán nem meggyőző. Azt eddig is mindenki tudta, hogy a kicsi akadályokat a szerkezet körbenövi, és zárványokká válnak, a nagyok pedig blokkolhatják a növekedést, és új kristályok indítását eredményezhetik. A 16. ábra leírásánál azt találjuk, hogy a „nagy méret” a dendritcsúcs sugarának kb. a negyede fölött van. Ennek így nehéz a fizikai értelmét kihámozni, itt elkerülhetetlen az atomi növekedési mechanizmus bekapcsolása és azt kellene megnézni, hogy a csúcson mekkora az a sík felület, ahol a*

kétdimenziós növekedés zajlik. Ha ezt lefedi az idegen fázis, akkor a növekedés megakadhat. A lezáró fázis ahhoz is elég nagy kell, hogy legyen, hogy rajta új mag képződhessen és nőhessen tovább azaz, a nagy „szennyező” méretét a kritikus mag méretéhez kellene hasonlítani (heterogén magképződésnél a szükséges kontaktus-felület méretéhez). Ez lényegében a 18. ábrát is érinti. A pixelekben megadott távolságot nem tudom összevetni a kritikus méretekkel. A méreteknek egyébként itt fizikai jelentése lenne, mondjuk nm-ben. A 16-18. ábrákon az eltérő szín ugye eltérő orientációt jelent?

A dolgozatban tárgyalt fázismező-modell nem így működik. Az idegen részecskék nem blokkolják teljesen a szilárd fázis növekedését (lsd. 4. pont) és az új orientációjú szilárd fázis keletkezése sem az említett módon, klasszikus értelemben vett heterogén nukleációval, hanem a 4. pontban leírtak szerint történik. Ha a szilárd fázis növekedése csak atomi rétegenként, a csúcs környezetében indulva következhetne be, akkor a csúcs blokkolása valóban leállíthatná a növekedést. De a 2. pontban leírtak szerint a növekedés nem csak atomrétegenként történhet. Ha pedig az új orientációjú részecskék a javasolt módon, hagyományos értelemben vett heterogén nukleációval keletkeznének („új kristály”), azaz nem lenne szükség a növekvő dendritcsúccsal létrejövő kölcsönhatásra, akkor a szilárd fázis véletlenszerű megjelenését kellene tapasztalnunk a teljes szimulációs tartományban.

A részecske-dendrit kölcsönhatásnak a bíráló által javasolt atomi szintű vizsgálata egyébként tényleg érdekes lenne, de erre a fázismező-modell – mivel az anyagok atomi szerkezetéről nem tud semmit – nem alkalmas. Jól használható lehet azonban erre a célra az ún. atomisztikus fázismező modell (Phase Field Crystal, PFC modell), ahol az idegen részecske és a kristály is atomi szinten kezelhető.

Végül: Igen, a 16-18. ábrákon az eltérő szín eltérő orientációt jelent.

6. *Az 54. oldal utolsó bekezdésében elkezdett összefoglalás megfogalmazása kissé zavaró: Az új mag képződését nem a dendritcsúcs és az idegen részecske kölcsönhatása okozza. Annak a következménye a dendritcsúcs növekedésének a leállása. Az oldat (olvadék) és az idegen részecske kölcsönhatásából keletkezik az új kristály, ami tovább nő az idegen részecske (szimuláció) által megszabott irányban (gondolom, bár ez sehol nem derül ki). (Itt jut eszembe: miért is nem adta meg az orientációs mezőt és a szimulációban keletkező orientációs eltérést. Ezek azonosak? Igaz, a 16-18 ábrák azt sugallják, hogy igen.)*

A dendritcsúcs és az idegen részecske kölcsönhatásának tárgyában tett megjegyzésekkel kapcsolatban utalnék a 2. és a 4. pontokban adott magyarázataimra. Az orientációs eltéréssel kapcsolatban pedig arra mutatnék rá, hogy a kristály kölcsönhatás utáni orientációja és növekedési iránya nem mindig egyezik meg az idegen részecske orientációjával. A részecske eltérítő hatása lehet részleges is, ez látható pl. a dolgozat 17. ábrájának középső két paneljén.

