

STRUKTURBILDUNG
UNTER DER
GRINFELDINSTABILITÄT

Dissertation

zur Erlangung des akademischen Grades

doctor rerum naturalium
(Dr. rer. nat.),

genehmigt durch die
Fakultät für Naturwissenschaften
der Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg

von DIPL.-PHYS. PETER KOHLERT
geboren am 9. Februar 1972 in Calbe

Gutachter PROF. DR. KLAUS KASSNER
 DR. CHAOUQI MISBAH
 PROF. DR. RAINER CLOS

Eingereicht am 28. Mai 2003
Verteidigung am 11. November 2003

Dank

Zuallererst gilt mein Dank meinem Betreuer Klaus Kassner für seine unerschütterliche Geduld und seine fachliche Kompromisslosigkeit. Die freie Arbeitsatmosphäre, die er durch das Fernhalten „unwissenschaftlicher“ Pflichten von seinen Mitarbeitern schafft, weiß ich zu schätzen.

Bei Chaouqi Misbah bedanke ich mich für die Gastfreundschaft und die erhellenden Diskussionen, die meine Aufenthalte in Grenoble zu den inspirierendsten Momenten der letzten Jahre werden ließen. Aus der Grenobler Gruppe möchte ich besonders Zoltan Csahok und Olivier Pierre-Louis für ihre herzliche Art danken.

Zu Beginn umfasste die Magdeburger Gruppe Alexander Schinner und Jens Kappey, mit denen in dieser Zeit aufgrund ihres besonderen Humors ein ganz spezielles Klima entstand. Alexander war es zudem, der durch seine Einsatzbereitschaft die Bits in Bewegung hielt, eine nicht immer dankbare Aufgabe, die heute mit ähnlicher Hingabe von Gerrit Danker erledigt wird. Beiden gilt mein herzlicher Dank dafür.

Die Meister des guten Gesprächs waren zweifellos Thomas Fischaleck und Matthias Schröter. Glänzt der eine mit scharfer Kombination und abgründigem Humor, so hat der andere eine ganz besondere, zuweilen herausfordernde, aber immer gewinnbringende Art, Probleme anzugehen.

Eine völlig eigene Art, mit den Dingen umzugehen, lernte ich in der späteren Zeit von meinem Kollegen герой труда Evgueni P. Zemskov kennen. Auch Dir danke für das herzliche Miteinander.

Dorothea danke für die Gespräche zwischendurch, die Hilfsbereitschaft und für Unmengen an Kaffee.

Eine Menge weiterer Menschen hat mit auf die eine oder andere Weise dabei geholfen, auf dem richtigen Weg zu bleiben. Dazu zählen Adrian, Heike, Kolya, René, Uli, Marcus und Biegfried. Ich hoffe, ich habe niemanden ausgelassen.

Besonderer Dank gilt Dirk Rother für die Unterstützung während der letzten Wochen des Zusammenschreibens, sowie Anne, Matthias und Gerrit fürs Kontroll-Lesen.

Zuletzt, und zu allermeist danke ich den Menschen, die mich mit eisernen Nerven auch durch die schwierigsten Momente der letzten Jahre begleitet haben und das Vertrauen nicht aufgaben: meinen Eltern Ruth und Josef Kohlert und Dir, Anne.

Inhalt

Dank	iii
Vorwort	vii
1. Einführung	1
1.1. Strukturbildung	1
1.2. Die GRINFELDinstabilität	2
1.2.1. Das TORII-BALIBAR-Experiment	4
1.2.2. Polymere, Salze, Basalt	4
1.2.3. Kopplung mit chemischer Strukturbildung: PA–MB–O	6
1.2.4. Kopplung mit Gittereffekten auf kleinen Skalen: Epitaxie	7
1.3. Zielstellung dieser Arbeit	7
2. Grundlagen	9
2.1. Chemisches Potenzial und Randbedingungen	9
2.2. Die Dynamik der Grenzfläche	10
2.3. Betrachtungen anhand der freien Energie	11
3. Zweidimensionale Modelle	15
3.1. Die Grundgleichungen in zwei Dimensionen	15
3.1.1. Entdimensionalisierung	16
3.1.2. Der Formalismus der AIRYfunktion	19
3.2. Semiinfinites Modell, Expansionsmethode	20
3.2.1. Eigenschaften des Modells	20
3.2.2. Lineare Theorie	20
3.2.3. Nichtlineare Theorie und die Expansionsmethode	25
3.2.4. Charakteristika des schwach-nichtlinearen Regimes	29
3.2.5. Die Lösung nach SPENCER, Verallgemeinerung auf beliebige l_{12}	31
3.3. Semiinfinites Modell, Multizykloiden	33
3.3.1. Zykloiden	34
3.3.2. Das Zykloidenmodell	37
3.3.3. Multizykloiden	46
3.3.4. Das Multizykloidenmodell	49
3.3.5. Lösungen des Multizykloidenmodells	52
3.4. GRINFELDinstabilität bei endlicher Schichtdicke	55

3.4.1. Das Modell	55
3.4.2. Starres Substrat	57
3.4.3. Starres Substrat mit Berücksichtigung von Gravitation	61
3.4.4. Weiches Substrat, $l_{12} = 0$	64
3.4.5. Weiches Substrat mit Berücksichtigung von Gravitation	66
4. Dreidimensionale Modelle	69
4.1. Einführende Bemerkungen	69
4.2. Lineare Stabilitätsanalyse	70
4.3. Entdimensionalisierung	76
4.4. Schwach-nichtlineare Analyse	78
5. Zusammenfassung	81
A. Einzelheiten zu den Multizykloidenmodellen	83
A.1. Fourierzerlegung der Zykloide	83
A.2. Mittlere quadratische Amplitude von Multizykloiden erster Art	85
A.3. Topologie von Doppelzykloiden	88
A.4. Berechnungen zum Multizykloidenmodell	91
Tabellenverzeichnis	95
Abbildungsverzeichnis	97
Literaturverzeichnis	99
Lebenslauf	105

Vorwort

Was wir am nötigsten brauchen, ist ein Mensch, der uns zwingt, das zu tun, was wir können.

(Ralph Waldo Emerson)

Strukturbildung im Gleichgewicht ist langweilig.

Etwas bekloffen hörte ich diesen Satz aus dem Munde eines der großen Meister der nicht-linearen Dynamik, Prof. SIEGFRIED GROSSMANN, auf meine Frage, welches seiner Meinung nach die wichtigen Bereiche der Physik komplexer Systeme sind, auf die man heute sein kreatives Augenmerk richten solle. Hydrodynamische Turbulenz, ja, oder auch die Dynamik von Granulaten seien die modernen Herausforderungen, da hier die grundlegenden Prinzipien längst nicht so verstanden sind wie in der Nähe des Gleichgewichtes.

In der Tat fehlt in der nichtlinearen Dynamik ein analoges Prinzip zur Beschreibung der Bildung dissipativer Strukturen, das in der Gleichgewichtsstrukturbildung vorhanden ist. Wir lesen bei CROSS und HOHENBERG: *A long sought goal of nonequilibrium physics is to find a useful extremum principle such as minimization of the free energy in equilibrium applicable, say, to non-equilibrium steady states reached at long times.* [17]

Hier lagen also die fundamentalen Fragen, und hunderte von Physikern experimentierten bereits mit dieser und jener Modellgleichung, suchten nach Lösungen, die aus der Natur bekannte Strukturen reproduzierten [4]. Ebensoviele Modellsysteme wurden experimentell untersucht, man variierte PECKET-, REYNOLDS-, NUSSELT- und ein Dutzend anderer Zahlen und stellte teils beeindruckende Phasendiagramme zusammen.

Ergo schien ich mich seit mehreren Jahren im Abseits der modernen Physik zu bewegen. Eindrücke auf Tagungen schienen diesen Verdacht zu erhärten: von dem Effekt, an dem ich arbeitete, hatte kaum jemand etwas gehört, und die häufig gehörte Frage „Which dynamical equation are you solving?“ ging an meinem Verständnis der Thematik vorbei: Ein durch und durch klassisches Modell, die Oberfläche eines elastischen Festkörpers, die sich unter einer Instabilität verändert, ist zweifellos ein dynamisches System. Aber interessant waren zunächst einmal die sich bildenden Gleichgewichtsstrukturen, und diese sind, sofern sie existieren, bei diesem System vollkommen statisch. Trotzdem hatte für die meisten davon nie jemand eine Formel aufgeschrieben. Die korrekte Antwort „I am solving elastic equilibrium.“ stieß gleichfalls auf Befremden.

In dieser Arbeit geht es um Strukturbildung im Gleichgewicht.

1. Einführung

Auch das Chaos gruppiert sich um einen festen Punkt, sonst wäre es nicht einmal als Chaos da. [2]

(Arthur Schnitzler)

1.1. Strukturbildung

Von einer Struktur kann man ganz allgemein sprechen, wenn eine Mehrzahl von Einheiten in einer nicht-zufälligen Weise miteinander verbunden ist, so dass sich Regelmäßigkeiten zeigen.

Diese Definition des Soziologen HANS-PAUL BAHRDT [7] ist für alle praktischen Zwecke ausreichend: Atome gruppieren sich zu Kristallen, Sand formiert sich zu Dünen, aus kosmischem Staub werden Galaxien. Alle diese Dinge bezeichnen wir als Strukturen.

Schwierig wird es mit der notwendigerweise diskreten BAHRDTschen Definition erst, wenn man beginnt, Strukturen durch Gleichungen zu beschreiben. Die sich gruppierenden Einheiten weichen einem Kontinuum, und doch ist es möglich, die richtigen Strukturen daraus abzuleiten. Für die Gleichgewichtsgröße eines Wassertropfens spielen die Eigenschaften des einzelnen Wassermoleküls keine Rolle. Wichtig ist allein eine kollektive Eigenschaft, die Oberflächenspannung des Wassers. Auch die spontane Bildung eines Verkehrsstaus ist primär eine Funktion einer kontinuierlichen Größe, der mittleren Verkehrsdichte und hat nachweislich nichts mit der Intelligenz der übrigen Verkehrsteilnehmer zu tun [1].

Eine physikalisch fundiertere Formulierung des Begriffes der Struktur muss demzufolge berücksichtigen, dass die Entität und ihre Gruppierung zu einer anderen Begriffsklasse gehört als die daraus abgeleitete Struktur. Hier kommt eine gewisse Komplementarität der oft salopp in einem Atemzug gebrauchten Begriffe *Selbstorganisation* und *Strukturbildung* zum Tragen: Die Art der Gruppierung von Entitäten bezeichnet man, ob sie nun eine Struktur bilden oder nicht, als *Organisation*, während die Struktur selbst als eine räumlich oder zeitlich lokalisierbare Regelmäßigkeit auf einem zuvor homogenen System zu erkennen ist.

Auch die Nicht-Zufälligkeit der Beziehungen zwischen den Entitäten verschwindet in physikalischen Systemen: Welche Pivalinsäure-Moleküle sich zusammenfinden, um zum Keim eines neuen Dendriten zu werden, hängt vollständig vom Zufall ab, ebenso die Auswahl jedes weiteren, das die Struktur mit der Zeit wachsen lässt – die Organisation ist vom Zufall bestimmt, die Struktur hingegen nicht.

Was von der anfänglichen Definition übrigbleibt, sind räumliche oder zeitliche Regelmäßigkeiten irgendeiner Messgröße eines zuvor hinsichtlich dieser Größe homogenen Mediums. Damit ist der Begriff der Struktur völlig von den Eigenschaften der Elemente dieses Mediums abgekoppelt.

Die *Strukturbildung* bezeichnet nun den Übergang vom homogenen zum strukturierten Zustand. Sie ist mit dem Konzept der *Symmetriebrechung* verbunden, das in der Tat noch allgemeiner ist als die obige Beschreibung: unter Antrieb durch eine symmetriebrechende Kraft

geht das System oberhalb eines kritischen Wertes dieser Kraft in einen Zustand niedrigerer Symmetrie über. Ein gängiges Beispiel bringt PHILIP BALL [8]: Eine homogene Ölschicht in einer Pfanne sieht gleichförmig aus, egal aus welcher Richtung man sie betrachtet. Erhöht man die Temperatur, dann bilden sich plötzlich hexagonale Konvektionsmuster, und es gibt, von Randeffekten abgesehen, nur noch sechs Richtungen, aus denen man exakt das gleiche beobachtet: eine niedrigere Symmetrie hat sich eingestellt.

Die Definition über eine Symmetriebrechung ist auch vorteilhaft, wenn man sich folgende Überlegung vor Augen führt: Die Moleküle des Öls in der Pfanne sind selbst bereits das Resultat mehrerer Symmetriebrechungen, von den Elementarteilchen über die Atome und die Moleküle im Gas bis zur Flüssigkeit. Aus diesem Blickwinkel werden die Entitäten des Beispiels selbst zu Strukturen, wenn man sich die Hierarchie von Symmetriebrechungen hinabbeugt. Die Definition einer Struktur hängt somit schließlich auch davon ab, welchen Ausschnitt der Realität man betrachtet: Struktur ist, was entsteht, wenn ein wohldefiniertes System seine Symmetrie vermindert.

Geht es darum, Strukturbildung mathematisch zu erfassen, dann wird sofort das Prinzip der Nichtlinearität wichtig. Wenn eine Struktur, gesteuert durch eine symmetriebrechende Kraft – den Kontrollparameter – spontan „aus dem Nichts“ entsteht, kann die Größe, anhand derer sich die Struktur manifestiert, nicht linear von dem Parameter abhängen. Man untersucht folglich nichtlineare Gleichungen, und die Parameter der Symmetriebrechung erhält man durch Linearisierung dieser Gleichungen: Das Einsetzen einer Instabilität ist durch eine Wellenzahl q_0 und eine Frequenz ω_0 gekennzeichnet. Eine einfache Klassifizierung von Instabilitäten erfolgt aufgrund der Unterscheidung, ob einer der beiden kritischen Parameter Null ist.

Die in dieser Arbeit untersuchten Strukturen sind vom Typ ($q_0 \neq 0, \omega_0 = 0$), also periodisch im Raum und stationär in der Zeit. In der Klassifikation von CROSS und HOHENBERG bezeichnet man die damit verbundenen Mechanismen als I_S -Instabilitäten [17].

1.2. Die GRINFELDinstabilität

Eine Reihe von Modellsystemen ist bekannt, deren gemeinsame Eigenschaft darin besteht, dass sich aus einer anfänglich glatten Oberfläche unter der Wirkung eines externen Feldes eine strukturierte Oberfläche entwickelt.

Formal mit der GRINFELDinstabilität verwandt ist beispielsweise die ROSENSWEIGinstabilität einer Ferrofluidoberfläche, bei der sich unter Einfluss eines externen Magnetfeldes Stachelstrukturen ausbilden [19, 21, 55]. Ähnliche Effekte können auch durch elektrische Felder hervorgerufen werden (Elektrostrikation).

Die GRINFELDinstabilität dagegen wird durch elastische Felder verursacht. Dies widerspricht zunächst der Alltagserfahrung: Unter den Wirkungen von Elastizität stellt man sich gemeinhin keine Strukturbildung vor. Zieht man an einem Festkörper, so ändert sich seine Länge, aber die Oberfläche bleibt eben. Drückt man stattdessen, dann geschieht zunächst ebenfalls nichts mit der Oberfläche, bis eine andere Instabilität stattfindet: die EULERSche Knickinstabilität. Doch abgesehen von einer makroskopischen Verbiegung bleibt auch hier

die Oberfläche erhalten.

Der Widerspruch löst sich auf, wenn wir den Atomen auf der Oberfläche die Möglichkeit geben, ihren Platz zu verlassen und sich an einer neuen Stelle wieder anzulagern. Solche Transportprozesse sind im Alltag zumeist unterdrückt, da die Temperaturen der Oberflächen zu niedrig sind. Daher kann die GRINFELDinstabilität selten direkt beobachtet werden.

Begünstigen wir aber die Fähigkeit zur Gestaltänderung, indem wir den Festkörper beispielsweise bei hohen Temperaturen unter Hochvakuum entstehen lassen (Dünnschichttechnologie), mit seiner Schmelze in Kontakt bringen (Eis im Wasser) oder mit einer konzentrierten Lösung desselben Stoffes (gesättigte Salzlösungen), wobei er jeweils einer nichthydrostatischen Spannung unterliegt, so wird sich die Festkörperoberfläche verändern. Wie sich zeigt, ist es bei gleicher elastischer Spannung für einen Festkörper tatsächlich energetisch günstiger, eine strukturierte Oberfläche zu entwickeln – jeder Festkörper unter elastischer Spannung hat die Tendenz dazu.

Betrachtet man ausschließlich den Effekt der Verringerung der elastischen Energie, so ist zwar eine Strukturierung erklärbar, jedoch ist kein kritischer Parameter des Übergangs von der unstrukturierten zur strukturierten Oberfläche erkennbar. Jeder noch so gering elastisch verspannte Körper würde im Laufe der Zeit Strukturen entwickeln. Folglich benötigen wir einen Mechanismus, der der Instabilität entgegenwirkt, und dabei handelt es sich um die allgegenwärtige Oberflächenspannung. Sie sorgt auf kleinen Längen (Kapillarität) für eine Stabilisierung der Oberfläche. Andere Effekte können die Instabilität auf großen Längen stabilisieren: die Schwerkraft, die Art und Weise der Applikation der elastischen Spannung, und schließlich auch die Art des Transportmechanismus selbst: wenn lediglich Oberflächendiffusion vorliegt, dann leuchtet ein, dass die Bildung einer Struktur um so länger dauert, je größer ihre Ausdehnung ist (einen Hinweis darauf liefert bereits die lineare Theorie, vgl. [Abbildung 3.2](#) auf Seite 24).

Die GRINFELDinstabilität wird also im allgemeinen in einem nach oben und unten begrenzten Fenster endlicher Wellenzahlen räumlich periodische Strukturen ausbilden.

Die Literatur zur GRINFELDinstabilität ist vielfältig. Von ASARO und TILLER [5] zuerst untersucht und unabhängig von GRINFELD „wiederentdeckt“ [28–30] wurde sie mit den Arbeiten von NOZIÈRES [52, 53] einem breiteren Fachpublikum bekannt.

Eine frühe Arbeit über elastische Oberflächeninstabilitäten stammt von HUTCHINSON et. al [36].

Wegen der besonderen technischen Bedeutung gibt es eine unüberschaubare Anzahl von Publikationen über dünne Schichten und selbstorganisiertes Wachstum von Halbleiterstrukturen [12, 14, 16, 24, 32, 60, 64].

Zykloiden als Ansatzfunktionen wurden von GAO et. al erstmalig benutzt [15] und später von uns auf Doppelzykloiden erweitert [38]. Multizyklen als Ansatzfunktionen wurden etwa zeitgleich auch von YU et. al benutzt [72]. Die Behandlung mit Amplitudengleichungen ist eine Domäne von K. KASSNER [40]. Die Verbindung der GRINFELDinstabilität mit der Bildung von Rissen wird beispielsweise von BRENER et. al [13, 62] und von LEVERMANN und PROCACCIA [48] behandelt.

Schließlich wurde von J. KAPPEY im Rahmen seiner Dissertation nachgewiesen, dass die

MULLINS-SEKERKA-Instabilität durch die Anwesenheit elastischer Felder beeinflusst werden kann [37].

Im Folgenden werden einige experimentelle Beispielsysteme vorgestellt.

1.2.1. ^4He . Das TORII-BALIBAR-Experiment

Das TORII-BALIBAR-Experiment [69, 70] zählt zu den wenigen direkten experimentellen Untersuchungen der GRINFELDinstabilität. Im Experiment wird festes ^4He im Kontakt mit einer suprafluiden Phase desselben Materials untersucht. Modulationen der Oberfläche können sich in diesem System über den Mechanismus von Schmelzen und Rekristallisieren bilden.

Dieses wegen der tiefen Temperaturen experimentell aufwändige System bietet den großen Vorteil, dass das Material extrem weich ist und einen geringen Dichtekontrast aufweist¹. Dies führt zu Strukturen auf sichtbaren Skalen; es entstehen Furchen in einem Abstand von etwa 8 mm.

Das Experiment wurde in einer Druckzelle (im Original *strain cell*) durchgeführt, die es gestattet, der festen Substanz durch Regulierung der elektrischen Spannung an zwei Piezoelementen eine definierte uniaxiale Spannung aufzuprägen. Die Instabilität tritt erwartungsgemäß jenseits einer kritischen Spannung auf, die im Rahmen der experimentellen Gegebenheiten gut mit den Vorhersagen der linearen Theorie übereinstimmt.

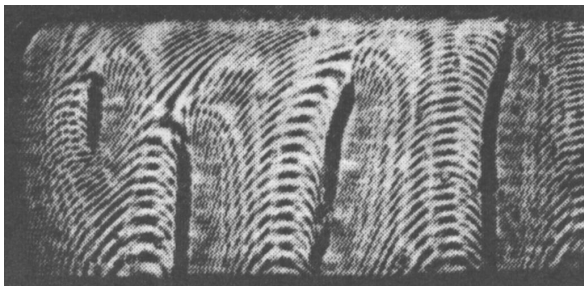


Abbildung 1.1.: Eine der Aufnahmen aus [70]. Die Furchen, die durch die GRINFELDinstabilität verursacht werden, sind als schwarze senkrechte Streifen deutlich zu erkennen.

1.2.2. Polymere, Salze, Basalt

An einer Reihe weiterer experimenteller Systeme wurden im Zusammenhang mit der GRINFELDinstabilität beachtenswerte Experimente durchgeführt. In einer Arbeit von BERRÉHAR et. al aus dem Jahr 1992 wird über einkristalline Filme aus Polydiazetylen berichtet, die durch Elektronenbeschuss auf dem Monomersubstrat derselben Substanz erzeugt wurden [11].

Das Experiment zeigte eine mittels Atomkraftmikroskopie vermessene Strukturierung der Oberfläche. Die GRINFELDinstabilität tritt dabei in Form von Oberflächenstrukturen (WRINKLES) auf, verbunden mit einem sekundären Effekt, der Ausbildung von parallelen Rissen im

¹ Wir haben $g = 9.81 \text{ m s}^{-2}$, $\gamma = 2 \cdot 10^{-4} \text{ J m}^{-2}$, $\Delta\rho = 18 \text{ kg m}^{-3}$, was $k = 939.67 \text{ m}^{-1}$ bzw. $\lambda = 6.69 \cdot 10^{-3} \text{ m}$ ergibt, in enger Übereinstimmung mit den Messungen ($\approx 8 \cdot 10^{-3} \text{ m}$).

Abstand von wenigen Mikrometern bei Schichtdicken größer als etwa 175 nm. Das Experiment nimmt von den beteiligten Größenordnungen her eine Zwischenposition zwischen den Halbleitern und dem Helium ein.

Ungeachtet dessen eignet sich diese Arbeit weniger als Grundlage theoretischer Betrachtungen. Der Grund dafür liegt in der Undefiniertheit der Grenzschicht zwischen Polymer und Monomer. Die eindringenden Elektronen weisen eine gewisse Breite in der Verteilung der Eindringtiefen auf. Daher existiert eine Übergangszone, in der polymerisierte Bereiche und Monomere abwechseln. Zudem findet an der Oberfläche kein Transport statt, sondern es geschieht lediglich eine bevorzugte Polymerisation in bestimmten Richtungen. Der Prozess ist damit hochgradig von der Zeit und von den Anfangsbedingungen abhängig.

Ein interessantes neueres Experiment beschäftigt sich mit einem Kristall aus Natriumchlorat, der sich in seiner gesättigten Lösung befindet und von oben her unter Spannung gesetzt wird [45].

