



FAKULTÄT FÜR
NATURWISSENSCHAFTEN

Institut für Theoretische Physik
Computerorientierte Physik
Prof. Dr. K. Kassner

Themen für Forschungsbelege, Diplom-, Bachelor- und Masterarbeiten

1. Tropfenbildung in überhitzten Festkörpern

Beim Schmelzen von Legierungen in einem Temperaturgradienten tritt im Festkörper eine Zone lokaler Überhitzung auf. Experimente in Marseille haben vor einigen Jahren gezeigt, dass in dieser Zone durch Keimbildung Flüssigkeitstropfen entstehen, die zur Grenzfläche zwischen Festkörper und Schmelze migrieren und dabei wachsen. Das Zeitverhalten dieses Tropfenwachstums ist näherungsweise analytisch berechnet worden, doch es fehlt eine numerische Simulation, die die Beurteilung der Qualität der analytischen Näherungen ermöglichen würde. Eine solche Berechnung, die zunächst von kugelförmigen Tröpfchen ausgehen und in einem zweiten Schritt Abweichungen von der Kugelform in einer zylindersymmetrischen Geometrie berücksichtigen sollte, würde wahrscheinlich wegen ihres Referenzcharakters in der Fachliteratur häufig zitiert werden.

2. Numerische Simulation einer nichtlokalen Gleichung für gerichtete Erstarrung

In den letzten Jahren wurde gezeigt [1], dass in Systemen mit langreichweitigen Wechselwirkungen (z.B. elektrostatischer oder elastischer Natur) Amplitudengleichungen, die man für den Grenzfall langwelliger Instabilitäten ableiten kann, nichtlokale Terme enthalten. Solche Gleichungen wurden mittlerweile für ein elastisches System, für die Saffman-Taylor-Instabilität und für Kristallwachstum in einem Temperaturgradienten (gerichtete Erstarrung) hergeleitet [2]. Insbesondere die letzte Gleichung ist interessant, da man bisher glaubte, im betrachteten Parameterbereich seien Amplitudengleichungen grundsätzlich nur eine schlechte Näherung. Im Forschungsbeleg sollte die Amplitudengleichung für dieses System in zwei Dimensionen untersucht werden, wobei es wesentlich darum geht festzustellen, wie gut bekannte Resultate angenähert werden.

[1] K. Kassner, C. Misbah, *Amplitude equations for systems with long-range interactions*, *Phys. Rev. E* **66**, 026102 (2002).

[2] K. Kassner, C. Misbah, J.-M. Debierre, *Nonlocal interface equations in crystal growth*, *J. Cryst. Growth*, **275**, e183 (2005).

3. Stabilitätsanalyse viskoelastischer Jets

Hier geht es im Wesentlichen um analytische Rechnungen mit anschließender numerischer Auswertung einer Dispersionsrelation. Es soll ein zylindrischer Strahl eines viskoelastischen Fluids im Innern eines Newtonschen Fluids betrachtet werden. Eine Grundlösung der Navier-Stokes-Gleichungen bzw. ihrer viskoleastischen Verallgemeinerung mit konstanter Strömungsgeschwindigkeit kann im Rahmen der Lubrikationstheorie angegeben werden.

Es soll dann eine kleine Störung angenommen und deren Wachstum oder Relaxation im Rahmen der Lubrikationstheorie durch lineare Stabilitätsanalyse bestimmt werden. Das Hauptproblem scheint dabei die Bestimmung des Druckterms in der äußeren Flüssigkeit zu sein.

4. Dreidimensionales Kristallwachstum im Kanal

Dieses Projekt wird in Zusammenarbeit mit einer Gruppe aus Marseille bearbeitet.

Ein Phasenfeldmodell wurde in drei verschiedenen Versionen implementiert (in einem quadratischen, in einem zylindrischen, in einem hexagonalen und einem dreieckigen Kanal, die beiden letzten sind die Magdeburger Versionen), mit dem das bisher praktisch nicht untersuchte Wachstum von (vorläufig nichtfacettierten) Kristallen in einem Kanal simuliert werden kann. Interessierende Größen sind die Wachstumsgeschwindigkeit sowie Form und Dynamik des Kristalls als Funktion von Unterkühlung, Oberflächenspannung und anderen Einflussgrößen des Systems. Für isotrope und anisotrope Oberflächenspannung sind eingehende Untersuchungen durchgeführt und interessante Dynamiken gefunden worden (z.B. Kristallfinger, die sich schraubenförmig durch den Kanal winden). Das Programm ist für Graphik-Karten parallelisiert.

Ein interessanter zu untersuchender Aspekt ist der Einfluss des Kontaktwinkels zur Kanalwand auf die Dynamik.

Weiter stellt sich die Frage, ob man stationäre Wachstumsstrukturen nicht grundsätzlich effizienter mithilfe eines Multigridverfahrens für die im mitbewegten Bezugssystem zeitunabhängigen Gleichungen bekommen kann.

5. Phasenfeldmodell für Quasikristalle

In den letzten Jahren hat eine spezielle Erweiterung des Phasenfeldmodell-Ansatzes Furore gemacht, das sogenannte *Phase-field crystal model*, das es erlaubt, Dinge wie Ribbildung und plastisches Verhalten von Kristallen in einer Weise zu simulieren, die nahe an der mikroskopischen räumlichen Skala liegt (d.h. die Dynamik von Defekten im Kristallgitter beschreibt), dabei aber sehr viel längere Zeitskalen zu erreichen als etwa in der Molekulardynamik.

Die naheliegende Verallgemeinerung auf Quasikristalle ist noch nicht durchgeführt, ist aber von der Idee her einfach.

6. Amplitudengleichungen mit Überhängen

Amplitudengleichungen sind zur Beschreibung der Dynamik von Strukturbildungsvorgängen in der Regel gut, solange die entstehenden Strukturen keine zu großen räumlichen Inhomogenitäten aufweisen, denn die Entwicklung setzt einen kleinen Parameter voraus, der oft direkt mit der Amplitude skaliert. Dies rückt die Beschreibung von Strukturen mit Überhängen aus dem Anwendungsbereich dieser Gleichungen.

Eine neue Idee könnte das ändern, und es wäre interessant zu untersuchen, wie weit sie führt. Parametrisiert man eine Grenzlinie einer zweidimensionalen periodischen Struktur nicht durch eine Koordinate längs einer Achse, sondern durch die Bogenlänge, so lassen sich Formen mit Überhängen durch kleine Amplituden quasiperiodischer Funktionen x und y dieser Bogenlänge beschreiben. Die Komplexität der Beschreibung nimmt zu, weil man statt einer einzigen Amplitude [etwa $y(x)$] zwei hat [$x(s)$ und $y(s)$] aber ihr Anwendungsbereich wird größer.