7. *Lehet-e tiszta polikristályos szferolitot növesztetni, ha a forgási szabadsági fok nem játszik szerepet? A forgási szabadságfok csökkentésével az is a problémám, hogy ha az fontos és befagyaszjtuk, akkor nem fog kristály növekedni, hanem amorf állapotnak kellene létrejönnie. Ha a rossz molekula-orientációk ritkák, akkor viszont nem lesz belőlük kritikus mag méretű kristály a már növekvő felületen, vagy zárványként elhálnak. Mi erről a véleménye?*

A modell két fontos paramétere az orientációs mező és a fázismező mozgásegyenleteiben szereplő, a rotációs és translációs diffúziós állandókkal kapcsolatba hozható M_θ és M_ϕ mobilitás, ill. ezek aránya, M_θ/M_ϕ . Ha ez az arány nagy, azaz az orientációs rendeződés a növekedési sebességhez képest elegendően gyors, tökéletes egykristályt kapunk. Ha ez az arány kicsi, orientációs rendeződésre nincs lehetőség, amorf szerkezetet kapunk. Köztes esetekben az orientációs hibák keletkezésének és az orientációs rendeződésnek a versengését, ill. az ennek következtében előálló érdekes polikristályos szerkezetek kialakulását – beleértve a bíráló által említett zárványképződést is – figyelhetjük meg.

8. *A 21. ábrával kapcsolatban nem értem, hogy ha a szimuláció mérete $500 \times 500 = 250000$ pixel, hogyan lehetett ebbe 800000 pixel idegen testet beletenni (adat az ábrafeliratban)?*

Jogos az észrevétel, 800000 db egypixeles szennyező bele sem fért volna egy 500×500 pixel méretű szimulációs dobozba. Az ellentmondás oka az, hogy a szimuláció méretét rosszul adtam meg, ez a sorozat valójában 2000×2000 pixeles méretben készült. A szennyezők számát illetően is tennék egy pontosítást. A szimulációk indítása előtt ugyan az ábraaláírásban megadott számú szennyezőt szórtuk el véletlenszerűen a mintában, de mivel ezek egy része ugyanarra a helyre került, a szennyező részecskék effektív száma a megadottnál valamivel kevesebb, esetünkben kb. 725000-nek adódott.

9. *A 61. oldalon induló Szferolitok c. fejezet nagyon tetszett, az egy vagy több mellékminimumot mutató szemcsehatár energiáknak, mint az orientációkülönbség függvényének a hatása a morfológiára meglepően termékenynek bizonyult, pedig nagyon is kézenfekvő pl. az ikerhatárok megjelenése miatt. Egy megjegyzés és egy kérdés: A csúcsnál nincs elágazás csak az oldalsó felületeken, a csúcs növekedési iránya legfeljebb megtörik. Miért különbözik olyan jelentősen az elágazások sűrűsége a 27. ábra egyes szimulációi között?*

Az igaz, hogy az ábrán mutatott, már kialakult szerkezeten az elágazások mindegyike oldalágnak tűnik, de ez nem jelenti azt, hogy azok a dendritek oldalán keletkeztek. Ellenkezőleg. Az elágazások keletkezése a dendrit csúcsánál legvalószínűbb, hiszen ott legnagyobb a növekedési sebesség, azaz ott legvalószínűbb az orientációs hibák befagyása, azaz az új orientációjú, más irányba növekvő szemcsék keletkezése. Ha jobban megnézzük a 27. ábra alsó sorának második paneljét, a bal alsó sarokban éppen a kék színű dendritcsúcs megszűnését és két piros valamint egy sárga oldalág keletkezését figyelhetjük meg. Úgy gondolom, hogy a 27. ábra egyes paneljeit összehasonlítva az

elágazások sűrűsége az elágazásra felkínált orientációk számát növelve pedig azért nő, mert ahogy az orientációs szabadenergia 25. ábrán látható függvényében a kitüntetett orientációs eltéréseknek megfelelő lokális minimumok számát növeljük, azok egyre közelebb kerülnek egymáshoz, azaz egyre kisebb orientációs fluktuációk lesznek szükségesek a minimumok közötti átjáráshoz, azaz az orientáció váltásához.