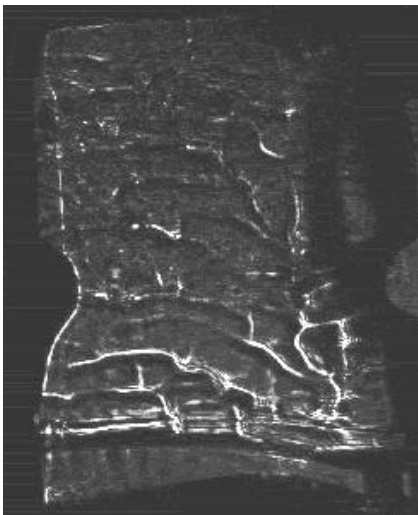


Abbildung 1.2.: Natriumchloratkristall unter Spannung. Das Bild ist Teil eines Videos, das freundlicherweise von DANIEL KÖHN zur Verfügung gestellt wurde.

Die Abbildung 1.2 zeigt ein Bild aus dem ersten Drittel des Experimentes. Der Kristall hat hier bereits eine strukturierte Oberfläche ausgebildet, die sich im Lauf des Experimentes weiter vergrößert. Das Experiment hat eine Gesamtlaufzeit von mehr als 300 Stunden. Ein interessanter und bisher unverstandener Aspekt ist die Ausbildung einer erneut glatten Oberfläche im untersten Teil des Bildes. Dieser Bereich weitet sich im Lauf des Experimentes nach oben aus und ist vermutlich mit einer Konzentrationswelle in der Lösung assoziiert. Zudem befindet sich in dem Experiment die Oberfläche parallel zur Schwerkraftrichtung, was eine theoretische Einordnung zusätzlich erschwert.

Das Natriumchlorat-Experiment stammt aus dem Bereich der Geowissenschaften. Hier existieren noch weitere Phänomene, an deren Entstehung die GRINFELDinstabilität zumindest beteiligt sein dürfte. Gemeint ist die Erstarrung von Basalt, in deren Verlauf sich in Verbindung mit abkühlungsbedingten Spannungen im Idealfall hexagonale Oberflächenstrukturen bilden. Diese führen in den Furchen zu Rissbildung und in der Folge zu den oft beobachteten hexagonalen Basaltsäulen. Die Reihe der Untersuchungen zu diesem Phänomen ist

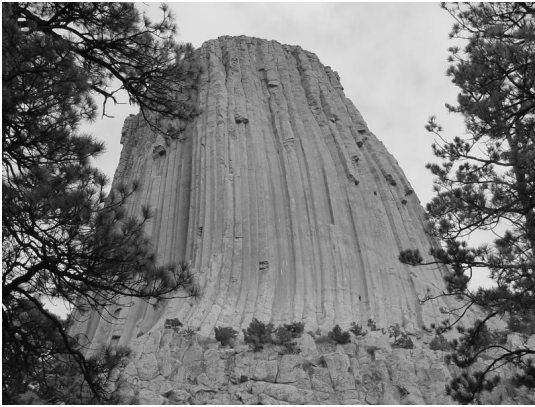


Abbildung 1.3.: Basaltsäulen. Der Devil's Tower in Wyoming (USA) ist eines der eindrucksvollsten Beispiele für Basaltsäulen. www.newyoming.org/DevilsTower/PhotoAlbum/ Siehe auch [50].

vielfältig [6, 18, 31, 34, 42, 47, 49, 57].

1.2.3. Kopplung mit chemischer Strukturbildung: PA–MB–O

Ein interessantes System, das im Hinblick auf die GRINFELDDinstabilität noch weitgehend unerforscht ist, sind dünne Schichten polymerisierender Gele.

Das hier vorgestellte Experiment wird eigentlich mit der Absicht untersucht, Turingstrukturen zu erforschen. Das Polyacryl-Methylenblau-Sauerstoff- oder kurz PA–MB–O-System zeigt in der Tat hexagonale Reaktionsmuster (Abbildung 1.4) [68].

Nun zeigt sich, dass die farblich erkennbaren Muster mit ebensolchen Strukturen der Oberfläche selbst einhergehen, die einen Durchmesser von wenigen Millimetern und eine Höhe von weniger als einem Millimeter besitzen. Die Interpretation als Kopplung mit elastischen Effekten während der Polymerisation des Gels liegt nahe. Untersuchungen hierzu stehen noch aus.

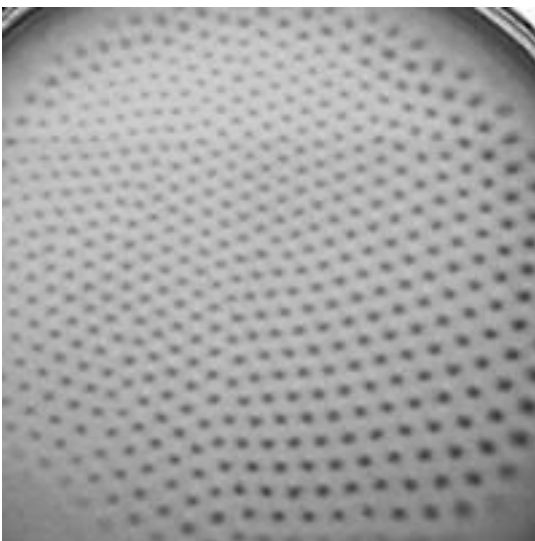


Abbildung 1.4.: Polyacryl-Methylenblau-Sauerstoff (PA–MB–O)-System. Deutlich treten die Hexagonmuster an der Oberfläche zutage. (Aufnahme von E. KASPER)

Inzwischen existiert auch eine Reihe von theoretischen Untersuchungen zu den Eigenschaften von Geloberflächen unter Spannung [20, 54, 58].

1.2.4. Kopplung mit Gittereffekten auf kleinen Skalen: Epitaxie

Im Bereich der Halbleitertechnologie entstehen Strukturen, die mit der GRINFELDinstabilität assoziiert werden, auf sehr viel kleineren Skalen. Lässt man eine dünne Schicht per MBE² sehr langsam wachsen, so dass ihre Atome ausreichend Zeit haben, per Oberflächendiffusion einen energetisch begünstigten Ort zu finden, so bildet sich zuerst eine Schicht mit der Gitterkonstanten des zugrundeliegenden Substrates, die eine enorme mechanische Spannung enthält. Später beginnt die Oberfläche, strukturiert weiterzuwachsen und dabei Pyramiden zu bilden, deren Spitzen elastisch relaxiert sind. Diesen Effekt bezeichnet man als versetzungs-freies STRANSKI-KRSTANOFF-Wachstum.



Abbildung 1.5.: TEM-Aufnahme eines Quantenpunktes.

Ein besonders schönes Beispiel³ zeigt das Bild 1.6, das ein vergrößerter und digital nachbearbeiteter Ausschnitt des Bildes 1.5 ist. Die Atome, gekennzeichnet durch helle Flecken, ordnen sich an der Unterseite, in der Nähe zum Substrat, in der gleichen Weise an wie das darunterliegende Gitter.

Die sich bildenden Strukturen sind üblicherweise facettiert; oft erhält man Pyramiden. In diesen Systemen spielen also neben der Endlichkeit der Schichtdicke die Kristallpotenziale eine Rolle – eine Möglichkeit der zukünftigen Erweiterung der Theorie.

1.3. Zielstellung dieser Arbeit

Unter der GRINFELDinstabilität bilden sich unter bestimmten Umständen – begrenzte Systemgröße, dünne Schichten – stationäre Strukturen aus. Diese sind durch ein Minimum der

² Unter http://www.ece.utexas.edu/projects/ece/mrc/groups/street_mbe/mbechapter.html findet man im Internet eine Einführung in die Molekularstrahlepitaxie.

³ Der Abdruck der Bilder 1.5 und 1.6 erfolgt mit freundlicher Genehmigung von GEORGE ADE, Physikalisch-Technische Bundesanstalt, Braunschweig. (<http://www.ptb.de/de/org/2/24/2404/verzerrung.htm>)

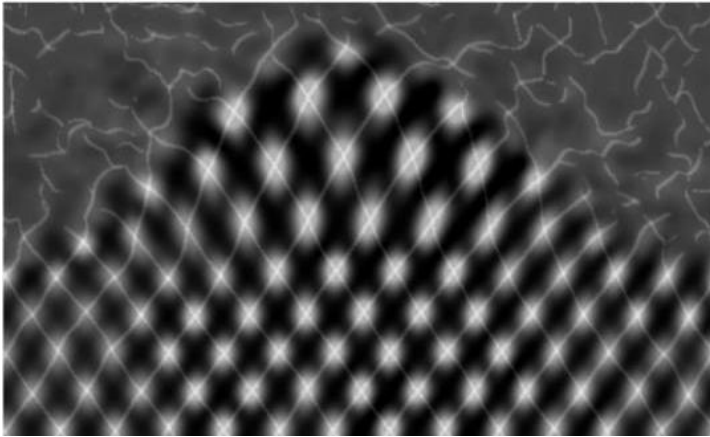


Abbildung 1.6.: Vergrößerter und nachbearbeiteter Ausschnitt aus Abbildung 1.5, durch den die elastische Relaxation in der Spitze der Quantenpunktstruktur besonders gut sichtbar wird.

freien Energie gekennzeichnet. Das Auffinden dieser Zustände ist für das nähere Verständnis verschiedenster experimenteller Situationen von Interesse. Darüberhinaus können sie der Validierung zukünftiger dynamischer Simulationen dienen.

Folgende Aufgaben stellen sich also:

1. Die schwach-nichtlineare Analyse einer Reihe von Systemen, darunter insbesondere dünner Schichten, unter verschiedenen Vorspannungen und die Klassifizierung möglicher stationärer Muster in Abhängigkeit von diesen Bedingungen.
2. Die genauere Charakterisierung bekannter Lösungen mit großer Amplitude, d.h. in großem Abstand von der ebenen Ausgangssituation. Hierzu dienen die Entwicklung der Oberfläche in hohe Ordnungen sowie alternative, dem Problem angemessenere Ansätze.

2. Grundlagen

2.1. Chemisches Potenzial und Randbedingungen

Die Dynamik der GRINFELDinstabilität wird durch das chemische Potenzial der Festkörpergrenzfläche $\zeta(\mathbf{x})$ beherrscht. Dieses setzt sich in den hier zu behandelnden Modellen aus drei Anteilen zusammen. Der elastische Teil des chemischen Potenzials lautet für die Grenzfläche eines dreidimensionalen Körpers abgesehen von Vorfaktoren [10]

$$\Delta\mu_E = \frac{1}{2E_Y} \left[(1 + \nu) \sigma_{ij}|_{z=\zeta(x)} \sigma_{ij}|_{z=\zeta(x)} - \nu \left(\sigma_{kk}|_{z=\zeta(x)} \right)^2 \right], \quad (2.1a)$$

und er reduziert sich in zwei Dimensionen (also bei einer eindimensionalen Grenzfläche) unter Annahme von „plane strain“ für $p = 0$ auf [38]

$$\Delta\mu_E = \frac{1 - \nu^2}{2E_Y} \left((\text{Tr}\sigma)^2|_{z=\zeta(x)} \right). \quad (2.1b)$$

Dabei sind E_Y der YOUNGSche Elastizitätsmodul und ν die POISSONSche Querkontraktionszahl. In dieser Formulierung bezeichnet σ_{ij} nicht in jedem Fall den tatsächlichen Spannungstensor im Festkörper. In Problemen mit einer Flüssigkeit als umgebendem Medium spielt deren Druck p eine Rolle, und die allgemeine Randbedingung an der Grenzfläche lautet

$$\sigma_{nn} = -p \qquad \sigma_{nt} = 0. \quad (2.2a)$$

Ohne Einschränkung der Allgemeinheit kann man den hydrostatischen Anteil aus dem Problem abziehen. Man transformiert also den Spannungstensor mittels $\sigma_{ij} \rightarrow \sigma_{ij} - \sigma_{nn}\delta_{ij}$, und wir betrachten ab sofort ausschließlich den solcherart reduzierten Spannungstensor (der auch in den Gleichungen (2.1) steht). Die Randbedingung an der oberen Grenzfläche lautet dann in jedem Fall

$$\sigma_{nn} = 0 \qquad \sigma_{nt} = 0 \quad (2.2b)$$

oder

$$\sigma \mathbf{n} = \mathbf{0}. \quad (2.2c)$$

Zusammen mit der elastischen Gleichgewichtsbedingung im Inneren des Festkörpers

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} = 0 \quad (2.3)$$

und der Forderung nach dem Verschwinden der Veränderungen im Spannungstensor bei $z = -\infty$ ist das elastische Feld eines Halbraumes vollständig determiniert. In Mehrschichtsystemen sind zudem weitere Randbedingungen für Fest-Fest-Grenzflächen zu berücksichtigen [66]. Man fordert [65] zwischen den Medien A und B die Kontinuität der Verschiebungen

$$\mathbf{u}^A = \mathbf{u}^B, \quad (2.4a)$$

Darüberhinaus erfordert das Kräftegleichgewicht die Bedingung

$$\sigma^A \mathbf{n} = \sigma^B \mathbf{n}, \quad (2.4b)$$

wobei \mathbf{n} der Normalenvektor zur Grenzfläche zwischen A und B ist. Im Falle einer planaren Grenzfläche vereinfacht sich Gleichung (2.4b) zu

$$\sigma_{3i}^A = \sigma_{3i}^B. \quad (2.4c)$$

Im elastischen Gleichgewicht gelten innerhalb des Festkörpers auch die BELTRAMI-MICHELL-Gleichungen [46].

$$(1 + \nu) \Delta \sigma_{ij} + \frac{\partial^2 \sigma_{kk}}{\partial x_i \partial x_j} = 0. \quad (2.5)$$

Aus diesen kann man unter anderem folgern, dass die Komponenten des Spannungstensors die biharmonische Gleichung

$$\Delta \Delta \sigma_{ij} = 0 \quad (2.6)$$

erfüllen. Diese Tatsache wird zusammen mit der Methode der AIRYfunktion in den zweidimensionalen Modellen als Grundlage zur Bestimmung der Komponenten des elastischen Spannungsfeldes in drei Dimensionen dienen.

Die übrigen Terme des chemischen Potentials resultieren aus der Krümmung und aus der Schwerkraft, und lauten

$$\Delta \mu_S = -\gamma \kappa \quad \Delta \mu_G = g \Delta \rho \zeta(x) \quad (2.7)$$

mit γ als Oberflächenspannung und κ als mittlerer Krümmung. g ist die Fallbeschleunigung und $\Delta \rho$ der Dichtekontrast zwischen Festkörper und umgebendem Medium (wobei $\Delta \rho$ positiv ist, wenn die Dichte des Festkörpers größer als die der Flüssigkeit ist).

2.2. Die Dynamik der Grenzfläche

Die Dynamik der Grenzfläche beschreibt man dann, indem man die Normalgeschwindigkeit durch die Änderung des chemischen Potentials ausdrückt. Im Falle eines Festkörpers im Kontakt mit seiner Schmelze wäre das einfach

$$v_n = -\frac{1}{k} \Delta \mu \quad (2.8a)$$

mit einem Mobilitätskoeffizienten k . Für eine Oberfläche, auf der primär Oberflächendiffusion abläuft, setzt man stattdessen

$$v_n = D\Delta\mu \quad (2.8b)$$

mit einer Diffusionskonstanten D . Ein stationärer Zustand wäre dadurch gegeben, dass man $v_n = 0$ fordert.

2.3. Betrachtungen anhand der freien Energie

Betrachten wir nun die Änderung der freien Energie des Festkörpers durch Modulation seiner zuvor ebenen Grenzfläche durch eine Funktion $\zeta(x)$. Die anfangs homogene Energiedichte w_0 wird modifiziert. Ihr allgemeiner Ausdruck ist (z.B. [59])

$$w(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \sigma_{ij} u_{ij} . \quad (2.9)$$

Wir werden die Verzerrungen u_{ij} durchweg mittels des HOOKEschen Gesetzes über die Spannungen ausdrücken¹ (vgl. [46]):

$$u_{ij} = \frac{1}{E_Y} [(1 + \nu) \sigma_{ij} - \nu \sigma_{ll} \delta_{ij}] . \quad (2.10)$$

Einsetzen von (2.10) in (2.9) ergibt nach Vereinfachung für die elastische Energiedichte den Ausdruck²

$$w(\mathbf{x}) = \frac{1}{2E_Y} [(1 + \nu) \text{Tr}(\sigma^2) - \nu \text{Tr}(\sigma)^2] . \quad (2.11)$$

Die Verwendung des HOOKEschen Gesetzes weist auf eine Grenze aller hier behandelten Modelle hin. Wir gehen in jedem Fall von der Gültigkeit der linearen Elastizitätstheorie aus. Da sich in Cusp-artigen Morphologien sehr hohe lokale elastische Energiedichten einstellen können, ist dieser Punkt zumindest in solchen Extremfällen diskussionswürdig.

Die freie elastische Energie ist schließlich das Integral der Änderung der Energiedichte über das Gesamtvolumen des Festkörpers. Dabei sei das Teilintegral über die Oberfläche als

¹ Dabei ist δ_{ij} wie üblich 1, falls $i=j$, und sonst 0.

² Mit den Invarianten des Spannungstensors

$$I_1 = \text{Tr}(\sigma) \quad I_2 = \frac{1}{2} \left(\text{Tr}(\sigma)^2 - \text{Tr}(\sigma^2) \right) \quad I_3 = \det \sigma$$

gilt

$$w(\mathbf{x}) = \frac{1}{E} \left[\frac{1}{2} I_1^2 - (1 + \nu) I_2 \right] .$$

Diese Formel ist allerdings nicht im zweidimensionalen Fall gültig; ein Analogon wird in Kapitel 3.1 hergeleitet. Im Übrigen sieht man, dass die Energiedichte an der Oberfläche bis auf einen Vorfaktor mit dem chemischen Potenzial übereinstimmt.

Mittelung aufzufassen und nur die Integration senkrecht dazu wird explizit geschrieben:

$$E_E = \left\langle \int^{\zeta(x)} dz (w(\mathbf{x}) - w_0) \right\rangle. \quad (2.12)$$

Die untere Integrationsgrenze hängt vom betrachteten System ab, in dieser Arbeit ist sie entweder $-\infty$ oder eine endliche Tiefe $-L$.

Aufgrunddessen, dass nur die *Änderung* der freien Energie betrachtet wird, wurde der Anteil aus der homogenen Vorspannung subtrahiert. Die Subtraktion ist in dieser Form statthaft, wenn die Oberfläche im Mittel bei Null bleibt, da sich dann die Fläche des Integrationsgebietes nicht verändert.

Die anderen Beiträge zur freien Energieänderung berechnen sich wie folgt: Die Oberflächenenergie ist proportional zum Gewinn an Fläche und beträgt daher

$$E_S = \gamma \left\langle \sqrt{1 + \zeta_x^2 + \zeta_y^2} - 1 \right\rangle. \quad (2.13a)$$

Für die Änderung der potenziellen Energie betrachten wir am Punkt (x, y) eine infinitesimal breite Säule der Höhe $\zeta(x, y)$. Sie hat die Masse $m = \Delta\rho \zeta(x, y) d\tau$, wobei $\Delta\rho$ wieder der Dichtekontrast des Festkörpers zum umgebenden Medium und g die Erdbeschleunigung sind. Für die potenzielle Energie ist die Schwerpunkthöhe, also $^{1/2} \zeta(x, y)$, maßgeblich. Folglich ist

$$E_G = \frac{g \Delta\rho}{2} \langle \zeta(x, y)^2 \rangle. \quad (2.13b)$$

Wir haben damit Ausdrücke für die Änderung aller beteiligten Energieformen abgeleitet. Lassen wir die Mittelungsklammern weg, so haben wir die Änderung der freien Energie als Funktional der Oberfläche $\zeta(x)$. Ein Extremum $\zeta(x)$ der Variationsaufgabe

$$\delta E = \delta [E_E + E_S + E_G] = 0 \quad (2.14)$$

hat man bekanntlich dann gefunden, wenn die Differenzialgleichung

$$\frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial E}{\partial \zeta'(x)} - \frac{\partial E}{\partial \zeta(x)} = 0 \quad (2.15)$$

erfüllt ist. Dies ist aber gerade identisch mit dem Verschwinden des chemischen Potentials, und damit sind beide Herangehensweisen äquivalent.

Nimmt man als Ansatz für $\zeta(x)$ ein Funktionensystem mit den Amplituden α_n , so ist die Lösung des Variationsproblems identisch mit der Lösung des Gleichungssystems

$$\frac{\partial E}{\partial \alpha_n} = 0. \quad (2.16)$$

Entwickelt man alle Größen konsistent in der Grundamplitude α_1 , dann ist das Auffinden eines Extremums auf die Nullstellenbestimmung eines Polynoms in α_1 reduziert. Diese Überlegung liegt der sogenannten Expansionsmethode zugrunde, die als Grundlage für die linearen

und schwach-nichtlinearen Berechnungen dient. Da das chemische Potenzial in diesem Falle nichts anderes ist als die Ableitung der freien Energieänderung nach der Variablen α_1 , entspricht dieses Verfahren dem Auffinden der stationären Lösung einer entsprechenden Amplitudengleichung.

3. Zweidimensionale Modelle

Die Tiefe muss man verstecken. Wo? An der Oberfläche. [2]

(Hugo von Hoffmannsthal)

3.1. Die Grundgleichungen in den zweidimensionalen Modellen

Gehen wir nun etwas näher auf die spezielle Situation in zwei Dimensionen ein. Infolge der Vorspannung im Festkörper ändert sich zunächst die Position der Gleichgewichtsfläche, und zwar sowohl durch die hier nicht speziell berücksichtigte elastische Querkontraktion als auch – bei Systemen in Kontakt mit einer Flüssigkeit – durch die Änderung des chemischen Potentials. Die neue Gleichgewichtsfläche, die sich infolge beider Effekte einstellt, sei dann durch $z = 0$ beschrieben. Die Abweichung von der Fläche $z = 0$ ist die Funktion $\zeta(x)$. Wir suchen nach translations- und spiegelsymmetrischen Lösungen und benutzen daher für $\zeta(x)$ die Form

$$\zeta(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \alpha_n \cos(nkx) . \quad (3.1)$$

Die Terme (2.13a) und (2.13b) für die Oberflächenenergie und die potenzielle Energie kann man in zwei Dimensionen als

$$E_S = \gamma \left\langle \sqrt{1 + \zeta_x(x)^2} - 1 \right\rangle \quad E_G = \frac{g \Delta \rho}{2} \langle \zeta(x)^2 \rangle \quad (3.2)$$

ausdrücken. Da alle Energietermine über ein Grundintervall gemittelt werden, bezeichnen E_E , E_S und E_G Änderungen der mittleren Linien- bzw. (in drei Dimensionen) Flächendichten der freien Energie, jedoch wird meist vereinfachend die Bezeichnung Energien beibehalten.

Die Komponenten des Spannungstensors werden in zwei Dimensionen unter der Annahme des ebenen Spannungszustandes (*plane strain*) berechnet. Das HOOKEsche Gesetz wird also unter der Nebenbedingung formuliert, dass in der y -Richtung keine Deformation auftritt ($u_{yy} = 0$). Die Spannung in dieser Richtung verschwindet hingegen nicht. Das HOOKEsche Gesetz lautet unter diesen Voraussetzungen¹:

$$u_{ij} = \frac{1 + \nu}{E_Y} (\sigma_{ij} - \nu \sigma_{ll} \delta_{ij}) . \quad (3.3)$$

Die elastische Energiedichte wird berechnet, indem in Gleichung (2.9) unter Beachtung der Plane-Strain-Bedingung summiert wird. Einsetzen und Zusammenfassen führt auf

$$w(x, z) = \frac{1 - \nu^2}{2E_Y} \left(\text{Tr}(\sigma)^2 - \frac{2}{1 - \nu} \det(\sigma) \right) . \quad (3.4)$$

¹ Wir setzen in (2.10) zunächst $u_{yy} = 0$ ein. Daraus folgt $\sigma_{yy} = \nu (\sigma_{xx} + \sigma_{zz})$ und damit $\sigma_{ll} = (1 + \nu) (\sigma_{xx} + \sigma_{zz})$. Mit der Vereinbarung, dass i, j und l nur über x und z laufen, ergibt sich aus Gleichung (2.10) die Beziehung (3.3).

