

Válasz Kun Ferenc bírálatára

Köszönöm bírálóm munkáját, a dolgozat gondos elolvasását, valamint az ezzel kapcsolatos megjegyzéseit és kérdéseit, amelyekre az alábbi válaszokat adom:

1. *Az irodalmi háttér bemutatása nagyon célirányosan történt, az első három fejezet elsősorban azt szolgálja, hogy felvezesse a jelölt által használt fázismező modell motivációját, alapfogalmait, valamint a modellel végzett vizsgálatok menetét és kihívásait. Alig tudunk meg valamit arról, hogy mezoszkopikus skálán vannak-e más elméleti megközelítések (más hosszúságskálákon használt módszereket röviden vázol a szerző), vagy esetleg ugyancsak a fázismező modellt használva mások milyen sikereket értek el. Azt is érdekes lett volna röviden bemutatni, hol vannak a fázismező modellel történő leírás határai, vannak-e olyan kísérleti eredmények, amelyeket a modell nem tud kellő pontossággal leírni. Ehhez természetesen szerencsés lett volna további referenciákkal kiegészíteni a dolgozatot, ami növelte volna a kutatómunka, illetve a dolgozat háttérének mélységét.*

A felsorolt témákról tényleg nem sok szó esik a dolgozatban. A megszilárdulási morfológiák leírására alkalmazott modellek közül a mezoszkopikus skálát egyértelműen a fázismező-modellek uralják. Ugyanezen a méretskálán még talán a sejtautomata modelleket említeném meg, amelyeket szintén alkalmaznak pl. dendritek növekedésének leírására. A fázismező-modellekkel történő leírás határait többféle értelemben is lehet vizsgálni. A modellnek rengeteg változata létezik, más-más erősségekkel és gyengeségekkel. A rendszerek komplexitását tekintve, néhány fázis és néhány kémiai összetevő egyidejű kezelése rutinszerűnek tekinthető, de speciális modellek ennél többet is kezelnek. A használható méretskálát tekintve alulról a rendszert leíró paraméterek értelmezhetősége (azaz hogy mit jelentenek ezek a mennyiségek ha már csak néhány atom van a szimulációs cellában) szab határt, felülről pedig a leírni kívánt mikroszerkezetre jellemző hosszúságskálák (pl. kapilláris hossz, diffúziós hossz, eutektikus lamellatávolság, stb.) által meghatározott maximális cellaméret és a szimulációk elvégzésére fordítható számítógépes erőforrások nagysága. Ez két dimenzióban akár a mm-es vagy cm-es nagyságrendbe is eshet (kb. 1 – 100 s valós idő mellett), míg három dimenzióban kb. a mm-es nagyságrend és a 0.1 – 1 s érhető el.

A fázismező-modellek elméleti limitációi közül talán a több fázis egyidejű, konzisztens

kezelését emelném ki. Ez még mindig nem tökéletesen megoldott. A szimulációkat tekintve a legnagyobb nehézség talán azoknak az eseteknek a kezelése, amikor a rendszernek egyidejűleg több, nagyon eltérő méretskálája van. Ilyen pl. az, amikor a kémiai és a hődiffúziót egyidejűleg kell megoldani, mert a megfelelő diffúziós állandók és így a diffúziós hosszak aránya (az ún. Lewis-szám) fémek esetén a 10000-es nagyságrendbe esik.

- 2. A szerző munkája, a megfelelő fázismező modell származtatását követően elsősorban numerikus számolásokra, számítógépes szimulációra épül. Ezért hasznosnak éreztem volna, 2-3 további oldalon tárgyalni a modellek számítógépes megvalósításának problémáit. Szintén hasznos lett volna egy olyan jellegű ábrával kiegészíteni a numerikus módszerek bemutatását a dolgozat elején, mint a 72. oldalon szereplő 32. ábra.*

Valóban, a modell numerikus megvalósítását nem részletezem a dolgozatban. Egyetértek a bírálóval, egy ilyen, alapvetően numerikus szimulációkra épülő dolgozatban ez talán kívánatos lett volna. Ettől alapvetően az tartott vissza, hogy a disszertációm fizikai témájú, azt a Fizikai Osztályon adtam be, ahol a numerikus részletek iránt valószínűleg kisebb az érdeklődés. A numerikus részletek leírásának nagyvonalú kezelése sajnos a témában megjelenő publikációkra is jellemző, több esetben is hasznos lenne azok részletesebb ismerete.