Háromdimenziós polikristályos fázismező modell

10. *Komoly eredmény, hogy a számítások 3D-ben is ugyanúgy működnek, mint 2D-ban. Itt is, azonban, felmerülnek bizonyos mennyiségi problémák, pl. a kristálméreték kérdése és a szerkezet jellegének meghatározása abban az értelemben, hogy a „szennyezők” bevitele itt is második fázist jelent, és ennek aránya nagy. Pl. a 35. ábrán bemutatott morfológiák esetében a 64×106 voxelből 20×106 voxel az idegen fázis (kb 30 térfogat%), tehát egy kompozit anyagról van szó, aminek a térfogatban is látszania kellene. Ha minden szennyező legalább egy új kristályt jelent, egy szennyező szemcsére egy $\simeq 3$ szoros térfogatú szemcse jut. Ennek mérete kb. $31/3$ voxel, azaz a szemcsék és a szennyező idegen anyag szemcséinek mérete alig különbözne. Végül is mekkorák a szemcsék a szennyező zárványokhoz képest?*

A 35. ábra bal alsó paneljéhez már valóban extrém nagy, $\simeq 30\%$ -os szennyező koncentráció tartozik. Ha minden szennyező egyben aktív heterogén nukleációs centrumot is jelentene, azaz azok nagy részén nem túl nagy időeltéréssel egy új részecske növekedése indulna meg, akkor valóban az ábrán bemutatottól egészen eltérő mikroszerkezetet kapnánk. Ekkor igaz lenne az, hogy minden szennyezőre egy nála alig néhányszor nagyobb kristályos részecske jutna. A szennyezők azonban mindössze egy voxel méretűek, ami a bemutatott esetben bőven a nukleációhoz szükséges kritikus méret alatt van, ezért rajtuk új részecskék keletkezését nem figyelhetjük meg. A teljes szimuláció során csupán egyetlen részecskét láthatunk, amelynek növekedése a szimuláció elején a szimulációs doboz közepén elhelyezett, kritikusnál nagyobb méretű szilárd csíra lerakásával indult.

A dolgozatban bemutatott 2D és 3D szimulációk során, ahol a növekedési front menti nukleációnak (NFN) a heterogén, azaz az idegen részecskékkel történő kölcsönhatásával létrejövő mechanizmusát mutatom be, az idegen részecskék szerepe nem az új *részecskék* növekedésének indítása (azaz a klasszikus értelemben vett heterogén nukleáció), hanem a növekvő kristályos anyag megszilárdulási frontjával való kölcsönhatás során a növekvő kristályos részecskéhez tartozó, de attól eltérő orientációjú új *szemcsék* létrehozása.

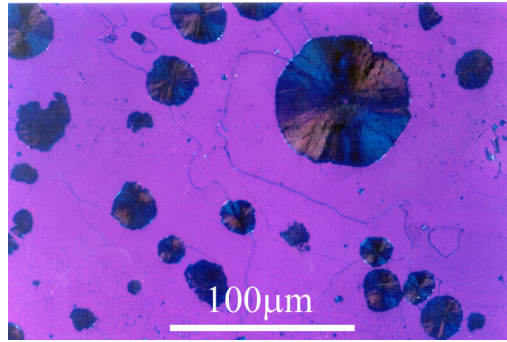
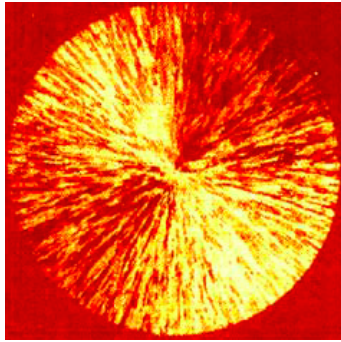
TÉZISEK