Durch Einsetzen des Vorspannungstensors $\sigma_{ij,0} = \sigma_0 \delta_{ix} \delta_{jx}$ in (3.4) folgt, dass die Energiedichte des Ausgangszustandes gerade

$$w_0 = \frac{\sigma_0^2 (1 - \nu^2)}{2E_Y} \quad (3.5)$$

beträgt. Da nur die Änderung gegenüber dem Ausgangszustand von Interesse ist, subtrahieren wir den Anteil der Vorspannung aus der Energiedichte. Integration und Mittelung des Differenzausdrucks ergibt die gesuchte Größe:

$$E_E = \frac{(1 - \nu^2)}{2E_Y} \left\langle \int_{-\infty}^{\zeta(x)} dz \left(\text{Tr}(\sigma)^2 - \frac{2}{1 - \nu} \det \sigma - \sigma_0^2 \right) \right\rangle. \quad (3.6)$$

3.1.1. Entdimensionalisierung

Eine drastische Vereinfachung erfährt in zwei Dimensionen die Berechnung der Komponenten des Spannungstensors. Bevor dafür der Formalismus der AIRYfunktion eingeführt wird, erfolgt die Entdimensionalisierung der beteiligten Größen. Diese Prozedur ist als Voraussetzung für die Expansionsmethode notwendig, da eine effiziente Implementierung eines umfangreichen Verfahrens voraussetzt, dass alle Größen so weit wie möglich vereinfacht werden. Da dies auf Kosten der Lesbarkeit hinsichtlich der tatsächlichen physikalischen Größenordnungen geschieht, wird an geeigneter Stelle auch auf die Rücktransformation eingegangen.

Der Spannungstensor wird entdimensionalisiert, indem man seine Komponenten in Einheiten der Vorspannung misst, also die Transformation

$$\sigma \rightarrow \sigma_0 \sigma, \quad (3.7)$$

durchführt. Es gilt also fortan

$$\sigma = \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}}_{\text{Vorspannung}} + \underbrace{\begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{xz} & \sigma_{zz} \end{pmatrix}}_{\text{Änderung}}. \quad (3.8)$$

In der Gleichung für die elastische Energie (3.6) treten nur quadratische Formen der Spannungskomponenten auf. Daher führt diese Transformation zu einem zusätzlichen Vorfaktor σ_0^2 :

$$E_E = \frac{\sigma_0^2 (1 - \nu^2)}{2E_Y} \left\langle \int_{-\infty}^{\zeta(x)} dz \left(\text{Tr}(\sigma)^2 - \frac{2}{1 - \nu} \det \sigma - 1 \right) \right\rangle. \quad (3.9)$$

Räumliche Größen werden in Einheiten des Grundintervalls der Reihe (3.1) gemessen. Faktoren der Form $\cos(kx)$ werden dann einfach zu $\cos(x)$. Differenziationen und Integrale erfor-

dem das Anbringen entsprechender Vorfaktoren, jedoch bleiben Integrale, die mit der Mittelwertberechnung assoziiert sind, davon unberührt:

$$\begin{aligned} kx \rightarrow x & \int d\{x, z\} (\dots) \rightarrow \frac{1}{k} \int d\{x, z\} (\dots) \\ kz \rightarrow z & \frac{d}{d\{x, z\}} (\dots) \rightarrow k \frac{d}{d\{x, z\}} (\dots) . \end{aligned} \quad (3.10)$$

Folglich muss im Vorfaktor von E_E ein Faktor k^{-1} berücksichtigt werden. Die Amplituden werden ebenfalls transformiert: $k\alpha_n \rightarrow \alpha_n$. Infolgedessen sind nun sowohl $\zeta(x)$ als auch seine Ableitung dimensionslos:

$$\zeta(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \alpha_n \cos(nkx) \rightarrow \sum_{n=1}^{\infty} \alpha_n \cos(nx), \quad \zeta_x(x) = - \sum_{n=1}^{\infty} n\alpha_n \sin(nx). \quad (3.11)$$

Da letztere im Rahmen einer Reihenentwicklung in allen geraden Potenzen auftreten wird, würden ohne Entdimensionalisierung beliebig hohe Potenzen von k auftreten.

In der Gleichung für die potenzielle Energie (3.2) entsteht aufgrund der Transformation der Amplituden ein Vorfaktor k^{-2} , den wir vor das Mittelungsintegral ziehen. Die Gleichungen (3.2) und (3.6) lauten nun

$$\begin{aligned} E_S &= \gamma \left\langle \sqrt{1 + \zeta_x(x)^2} - 1 \right\rangle, \quad E_G = \frac{g \Delta \rho}{2k^2} \langle \zeta(x)^2 \rangle, \\ E_E &= \frac{\sigma_0^2 (1 - \nu^2)}{2k E_Y} \left\langle \int_{-\infty}^{\zeta(x)} dz \left(\text{Tr}(\sigma)^2 - \frac{2}{1 - \nu} \det \sigma - 1 \right) \right\rangle. \end{aligned} \quad (3.12)$$

Alle dimensionsbehafteten Größen stehen jetzt in den Vorfaktoren der Mittelungsintegrale. Diese Faktoren kann man wiederum vereinfachen, indem man zwei für das Modell charakteristische Längenskalen l_1 und l_2 sowie ihr Verhältnis l_{12} einführt. Mit elastischen Energiedichte des vorgespannten Zustandes (3.5) lauten sie:

$$l_1 = \frac{\gamma}{2w_0} \quad l_2 = \frac{w_0}{g \Delta \rho} \quad l_{12} = \frac{l_1}{2l_2} = \frac{E_Y^2 \gamma g \Delta \rho}{\sigma_0^4 (1 - \nu^2)^2} \quad (3.13)$$

l_1 ist, abgesehen von einem Vorfaktor, als GRIFFITHLänge bekannt. Man beachte, dass l_{12} in Abwesenheit von Gravitation Null wird, da dann l_2 divergiert. Der Grund für die spezielle Definition von l_{12} liegt in der Möglichkeit, mit $l_{12} = 0$ das gravitationsfreie Modell und mit $l_{12} = 1$ gerade die kritische Situation des Modells mit Gravitation „einstellen“ zu können. Mehr Details dazu folgen in der linearen Stabilitätsanalyse. k ist nun als einzige dimensionsbehaftete Größe in den Gleichungen (3.12) enthalten. k wird mit Hilfe von l_1 dimensionslos gemacht:

$$k \rightarrow \frac{k}{l_1}. \quad (3.14)$$

Mit den Definitionen (3.5) und (3.13) formt man die Vorfaktoren in (3.12) zu

$$\gamma \rightarrow 2w_0l_1 \quad \frac{g \Delta\rho}{4k^2} \rightarrow \frac{w_0l_1^2}{4k^2l_2} = \frac{w_0l_1l_{12}}{2k^2} \quad \frac{1 - \nu^2}{2kE_Y} \sigma_0^2 \rightarrow \frac{w_0l_1}{k} \quad (3.15)$$

um. Jetzt enthalten die Gleichungen (3.12) alle einen gemeinsamen Faktor² $2l_1w_0k^{-2}$. Die Division durch diesen Faktor ergibt eine reduzierte Form der Energieänderung E_{red} :

$$E_{\text{red}} = \left\langle \frac{k}{2} \int_{-\infty}^{\zeta(x)} dz \left[\text{Tr}(\sigma)^2 - \frac{2}{1-\nu} \det \sigma - 1 \right] + k^2 \left[\sqrt{1 + \zeta_x(x)^2} - 1 \right] + \frac{l_{12}}{2} \zeta(x)^2 \right\rangle, \quad (3.16)$$

die als Grundlage für die Berechnungen in den zweidimensionalen Modellen dienen wird. Sie enthält nunmehr nur noch die dimensionslosen Parameter k und l_{12} ³ sowie die Amplituden der Funktion $\zeta(x)$. Die (nicht gemittelte) Energie ist nur von $\zeta(x)$ und $\zeta_x(x)$ abhängig. Sie nimmt daher einen Extremwert an, wenn die Gleichung

$$\frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial E}{\partial \zeta_x(x)} - \frac{\partial E}{\partial \zeta} = 0 \quad (3.17)$$

erfüllt ist, d.h. mit der Krümmung

$$\kappa = \frac{\zeta_{xx}(x)}{\sqrt{1 + \zeta_x(x)^2}^3} \quad (3.18)$$

gilt

$$\frac{k}{2} \left[\text{Tr}(\sigma)^2 - \frac{2}{1-\nu} \det \sigma - 1 \right]_{z=\zeta(x)} - k^2 \kappa + l_{12} \zeta(x) = 0. \quad (3.19)$$

Eine Extremallösung $\zeta(x)$ des Modells wird durch ihre mittlere quadratische Amplitude charakterisiert. Mit (3.11) definieren wir:

$$\bar{\alpha} = \sqrt{\langle \zeta(x)^2 \rangle} = \sqrt{\frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \alpha_n^2}. \quad (3.20)$$

Für Vergleiche mit [63] bilden wir mit dem dimensionslosen k aus $\bar{\alpha}$ (3.20) die Größe

$$\bar{a} = \frac{\bar{\alpha}}{k}. \quad (3.21)$$

² k^2 wird nur deshalb in diesen Faktor einbezogen, damit keine Größen im Nenner stehen bleiben und potenzielle numerische Probleme bei der Behandlung von Situationen bei kleinen k von vornherein vermieden werden.

³ Für die schnelle Rücktransformation von Ergebnissen, die aus der Minimierung der Gesamtenergie gemäß Gleichung (3.16) bzw. der Lösung der zugeordneten Extremalbedingung gewonnen werden, in „physikalische“ Einheiten seien hier zusammenfassend die entsprechenden Vorschriften angegeben: $E \rightarrow E\gamma, k \rightarrow kl_1^{-1}, a_n \rightarrow \alpha_n k^{-1} l_1$.

3.1.2. Der Formalismus der AIRYfunktion

Die Berechnung des Spannungstensors ist in zwei Dimensionen erheblich einfacher als in drei. Grundlage der Berechnungen ist die AIRYSche Spannungsfunktion⁴ [46], die mit χ bezeichnet wird. Sie ist eine biharmonische Funktion, d.h. es gilt mit dem zweidimensionalen LAPLACE-operator $\Delta \equiv \partial_{xx} + \partial_{zz}$

$$\Delta \Delta \chi = 0. \quad (3.22)$$

Ihre konkrete Form muss aus den Randbedingungen des Problems bestimmt werden. Wenn man aus χ die Elemente des Spannungstensors durch Ableitung nach dem Schema

$$\sigma_{xx} = \frac{\partial^2 \chi}{\partial z^2} \quad \sigma_{xz} = -\frac{\partial^2 \chi}{\partial x \partial z} \quad \sigma_{zz} = \frac{\partial^2 \chi}{\partial x^2} \quad (3.23)$$

berechnet, so sind die elastischen Gleichgewichtsbedingungen automatisch erfüllt. Es folgt unmittelbar, dass die Spur in Gleichung (3.16) direkt durch die AIRYfunktion ausgedrückt werden kann:

$$\text{Tr}(\sigma) = 1 + \Delta \chi. \quad (3.24)$$

In dieser Formulierung ist die Vorspannung im Gesamt-Spannungstensor σ enthalten, und χ erzeugt nur die Abweichungen von der Vorspannung. Wollte man auch die Vorspannung in χ erfassen, müsste man einen zusätzlichen Term $\frac{1}{2}z^2$ berücksichtigen.

Die allgemeine Form der AIRYfunktion für das Spannungsfeld einer Halbebene lautet [59]

$$\begin{aligned} \chi = & \sum_{n=1}^{\infty} (A_n e^{nkz} + B_n e^{-nkz} + C_n z e^{nkz} + D_n z e^{-nkz}) \cos(nkx) + \\ & \sum_{n=1}^{\infty} (A_n^* e^{nkz} + B_n^* e^{-nkz} + C_n^* z e^{nkz} + D_n^* z e^{-nkz}) \sin(nkx) \end{aligned} \quad (3.25)$$

Da in dieser Arbeit ausschließlich translations- und spiegelsymmetrische Lösungen behandelt werden, entfallen die Koeffizienten A_n^* , B_n^* , C_n^* und D_n^* .

Der Ansatz (3.25) muss analog zu den Grundgleichungen in eine dimensionslose Form gebracht werden (vgl. Kapitel 3.1.1). Unter Berücksichtigung nur der ersten Zeile von Gleichung (3.25) schreibt man⁵:

$$\chi = \sum_{n=1}^{\infty} (A_n e^{nz} + B_n e^{-nz} + C_n z e^{nz} + D_n z e^{-nz}) \cos(nx), \quad (3.26)$$

wobei die Koeffizienten in (3.25) und (3.26) nicht identisch sind. Bezieht sich das Problem auf ein Gebiet, das in negativer z -Richtung unendlich ausgedehnt ist, so entfallen auch B_n und D_n .

⁴ Wir werden abkürzend den Ausdruck „AIRYfunktion“ benutzen. Dabei ist der Unterschied zu dem in der Mathematik ebenfalls gebräuchlichen Begriff der AIRYfunktion zu betonen, der für Lösungen der Gleichung $w''(z) - zw(z) = 0$ verwendet wird.

⁵ Um dimensionslose, von k unabhängige Koeffizienten zu erhalten, muss die transformierte AIRYfunktion außerdem mit einem Faktor k^{-2} versehen werden, da jede Differenziation in transformierten Koordinaten einen Faktor k erzeugt (Gl. 3.10). Dieser Schritt wird implizit vorausgesetzt.

3.2. Das semiinfinite Modell und seine Behandlung mit der Expansionsmethode

3.2.1. Eigenschaften des Modells

Im einfachsten Modell der GRINFELDinstabilität begrenzt die freie Oberfläche ein zweidimensionales elastisches Gebiet, das die Halbebene ausfüllt und durch die Funktion $\zeta(x)$ begrenzt wird. Es enthält eine Vorspannung σ_0 in x -Richtung – in der entdimensionalisierten Form einfach den ersten Term von Gleichung (3.8).

Das Modell wurde bereits umfangreich untersucht, darunter im Rahmen der linearen und schwach-nichtlinearen Stabilitätsanalyse sowie mit numerischen Ansätzen zur Dynamik. Zwei neue Zugänge zu diesem Modell sollen in dieser Arbeit vorgeschlagen werden, die Expansionsmethode [43] und das Multizykloidenmodell [44].

Im semiinfinite Modell lässt sich die Gleichung für die Gesamtenergie (3.16) mit Hilfe der AIRYfunktion noch weiter vereinfachen⁶:

$$\int d\tau \det \sigma = \int d\tau [\chi_{xx}\chi_{zz} - \chi_{xz}^2] = \oint ds \chi_x (\mathbf{e}_x \cdot \sigma \cdot \mathbf{n}) . \quad (3.27)$$

Nun sind per Annahme an der Oberfläche, also dem oberen Rand des Integrationsgebietes, $\sigma_{nn} = \mathbf{n} \cdot \sigma \cdot \mathbf{n} = 0$ und $\sigma_{tn} = \mathbf{t} \cdot \sigma \cdot \mathbf{n} = 0$. Da \mathbf{e}_x eine Linearkombination aus \mathbf{n} und \mathbf{t} ist, gilt auch $\mathbf{e}_x \cdot \sigma \cdot \mathbf{n} = 0$. Da σ_{nn} und σ_{nt} auch für $z \rightarrow -\infty$ verschwinden, wird das Randintegral insgesamt Null. Da letzteres Argument allerdings für Dünnschichtgeometrien gerade nicht zutrifft, verschwindet das Integral über die Determinante dort nicht.

Der elastische Anteil an der Änderung der freien Energie (3.16) vereinfacht sich somit im halbunendlichen Modell weiter zu

$$E_E = \frac{k}{2} \left\langle \int dz ((\text{Tr } \sigma)^2 - 1) \right\rangle = \frac{k}{2} \left\langle \int dz ((1 + \Delta\chi)^2 - 1) \right\rangle . \quad (3.28)$$

3.2.2. Lineare Theorie

Die durchzuführenden Rechenschritte werden sich in allen Folgemodellen im wesentlichen genauso gestalten wie in dieser Untersuchung: Unter Vorgabe einer Modulation $\zeta(x)$ der Oberfläche berechnet man zunächst die Veränderung des elastischen Feldes (den zweiten Term im

⁶ Es gilt

$$\begin{aligned} \int d\tau \det \sigma &= \int d\tau [\chi_{xx}\chi_{zz} - \chi_{xz}^2] = \int d\tau \{[\partial_x(\chi_x\chi_{zz}) - \chi_x\chi_{xzz}] - [\partial_z(\chi_x\chi_{xz}) - \chi_x\chi_{xzz}]\} \\ &= \int d\tau [\partial_x(\chi_x\chi_{zz}) - \partial_z(\chi_x\chi_{xz})] = \oint ds [n_x(\chi_x\chi_{zz}) - n_z(\chi_x\chi_{xz})] \\ &= \oint ds \chi_x [n_x\sigma_{xx} + n_z\sigma_{xz}] = \oint ds \chi_x (\mathbf{e}_x \cdot \sigma \cdot \mathbf{n}) . \end{aligned}$$

Spannungstensor (3.8)). Dann bestimmt man die daraus resultierende Energieänderung und bilanziert sie zusammen mit den anderen Termen aus Oberflächenenergie und Schwerkraft. Im Allgemeinen ist die Berechnung des elastischen Anteils der aufwändigste Teil der Prozedur.

Wir beschränken die Ansatzfunktion (3.11) auf die erste Mode

$$\zeta(x)_{\text{lin.}} = \alpha_1 \cos(x) \quad (3.29)$$

und suchen die reduzierten Energieterme der Gleichung (3.16) in niedrigster Ordnung. Die Wurzel in E_S wird entwickelt und die Entwicklung nach der quadratischen Ordnung abgebrochen. E_G kann exakt integriert werden:

$$k^2 \left\langle \sqrt{1 + \zeta'(x)^2} - 1 \right\rangle + \frac{l_{12}}{2} \langle \zeta(x)^2 \rangle \approx \frac{k^2}{4} \alpha_1^2 + \frac{l_{12}}{4} \alpha_1^2 \quad (3.30)$$

Die Berechnung der Änderung des elastischen Spannungszustands erfolgt hier detailliert, um deutlich zu machen, wie im Anschluss ganz analog die Expansionsmethode aufgebaut wird. Wir benötigen die AIRYfunktion für das halbunendliche Modell. Sie lautet (vgl. (3.26))

$$\chi = \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{1}{n^2} a_n + \frac{1}{n} b_n z \right) \cos(nx) e^{nz}. \quad (3.31)$$

Die Vorfaktoren $1/n$ bzw. $1/n^2$ sind a priori nicht notwendig, da sie auch den Konstanten a_n und b_n , die wir als AIRYkoeffizienten bezeichnen werden, zugeschlagen werden können. Sie werden jedoch die Schreibweise der Ableitungen erheblich erleichtern, da sie dort auftretende n kompensieren. Schreiben wir zunächst auch die Ableitungen in allgemeiner Form auf:

$$\sigma_{xx} = \sum_{n=1}^{\infty} (a_n + (2 + nz) b_n) \cos(nx) e^{nz} \quad (3.32a)$$

$$\sigma_{xz} = \sum_{n=1}^{\infty} (a_n + (1 + nz) b_n) \sin(nx) e^{nz} \quad (3.32b)$$

$$\sigma_{zz} = - \sum_{n=1}^{\infty} (a_n + b_n n z) \cos(nx) e^{nz}. \quad (3.32c)$$

Daraus folgt

$$\text{Tr } \sigma = 1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} b_n \cos(nx) e^{nz} \quad (3.33)$$

Für die lineare Theorie zeigt sich, dass das erste Glied der Reihe (3.31) ausreichend ist. Der Grund hierfür wird im Kontext der Expansionsmethode (Kapitel 3.2.3) ersichtlich. Die Spannungen lauten (einschließlich der Vorspannung)

$$\begin{aligned} \sigma_{xx} &= 1 + (a_1 + b_1 (2 + z)) \cos(x) e^z & \sigma_{xz} &= (a_1 + b_1 (1 + z)) \sin(x) e^z \\ \sigma_{zz} &= - (a_1 + b_1 z) \cos(x) e^z. \end{aligned} \quad (3.34)$$

Die AIRYkoeffizienten a_1 und b_1 bestimmen wir mit Hilfe der Randbedingung (2.2c) Da die rechte Seite von (2.2c) Null ist und auf der linken Seite lediglich ein Produkt mit dem Normalenvektor \mathbf{n} steht, ist eine Normierung nicht erforderlich. Man verwendet daher

$$\mathbf{n}' = \begin{pmatrix} -\zeta_x(x) \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (3.35)$$

Schreiben wir nun die Randbedingungen (2.2c) explizit auf,

$$\begin{aligned} |\sigma_{xx}\zeta'(x) - \sigma_{xz}|_{z=\zeta(x)} &= 0 \\ |\sigma_{xz}\zeta'(x) - \sigma_{zz}|_{z=\zeta(x)} &= 0, \end{aligned} \quad (3.36)$$

entwickeln in der Störung $\zeta(x)$ und beachten, dass $\zeta'(x)$ und die AIRYkoeffizienten von der gleichen Ordnung sind, so ergibt sich nach Einsetzen von (3.11) in niedrigster Ordnung

$$(a_1 + b_1 + \alpha_1) \sin(x) = 0 \quad a_1 \cos(x) = 0,$$

und damit

$$a_1 = 0 \quad b_1 = -\alpha_1. \quad (3.37)$$

Kombinieren wir Gleichungen (3.28) und (3.33), so folgt allgemein⁷

$$E_E = 2k \left\langle \sum_{n=1}^{\infty} \frac{b_n}{n} \cos(nx) e^{n\zeta(x)} + \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{b_m b_n}{m+n} \cos(mx) \cos(nx) e^{(m+n)\zeta(x)} \right\rangle. \quad (3.38)$$

Dieser Ausdruck ist erwartungsgemäß in niedrigster Ordnung quadratisch in α_1 :

$$E_{E, \text{lin.}} = 2k \left\langle b_1 \cos x (1 + \zeta(x)) + \frac{b_1^2}{2} \cos^2 x \right\rangle = -\frac{\alpha_1^2 k}{2}. \quad (3.39)$$

Zusammen mit (3.30) erhalten wir schließlich für die Energie

$$E_{\text{gesamt, lin.}} = \frac{\alpha_1^2}{4} (k^2 + l_{12} - 2k). \quad (3.40)$$

⁷ Ausmultiplizieren und Integrieren:

$$\begin{aligned} E_E &= \frac{k}{2} \left\langle \int dz \left(\left(1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} b_n \cos(nx) e^{nz} \right)^2 - 1 \right) \right\rangle \\ &= 2k \left\langle \int dz \left(\sum_{n=1}^{\infty} b_n \cos(nx) e^{nz} \left(1 + \sum_{n=1}^{\infty} b_n \cos(nx) e^{nz} \right) \right) \right\rangle \\ &= 2k \left\langle \sum_{n=1}^{\infty} \frac{b_n}{n} \cos(nx) e^{n\zeta(x)} + \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{b_m b_n}{m+n} \cos(mx) \cos(nx) e^{(m+n)\zeta(x)} \right\rangle. \end{aligned}$$

Für Transportprozesse wie Schmelzen und Erstarren oder Verdampfung und Kondensation, die nicht mit Volumenerhaltung der festen Phase einhergehen, gilt für die linearisierte Dynamik die Gleichung (vgl. z.B. [51])

$$\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} = -\frac{\partial E}{\partial \alpha_1}. \quad (3.41)$$

Setzen wir hier die Energie (3.40) und den Normalmodenansatz

$$\alpha_1 = A e^{ix+\omega t} \quad (3.42)$$

ein, so erhalten wir für die Wachstumsrate

$$\omega = \frac{1}{2} [-k^2 + 2k - l_{12}]. \quad (3.43a)$$

Für den Fall von Oberflächendiffusion, also bei Transportprozessen mit Volumenerhaltung, verändert man (3.41) durch Voranstellen von $-\Delta$ und erhält entsprechend

$$\omega = \frac{1}{2} [-k^4 + 2k^3 - k^2 l_{12}]. \quad (3.43b)$$

Aus den Gleichungen (3.43) können jeweils durch Berechnung der Maxima die linear instabilsten Moden bestimmt werden. Sie betragen

$$k_{\text{inst.}} = 1 \quad (3.44a)$$

für Schmelzen/Erstarren und

$$k_{\text{inst.}} = \frac{3}{4} + \frac{1}{4} \sqrt{9 - 8l_{12}} \quad (3.44b)$$

für Oberflächendiffusion. Im Spezialfall vernachlässigbarer Gravitation ($l_{12} = 0$) ergibt sich für letzteren Fall $k = 3/2$. Der linear instabile Bereich wird durch die Nullstellen der Gleichungen (3.43) beschrieben. Da sich beide Gleichungen im Wesentlichen nur um den Faktor k^2 unterscheiden, sind die Nullstellen abgesehen vom Entartungsgrad der Lösung $k = 0$ identisch:

$$k_{\text{marg.}} = 1 \pm \sqrt{1 - l_{12}}. \quad (3.45)$$

Folglich existiert im Fall vernachlässigbarer Gravitation ($l_{12} = 0$) ein linear instabiles Band im Bereich $k = 0 \dots 2$, und zwar unabhängig von der Form des Transportmechanismus.