- 3. A dolgozat szerkesztése gondosan történt, a szövegben nagyon kevés az elírás. Egy két zavaró apróságot lehet említeni: - Az 55. oldalon látható 18. ábrára nem találtam hivatkozást. Az 54. oldal kapcsolódó bekezdése csak a kísérleti eredményt bemutató 19. ábrára hivatkozik. - A referenciák között a 67. esetén csak a szerzők neve van feltüntetve. - Kicsit zavaró, hogy a referenciák megadásának formátuma nem egységes, helyenként nem világos, pontosan mi a kötetszám és az oldalszám, időnként feltűnik az éven belüli kiadás száma is a koordináták között.*

Köszönöm a felsorolt – jogos – észrevételeket. Sajnos ezeket a dolgozatban már nem tudom kijavítani. A referenciák nem egységes formátumát azzal magyarázom, hogy azokat a szövegszerkesztőm egy olyan BibTeX adatbázisból vette, amelyet különböző helyekről, ebből adódóan különböző részletességű tartalommal töltöttem fel. Ezért fordul elő, hogy időnként megjelenik pl. az éven belüli kiadás száma is, más esetekben pedig nem.

- 4. Hogyan viszonyul egymáshoz a két- és háromdimenziós modell számítógépes szimulációjának CPU idő igénye? A dolgozatában az összevetés alapját a számolásokhoz használt PC klaszter mérete jelenti, de nem világos, hogy hány magra/szálra kell gondolni, illetve milyen processzorokról van szó. A szimulációs programnak melyik a legidőigényesebb része?*

A dolgozatban bemutatott szimulációk jellemzően 2002 és 2007 között készültek. Ennek

az időszaknak az elején a számítógép-klaszterünk 20-40 db, a végén 100-120 db AMD alapú, egyprocesszoros, egymagos számítógépből állt. A futásidőkről pontos feljegyzéseket nem készítettem, de emlékeim szerint eleinte egy 20 db 32 bites számítógépből álló, gyors hálózattal összekapcsolt „blokkon” a futásidő kisebb 2D problémák (500×500 pixel) esetében néhányszor 10-100 perc körül alakult, de nagyobb problémák (7000×7000 pixel) esetén akár a több napot is elérte. A 3D szimulációk ennél természetesen sokkal időigényesebbek voltak, de ezt némileg kompenzálta a számítástechnika fejlődése. Egy közepes méretű ($256 \times 256 \times 256$ voxel) szimuláció időigénye 20 db 64 bites számítógépen több óra volt, míg a legnagyobb szimulációnk ($800 \times 800 \times 800$ voxel) futásideje 80 db számítógépen egyszerre futtatva is az egy hét nagyságrendjében volt.

A szimulációk legidőigényesebb része két és három dimenzióban egyaránt az orientációs mező időfejlődésének számolása volt. Ennek fő oka az, hogy (különösen 3 dimenzióban) az orientációs mező kezelése a legösszetettebb feladat. Egyes esetekben (jellemzően a 2D elágazó szerkezeteknél) előfordult az is, hogy az orientációs mező mozgásegyenlete ill. annak paraméterei a másik két mezőénél lényegesen kisebb időlépés használatát követelték meg, azaz az orientációs mező időfejlődését csak finomabb lépésekben, sűrűbben számolva lehetett követni.

5. *A dolgozatban számos helyen összehasonlítja a szimulációval kapott eredményeit kristálynövekedésre végzett kísérletekkel. Az egyezés sok esetben valóban impresszív, azonban az összehasonlítás mindig csak „vizuálisan” történik. Struktúrák hasonlóságának kvantitatív jellemzésére bevezettek-e valamilyen kísérletekben és szimulációban egyaránt mérhető mennyiséget?*

Nem, a kutatásaink célja elsősorban a polikristályos megszilárdulás során előforduló jelenségek leírása és kvalitatív jellemzése volt, kvantitatív egyezésre és összehasonlításra nem törekedtünk. Valószínűleg egy adott típusú szerkezethez meg lehetne találni azt a mennyiséget és kiértékelési eljárást, amivel a hasonló szerkezetek számszerűsíthetőek és összehasonlíthatók lennének (pl. fraktáldimenzió a sűrűn elágazó szerkezetekre), de tekintettel a vizsgált megszilárdulási morfológiák sokféleségére (pl. 62. oldal 24. ábra), nehezen tudok olyan módszert elképzelni, ami erre a célra univerzálisan használható lenne.