11. Az 1, 4, 5, és 6. tézispontokat új tudományos eredményként elfogadom. A 2. tézisponttal kapcsolatban megjegyzem, hogy a kissé bombasztikus terminológiákkal mint „szédelgő dendrit”, „orientációs pinning centrum” nem sokat tudtam kezdeni. A „szédelgő dendritek” szerintem szferolitok. Az „orientációs pinning centrumok” pedig idegen részecskék, illetve ezek hatásának leírására szolgáló modell elemek. Ettől eltekintve, ezen szferolitok keletkezési mechanizmusának pontosítása is szükséges szerintem. Az új orientáció nem a dendritcsúcs és a részecske kölcsönhatásaként jön létre – mint a tézispont állítja, hanem a részecskén végbemenő random (pl. amorf szemcsén) vagy irányított (epitaxiás) magképződés eredményeképpen. Ebből a szempontból mindegy, hogy a részecske hol található. Ha éppen a dendritcsúcsra helyezzük (kerül), akkor megállíthatja a meglévő kristály növekedését és onnan egy újat indíthat. A 3. tézisponttal kapcsolatban azt gondolom, hogy a leírt jelenség csak nagy molekulájú anyagok kristályosodásakor játszhat szerepet (pl. szerves molekulák). Szerintem ennek a megszorításnak szerepelnie kell a tézisben. A fenti megszorításokkal elfogadom a 2. és 3. tézispontot is.

A „szédelgő dendrit” (vagy angol eredetijében „dizzy dendrite”) valóban kicsit bombasztikus elnevezésnek tűnhet. Ezt a kifejezést egy amerikai társszerzőnkkel egyetértve akkor találtuk ki, amikor egy a témában írt Nature Materials cikkünkhöz kerestünk egy figyelemfelkeltő címet. Úgy gondolom, a dizzy dendrite jó választás lett: hatásos, de nem félrevezető. Az orientációs pinning centrum pedig csak egy technikai kifejezés, arra utal, hogy a korai munkáinkban az idegen részecske szerepe csupán az orientációs mező rögzítése volt, nem rendelkezett még pl. állítható nedvesítési tulajdonságú felületekkel.

A 2. tézisponttal kapcsolatosan a növekedési mechanizmus bíráló által kifogásolt magyarázatát fenntartom. A korábban (4., 5. és 6. pontokban) említettek szerint az új orientáció ténylegesen a növekedési front és az idegen részecske kölcsönhatásával jön létre, nem pedig egy teljesen új kristályos mag képződésével és további növekedésével. Az idegen részecske és a dendritcsúcs relatív helyzete fontos, mint ahogy azt a 18. ábra is mutatja. A bíráló által javasolt, a növekvő részecskétől független nukleációs események képe pl. azért sem tartható, mert ez esetben az új szilárd részecskék keletkezésének a szimulációs dobozban több helyen is megfigyelhetőnek kellene lennie. Ezt pedig sem a szimulációkban, sem pedig az azokat motiváló kísérletekben nem volt tapasztalható.

A 3. tézisponttal kapcsolatosan pedig azt jegyezném meg, hogy bár a leírt jelenség elsősorban komplex, nagy molekulájú anyagok kristályosodására jellemző, akad példa ennek az ellenkezőjére is. Polikristályos szferolit részecskék növekedése figyelhető meg pl. tiszta szelénben, valamint öntöttvasban levő grafit zárványokban is (4. ábra).



4. ábra. Szferolit tiszta szelénben (G. Ryschenkow, G. Faivre, J. Cryst. Growth 87, 1988, p. 221)
és grafit szferolit öntöttvasban (Dissemination of IT for the promotion of Materials Science, UK)

Budapest, 2014. április 22.

Pusztai Tamás
MTA Wigner FK