Im Fall endlicher Gravitation kann man den kritischen Punkt berechnen, an dem gerade eine Mode instabil wird. Man löst dazu das Gleichungssystem $\omega = 0$, $d\omega/dk = 0$ und erhält – wiederum unabhängig vom Transportmechanismus⁸ –

$$k_{\text{crit.}} = 1, \quad l_{12, \text{crit.}} = 1. \quad (3.46)$$

⁸ Hier zeigt sich nochmals der Grund für die spezielle Definition des Parameters l_{12} .

Die Dispersionsrelationen für beide Transportmechanismen zeigen die Abbildungen 3.1 und 3.2. Die Richtigkeit dieser Herleitungen lässt sich überprüfen, indem man auf reale physikalische Parameter zurückskaliert und mit den bekannten Resultaten vergleicht. Dazu benutzt man die Definitionen der Längenskalen (3.13). k wird durch l_1 dividiert, und man erhält

$$k_{\text{crit.}} = \frac{1}{l_1} = \frac{w_0}{2\gamma} \qquad l_{12, \text{crit.}} = 1 = \frac{\gamma g \Delta\rho}{4w_0^2},$$

woraus durch Einsetzen die bekannten Ergebnisse

$$k_{\text{crit.}} = \sqrt{\frac{g \Delta\rho}{\gamma}} \qquad \sigma_{0, \text{krit.}}^2 = \frac{E_Y \gamma k_{\text{crit.}}}{1 - \nu^2} = \frac{E_Y \sqrt{\gamma g \Delta\rho}}{1 - \nu^2}$$

folgen.

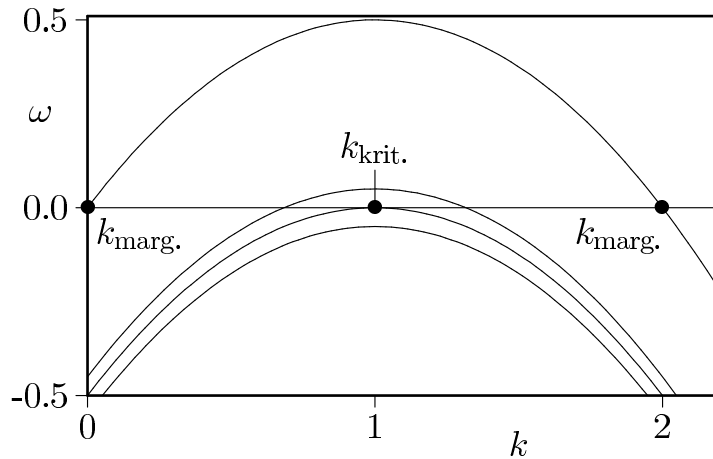


Abbildung 3.1.: Dispersionsrelation der GRINFELDinstabilität für den Prozess Schmelzen und Erstarren bei unterschiedlichen Werten des Parameters l_{12} (von oben nach unten: 0, 0.9, 1.0, 1.1). Marginale Wellenzahlen des gravitationsfreien Modells und kritische Wellenzahl des Modells mit Gravitation sind hervorgehoben.

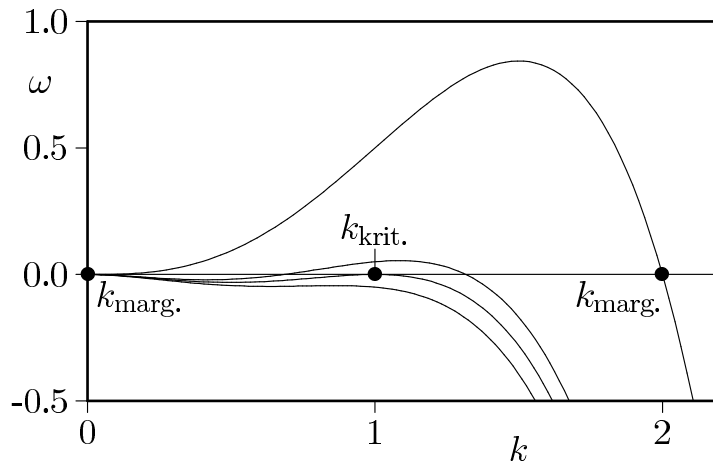


Abbildung 3.2.: Dispersionsrelation der GRINFELDinstabilität für Oberflächendiffusion für unterschiedliche Werte des Parameters l_{12} (von oben nach unten: 0, 0.9, 1.0 und 1.1). Marginale Wellenzahlen des gravitationsfreien Modells und kritische Wellenzahl des Modells mit Gravitation sind hervorgehoben.

Die Aussagen des Abschnitts gewinnt man – bis auf die linear schnellstwachsenden Moden – auch direkt aus Formel (3.40), wenn man sich vergegenwärtigt, dass das System einer

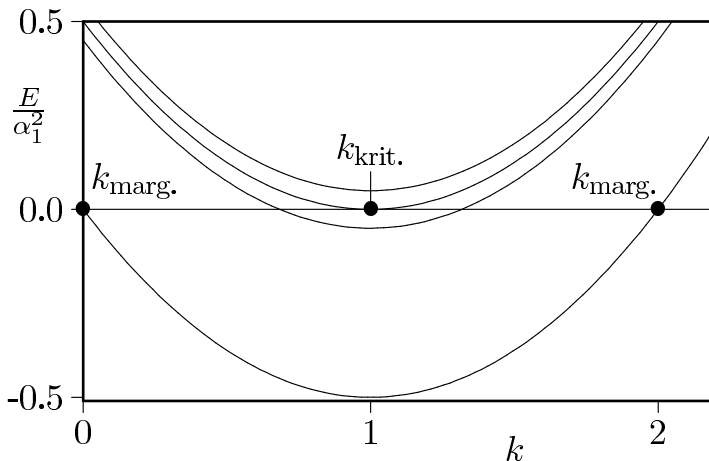


Abbildung 3.3.: Lineares Verhalten der Gesamtenergie (3.40) für unterschiedliche l_{12} (von unten nach oben: 0, 0.9, 1.0 und 1.1). Es handelt sich formal um die Inversion von Abbildung 3.1.

Störung folgt, sofern es dabei seine freie Energie insgesamt absenken kann. Hierzu betrachte man die Abbildung 3.3. Für $l_{12} = 0$ ergibt sich der linear instabile Bereich $k = 0 \dots 2$. Im gravitationsfreien Modell existiert demzufolge keine „kritische Spannung“. Der kritische Fall im Modell mit Gravitation ist erreicht, wenn genau eine Mode in die Lage versetzt wird, die Energie abzusenken. Dies geschieht natürlich bei $k = 1$ und $l_{12}=1$.

3.2.3. Nichtlineare Theorie und die Expansionsmethode

Möchte man das volle Problem lösen, so muss der vollständige Ansatz (3.11) benutzt werden, und die Bewegungsgleichungen kann man als

$$\frac{\partial \alpha_n}{\partial t} = -\frac{\partial E}{\partial \alpha_n} \quad (3.47a)$$

bzw.

$$\frac{\partial \alpha_n}{\partial t} = -k^2 \frac{\partial E}{\partial \alpha_n} \quad (3.47b)$$

ausdrücken. Stationäre Lösungen erfüllen – unabhängig davon, ob Gleichung (3.47a) oder (3.47b) zugrundegelegt wird – die Bedingung

$$\frac{\partial E}{\partial \alpha_n} = 0. \quad (3.48)$$

Diese Forderung ist natürlich identisch mit der nach dem Verschwinden des Ausdrucks (3.19).

Die Expansionsmethode besteht nun darin, alle beteiligten Größen – höhere Amplituden und AIRYkoeffizienten – systematisch als Entwicklungen in der Grundamplitude darzustellen. Der Formalismus wird zunächst auf das halbumendliche Modell angewendet, ist aber auch für endliche Schichten und in drei Dimensionen anwendbar. Die freie Energie lässt sich auf diese Weise als Funktion von k , l_{12} und geraden Potenzen von α_1 beschreiben – ungerade Potenzen sind per Symmetrie verboten. Bei festgehaltenen k und l_{12} besteht das Auffinden eines

Extremums dann in der Nullstellenbestimmung eines Polynoms. Darüberhinaus reduziert sich die Bestimmung der Stabilität auf die Bestimmung des Vorzeichens der zweiten Ableitung der Energie nach α_1 .

Das zu erfüllende Gleichungssystem für das volle Problem besteht aus den Randbedingungen (2.2c) und der Extremalbedingung (3.19), also

$$[(1 + \sigma_{xx}) \zeta'(x) - \sigma_{xz}]|_{z=\zeta(x)} = 0 \quad (3.49a)$$

$$[\sigma_{xz} \zeta'(x) - \sigma_{zz}]|_{z=\zeta(x)} = 0 \quad (3.49b)$$

$$\frac{k}{2} [2\Delta\chi + (\Delta\chi)^2]_{z=\zeta(x)} - k^2\kappa + l_{12} \zeta(x) = 0. \quad (3.49c)$$

Es erweist sich nun, dass die Forderung nach dem Verschwinden der linken Seiten der Gleichungen (3.49) in eindeutiger Weise auf ein rekursives Schema für die Berechnung der AIRY-Koeffizienten und der Entwicklungskoeffizienten der höheren Amplituden führt. Das Verfahren kann zugleich als Verallgemeinerung der schwach nichtlinearen Analyse von Nozières [53] angesehen werden.

Betrachten wir E_{red} zunächst allgemein als Funktion $\zeta(x)$ und bilden die Mittelung:

$$\langle E_{\text{red}} \rangle = \left\langle \sum_{n=1}^{\infty} A_n \zeta(x)^n \right\rangle.$$

Die $\zeta(x)^n$ lassen sich als Summe aus einer Reihe von Produkten $\prod_{j=1}^n \cos(i_j x)$ mit amplitudenabhängigen Vorfaktoren schreiben, wobei i irgendeine Indexmenge der Mächtigkeit n bezeichnen möge. Nun lässt sich leicht induktiv anhand der fortgesetzten Anwendung von Additionstheoremen zeigen, dass ein Integral über ein solches Produkt genau dann ungleich Null werden kann, wenn sich die Indizes der Menge i so in zwei Teilmengen zerlegen lassen, dass die Summe aller Elemente in beiden Teilmengen gleich ist⁹.

Eine notwendige Voraussetzung dafür ist, dass die Summe aller Elemente der Indexmenge i eine gerade Zahl ist. E_{red} enthält also [53] nur Terme der Form

$$\alpha_1^2, \alpha_1^4, \alpha_2^2, \alpha_2^4, \alpha_1^2 \alpha_2, \alpha_1^3 \alpha_3, \alpha_1 \alpha_2 \alpha_3 \dots \quad (3.50)$$

Mit

$$\alpha_n \propto \alpha_1^n, \quad (3.51)$$

muss die Reihenentwicklung folglich

$$\alpha_n = \alpha_1^n \sum_{m=0}^{\infty} \alpha_{n,2m} \alpha_1^{2m} \quad (3.52)$$

lauten, da für alle $2m + 1$ die Bedingung (3.50) wiederum verletzt wäre.

⁹ Mit anderen Worten, wenn sie der strengen Variante des Zahlenaufteilungsproblems [33] genügen.

Das Argument lässt sich auf die AIRYkoeffizienten ausdehnen. Genau wie von den α_n ist E_{red} auch von den Spannungstermen (3.32) abhängig, und wie die α_n in $\zeta(x)$ sind die a_n und b_n in den σ_{ij} mit entsprechenden Winkelfunktionen $\cos(nx)$ bzw. $\sin(nx)$ assoziiert (die Exponentialfunktionen kann man als Reihe in $\zeta(x)$ betrachten und sie beeinflussen die Argumentation nicht). Folglich kann man E_{red} formal als gemischte Reihe in $\zeta(x)$ und den σ_{ij} schreiben und erhält mit denselben Argumenten die Form

$$a_n = \alpha_1^n \sum_{m=0}^{\infty} a_{n,2m} \alpha_1^{2m} \quad b_n = \alpha_1^n \sum_{m=0}^{\infty} b_{n,2m} \alpha_1^{2m}. \quad (3.53)$$

für die AIRYkoeffizienten.

An diese Argumentation schließt sich unmittelbar die Frage an, wieviele Entwicklungskoeffizienten man berücksichtigen muss, um E_{red} in einer geforderten Genauigkeit α_1^{2N} exakt zu berechnen. Da lineare Anteile sowohl in $\zeta(x)$ allein als auch in den σ_{ij} allein nicht in E_{red} vorkommen können (sie verschwinden bei der Mittelung), besteht E_{red} nur aus quadratischen und höheren Formen in den α_n , a_n und b_n , deren Indexmengen zudem wieder der Bedingung (3.50) genügen müssen. In einem Energieterm der Genauigkeit α_1^{2N} können daher höchstens solche α_n , a_n und b_n mit $n = 1 \dots N$ auftreten¹⁰.

Die Aussage lässt sich hinsichtlich der Entwicklungskoeffizienten $\alpha_{n,2m}$, $a_{n,2m}$ und $b_{n,2m}$ noch weiter präzisieren. Dazu stellen wir die Menge der zu berücksichtigenden Entwicklungskoeffizienten in einem Schema der folgenden Art dar:

(α)	α_1	α_2	α_3	(a)	a_1	a_2	a_3	(b)	b_1	b_2	b_3
α_1^1	α_1			α_1^1	$a_{1,0}$			α_1^1	$b_{1,0}$		
α_1^2		$\alpha_{2,0}$		α_1^2		$a_{2,0}$		α_1^2		$b_{2,0}$	
α_1^3			$\alpha_{3,0}$	α_1^3	$a_{1,2}$		$a_{3,0}$	α_1^3	$b_{1,2}$		$b_{3,0}$
α_1^4		$\alpha_{2,2}$		α_1^4		$a_{2,2}$		α_1^4		$b_{2,2}$	
α_1^5				α_1^5	$a_{1,4}$			α_1^5	$b_{1,4}$		

(3.54)

Im Schema (3.54) wurde beispielhaft angenommen, dass die Energie in der Ordnung α_1^6 berechnet werden soll. Warum ist nun beispielsweise $b_{3,2}$ nicht enthalten? b_3 ist $\propto \alpha_1^3$. Folglich kommt in E_{red} ein Term wie $b_1 b_3$ aufgrund der obigen Überlegungen nicht vor, wohl aber Produkte mit anderen Koeffizienten, die zusammen mindestens ebenfalls von der Ordnung α_1^3 sind. $b_{3,2}$ selbst ist aber bereits $\propto \alpha_1^5$, so dass es nur zu Termen in E_{red} beitragen kann, die mindestens $\propto \alpha_1^8$ sind. Allgemein kann man folgenden Schluss ziehen:

Lemma 3.1 *In eine Berechnung der Energie in der Ordnung α_1^{2N} gehen (mit Ausnahme des Falles $n = 1$ für die $\alpha_{n,2m}$) alle Koeffizienten $\alpha_{n,2m}$, $a_{n,2m}$ und $b_{n,2m}$ ein, für die $n + m \leq N$ gilt.*

¹⁰ Übrigens kommen die a_n überhaupt nicht im Energieausdruck vor, da sie nicht in der Spur des Spannungstensors (3.33) enthalten sind.

Die Berechnung der Koeffizienten mit den Gleichungen (3.49) erfolgt mit einem rekursiv-linearen Schema, das der Form (3.54) sehr ähnlich ist. Wir machen uns zunächst bewusst, dass die linke Seite der Gleichung (3.49a) eine ungerade Funktion ist, also ausschließlich Sinuskomponenten enthält, während die Gleichungen (3.49b) und (3.49c) gerade Funktionen sind. Man setzt also die Entwicklungen aller beteiligten Koeffizienten bis zu der durch Lemma 3.1 vorgeschriebenen Ordnung in α_1 in die Gleichungen (3.49) ein, wobei die e-Funktionen zu entwickeln sind, und sortiert sie sowohl nach Potenzen in α_1 als auch nach Sinus- bzw. Cosinusfunktionen. Alle diese Terme müssen einzeln Null werden.

Komponenten mit ungeradem $n + m$ sind auch hier per Symmetrie verboten, und aus den Bestimmungsgleichungen ergibt sich die folgende Anordnung der zu lösenden Teilprobleme.

(3.49a)	$\sin(x)$	$\sin(2x)$	$\sin(3x)$	
(3.49b)	$\cos(x)$	$\cos(2x)$	$\cos(3x)$	
(3.49c)		$\cos(2x)$	$\cos(3x)$	
α_1^1	$a_{1,0}, b_{1,0}$			
α_1^2		$a_{2,0}, b_{2,0}, \alpha_{2,0}$		
α_1^3	$a_{1,2}, b_{1,2}$		$a_{3,0}, b_{3,0}, \alpha_{3,0}$	
α_1^4		$a_{2,2}, b_{2,2}, \alpha_{2,2}$		
α_1^5	$a_{1,4}, b_{1,4}$			

(3.55)

In jeder Position ergibt sich ein lineares System aus zwei bzw. drei Gleichungen, das die angegebenen Koeffizienten $a_{n,2m}$, $b_{n,2m}$ und $\alpha_{n,2m}$ zu bestimmen gestattet. Dass in einigen Fällen nur zwei Gleichungen zu lösen sind, liegt daran, dass α_1 selbst natürlich nicht entwickelt wird. An jeder Position im Schema treten die angegebenen Koeffizienten erstmals linear auf, und die übrigen (induzierten) Terme jedes dieser Gleichungssystem können nur durch aus solchen Ausdrücken resultieren, die im Schema (3.55) bei niedrigeren Potenzen von α_1 liegen und deren Summe $n + m$ nicht größer ist.

Daraus resultiert die Reihenfolge der Lösung der jeweiligen Untersysteme: Man startet bei $n + m = 1$ und geht bis $n + m = N$, das sind jeweils Diagonalen, die im Schema (3.55) von rechts oben nach links unten verlaufen, und löst innerhalb dieser Diagonalen in der Reihenfolge $m = 0$ bis $m = N - 1$.

Sind alle Koeffizienten bestimmt, so bleibt in Gleichung (3.49c) die Mode $\cos(x)$ übrig. Hierbei handelt es sich gerade um die Änderung des chemischen Potentials, ausgedrückt als Reihe in α_1 . Diese Größe ist proportional (mit einem Faktor $\frac{1}{2}$) zur Ableitung der Energieänderung nach α_1 . Eine Integration über α_1 ergibt also die Gesamtenergie als Reihe in α_1 .

Das Auffinden stationärer Zustände ist damit auf die Nullstellenbestimmung eines Polynoms in α_1 reduziert. Dies ist der letzte und einzige Schritt des gesamten Verfahrens, der numerisch zu erfolgen hat.

Tabelle 3.1 gibt die Koeffizienten an, die für eine Bestimmung der Energie in vierter Ordnung in α_1 notwendig sind. Für $k = 1$ und $l_{12} = 1$ wurden sie in dimensionsbehafteter Form bereits von Nozières [53] hergeleitet. Insgesamt wurden mit diesem Verfahren Energien bis zur Ordnung α_1^{16} berechnet. Die entstehenden Ausdrücke sind, wie man schon anhand der

niedrigen Koeffizienten sieht, sehr komplex und hier nicht darstellbar. Optimierte MAPLE-Arbeitsblätter, die die Koeffizienten erzeugen, sind vom Autor erhältlich.

Tabelle 3.1.: Die für die lineare und die erste nichtlineare Ordnung notwendigen AIRYkoeffizienten und Amplitudenkoeffizienten

Koeff.	Wert	Koeff.	Wert	Koeff.	Wert
		$a_{1,0}$	0	$b_{1,0}$	-1
$\alpha_{2,0}$	$\frac{-2k}{4k^2-4k+l_{12}}$	$a_{2,0}$	1	$b_{2,0}$	$\frac{4k^2+l_{12}}{4k^2-4k+l_{12}}$
		$a_{1,2}$	$-\frac{12k^2+3l_{12}-8k}{4(4k^2-4k+l_{12})}$	$b_{1,2}$	$\frac{-52k+3l_{12}+12k^2}{8(4k^2-4k+l_{12})}$

Damit erhalten wir nach Vereinfachung die Änderung der Gesamtenergie in vierter Ordnung in α_1 allgemein zu

$$E_{\text{red}} = \frac{1}{4} (k^2 - 2k + l_{12}) \alpha_1^2 - \frac{k}{64} \frac{4k(3k^2 - 27k + 40) + 3l_{12}(k - 8)}{-4k + l_{12} + 4k^2} \alpha_1^4 \quad (3.56)$$

Am kritischen Punkt $\{k = 1, l_{12} = 1\}$ ergibt sich erwartungsgemäß

$$E_{\text{red}} = -\frac{43}{64} \alpha_1^4 \quad (3.57)$$

3.2.4. Charakteristika des schwach-nichtlinearen Regimes

Welche Schlüsse kann man aus der Gleichung (3.56) ziehen? Wie bereits dargelegt, setzt die Instabilität bei $\{l_{12} = 1, k = 1\}$ ein, und man kann zunächst einmal die höheren Koeffizienten am kritischen Punkt einsetzen. Man erhält in Erweiterung zu (3.57)

$$E_{\text{gesamt, krit.}} = -\frac{43}{64} \alpha_1^4 - \frac{11661}{1024} \alpha_1^6 - \frac{3446989}{12288} \alpha_1^8 - \frac{317790953065}{37748736} \alpha_1^{10} - \frac{154676894913120211}{543581798400} \alpha_1^{12} - \frac{81526198232945992800847}{7827577896960000} \alpha_1^{14} - \frac{2229374504089574965742093912371}{5523138964094976000000} \alpha_1^{16}. \quad (3.58)$$

Der lineare Term ist hier natürlich Null. Wir sehen erwartungsgemäß, dass weder in der nächsten noch in irgendeiner der verfügbaren Ordnungen ein nichtnegativer Term erscheint. Dies steht mit dem eingangs erwähnten Argument in Einklang, dass das halbbunendliche Modell keine Restabilisierung zulässt. Die Abbildung 3.4 zeigt den Anstieg der Absolutwerte der Koeffizienten.