6. *Részletesen elemezte a szennyezők hatását a dentrit-csúcs eltérülésére. Az 55. oldal ábrái nagyon szépen illusztrálják a szennyező méretének, orientációjának és a dentritcsúcs tengelyétől mért távolságának a hatását. Történt-e mennyiségi jellemzése a szennyezők hatásának, fel lehet-e állítani valamilyen összefüggést például a szennyező mérete és az eltérülés mértéke között?*

A szennyezők és a dendritcsúcs kölcsönhatását később 3D szimulációk segítségével is részletesen vizsgáltam. A dendrit orientációjához képest pl. 30° -kal elforgatott szennye-

ző részecskének a növekedési irányt eltérítő hatása a részecske méretének egy kritikus értéke felett teljes, azaz ilyenkor a dendrit a részecske által meghatározott új irányba nő tovább. A kritikus méret alatti részecskék esetén az eltérítő hatás csak részleges és a részecske nagyságától függő mértékű. Ez a kritikus szennyező méret a dendritesúcs görbületi sugarának közelében van és erősen függ a részecske nedvesítési tulajdonságaitól. Jól nedvesítő részecske esetén a görbületi sugárnál sokkal kisebb is lehet, míg erősen nem-nedvesítő esetben (amikor a szilárd anyag „kerüli” a részecskét) az eltérítő effektus akár teljesen meg is szűnhet.

7. *A lehűlés közben megszilárduló anyagban előfordulhat az is, hogy a például a hőmérséklet gradiens miatt mechanikai feszültség jön létre, ami repedések kialakulását okozza. A jelenségre nagyon szép példa a vulkánkitörést követően a megszilárduló lávában létrejövő repedések, amelyek sokszor meglepően szabályos, hatszöges alakú lávaoszlopok kialakulását eredményezik. Magyarországon ilyen képződmény a Hegyestű (Balatonfelvidéki Nemzeti Park). Alkalmassá lehet-e tenni a kontinuum fázismező elméletet az ilyen repedések által okozott diszkontinuitás kezelésére és a megszilárdulás közben létrejövő repedésnövekedés leírására?*

A fázismező-modellnek létezik egy repedések terjedésének leírására kifejlesztett változata. Ebben a fázismező, mint rendparaméter a szilárd anyagban belüli „folytonos” és a repedéseken belüli „szétszakadt” állapot megkülönböztetésére szolgál, a két állapot közti átmenet a repedés felületén keresztül folytonosan történik (Izd. pl. a R. Spatscheck et al., Phil. Mag. 91 75–95 (2011) áttekintő cikket). A rugalmas alakváltozást és feszültségeket is tartalmazó modellben a repedés növekedése a megszilárdulást leíró modellben a megszilárdulási front terjedésének feleltethető meg. Ezzel a modellel több jelenséget is sikeresen modelleztek: leírták a repedések terjedését, reprodukálták a repedés csúcsa körüli energiaáram egy kritikus értéke felett a csúcs instabillá válását és elágazását, valamint folyamat során hanghullámok keletkezését. A megszilárdulással kapcsolatos fajterfogatváltozás és az ennek következtében kialakuló mechanikai feszültségek kezelése ill. az előbb említett modellhez csatolása azonban még nem megoldott.

8. *A háromdimenziós kristályosodás esetén kiválóan reprodukálta a korábban két dimenzióban talált struktúrákat, kristályosodási módusokat. Egy olyan struktúrát mutat be, amelynek nincs kétdimenziós megfelelője, de itt is nagyon szép egyezést talál a kísérleti eredményekkel. Megemlíti, hogy a különleges struktúra létrejöttének részleteit még nem sikerült megérteni. Az itt hivatkozott saját publikációk közül a legfrissebb 2008-ban jelent meg. Ezt a kutatási irányt később nem folytatta, vagy a probléma olyan nehéznek bizonyult, hogy azóta sem született kimerítő magyarázat a jelenségre?*

Valóban, a dolgozatban bemutatott legfrissebb eredmények 2007 körül születtek, utána ennek a témakörnek a kutatása háttérbe szorult. Ennek egyik oka az, hogy (mint a bíráló

helyesen rátapintott) a háromdimenzós szimulációk nem várt nehézségekkel is jártak, amelyek egy részét, például a növekedés során meghatározott irányokba történő elágazás problémáját még nem sikerült megnyugtatóan megoldani. Másik fontos ok az is, hogy az azóta előtérbe került újabb témák és projekt feladatok miatt ezekre a polikristályos növekedési morfológiákkal kapcsolatos kutatásokra nem is jutott elegendő idő. Ez a helyzet azonban jelenleg változóban van. Tavaly Korbuly Bálint személyében egy új PhD hallgató került a csoportunkba, akinek témája az orientációs mezőt is tartalmazó fázismező-modellekkel kapcsolatos. Új lendületet adhat ezeknek a munkáinknak az is, ha a témát érintő, idén beadott OTKA és/vagy Magyar-Francia Tét pályázatunk támogatást nyer.

Budapest, 2014. április 22.

Pusztai Tamás
MTA Wigner FK