

Inhaltsverzeichnis

Kurzfassung	I
1 Einleitung	1
2 Multi-Phasenfeldmodellierung	9
2.1 Formulierung einer allgemeinen Klasse von Multi-Phasenfeldmodellen	9
2.2 Herleitung der allgemeinen Reaktions-Diffusionsgleichungen	11
2.3 Ausdrücke für die freien Energien	13
3 Sharp Interface Asymptotik für das Multi-Phasenfeldmodell	17
3.1 ξ -Vektor und Spannungstensor Formalismus	18
3.2 Phasengrenzflächen	21
3.3 Multipelpunkte	23
3.4 Verallgemeinerung der Ergebnisse im asymptotischen Limes	28
4 Numerische Simulation isotroper Phasensysteme	31
4.1 Planare und gekrümmte Grenzflächen in Fest-Flüssig-Systemen	32
4.2 Kalibrierung der Parameter in den freien Energien	34
4.3 Evolution von Tripelpunkten und Stabilität von Quadrupelpunkten	40
4.4 Kornreifung und Kornwachstum	45
5 Numerische Simulation anisotroper Kornstrukturen	49
5.1 Formulierung glatter und kristalliner Anisotropien	50
5.2 Diskretisierung des Multi-Phasenfeldmodells	52
5.3 Dynamisches Verhalten anisotroper Phasengrenzen	54
5.4 Facettiert wachsende Grenzflächen	59
6 Modellierung von Kornwachstum in dünnen, metallischen Filmen	65
6.1 Motivation	66
6.2 Symmetrie und Energie von Korngrenzen	67

6.3	Simulation des Symmetrieverhaltens benachbarter Korngrenzentripelpunkte	69
7	Erweitertes Multi-Phasenfeldmodell für eutektische und peritektische Legierungen	75
7.1	Entwicklung des thermodynamisch konsistenten Multi-Phasenfeldmodells	76
7.2	Konstruktion von Phasendiagrammen	79
7.3	Simulation eutektischer Erstarrung in einem Modellsystem	82
7.4	Simulation eutektischer Phasenübergänge im <i>Al – Si</i> System	95
7.5	Simulation peritektischer Phasenumwandlungen	97
8	Phasenfeldmodellierung monotektischer Erstarrung mit Konvektion	103
8.1	Monotektische Phasenfeldmodelle	104
8.2	Modellierung der Konvektion	113
8.3	Simulation monotektischer Erstarrung	115
9	Ausblick	121
	Literaturverzeichnis	125