Das lineare Verhalten oberhalb der kritischen Spannung, also bei $l_{12} < 1$, wird durch die Nullstellen des in α_1 quadratischen Terms in (3.56) bestimmt: ein durch eine untere und obere marginale Wellenzahl

$$k_{\text{marg.}} = 1 \pm \sqrt{1 - l_{12}} \quad (3.59)$$

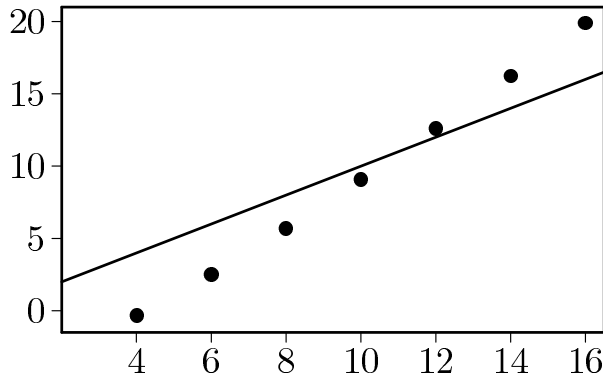


Abbildung 3.4.: Die logarithmische Darstellung der Absolutwerte der Koeffizienten der Energie am kritischen Punkt (3.58) über der Ordnung des Koeffizienten in α_1 . Die durchgezogene Linie ist die Funktion $\exp(n)$.

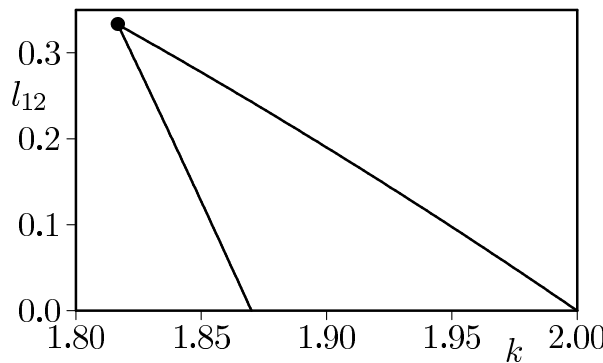


Abbildung 3.5.: Parameterbereich, für den der quartische Term der Energie positiv ist. Rechts die obere marginale Wellenzahl (Gl. 3.59), links die Linie, auf der der quartische Term Null ist.

begrenzter Bereich ist linear instabil. Eine Analyse des quartischen Terms von Gleichung (3.56) zeigt, dass für hinreichend kleine l_{12} ein Bereich unterhalb der marginalen Wellenzahl existiert, bei dem sein Vorzeichen positiv wird (Abbildung 3.5).

Der größte l_{12} -Wert, für den der quartische Term gerade noch Null werden kann, ist

$$l_{12, \text{tric.}} = -\frac{148}{9} + \frac{20}{9} \sqrt{57} \approx 0.333, \quad (3.60a)$$

korrespondierend mit

$$k_{\text{tric.}} = \frac{13}{3} - \frac{1}{3} \sqrt{57} \approx 1.817 \quad (3.60b)$$

(der Punkt in Bild 3.5). Im Grenzfall $l_{12} = 0$ erfolgt der Vorzeichenwechsel bei

$$k_{l_{12}=0, \text{tric.}} = \frac{9}{2} - \frac{1}{6} \sqrt{249} \approx 1.870. \quad (3.60c)$$

Die letzte Angabe finden wir bereits bei Nozières [53]. Aus der Existenz eines gewissen superkritischen Bereiches bei großen Spannungen kann man schließen, dass eine Restabilisierung der GRINFELDinstabilität möglich ist, solange man durch Begrenzung der Systemgröße die Ausbildung solcher Anteile unterdrückt, die kleineren Wellenzahlen als denen innerhalb des gekennzeichneten Bereiches in Bild 3.5 entsprechen.

3.2.5. Die Lösung nach SPENCER und ihre Verallgemeinerung auf beliebige l_{12}

Gleichung (3.60c) legt nahe, dass im gravitationsfreien Modell für $k \in [1.87, 2]$ eine Restabilisierung möglich ist. Da durch die systematische Erfassung höherer Moden im Rahmen der Expansionsmethode die Energie und ihre Ableitungen wesentlich genauer berechnet werden können, kann diese Aussage nun präzisiert werden. Dabei liegt die Beschränkung zunächst auf dem gravitationsfreien Modell $l_{12} = 0$.

In der Tat zeigt eine numerische Arbeit von SPENCER und MEIRON [63], dass der restabilisierte Bereich sogar größer ist; die Mannigfaltigkeit der stabilen Lösungen terminiert dort bei $k \approx 1.74$. Die Lösung ist als fettgedruckte Kurve in Bild 3.7 dargestellt.

Die in [63] und hier dargestellte mittlere quadratische Amplitude ist die Größe (3.21) (vgl. S. 18). Die Definition der typischen Länge l_1 unterscheidet sich in [63] um den Faktor $1/2$ von der hier benutzten Größe, daher findet man bei SPENCER den Bereich $[3.48, 4]$.

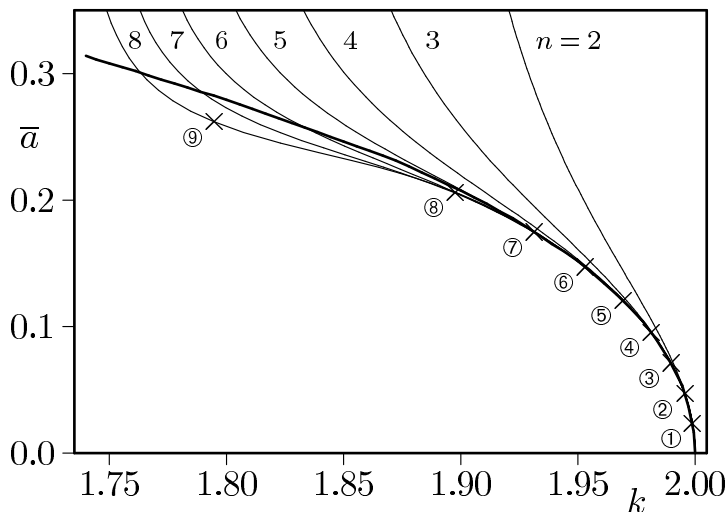


Abbildung 3.6.: Stationäre Lösungen nach der Expansionsmethode mit Genauigkeiten α_1^{2N} von $N = 2$ bis $N = 8$. Die fettgedruckte Linie ist die digitalisierte und skalierte Kurve aus [63]. Zahlen in Kreisen korrespondieren zu den entsprechenden Kurven in Abbildung (3.7).

Es fällt auf, dass durch die Expansionsmethode die mittleren quadratischen Amplituden der SPENCER-Lösung bis hin zu moderaten Werten von $\bar{a} \approx 0.2$ recht gut approximiert werden. Danach weichen die Lösungen vom numerischen Ergebnis ab.

Am Beispiel der genauesten Lösung in dieser Darstellung gibt die Abbildung 3.7 eine Anzahl von Morphologien an (jedem Punkt der Lösungsmengen in Bild 3.6 entspricht eine Oberfläche $\zeta(x)$).

Anhand der Abbildung 3.7 wird klar, warum die Lösungen voneinander abweichen: Die Berücksichtigung weniger (im Beispiel acht) Amplituden funktioniert, solange die Struktur nicht zu weit von der Cosinusform abweicht. Für größere mittlere Amplituden bilden sich in Einklang mit den Resultaten [53,63] Strukturen, die in den Maxima flacher und in den Minima spitzer werden. Die dynamische Entwicklung führt in endlicher Zeit zu einer Cuspsingularität, und für deren Beschreibung ist eine große Anzahl von Moden notwendig.

Da das Modell den Parameter l_{12} enthält, ist eine Erweiterung der SPENCERSchen Lösung auf beliebige Szenarien mit Schwerkraft möglich. Eine Anzahl Lösungen für unterschiedliche

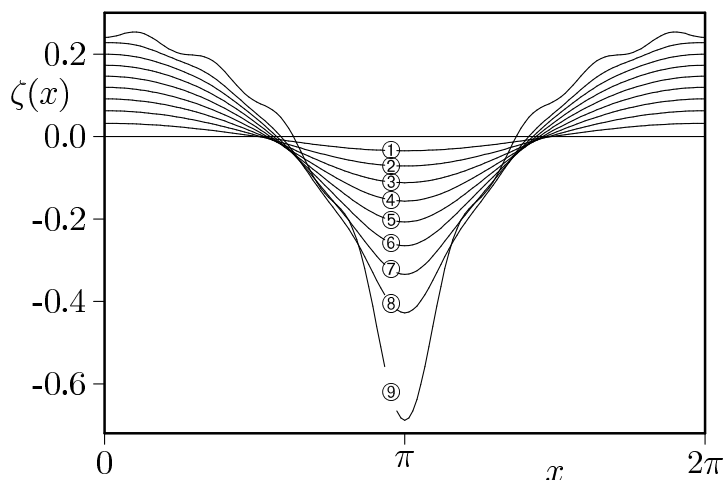


Abbildung 3.7.: Morphologien einiger spezieller Punkte aus Abbildung 3.6, korrespondierend zur genauesten Lösung ($N = 8$). Die Ergebnisse sind in der dimensionslosen Form dargestellt, daher beträgt das Grundintervall aller Kurven 2π .

Parameter im linear instabilen Bereich zwischen 0 und 1 zeigt die Abbildung 3.8.

Der schwarze Punkt in der Abbildung zeigt die Grenze, bis zu der stabile Lösungen mit kleiner Amplitude existieren können, gegeben durch Gleichung (3.60b). Kreise markieren den Übergang der Kurven zwischen stabil und instabil. Generell sind alle Bereiche, in denen die Lösungskurve nach links geneigt ist, stabil. Dies kann man sich leicht vergegenwärtigen, indem man sich klar macht, dass bei fixierten k und l_{12} die Energie ein Polynom in α_1 ist, dessen Maxima und Minima sich abwechseln. $\bar{\alpha} = 0$ ist ein Maximum, solange eine lineare Instabilität vorliegt (also in der Abbildung bei $k < 1 + \sqrt{1 - l_{12}}$), auf das bei höheren $\bar{\alpha}$ als nächstes ein Minimum zu folgen hat. Aufgrund der Restriktion hinsichtlich der Modenzahl werden

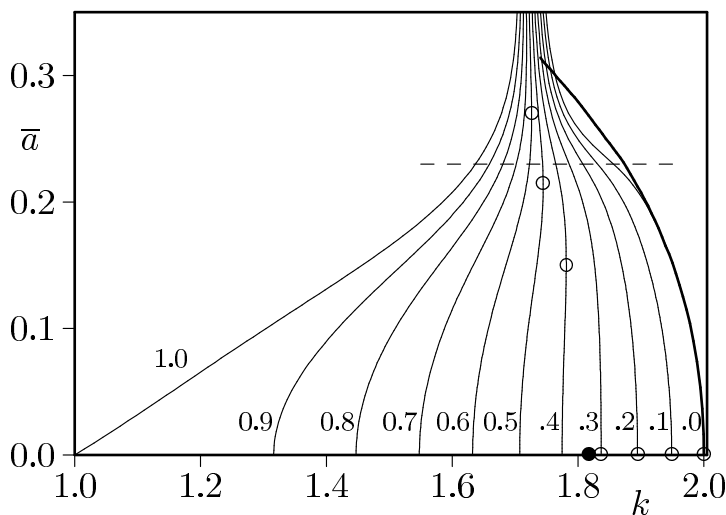


Abbildung 3.8.: Stationäre Lösungsmannigfaltigkeiten im linear instabilen Bereich für unterschiedliche l_{12} . Zum Vergleich wurde die SPENCER-Lösung mit dargestellt. Diskussion im Text.

Lösungen oberhalb der gestrichelten Linie nicht mehr als verlässlich angesehen.

Die Expansionsmethode erlaubte eine gewisse Erweiterung der Kenntnisse aus dem gravitationsfreien Modell. Darüberhinaus wird sie bei der Behandlung endlich dicker Schichten erneut verwendet werden. Wegen der dort herrschenden Möglichkeit der Restabilisierung und

der Vermeidung der Cuspsingularität ist sogar zu erwarten, dass die Methode dort bedeutend genauere Ergebnisse liefern kann.

Es bleibt zu bemerken, dass die Expansionsmethode eine Reihe von Artefakten erzeugen kann. Zum einen existieren unter gewissen Bedingungen weitere reelle Nullstellen, deren Existenz und Position von der zugrundegelegten Ordnung abhängt. Zum anderen erscheint jede Lösung mehrfach im Diagramm, da eine Lösung $\zeta(kx)$ immer auch als $\zeta(2kx)$ bei halber Grundwellenzahl aufgefasst werden kann. Diese „Geisterlösungen“ existieren bei $k < 1$ bei kleinen Amplituden (trotz der Reduktion auf α_1 werden gewisse Näherungen solcher Lösungen erzeugt) und interferieren mit der Mannigfaltigkeit der „echten“ Lösungen. Es erweist sich also als notwendig, für die Untersuchung dieses Teils des Lösungsdiagramms ein anderes Verfahren zu entwickeln.

3.3. Der Multizykloidenansatz für das semiinfinite Modell

Die bisher benutzte Methode weist einen Nachteil auf: Stationäre Lösungen bei großen Amplituden enthalten einen nicht zu vernachlässigenden Anteil hoher Moden. Daraus folgt die Notwendigkeit von Reihenentwicklungen in hoher Ordnung, und analytische Verfahren, die auf FOURIERreihendarstellungen der Oberfläche aufbauen, sind bei großen Amplituden zum Scheitern verurteilt.

Wir geben daher die Cosinusreihe als Funktionensystem zugunsten einer anderen Funktionenklasse auf, die wir als verallgemeinerte Zykloiden bezeichnen. Für solche Oberflächen wird es nicht mehr möglich sein, die elastische Energieänderung des gesamten Halbraumes analytisch zu berechnen¹¹. Dies ist jedoch für unsere Zwecke überhaupt nicht notwendig. Wie wir sehen werden, kann man die freie Energiedichte *an der Oberfläche* exakt angeben¹² und damit die Variation infolge einer Änderung der Morphologie ausdrücken, mit anderen Worten, wir werden ausschließlich das Problem

$$\delta E = \delta E_E + \delta E_S + \delta E_G = 0 \quad (3.61)$$

lösen, ohne die Energie selbst anzugeben. Gao [15] hat gezeigt, dass die stationären Lösungen des halbunendlichen Modells in zwei Dimensionen Ähnlichkeit mit Zykloiden aufweisen. Nehmen wir vorübergehend an, dass die Lösungen tatsächlich Zykloiden sind. Bei der Entwicklung einer Zykloide (3.62) in eine Cosinusreihe zeigt sich, dass bei großen ρ die Reihe der zugehörigen Koeffizienten sehr langsam konvergiert. Anhang A.1 zeigt diese Entwicklung. Die einzelnen Koeffizienten sind aber keineswegs voneinander unabhängig, denn sie enthalten ja gerade ρ als einzigen Parameter.

¹¹ Tatsächlich *kann* man einen allgemeinen Ausdruck für diese Größe angeben, dieser ist jedoch extrem umfangreich und für unsere Art von Berechnungen nicht praktikabel.

¹² Der Ausdruck enthält – genau wie die Formel für die Oberfläche – für N -Zykloiden mit $N \geq 2$ Integrale, für keine allgemeinen Lösungen existieren und die daher numerisch ausgewertet werden. Trotzdem wird von analytischer Lösbarkeit die Rede sein.

Nehmen wir weiter an, dass sich die tatsächlichen Lösungen des halbunendlichen Modells nur wenig von einer Zykloide unterscheiden, so sollte es möglich sein, die Zykloidenlösung mittels geeigneter kleiner Parameter so zu modifizieren, dass sie gegen die echte Lösung konvergiert. Diese Modifikationen, als Multizykloiden bezeichnet, werden im Anschluss an das Zykloidenmodell untersucht werden.

Die Zykloiden, und mit ihnen die Multizykloiden, enthalten darüberhinaus den Spezialfall von Morphologien mit Cuspsingularität. Obgleich der Fall der Cusp selbst nur als Grenzfall behandelt werden kann – er stellt eine Singularität in der konformen Abbildung dar – wird sich zeigen, dass eine offene Menge von Lösungen mit der Cuspsingularität als Grenze exakt berechenbar sind. Die Cusplösung kann daher beliebig genau approximiert werden.

Die Multizykloiden werden noch einen weiteren methodischen Vorteil mit sich bringen. Die Menge der darstellbaren Morphologien umfasst nämlich auch solche mit Überhängen. Diese sind definitionsgemäß in Theorien, in denen die Oberfläche als FOURIERreihe dargestellt wird, überhaupt nicht enthalten. Damit erweitern sich die Möglichkeiten für die Behandlung strukturbildender Systeme signifikant.

3.3.1. Zykloiden

Vergegenwärtigen wir uns die wichtigsten Eigenschaften der Zykloiden. Eine ausführliche Übersicht bietet das Werk von ROBERT C. YATES [71].

Um sich eine Zykloide plausibel zu machen, stellt man sich einen Kreis vor, der auf einer Geraden abrollt. Die klassische, spitze Zykloide ist als die Bahnkurve definiert, die ein Punkt beschreibt, der sich auf diesem Kreis befindet. Verlängerte bzw. verkürzte Zykloiden entstehen, wenn der Punkt in einem größeren bzw. kleineren Abstand als dem Radius relativ zum Abrollkreis fixiert ist. Eine Radmutter beschreibt beispielsweise eine verkürzte Zykloide, und ein Punkt auf dem Spurkranz eines Eisenbahnrades eine verlängerte Zykloide.

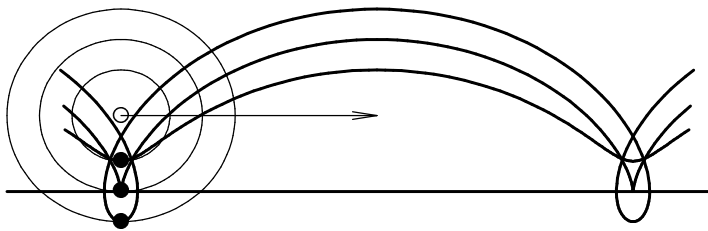


Abbildung 3.9.: Verkürzte, spitze und verlängerte Zykloide als Bahnen von Punkten in einem Abstand kleiner ($\rho=0.6$), gleich ($\rho=1.0$) bzw. größer ($\rho=1.4$) als der Abrollradius.

Eine mathematische Beschreibung der Zykloide kann durch eine komplexe Funktion der Form

$$\zeta(\xi) = \xi - i\rho e^{-i\xi} - i\frac{\rho^2}{2} \quad (3.62)$$

erfolgen. Dazu stellt man sich den in Abbildung 3.9 gezeigten Bereich als Ausschnitt der komplexen Ebene $z = x + iy$ vor¹³. Spaltet man $\zeta(\xi)$ in Real- und Imaginärteil auf, $\zeta(\xi) =$

¹³ Für die gesamten Betrachtungen über Zykloiden und ihre Erweiterungen bezeichnen wir die zweidimensionalen Koordinaten als (x, y) und z als die komplexe Zahl, die durch $z = x + iy$ definiert ist.

$x(\xi) + iy(\xi)$, dann entsprechen diese der parametrischen Darstellung der Zyklode. Es gilt

$$\begin{aligned} x(\xi) &= \Re(\zeta(x)) = \xi - \rho \sin \xi \\ y(\xi) &= \Im(\zeta(x)) = -\rho \cos \xi - \frac{\rho^2}{2} \end{aligned} \quad (3.63)$$

Die neben ξ ebenfalls reelle Größe ρ ist eine verallgemeinerte Amplitude. Der letzte Term in Gleichung (3.62) ist für die Form der Zyklode ohne Belang. Er sorgt für eine Verschiebung der Kurve in der vertikalen Richtung in der Art, dass der Mittelwert der Funktion, auf die Abszisse bezogen, Null ist¹⁴. Nur dann kann man auch die mittlere *quadratische* Abweichung sinnvoll definieren.

In der Form (3.62) ergeben sich ausschließlich nach unten ($y \rightarrow -\infty$) gerichtete Cuspsingularitäten. Aufwärtsgerichtete Spitzen entstehen, wenn man das Vorzeichen in der Exponentialfunktion invertiert. Solche Funktionen sind für die GRINFELDinstabilität ohne Belang, da eine Spitze elastisch vollständig relaxiert wäre und unter einer beliebigen Störung augenblicklich unter Verkleinerung der Oberfläche verschwinden würde. Strukturen, deren Cuspsingularitäten ausschließlich nach oben zeigen, können ebenfalls untersucht werden, da hierfür lediglich der konjugiert komplexe Ansatz benutzt werden muss. Eine Einschränkung würde der Zykloidenansatz nur im Hinblick auf hypothetische Systeme darstellen, die in beiden Richtungen zur Ebene Spitzen aufweisen.

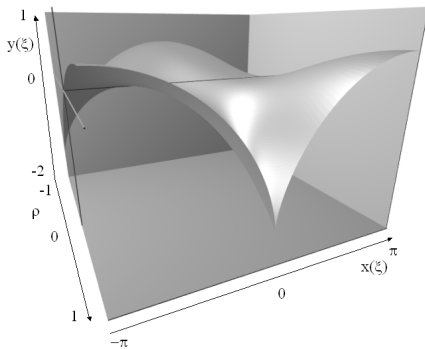


Abbildung 3.10.: Gesamtheit der durch eine Zyklode darstellbaren physikalisch relevanten Morphologien (vgl. Gleichung (3.62)). Die Cusp Grenze liegt bei $\rho = \pm 1$ (im Bild vorn bzw. hinten); negative ρ bewirken eine Verschiebung der Kurve um π in Richtung von $x(\xi)$.

Die Abbildung 3.10 zeigt die Morphologie der Zyklode von der negativen Cusp Grenze $\rho = -1$ über den Trivialfall $\rho = 0$, der der Geraden $y = 0$ entspricht, bis zur erneuten Cusp

14 Der Mittelwert einer parametrisch gegebenen Funktion berechnet sich zu

$$\langle x_\xi(\xi) y(\xi) \rangle ,$$

also folgt für die Zyklode in der Form (3.62)

$$\langle (1 - \rho \cos \xi) (-\rho \cos \xi - \rho^2/2) \rangle = -\rho^2/2 - \rho (1 - \rho^2/2) \underbrace{\langle \cos \xi \rangle}_0 + \rho^2 \underbrace{\langle \cos^2 \xi \rangle}_{1/2} = 0 .$$

bei $\rho = 1$. Sowohl für das Monozykloidenmodell als auch in Vorbereitung der Multizykloiden folgen einige Eigenschaften der Zykloide. Der *Krümmungsradius* beträgt [9]

$$r = \left| \frac{(\dot{x}(\xi)^2 + \dot{y}(\xi)^2)^{\frac{3}{2}}}{\begin{vmatrix} \dot{x}(\xi) & \dot{y}(\xi) \\ \ddot{x}(\xi) & \ddot{y}(\xi) \end{vmatrix}} \right|. \quad (3.64)$$

Daraus folgt für die Zykloide

$$r_Z = \left| \frac{(1 - 2\rho \cos(\xi) + \rho^2)^{3/2}}{\rho (\cos(\xi) - \rho)} \right|. \quad (3.65)$$

Für $\rho > 0$ liegt das Minimum der Zykloide bei $\xi = 2n\pi, n \in \mathbb{Z}$; für negative ρ bei $\xi = (2n+1)\pi, n \in \mathbb{Z}$. An diesen Stellen ist die Betrachtung des Krümmungsradius interessant, da er im Extremfall der Cusp Null wird. Er beträgt

$$r_{\xi=n\pi}^{\pm} = \left| \frac{(\pm 1 + \rho)^2}{\rho} \right|. \quad (3.66)$$

Folglich liegt die Cuspamplitude bei

$$\rho_{\text{Cusp}} = \pm 1. \quad (3.67)$$

Für die Berechnung der Cuspamplitude ist die Kenntnis des Krümmungsradius jedoch nicht zwingend notwendig. Das Auftreten einer Cusp singularität ist allgemein durch die Bedingung

$$\zeta'(\xi) = 0 \quad (3.68)$$

gegeben, was für die Zykloide auf die Gleichungen

$$1 - \rho \cos(\xi) = 0, \quad \rho \sin(\xi) = 0 \quad (3.69)$$

führt. Bei $\xi = 0$ bzw. $\xi = \pi$ folgt ebenfalls das Ergebnis (3.67); für andere ξ existieren keine Lösungen.

Die gesuchten stationären Lösungen sind durch die Grundwellenzahl k , den Parameter l_{12} sowie durch ρ (bzw. im verallgemeinerten Modell den Parametersatz $\rho_1 \dots \rho_N$) gekennzeichnet. Letzterer determiniert die gesuchte Form der Oberfläche. Da es unmöglich ist, den gesamten Morphologieverlauf in Abhängigkeit von den ersten beiden Parametern darzustellen, benötigen wir hierfür wieder ein skalares Maß. Analog zum vorigen Kapitel verwenden wir hierfür die mittlere quadratische Abweichung der Zykloide von der Abszisse. Sie ist die Größe, mit der die Resultate im allgemeinen angegeben werden. Da sie keine eindeutige Funktion der ρ_n ist, kann eine Darstellung der stationären Lösungsmannigfaltigkeit in einem $(k, \bar{\alpha})$ -Diagramm durchaus mehrdeutig sein. Diese Eigenschaft traf auch schon auf die Methode des

vorigen Abschnittes zu, allerdings war dort die Genauigkeit nicht ausreichend, um solche im Rahmen des Modells durchaus existierenden Mehrdeutigkeiten identifizieren und von Artefaktlösungen unterscheiden zu können. Die mittlere quadratische Amplitude beträgt

$$\bar{\rho} = \sqrt{\langle x'(\xi) y^2(\xi) \rangle} = \frac{|\rho|}{2} \sqrt{2 - \rho^2}, \quad (3.70a)$$

und sie entspricht dem \bar{a} des vorigen Abschnitts. Entsprechend bilden wir die Größe

$$\bar{a} = \frac{\bar{\rho}}{k}. \quad (3.70b)$$

Sie stimmt mit der Größe überein, die SPENCER und MEIRON in [63] darstellen.

3.3.2. Das Zykloidenmodell

Wir führen die Energieminimierung mit Zykloiden als Ansatzfunktion vollständig aus, denn sie dient als vergleichsweise einfach nachvollziehbarer Prototyp der komplexeren Berechnungen an verallgemeinerten Zykloiden. Die Rechnung wurde ohne Berücksichtigung von Schwerkraft bis auf den letzten Schritt der eigentlichen Minimierung bereits von CHIU und GAO [15] ausgeführt.

Beschränken wir unseren Lösungsraum auf die Zykloiden (3.62), so vereinfacht sich das allgemeine Variationsproblem (3.61) zu

$$\frac{\delta}{\delta \rho} [E_E + E_S + E_G] = 0. \quad (3.71)$$

Wir erweitern den reellen Parameter ξ in Gleichung (3.62) zu einer komplexen Größe $\Upsilon = \xi + i\eta$. Dann stellt (3.62) die eine konforme Abbildung zwischen der z -Ebene und der Υ -Ebene dar, die die Kurve $\zeta(\xi)$ in die Kurve $\eta = 0$ und den elastischen Festkörper in die Halbebene $\eta \leq 0$ überführt.

Formulieren wir das elastische Teilproblem in komplexen Größen. Dazu kommen wir noch einmal auf die AIRYfunktion zurück. Die Berechnung der elastischen Spannungen nach den üblichen Ableitungsregeln impliziert die Gültigkeit der elastischen Gleichgewichtsbedingung $\partial_j \sigma_{ij} = 0$. Weiterhin folgt aus dem HOOKEschen Gesetz die biharmonische Gleichung $\Delta^2 \chi = 0$. Die allgemeinste Lösung für die AIRYfunktion lautet in komplexen Koordinaten (z, \bar{z}) (mit $z = x + iy$, $\bar{z} = x - iy$)

$$\chi(z, \bar{z}) = \bar{z} f_1(z) + g_1(z) + z f_2(\bar{z}) + g_2(\bar{z}). \quad (3.72)$$

Dabei sind f_1 , f_2 , g_1 und g_2 analytische Funktionen ihrer Argumente. Die Beschränkung auf reelle Lösungen der biharmonischen Gleichung reduziert die Anzahl der unabhängigen Funktionen von vier auf zwei. Wir wählen die Formulierung

$$\chi(z, \bar{z}) = \frac{1}{2} \left\{ \bar{z} \Phi(z) + \int \Psi(z) dz + z \overline{\Phi(z)} + \int \overline{\Psi(z)} d\bar{z} \right\}. \quad (3.73)$$

Die Funktionen Φ und Ψ werden als GOURSATfunktionen bezeichnet. Wir vermerken, dass die Ableitungen in komplexen Größen $\partial_x = \partial_z + \partial_{\bar{z}}$ und $\partial_y = \mathfrak{i}(\partial_z - \partial_{\bar{z}})$ lauten und erhalten für die Spannungen

$$\begin{aligned}\sigma_{xx} + \sigma_{yy} &= 2 \left[\Phi'(z) + \overline{\Phi'(z)} \right] \\ \sigma_{yy} - \sigma_{xx} + 2\mathfrak{i}\sigma_{xy} &= 2 \left[\bar{z}\Phi''(z) + \Psi'(z) \right].\end{aligned}\quad (3.74)$$

Nachdem wir die Komponenten des Spannungstensors durch die GOURSATfunktionen ausgedrückt haben, macht es sich erforderlich, gleiches auch für die Randbedingungen auf der Kurve (3.62) zu erreichen. Wir formulieren dazu die Kraftdichte (f_x, f_y) auf einen Punkt der durch (3.62) gegebenen Oberfläche (vgl. Gleichung (2.2c), S. 9) als komplexe Größe $f = f_x + \mathfrak{i}f_y$:

$$f_x + \mathfrak{i}f_y = \sigma_{xj}n_j + \mathfrak{i}\sigma_{yj}n_j = (\sigma_{xx} + \mathfrak{i}\sigma_{xy})n_x + (\sigma_{yy} - \mathfrak{i}\sigma_{xy})\mathfrak{i}n_y. \quad (3.75)$$

Mit der Bogenlänge s entlang der Oberfläche, definiert so, dass $s \rightarrow \infty$ wenn $x \rightarrow \infty$, gilt

$$n_x + \mathfrak{i}n_y = -\frac{dy}{ds} + \mathfrak{i}\frac{dx}{ds} = \mathfrak{i}\frac{dz}{ds}. \quad (3.76)$$

Daraus folgt

$$\begin{aligned}f_x + \mathfrak{i}f_y &= \frac{1}{2}(\sigma_{xx} + \sigma_{yy})\mathfrak{i}\frac{dz}{ds} + \frac{1}{2}(\sigma_{yy} - \sigma_{xx} - 2\mathfrak{i}\sigma_{xy})\mathfrak{i}\frac{d\bar{z}}{ds} \\ &= \left[\Phi'(z) + \overline{\Phi'(z)} \right] \mathfrak{i}\frac{dz}{ds} + \left[z\overline{\Phi''(z)} + \overline{\Psi'(z)} \right] \mathfrak{i}\frac{d\bar{z}}{ds} \\ &= \mathfrak{i}\frac{d}{ds} \left[\Phi(z) + z\overline{\Phi'(z)} + \overline{\Psi(z)} \right].\end{aligned}\quad (3.77)$$

Wir integrieren diesen Ausdruck, um zur Gesamtkraft auf die Oberfläche $\zeta(\xi)$ zu gelangen:

$$-\mathfrak{i}f = -\mathfrak{i} \int (f_x + \mathfrak{i}f_y) ds = \Phi(z) + z\overline{\Phi'(z)} + \overline{\Psi(z)}. \quad (3.78)$$

Analog zum Vorgehen in den vorangegangenen Kapiteln separieren wir den Anteil der Vorspannung aus dem Spannungstensor. Darüberhinaus entdimensionalisieren wir ihn mit der Vorspannung σ_0 :

$$\sigma_{ij} \rightarrow \sigma_{ij} + \delta_{ix}\delta_{jx}. \quad (3.79)$$

Auch die GOURSATfunktionen Φ und Ψ werden durch σ_0 dividiert. Bringen wir in der Randbedingung $\sigma_{ij}n_j = 0$ den Anteil aus der Vorspannung auf die rechte Seite, so folgt nach der Transformation (3.79)

$$\sigma_{ij}n_j = -\delta_{ix}n_x. \quad (3.80)$$

Sollen auch f_x, f_y, Φ und Ψ nur Abweichungen von der Vorspannung enthalten, so wird aus $f_x + \mathfrak{i}f_y = 0$ jetzt $f_x + \mathfrak{i}f_y = \frac{dy}{ds}$, und nach Integration entsprechend Gleichung (3.78) erhalten wir

$$-\mathfrak{i}f = \frac{1}{2}(\bar{z} - z). \quad (3.81)$$

Einer Argumentation von SPENCER und MEIRON folgend impliziert die Periodizität der Spannungen keineswegs die Periodizität der Funktionen Φ und Ψ . Jedoch können wir die GOURSATfunktionen durch periodische Funktionen Φ_0 und Ψ_0 entsprechend den Beziehungen

$$\begin{aligned}\Phi(z) &= \Phi_0(z) \\ \Psi(z) &= \Psi_0(z) - z\Phi'_0(z)\end{aligned}\quad (3.82)$$

ausdrücken. Das Problem besteht nun darin, periodische Funktionen Φ_0 und Ψ_0 zu finden, die im Gebiet des Festkörpers analytisch sind. Aus (3.78), (3.81) und (3.82) folgt, dass Φ_0 und Ψ_0 der Bedingung

$$\Phi_0(z) + (z - \bar{z})\overline{\Phi'_0(z)} + \overline{\Psi_0(z)} = -\frac{1}{2}(z - \bar{z}) \quad (3.83)$$

genügen müssen. Darüberhinaus verlangen wir von Φ_0 und Ψ_0 , dass sie für $y \rightarrow -\infty$ gegen Null gehen, da der Spannungszustand hier gegen die Vorspannung konvergiert.

Transformieren wir nun Gleichung (3.83) in die Υ -Ebene. Dazu benutzen wir die analytische Fortsetzung der Funktion $\zeta(\xi)$: $\zeta(\Upsilon) = \zeta(\xi + i\eta)$. An dieser Stelle sehen wir noch von einer konkreten Form der Funktion $\zeta(\Upsilon)$ ab, um allgemeine Beziehungen zu erhalten, auf die wir in Folgekapiteln noch einmal zurückkommen können. Die Größen in der Υ -Ebene werden wir mit einer Tilde kennzeichnen. Mit $z = \zeta(\Upsilon)$ haben wir also

$$\begin{aligned}\Phi_0(z) &= \Phi_0(\zeta(\Upsilon)) = \tilde{\Phi}_0(\Upsilon) \\ \Psi_0(z) &= \tilde{\Psi}_0(\Upsilon).\end{aligned}\quad (3.84)$$

Gleichung (3.83) enthält außerdem die erste Ableitung von Φ_0 , die sich entsprechend

$$\Phi'_0(z) = \tilde{\Phi}'_0(\Upsilon) \frac{d\Upsilon}{dz} = \frac{\tilde{\Phi}'_0(\Upsilon)}{\zeta'(\Upsilon)} \quad (3.85)$$

transformiert. Setzt man (3.84) und (3.85) in Gleichung (3.83) ein, so folgt auf der reellen Achse $\eta = 0$

$$\tilde{\Phi}_0(z) + \frac{1}{2} \left[\zeta(\xi) - \overline{\zeta(\xi)} \right] \left(1 + 2 \frac{\overline{\tilde{\Phi}'_0(\xi)}}{\zeta'(\xi)} \right) + \overline{\tilde{\Psi}_0(\xi)} = 0 \quad (3.86)$$

Nun lautet nach wie vor die Forderung an die Funktionen $\tilde{\Phi}'_0(\Upsilon)$ und $\tilde{\Psi}_0(\Upsilon)$, dass sie in der unteren Halbebene analytisch sind. Schreiben wir sie als Reihen in Potenzen von $e^{-i\Upsilon}$, so folgt mit $\Upsilon = \xi + i\eta$, dass diese Reihen keine Terme der Form $e^{+in\Upsilon}$ enthalten werden, da diese nur in der oberen Halbebene analytisch sind:

$$\tilde{\Phi}_0(\Upsilon) = \sum \alpha_n e^{-in\xi} \quad \tilde{\Psi}_0(\Upsilon) = \sum \beta_n e^{-in\xi}. \quad (3.87)$$

Darüberhinaus hängt die Ordnung von $\tilde{\Phi}_0(\Upsilon)$ in $e^{-i\Upsilon}$ von der Ordnung der Ansatzfunktion $\zeta(\xi)$ ab. $\zeta(\xi)$ ist ebenfalls analytisch in der unteren Halbebene und kann daher als

$$\zeta(\xi) = \sum_{n=0}^N z_n e^{-in\xi} \quad (3.88)$$

ausgedrückt werden. Multiplizieren wir (3.86) mit dem Nenner des mittleren Terms auf der linken Seite, so ist einzusehen, dass die höchste Ordnung in $e^{-i\Upsilon}$, abgesehen von $\tilde{\Phi}_0(z)$, durch $\zeta(\xi)z'_0 = \zeta(\xi)$ erzeugt wird. Es genügt daher bei einer Ansatzfunktion der Art (3.88),

$$\tilde{\Phi}_0(\Upsilon) = \sum_{n=1}^N \alpha_n e^{-in\xi} \quad (3.89)$$

anzusetzen. Ein konstanter Term ($n = 0$) entfällt, da die Funktionen nur Abweichungen zum Vorspannungszustand beschreiben.

Wir kommen zum Beispiel der Zykloide. Wir setzen den Ansatz für die Zykloide (3.62) in Gleichung (3.86) ein¹⁵. Da $\zeta(\xi)$ nur einen Term erster Ordnung in $e^{-i\xi}$ enthält, lautet der Ansatz $\tilde{\Phi}_0(\xi) = \alpha_1 e^{-i\xi}$.

$$\alpha_1 e^{-i\xi} - \frac{i}{2}\rho (e^{-i\xi} + \rho + e^{i\xi}) \left(1 + 2i \frac{\bar{\alpha}_1 e^{i\xi}}{1 - \rho e^{i\xi}} \right) + \overline{\tilde{\Psi}_0}(\xi) = 0. \quad (3.90)$$

Der einzige Term außer dem ersten, der einen negativen Exponenten enthält, ist das Produkt der jeweils ersten Summanden in den beiden Klammern. Wir erhalten folglich

$$\alpha_1 = i \frac{\rho}{2}, \quad (3.91)$$

und damit nach etwas Vereinfachung¹⁶ für die zweite GOURSATfunktion

$$\tilde{\Psi}_0(\xi) = - \frac{i\rho (2\rho + e^{-i\xi})}{2(1 - \rho e^{-i\xi})}. \quad (3.92)$$

Die Funktion $\tilde{\Psi}_0(\xi)$ werden wir, wie sich zeigen wird, für die Energieminimierung nicht benötigen, da die Energiedichte an der Oberfläche einzig durch die Funktion $\tilde{\Phi}_0(\xi)$ determiniert ist. Für eine Beschreibung des Spannungszustandes im *Inneren* des Festkörpers ist sie jedoch notwendig und wird daher hier mit angegeben.

¹⁵ Die auf $\zeta(\xi)$ bezogenen Ausdrücke lauten

$$\zeta(\xi) = \xi - i\rho e^{-i\xi} - i \frac{\rho^2}{2}; \quad \zeta'(\xi) = 1 - \rho e^{-i\xi}; \quad \overline{\zeta'}(\xi) = 1 - \rho e^{i\xi}$$

¹⁶

$$\begin{aligned} \overline{\tilde{\Psi}_0}(\xi) &= -a_1 e^{-i\xi} + \frac{i}{2}\rho (e^{-i\xi} + \rho + e^{i\xi}) \left(1 + 2i \frac{\bar{a}_1 e^{i\xi}}{1 - \rho e^{i\xi}} \right) \\ &= \frac{i}{2}\rho \left[\rho + e^{i\xi} + \rho (e^{-i\xi} + \rho + e^{i\xi}) \frac{e^{i\xi}}{1 - \rho e^{i\xi}} \right] = \frac{i}{2}\rho \frac{2\rho + e^{i\xi}}{1 - \rho e^{i\xi}} \\ \tilde{\Psi}_0(\xi) &= - \frac{i\rho (2\rho + e^{-i\xi})}{2(1 - \rho e^{-i\xi})} \end{aligned}$$

Kehren wir zur Darstellung der Komponenten des Spannungstensors über die GOURSAT-funktionen, Gleichung (3.74), zurück. Wir hatten den Anteil der Vorspannungen aus den Komponenten des Spannungstensors und aus den GOURSATfunktionen separiert und alle Größen mit σ_0 entdimensionalisiert (weshalb die Vorspannung den Wert 1 hat, vgl. (3.79)). Gleichung (3.74) ist nach wie vor gültig, wir beschreiben aber nur noch die *Abweichung* des Spannungsfeldes von der Vorspannung. Wir führen die konforme Abbildung an der ersten der Gleichungen (3.74) durch:

$$\sigma_{xx} + \sigma_{yy} = 2 [\Phi'(z) + \overline{\Phi'}(z)] = 2 \left[\frac{\tilde{\Phi}'(\Upsilon)}{\zeta'(\Upsilon)} + \frac{\overline{\tilde{\Phi}'(\Upsilon)}}{\overline{\zeta'(\Upsilon)}} \right], \quad (3.93)$$

An der Oberfläche $\Upsilon = \xi$ verschwinden laut Voraussetzung die Normalspannungen. Folglich ist $\sigma_{tt} = \text{Tr}(\sigma)$, wobei hier selbstverständlich der vollständige Spannungstensor einzusetzen ist. Wir haben also

$$\sigma_{tt} = 1 + 2 \left[\frac{\tilde{\Phi}'(\xi)}{\zeta'(\xi)} + \frac{\overline{\tilde{\Phi}'(\xi)}}{\overline{\zeta'(\xi)}} \right]. \quad (3.94)$$

Für die Zykloide folgt

$$\sigma_{tt} = 1 + \frac{\rho e^{-i\xi}}{1 - \rho e^{-i\xi}} + \frac{\rho e^{i\xi}}{1 - \rho e^{i\xi}} = 1 + \frac{2\rho (\cos(\xi) - \rho)}{1 - 2\rho \cos(\xi) + \rho^2}. \quad (3.95)$$

Nun kommen wir zur eigentlichen Energievariation. Die Variation der elastischen Energie infolge einer Änderung der Oberfläche $\delta \mathbf{x}$ kann man nach [15] als

$$\delta E_E = \int w(s) \mathbf{n} \delta \mathbf{x} ds \quad (3.96)$$

schreiben, wobei $w(s)$ die Energiedichte an der Oberfläche ist. Integrale über die Oberfläche werden wir wie in den vorangegangenen Kapiteln als Mittelwerte auffassen, d.h. wir dividieren jeweils durch die Intervalllänge. Wir beschränken unseren Lösungsraum auf die Menge der Zykloiden. Daher ist es möglich, Gleichung (3.96) als Variation des Parameters ρ aufzufassen. Analog werden wir bei den Erweiterungen der Zykloiden vorgehen: Die Variation (3.96) wird dort analog als Variation einer Paramettermenge $\{\rho_1 \dots \rho_n\}$ betrachtet werden. $\delta \mathbf{x}$ drückt man mittels

$$\delta \mathbf{x} = \left(\frac{\delta x(\xi)}{\delta \rho} \mathbf{e}_x + \frac{\delta y(\xi)}{\delta \rho} \mathbf{e}_y \right) \delta \rho \quad (3.97)$$

aus. Weiterhin gilt

$$\mathbf{n} ds = (-y'(\xi) \mathbf{e}_x + x'(\xi) \mathbf{e}_y) d\xi. \quad (3.98)$$

Wir setzen nun entsprechend dem Ansatz (3.62) die Größen für die Zykloide ein:

$$\begin{aligned} \delta \mathbf{x} &= -k^{-1} [\sin(\xi) \mathbf{e}_x + (\cos(\xi) + \rho) \mathbf{e}_y] d\rho \\ \mathbf{n} ds &= [-\rho \sin(\xi) \mathbf{e}_x + (1 - \rho \cos(\xi)) \mathbf{e}_y] d\xi \end{aligned} \quad (3.99)$$

Hier ist wieder zu beachten, dass beim Rechnen in dimensionslosen Größen die Ableitung nach einer Ortsvariable einen Vorfaktor k^{-1} erzeugt (vergleiche hierzu Kapitel 3.1.1). An der Oberfläche gilt

$$w(\xi) = \frac{1}{2} \text{Tr}(\sigma)^2 = \frac{1}{2} \sigma_{tt}^2, \quad (3.100)$$

was nach Einsetzen von (3.95) und Vereinfachen auf

$$w(\xi) = \frac{1}{2} \frac{(1 - \rho^2)^2}{(1 - 2\rho \cos(\xi) + \rho^2)^2} \quad (3.101)$$

führt. Einsetzen von (3.99) und (3.101) in (3.96) ergibt schließlich¹⁷

$$\frac{\delta E_E}{\delta \rho} = \frac{1}{2k} \left\langle \frac{\cos(\xi) (\rho^2 - 1)^3}{(1 - 2\rho \cos(\xi) + \rho^2)^2} \right\rangle = -\frac{\rho}{k}. \quad (3.102)$$

Dabei haben wir das Integral wieder als Mittelung aufgefaßt, also durch die Intervallbreite 2π dividiert.

Kommen wir wir zu den anderen Energietermen. Die potenzielle Energie entspricht bis auf einen Vorfaktor dem Quadrat der mittleren quadratischen Amplitude (3.70):

$$E_G = \frac{l_{12}}{2k^2} \langle x'(\xi)y(\xi)^2 \rangle = \frac{l_{12}}{2k^2} \frac{\rho^2 (2 - \rho^2)}{4} \quad (3.103)$$

Folglich beträgt die Ableitung

$$\frac{\partial E_G}{\partial \rho} = \frac{l_{12}}{2k^2} \rho (1 - \rho^2). \quad (3.104)$$

¹⁷ Wir benutzen das Integral aus [25], § 3.645:

$$\frac{1}{\pi} \int_0^\pi \frac{\cos(\xi)^n}{(a + b \cos(\xi))^{n+1}} d\xi = \frac{1}{2^n (a+b)^n \sqrt{a^2 - b^2}} \sum_{k=0}^n (-1)^k \frac{(2n - 2k - 1)!! (2k - 1)!!}{(n - k)! k!} \left(\frac{a+b}{a-b} \right)^k.$$

Diese Formel gilt für $a^2 > b^2$. Der Operator !! bezeichnet im Falle eines geraden (ungeraden) Argumentes das Produkt über alle geraden (ungeraden) ganzen Zahlen zwischen Null und dem Argument, einschließlich diesem selbst. Mit $n = 1$, $a = 1 + \rho^2$ und $b = -2\rho$ folgt $1 + 2\rho^2 + \rho^4 > 4\rho^2$ bzw. $1 - 2\rho^2 + \rho^4 = (1 - \rho^2)^2 > 0$ überall außer an der Cusp $\rho = \pm 1$, also ist die Voraussetzung erfüllt. Weiter gilt

$$\frac{1}{\pi} \int_0^\pi \frac{\cos(\xi)}{(a + b \cos(\xi))^2} d\xi = \frac{1}{2(a+b)\sqrt{a^2 - b^2}} \left[-1 + \left(\frac{a+b}{a-b} \right) \right] = \frac{b}{(a^2 - b^2)\sqrt{a^2 - b^2}}.$$

Mit der Identität $a^2 - b^2 = (1 - \rho^2)^2$ und nach Multiplikation mit dem Vorfaktor $\frac{1}{2}(\rho^2 - 1)^3 = \frac{1}{2}\sqrt{a^2 - b^2}^3$ aus (3.102) erhalten wir schließlich

$$\frac{(a^2 - b^2)^{3/2}}{2\pi} \int_0^\pi \frac{\cos(\xi)}{(a + b \cos(\xi))^2} d\xi = \frac{b}{2} = -\rho.$$

Die Oberflächenenergie ist in dimensionslosen Einheiten gerade gleich der Differenz der Bogenlängen. Der Ausdruck und seine Ableitung sind einfach zu berechnen¹⁸:

$$\begin{aligned} E_S &= \left\langle \sqrt{x'(\xi)^2 + y'(\xi)^2} - 1 \right\rangle \\ &= \frac{2(1+\rho)}{\pi} E \left(\frac{2\sqrt{\rho}}{1+\rho} \right) - 1 \end{aligned} \quad (3.105)$$

$$\frac{\partial E_S}{\partial \rho} = \frac{1}{\pi} \left[\frac{\rho-1}{\rho} K \left(\frac{2\sqrt{\rho}}{1+\rho} \right) + \frac{\rho+1}{\rho} E \left(\frac{2\sqrt{\rho}}{1+\rho} \right) \right]. \quad (3.106)$$

Um die folgenden Berechnungen kürzer fassen zu können, führen wir eine Hilfsfunktion $S(\rho) = \frac{\partial E_S}{\partial \rho}$ ein. Das Variationsproblem haben wir damit auf die Lösung der Gleichung

$$-\frac{\rho}{k} + S(\rho) + \frac{l_{12}}{2k^2} \rho (1 - \rho^2) = 0 \quad (3.107)$$

reduziert. Wir lassen die Schwerkraft zunächst außer Acht, $l_{12} = 0$. Im Grenzfall der Cusp $\rho \rightarrow 1$ gilt $S(1) = 2/\pi$. Daraus folgt

$$-\frac{1}{k} + \frac{2}{\pi} = 0 \Rightarrow k_{\text{Cusp}} = \frac{\pi}{2}.$$

Wir sehen am dritten Term von Gleichung (3.107), dass auch ein $l_{12} \neq 0$ die Position der Cusp im k -Raum nicht verändert. Für den Einsatz der Instabilität sollten sich dieselben Ergebnisse wie in der linearen Theorie ergeben. Wir entwickeln dazu $S(\rho)$. Der Term erster Ordnung ist $S(\rho) \approx \rho/2$, und die linearisierte Version von Gleichung (3.107) lautet daher

$$\rho \left(-\frac{1}{k} + \frac{1}{2} + \frac{l_{12}}{2k^2} \right) = 0, \quad (3.108)$$

mit der Lösung

$$k_{\text{Marginal}} = 1 \pm \sqrt{1 - l_{12}}, \quad (3.109)$$

in Übereinstimmung mit der linearen Theorie. Um die gesamte Menge der stationären Lösungen zu berechnen, lösen wir (3.107) nach k auf:

$$k = \frac{\rho}{2S(\rho)} \left(1 \pm \sqrt{1 - 2l_{12}S(\rho) \frac{1 - \rho^2}{\rho}} \right) \quad (3.110)$$

¹⁸ Dabei sind K und E die vollständigen elliptischen Integrale erster und zweiter Art. Sie sind definiert durch

$$K(u) = \int_0^{\pi/2} \frac{dx}{\sqrt{1 - u^2 \sin^2 x}}, \quad (|u| < 1); \quad E(u) = \int_0^{\pi/2} dx \sqrt{1 - u^2 \sin^2 x}, \quad (|u| \leq 1).$$

Wir vergleichen zunächst unsere Lösung für $l_{12} = 0$ mit der von SPENCER und MEIRON [63]. Die dort dargestellte Größe ist die dimensionsbehaftete mittlere Quadratamplitude, die wir aus der dimensionslosen Größe $\bar{\rho}$ durch Division durch k gewinnen:

$$\bar{\alpha} = \frac{1}{k} \bar{\rho} = \frac{\text{sgn}(\rho)}{2} S(\rho) \sqrt{2 - \rho^2} \quad (3.111)$$

Die Lösungskurve (Bild 3.11) ist also die Darstellung¹⁹

$$(k, \bar{\alpha}) = \left(\frac{\rho}{S(\rho)}, \frac{\text{sgn}(\rho)}{2} S(\rho) \sqrt{2 - \rho^2} \right). \quad (3.112)$$

ρ kann als Parameter von 0 (ebene Grenzfläche) entweder bis 1 oder -1 (Cusp) laufen. Die Ergebnisse sind identisch und beschreiben um π gegeneinander verschobene Morphologien (vergleiche hierzu die Argumentation auf Seite 49). Für die Darstellung des Radius müssen

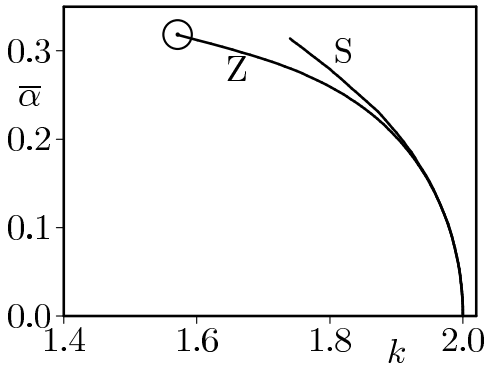


Abbildung 3.11.: Monozykloidenmodell, Vergleich der mittleren quadratischen Amplitude bei $l_{12} = 0$ (Z) mit der SPENCER-MEIRON-Lösung (S). Letztere wurde digitalisiert und durch Multiplikation mit 2 (Amplituden) bzw. $\frac{1}{2}$ (Wellenzahl) in die hier verwendete Skalierung überführt. Die Cusp der Zykloidenlösung (\odot), durch Einsetzen von $\rho = 1$ in (3.112) zu $(\pi/2, 1/\pi)$ bestimmt, liegt bei deutlich kleinerer Wellenzahl als die numerische Lösung.

wir ebenfalls Gleichung (3.66) durch k dividieren. Für nichtnegative ρ folgt also

$$(k, r_C) = \left(\frac{\rho}{S(\rho)}, S(\rho) \frac{(\rho - 1)^2}{\rho^2} \right). \quad (3.113)$$

Abbildung 3.12 stellt den Vergleich mit dem aus der Literatur entnommenen Modell anhand der Cuspradien her. Die beiden Diagramme 3.11 und 3.12 legen bereits nahe, dass das Zykloidenmodell einer Erweiterung bedarf, wenn es mehr als qualitative Aussagen treffen soll.

Vor diesem Schritt beziehen wir jedoch die potenzielle Energie in die Theorie ein und entwickeln eine vollständige Darstellung des Zykloidenmodells, da sie zu einigen neuen Aussagen führen wird. Zu diesem Zweck setzen wir die allgemeine Form für k (3.110) in die Darstellung der mittleren quadratischen Amplitude (3.112) ein. Das Lösungsfeld, das nun vom Parameter l_{12} abhängig ist, ist in Abbildung (3.13) dargestellt.

Die Position der Cusp (\odot) entspricht dem Symbol in Abbildung 3.11. Erhöhen wir l_{12} von Null auf eins, so engt sich, wie aus der linearen Theorie bekannt, der linear instabile k -Bereich

¹⁹ Darüberhinaus unterscheiden sich aufgrund einer abweichenden Definition von l_1 die Größen in [63] um einen Faktor 2 von denen in (3.112).

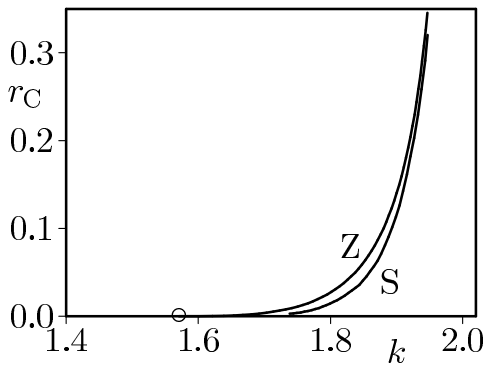


Abbildung 3.12.: Monozykloidenmodell, Vergleich des Cuspradius bei $l_{12} = 0$ (Z) mit der SPENCER-MEIRON-Lösung (S) (siehe auch Bild 3.11). Generell schätzt das Zyklidenmodell den Cuspradius zu groß ein.

ein, bis bei $l_{12} = 1$, dem kritischen Fall im Modell mit Schwerkraftterm, nur die Wellenzahl $k = 1$ neutral stabil bleibt.

Für noch größere l_{12} ist eine endliche Störung der ebenen Grenzfläche notwendig, um sie überhaupt zu destabilisieren. Eine Schar instabiler Lösungen schließt sich an, die sich asymptotisch an $1/2k$ annähern. Schließlich betrachten wir die Stabilität der Lösungsschar aus Ab-

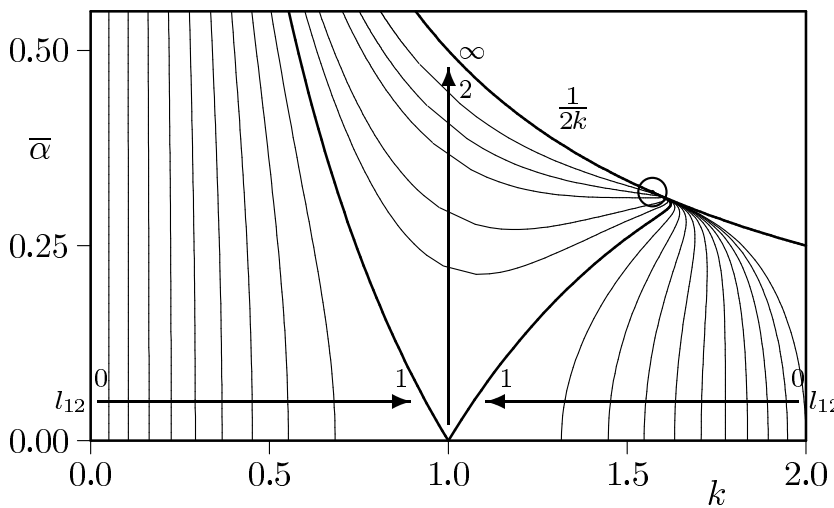


Abbildung 3.13.: Stationäre Lösungen des Monozykloidenmodells

Abbildung 3.13. Die Gleichung (3.107) lieferte ja lediglich Extremwerte. Durch Betrachtung des Vorzeichens der zweiten Ableitung²⁰

$$-\frac{1}{k} + S'(\rho) + \frac{l_{12}}{2k^2} (1 - 3\rho^2) = 0 \tag{3.114}$$

erhält man ein erstaunliches Resultat (Abbildung 3.14): Stabile Lösungen treten in einem Bereich auf, der durch die $l_{12} = 0$ -Kurve die Verbindung zwischen der Cusp und dem durch (•)

²⁰

$$S'(\rho) = \frac{1}{\pi\rho^2} \left[\frac{1+\rho^2}{1+\rho} K\left(\frac{2\sqrt{\rho}}{1+\rho}\right) + (1+\rho) E\left(\frac{2\sqrt{\rho}}{1+\rho}\right) \right]$$

gekennzeichneten Punkt $(16/9, 0)$ im Diagramm 3.14 und die Abszisse begrenzt ist²¹.

Im übrigen unterscheidet sich die Lösung $k = 16/9 = 1.\bar{7}$ leicht vom trikritischen Punkt aus der Expansionsmethode (1.817). Allerdings beschreibt das Zykloidenmodell trotz seiner offensichtlichen Qualität als nichtlineare Theorie nur die linearen Terme exakt. Eine Entwicklung in Doppelzykloiden liefert hier wieder das korrekte Ergebnis.

Es zeigt sich, dass neben den Kurven für $l_{12} = 0 \dots 32/81$ (entsprechend $k = 2 \dots 16/9$), die vollständig stabil sind, auch jede weitere Lösungskurve in den stabilen Bereich einmündet, bevor die Cuspsingularität erreicht wird. Im Rahmen des Zykloidenmodells gibt es also die prinzipielle Möglichkeit, in lateral endlichen Systemen bei beliebiger Schwerkraft Restabilisierung zu erreichen.

Aufgabe des folgenden Kapitels wird es sein zu überprüfen, ob genauere Modelle dieses Verhalten beibehalten werden. Darüberhinaus stellt sich die interessante Frage, ob die im Gegensatz zur Wellenzahl auffällig übereinstimmende Cuspamplitude (vgl. Abbildung 3.11) Zufall ist oder bereits das korrekte Ergebnis für das Modell darstellt.

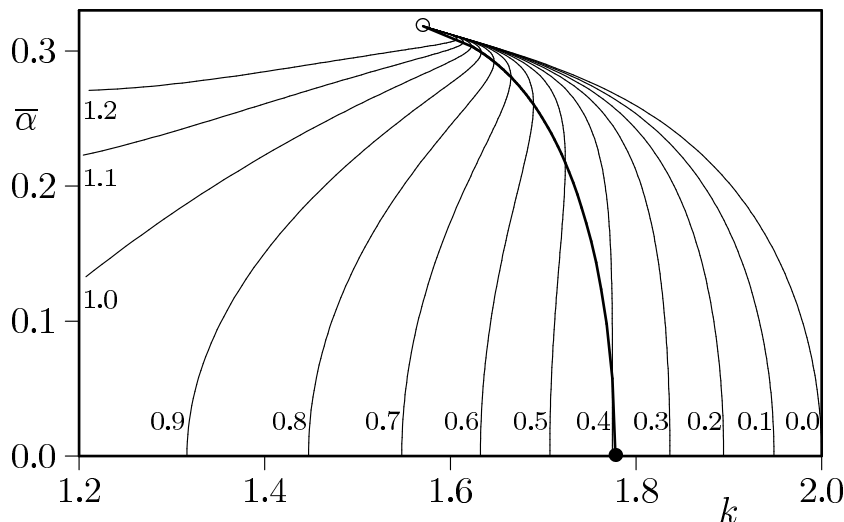


Abbildung 3.14.: Stabiler Lösungsbereich des Monozykloidenmodells. (vgl. Abbildung 3.13)

3.3.3. Multizykloiden

Verschiedene Verallgemeinerungen der Zykloide sind denkbar. GAO [15] sieht eine Verallgemeinerung in Richtung der Hypo- bzw. Epizykloiden für sinnvoll an, Kurven, die entstehen, wenn der Abrollkreis sich nicht entlang einer Geraden, sondern eines größeren Kreises bewegt. Die Zykloide ist in diesem Kontext ein Spezialfall für einen unendlich großen Radius des größeren Kreises.

Hier wird ein anderer Weg eingeschlagen, der dem physikalischen Problem einer instabilen Ebene angemessener erscheint. Sie wird als Multizykloide oder N -Zykloide bezeichnet. Diese

²¹ Man entwickelt Gleichung (3.114) bis einschließlich ρ^2 und berücksichtigt im Grenzfall $\rho = 0$, dass $k = 1 + \sqrt{1 - l_{12}}$.

Verallgemeinerung von Gleichung (3.62) wurde in [38] zunächst mit $N = 2$ (Doppelzykloide) auf die GRINFELDinstabilität angewendet. In [44] wurde die Erweiterung dann für allgemeine N ausgeführt²². Wir schreiben sie in der Form

$$\zeta_N(\xi) = \xi - \mathfrak{i} \sum_{n=1}^N \frac{\rho_n}{n} e^{-in\xi} - \mathfrak{i} \frac{1}{2} \sum_{n=1}^N \frac{\rho_n^2}{n}, \quad (3.115)$$

wobei der dritte Term analog zur Zyklode dem Abzug des Mittelwertes entspricht, so dass $\langle \Re \zeta'(\xi) \Im \zeta(\xi) \rangle = 0$. N ist die Anzahl der berücksichtigten Zyklodenmoden. Das explizit vorkommende n im Nenner könnte, analog zu den n im AIRYfunktionsansatz, auch den Parametern ρ_n zugeschlagen werden. Die Schreibweise in (3.115) wird jedoch eine vereinfachte Formulierung der Cuspbedingungen ermöglichen. Real- und Imaginärteil des Generators lauten also

$$x_N(\xi) = \xi - \sum_{n=1}^N \frac{\rho_n}{n} \sin(n\xi) \quad (3.116a)$$

$$y_N(\xi) = - \sum_{n=1}^N \frac{\rho_n}{n} \left(\cos(n\xi) + \frac{\rho_n}{2} \right). \quad (3.116b)$$

Die mathematischen Eigenschaften der Multizykloiden sind weitgehend unerforscht. Die einzelnen „Zyklodenmoden“ bilden kein Orthonormalsystem und bieten daher nicht die Möglichkeit einer eindeutigen Abbildung auf eine Fourierreihe. Sie scheinen aber hinsichtlich der Menge aller periodischen und symmetrischen Funktionen (einschließlich solcher mit Überhängen und Überkreuzungen) eine Teilmenge darzustellen, unter denen die mittlere Krümmung das gleiche Vorzeichen hat²³. Sinus und Cosinus mit nichtverschwindender Amplitude sind höchstens approximativ darstellbar. Allerdings zeigt sich, dass die Multizykloiden für das statische zweidimensionale Problem der GRINFELDinstabilität offenbar alle Lösungen zumindest approximativ enthalten. Genauere Untersuchungen hierzu sind notwendig.

Analog zur Monozyklode werden wir die mittlere quadratische Amplitude $\bar{\rho}$ benötigen. Sie beträgt²⁴

$$\bar{\rho}_N = \sqrt{\sum_{n=1}^N \left(\frac{\rho_n^2}{2n^2} \left(1 - \frac{n}{2} \sum_{j=1}^N \frac{\rho_j^2}{j} \right) - \sum_{j=1}^{N-n} \frac{\rho_n \rho_j \rho_{n+j}}{j(n+j)} \right)}. \quad (3.117)$$

Der Radius an der Stelle $\xi = 0$ wird wieder aus Gleichung (3.64) abgeleitet, er beträgt

$$r_{\xi=0} = \left| \frac{\left(-1 + \sum_{n=1}^N \rho_n \right)^2}{k \sum_{n=1}^N n \rho_n} \right|. \quad (3.118)$$

²² Etwa zeitgleich wurde dieser Ansatz auch von YU und SUO untersucht. [72]

²³ Für die Untermenge, die eindeutigen periodischen Funktionen $y = f(x)$, entspricht, ist die mittlere Krümmung Null.

²⁴ Gleichung (3.117) wird in Abschnitt A.2 bewiesen.

Wesentlich komplizierter als im Fall der Monozykloiden gestaltet sich aufgrund der Vielfalt der repräsentierbaren Kurven die Diskussion der Grenzen physikalisch sinnvoller Morphologien. Als physikalisch sinnvoll bezeichnen wir einen Satz von Parametern $\{\rho_1 \dots \rho_N\}$ immer dann, wenn die zugeordnete Kurve höchstens endlich viele Singularitäten und keine Selbstüberschneidungen enthält²⁵. Solche Selbstüberschneidungen sind bereits ab $N = 2$ im Morphologiediagramm (Abbildung A.1) enthalten, und mit steigendem N wird die Struktur dieser Grenzfälle sehr schnell unüberschaubar.

Möchte man allgemein untersuchen, was für Morphologien mit einer gegebenen N -Zykloide beschreibbar sind, muss man sich im Parameterraum $\{\rho_1 \dots \rho_N\}$ (dessen Ursprung der flachen Ebene entspricht) diejenige Hyperfläche ansehen, die durch das erstmalige Auftreten entweder einer Cuspsingularität oder einer Selbstüberschneidung gekennzeichnet ist, wobei wir voraussetzen, dass diese Fläche geschlossen ist. Für die Monozykloide entartet diese Fläche zu den Punkten $\rho_1 = \pm 1$ (vgl. Gleichung (3.67)). Bei der Doppelzykloide ist die Situation bereits recht komplex. Hier entspricht sie den Bereichen ❶ und ❷ im Diagramm A.1 auf Seite 88.

Allerdings ist es nicht notwendig, aus dieser Vielfalt, deren Diskussion sich das Kapitel A.3 anhand des Beispiels $N = 2$ widmet, die gesamte Menge physikalisch sinnvoller Kurven zu separieren. Da die Multizykloiden in unserem Kontext lediglich einer Präzisierung der Zykloidenlösung und der Annäherung an die SPENCER-MEIRONSche Lösung für den Fall ohne Gravitation dienen, können wir uns auf solche Multizykloiden beschränken, die höchstens bei $\xi = 2n\pi$ Spitzen ausbilden. Für die Parameter $\rho_2 \dots \rho_N$ fordern wir, dass sie in einer Weise klein sind, dass sie zwar eine Modulation der Oberfläche zwischen den Extremstellen $\xi = 2n\pi$ bewirken, aber keine neuen Singularitäten oder Selbstüberschneidungen erzeugen können.

Wir betrachten jetzt ausschließlich Situationen, in denen die einzigen vorkommenden Cuspsingularitäten entweder bei $\xi = 2n\pi$ oder bei $\xi = (2n + 1)\pi$ liegen. Wir haben entsprechend (3.68) das Gleichungssystem

$$1 - \sum_{n=1}^N \rho_n \cos(n\xi) = 0, \quad \sum_{n=1}^N \rho_n \sin(n\xi) = 0 \quad (3.119)$$

zu lösen. Sehen wir von weiteren Lösungen ab und setzen $\xi = 2n\pi$ bzw. $\xi = (2n + 1)\pi$, so finden wir die zwei wichtigen Lösungen

$$\sum_{n=1}^N \rho_n = 1 \quad \sum_{n=1}^N (-1)^n \rho_n = 1. \quad (3.120)$$

Die Ähnlichkeit dieser Lösungen legt eine Symmetrie nahe: Betrachten wir die Definition

²⁵ Selbstüberschneidungen können entweder nach dem Durchschreiten einer Cuspsingularität auftreten (dann entsteht genau eine Überkreuzung) oder durch Überinanderschieben zweier Schlingen (dann entstehen zwei Kreuzungen).

(3.115) noch einmal näher²⁶. Wir transformieren die Variable ξ um π :

$$\zeta_N(\xi + \pi) = \xi + \pi - \mathfrak{i} \sum_{n=1}^N \frac{\rho_n}{n} e^{-in(\xi+\pi)} = \xi + \pi - \mathfrak{i} \sum_{n=1}^N (-1)^n \frac{\rho_n}{n} e^{-in\xi}. \quad (3.121)$$

Durch Ersetzen der ρ_n durch $(-1)^n \rho_n$ entsteht eine identische Kurve, die gegenüber der ursprünglichen um π in Richtung der Abszisse verschoben ist. Hinsichtlich der Topologie ist der Parameterraum folglich symmetrisch bezüglich der Hyperfläche

$$\{\rho_{2n-1} = 0\}, \quad n = 1 \dots \infty \quad (3.122)$$

und die beiden äquivalenten Multizykloiden $\zeta(\xi)$ und $\zeta(\xi + \pi)$ stellen Analoga zur Freiheit der Wahl der Ansatzfunktion als Sinus- oder Cosinusreihe dar.

3.3.4. Das Multizykloidenmodell

Mit dem Ansatz (3.115) lautet unser allgemeines Variationsproblem (3.61) nun

$$\frac{\delta}{\delta \rho_n} [E_E + E_S + E_G] = 0, \quad n = 1 \dots N. \quad (3.123)$$

Wir erweitern wiederum den reellen Parameter ξ der Multizykloide (3.115) zu einer komplexen Größe $\Upsilon = \xi + \mathfrak{i}\eta$. (3.115) verkörpert dann eine konforme Abbildung, die die Oberfläche $\zeta(\xi)$ auf die Abszisse $\eta = 0$ und das elastische Gebiet in den Halbraum $\eta \leq 0$ überführt:

$$z = \zeta_N(\Upsilon) = \xi - \mathfrak{i} \sum_{n=1}^N \frac{\rho_n}{n} e^{-in\Upsilon} - \mathfrak{i} \frac{1}{2} \sum_{n=1}^N \frac{\rho_n^2}{n}, \quad (3.124)$$

Für das elastische Problem müssen wir wieder die Gleichung (3.86) erfüllen, die hier noch einmal wiederholt wird:

$$\tilde{\Phi}_0(z) + \frac{1}{2} \left[\zeta(\xi) - \overline{\zeta(\xi)} \right] \left(1 + 2 \frac{\overline{\tilde{\Phi}_0'(\xi)}}{\zeta'(\xi)} \right) + \overline{\tilde{\Psi}_0(\xi)} = 0 \quad (3.125)$$

Die modifizierten GOURSATfunktionen $\tilde{\Phi}_0$ and $\tilde{\Psi}_0$ müssen wiederum für $\eta \rightarrow -\infty$ analytisch sein. Daher ist $\overline{\tilde{\Psi}_0'(\xi)}$ in der oberen Halbebene analytisch. Das heißt, dass in $\overline{\tilde{\Psi}_0'(\xi)}$ nur Terme der Form $\exp(\mathfrak{i}n\xi)$ erlaubt sind, jedoch keine Terme der Form $\exp(-\mathfrak{i}n\xi)$. Wir machen einen Ansatz für $\tilde{\Phi}_0$:

$$\tilde{\Phi}_0 = \mathfrak{i} \sum_{n=1}^N \alpha_n e^{-in\xi}. \quad (3.126)$$

²⁶ Der imaginäre Translationsterm entsprechend Gleichung (3.115) ist für die Topologie natürlich irrelevant und wird hier vernachlässigt.

In dieser Form subsummieren wir, dass die α_n reell sind. Diese Annahme werden wir später belegen. Zunächst formen wir jedoch Gleichung (3.125) um. Es gilt mit $\cos(n\xi) = C_n$

$$\frac{1}{2} [\zeta(\xi) - \bar{\zeta}(\xi)] = i\Im(\zeta(\xi)) = -i \sum_{n=1}^N \frac{\rho_n}{n} \left(C_n + \frac{\rho_n}{2} \right), \quad (3.127a)$$

und daher

$$\bar{\Psi}_0(\xi) = i \left(\sum_{n=1}^N \frac{\rho_n}{n} C_n + \frac{\rho_n}{2} \right) \left(1 + 2 \frac{\bar{\Phi}'_0(\xi)}{\bar{\zeta}'(\xi)} \right) - \tilde{\Phi}_0(\xi). \quad (3.127b)$$

Durch die Wahl der α_n in $\tilde{\Phi}_0(\xi)$ müssen wir nun sicherstellen, dass die rechte Seite von Gleichung (3.127b) keine negativen Exponenten enthält. Es gilt

$$\bar{\Phi}'_0(\xi) = \sum_{n=1}^N n\alpha_n e^{in\xi}, \quad \bar{\zeta}'(\xi) = 1 - \sum_{n=1}^N \rho_n e^{in\xi}. \quad (3.128)$$

Für die Berechnung des Ausdrucks (3.127b) benutzen wir die allgemeine Formel für den Quotienten zweier Reihen ([3], S. 28): Wir setzen

$$\begin{aligned} s_1 &= 1 + a_1x + a_2x^2 + a_3x^3 + \dots, & s_2 &= 1 + b_1x + b_2x^2 + b_3x^3 + \dots, \\ s_3 &= 1 + c_1x + c_2x^2 + c_3x^3 + \dots, & s_4 &= 1 + d_1x + d_2x^2 + d_3x^3 + \dots, \\ s_5 &= 1 + \epsilon_1x + \epsilon_2x^2 + \epsilon_3x^3 + \dots, \end{aligned}$$

und vereinbaren $s_1 = 1 + \bar{\Phi}'_0(\xi)$, $s_2 = \bar{\zeta}'(\xi)$, also $a_n = n\alpha_n$, $b_n = -\rho_n$, $x = e^{i\xi}$. Wir berechnen

$$s_3 = \frac{s_1}{s_2} \quad s_4 = s_2^{-1} \quad s_5 = s_3 - s_4 = \frac{\bar{\Phi}'_0(\xi)}{\bar{\zeta}'(\xi)}.$$

Die Koeffizienten c_n und d_n ergeben sich aus der Rekursion

$$c_1 = a_1 - b_1, \quad c_n = a_n - \left[b_n + \sum_{j=1}^{n-1} b_j c_{n-j} \right], \quad d_1 = -b_1, \quad d_n = - \left[b_n + \sum_{j=1}^{n-1} b_j d_{n-j} \right],$$

und wir erhalten schließlich

$$\epsilon_1 = a_1 \quad \epsilon_n = a_n - \sum_{j=1}^{n-1} b_j \epsilon_{n-j}. \quad (3.129)$$

Setzen wir außerdem $\epsilon_0 = 1/2$, so ergibt sich

$$1 + 2 \frac{\bar{\Phi}'_0(\xi)}{\bar{\zeta}'(\xi)} = 1 + 2s_5 = 2 \sum_{n=0}^{\infty} \epsilon_n x^n, \quad (3.130)$$

wobei die ϵ_n durch

$$\epsilon_0 = \frac{1}{2}, \quad \epsilon_1 = \alpha_1, \quad \epsilon_n = n\alpha_n + \sum_{j=1}^{n-1} \rho_j \epsilon_{n-j}, \quad n = 2 \dots N \quad (3.131)$$

definiert sind. Negative Potenzen von $\exp(i n \xi)$ können neben denen in $\tilde{\Phi}_0$ nur durch entsprechende Terme in

$$C_n = \frac{1}{2} (e^{in\xi} + e^{-in\xi}) .$$

erzeugt werden. Wir beschränken uns nun auf diese Terme und fordern das Verschwinden des entsprechenden Teilausdrucks in Gleichung (3.127b). Daraus resultiert ein Gleichungssystem für die Koeffizienten α_n in Abhängigkeit von den ρ_n :

$$\sum_{m=1}^N \frac{\rho_m}{m} e^{-im\xi} \sum_{j=0}^{N-1} \epsilon_j e^{ij\xi} = \sum_{n=1}^N \alpha_n e^{-in\xi} . \quad (3.132)$$

Dabei haben wir den Vorfaktor i weggelassen. An dieser Stelle wird ersichtlich, dass die α_n tatsächlich wie im Ansatz vorausgesetzt reell sind. Sortieren dieser Gleichung nach e-Funktionen führt schließlich auf das System

$$\alpha_n = \sum_{j=n}^N \epsilon_{j-n} \frac{\rho_j}{j}, \quad n = 1 \dots N . \quad (3.133)$$

Man beachte, dass die ϵ_j in (3.133) ebenfalls α_i enthalten, vgl. (3.131). Daher liegt hier kein einfaches rekursives Schema, sondern ein lineares Gleichungssystem für die ϵ_n vor. Die Berechnung der α_n und ihrer Ableitungen wird im Kapitel A.4 im Anhang demonstriert.

Nun widmen wir uns der elastischen Energiedichte. Mit der Tangentialspannung nach (3.94) und der Gleichung (3.100) erhalten wir nach einigen Umformungsschritten

$$w(\xi) = \frac{1}{2} \left[1 + 4 \frac{f_1(\bar{\rho}, \xi)}{f_2(\bar{\rho}, \xi)} \right]^2 . \quad (3.134)$$

Dabei haben wir die Funktionen

$$f_1(\bar{\rho}, \xi) = \sum_{n=1}^N n\alpha_n (C_n - \rho_n) - \sum_{n=1}^{N-1} C_n \sum_{j=1}^{N-n} (\rho_j \alpha_{j+n} (j+n) + \rho_{j+n} \alpha_j j) \quad (3.135a)$$

und

$$f_2(\bar{\rho}, \xi) = x'(\xi)^2 + y'(\xi)^2 = 1 + \sum_{n=1}^N \rho_n (\rho_n - 2C_n) + 2 \sum_{n=1}^{N-1} C_n \sum_{j=1}^{N-n} \rho_j \rho_{j+n} \quad (3.135b)$$

eingeführt.

Um die Variation der elastischen Energie nach den ρ_n berechnen zu können, benötigen wir die Teilausdrücke $\delta \mathbf{x}$ nach (3.97) und $\mathbf{n}ds$ entsprechend (3.98). Einsetzen von Real- und Imaginärteil (3.116) ergibt

$$\delta \mathbf{x} = -\frac{1}{nk} \sum_{n=1}^N [S_n e_x + (C_n + \rho_n) e_y] \delta \rho_n \quad (3.136a)$$

$$\mathbf{n}ds = (-y'(\xi) e_x + x'(\xi) e_y) d\xi, \quad (3.136b)$$

und daraus folgt schließlich

$$\frac{\partial E_E}{\partial \rho_n} = \frac{1}{nk} \langle w(\xi) [S_n y'(\xi) - (C_n + \rho_n) x'(\xi)] \rangle, \quad (3.137)$$

mit $w(\xi)$ nach Gleichung (3.134) und

$$x'(\xi) = 1 - \sum_{n=1}^N \rho_n C_n \quad y'(\xi) = \sum_{n=1}^N \rho_n S_n.$$

Neben der Änderung der elastischen Energie benötigen wir die Ableitungen der Terme (3.105) für die Oberflächenenergie und (3.103) für die potenzielle Energie. Die Rechnung ist langwierig, bereitet aber keine grundsätzlichen Schwierigkeiten, und die Ergebnisse lauten

$$\frac{\partial E_S}{\partial \rho_n} = \left\langle \frac{\rho_n - c_n + \sum_{l=1}^{n-1} c_l \rho_{n-l} + \sum_{l=1}^{N-n} c_l \rho_{n+l}}{\sqrt{f_2(\bar{\rho}, \xi)}} \right\rangle, \quad (3.138a)$$

$$\frac{\partial E_G}{\partial \rho_n} = \frac{l_{12}}{2k^2} \left[\frac{\rho_n}{n} \left(\frac{1}{n} - \sum_{j=1}^N \frac{\rho_j^2}{j} \right) - \sum_{j=1, j \neq n}^N \frac{\rho_j \rho_{|n-j|}}{n |n-j|} \right]. \quad (3.138b)$$

3.3.5. Lösungen des Multizykloidenmodells

Mit den Gleichungen (3.137), (3.138a) und (3.138b) sind wir nun in der Lage, das System

$$\frac{\partial}{\partial \rho_n} (E_E + E_S + E_G) = 0 \quad (3.139)$$

numerisch zu lösen. Dazu wird ein NEWTON-RAPHSON-Schema [56] implementiert. Auf technische Einzelheiten der Methode und die Besonderheiten im vorliegenden Fall gehe ich im Anhang A.4 ab Seite 91 ein.

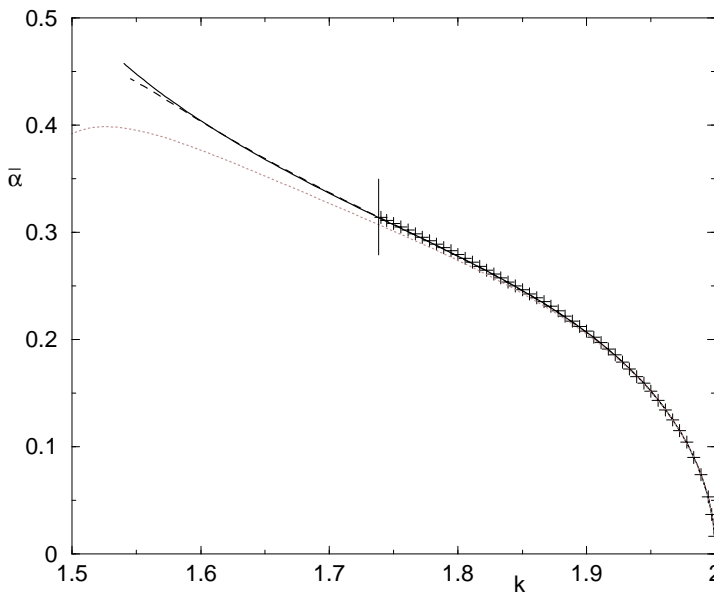


Abbildung 3.15.: Vergleich der mittleren quadratischen Amplituden mit unterschiedlicher Genauigkeit für das gravitationsfreie Modell. Die Kreuze kennzeichnen die digitalisierte Kurve aus [63] und die senkrechte Linie ihren Terminationspunkt. Gepunktete Linie: $N = 2$, gestrichelte Linie: $N = 3$; durchgezogene Linie: $N = 10$.

Der gravitationsfreie Fall

Das Modell ohne Schwerkraftterm, also der Spezialfall $l_{12} = 0$, bietet die Möglichkeit des Vergleichs mit dem Ergebnis aus [63]. Wir berechnen zu diesem Zweck die Lösung mit N -Zykloiden unterschiedlicher Genauigkeit, von $N = 2$ bis $N = 30$.

In [Abbildung 3.15](#) fällt zunächst auf, dass das Multizykloidenmodell eine deutlich längere Lösungsschar findet als in [63] angegeben. In dem Bereich, in dem sich beide Lösungen überlappen, stimmen sie ab $N = 3$ im Rahmen der durch die Digitalisierung gegebenen Genauigkeit überein, für noch größere N ändert sich auch im übrigen Bereich die Form nicht mehr. Aus diesem Grunde wurde in [Abbildung 3.15](#) lediglich der Fall $N = 10$ exemplarisch dargestellt.

Der numerische Algorithmus bricht unmittelbar vor dem Erreichen der Cusp $\sum \rho_n = 1$ ab. Dieser Abbruch erfolgt je nach gewähltem N zwischen $k = 1,53$ und $k = 1,55$, jedoch in jedem Fall unterhalb von $\pi/2$, der Lösung des Monozykloidenmodells. Um den Terminationspunkt exakter eingrenzen zu können, ist die Betrachtung einer anderen Größe, nämlich des Krümmungsradius bei $\xi = 0$, notwendig. Aus dessen Verlauf sollte zu extrapolieren sein, wo sie den Wert Null erreicht, d.h. an welcher Stelle sich die Cuspsingularität befindet.

Darüberhinaus ist zu klären, warum der Algorithmus vor der Cusp abbricht. Das Verfahren ist zwar an der Cuspsingularität nicht definiert, da bei $\zeta'(\xi) = 0$ einer der Terme in Gleichung [\(3.86\)](#) divergiert, jedoch ist es a priori nicht auszuschließen, dass sich die Lösungen über diesen Punkt hinaus fortsetzen lassen.

Vergleichen wir den Krümmungsradius bei $\xi = 0$. [Abbildung 3.16](#) verdeutlicht, dass diese Größe mit zunehmender Genauigkeit noch stärkeren Veränderungen unterworfen ist als die mittlere quadratische Amplitude. Zugleich ist aber auch ersichtlich, dass Multizykloiden ab etwa $N = 20$ die Lösung aus [63] reproduzieren.

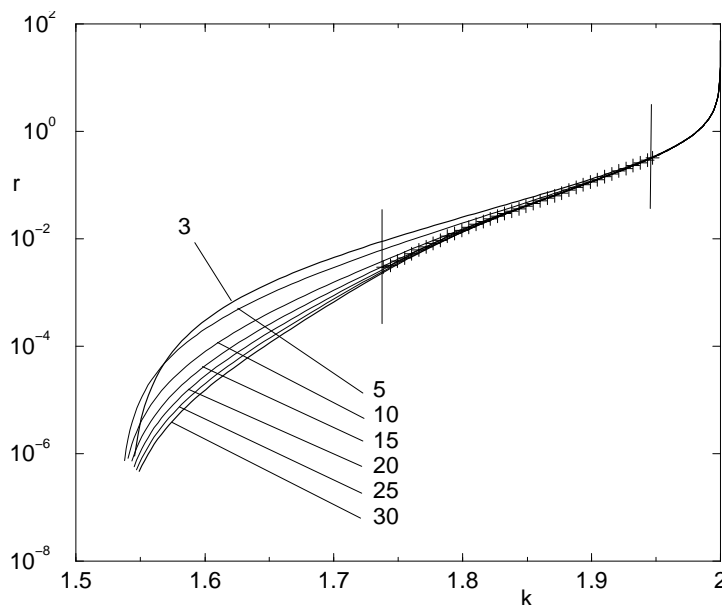


Abbildung 3.16.: Krümmungsradien bei $\xi = 0$ im gravitationsfreien Modell. Die Kreuze kennzeichnen die digitalisierte Lösungskurve aus [63].

Wie ein Vergleich der ersten fünf Amplituden für den Fall $N = 30$ (Abbildung 3.17) zeigt, wachsen zwar ihre Absolutbeträge, jedoch divergieren sie am Abbruch offenbar nicht, sondern ließen sich zu kleineren k stetig fortsetzen. Dies ist ein Hinweis auf mögliche Lösungen „hinter

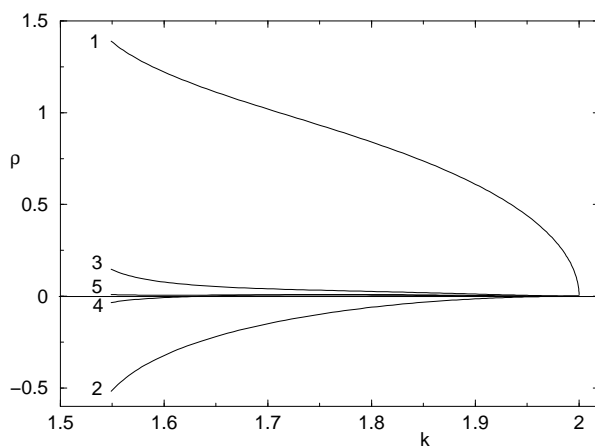


Abbildung 3.17.: Die ersten fünf Amplituden im Modell mit $N = 30$.

der Cusp“.

Einbindung von Schwerkraft in das Modell, $l_{12} \neq 0$

Die Abbildung 3.18 zeigt eine Anzahl stationärer Kurven im Modell mit Schwerkraft, die mit einer Genauigkeit $N = 30$ berechnet worden sind. Es zeigt sich, dass die gemeinsame Cusp aus dem Monozykloidenmodell einer Cusplinie weicht. Diese Linie ist um $k = \pi/2$ lokalisiert. Eine Information, ob die exakte Lösung tatsächlich für alle $l_{12} \pi/2$ beträgt, kann man aus dem Multizykloidenmodell nicht gewinnen.

Ein starker Hinweis auf eine möglicherweise exakte Lösung hinter dem Modell wird durch den speziellen Wert $l_{12} = 0.5$ geliefert. Hier ergibt die Numerik einen Terminationspunkt, der im Rahmen der numerischen Genauigkeit mit der Cusplösung des Monozykloidenmodells übereinstimmt.

Das Einmünden aller Lösungen in einen stabilen Bereich bleibt auch im Multizykloidenmodell erhalten: alle in Abbildung 3.18 nach links geneigten Teiläste sind gegenüber Variationen der ρ_n stabil.

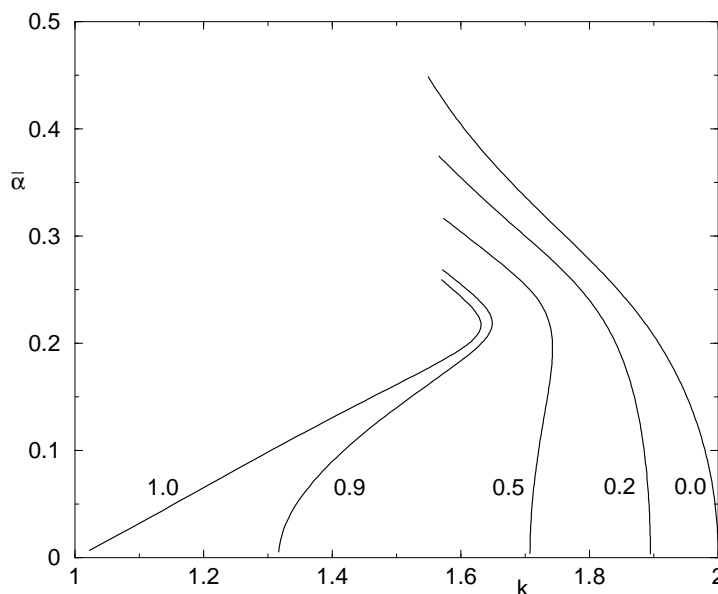


Abbildung 3.18.: Stationäre Lösungen bei verschiedenen L_{12} .

3.4. Die GRINFELDinstabilität einer endlich dicken Schicht

3.4.1. Das Modell

Das jetzt betrachtete Modell hat infolge der endlichen Schichtdicke einen engeren Bezug zu realen Systemen. Dabei ist das auf zwei Dimensionen reduzierte Modell durchaus von praktischer Relevanz, da es den Fall uniaxialer Vorspannung vollständig zu beschreiben gestattet. Damit ermöglicht das Modell eine Reinterpretation der experimentellen Daten von TORII und BALIBAR [70] an ^4He .

Dünne Schichten können restabilisierte Morphologien aufweisen. Der Vorspannungszustand existiere wieder in x -Richtung, und die ebene Grenzfläche liege bei $z = 0$. Die Veränderung der Grenzfläche infolge der GRINFELDinstabilität kann man wieder als Cosinusreihe ausdrücken.

Methodisch kommen wir auf die Expansionsmethode aus Kapitel 3.2 zurück. Dabei ist jetzt aufgrund der endlich dicken Schicht die vollständige AIRYfunktion (3.26) einzusetzen, jedoch genügt aufgrund der Symmetrie des Problems weiterhin die Beschränkung auf den geraden

Anteil des Ansatzes. Mit den Voraussetzungen dieses Kapitels wird es möglich sein, durch fortgesetzte Anwendung auch Aussagen zu Multischichtsystemen zu treffen²⁷ [35].

Zunächst werden anhand dieser Methode die Ergebnisse der linearen Analyse des Falles des starren Substrates in Abwesenheit des Gravitationsterms aus einer weiteren Arbeit von SPENCER et. al [65] reproduziert. Dieses Modell wird anschließend um eine schwach nichtlineare Analyse erweitert.

Schließlich wird das Modell des elastischen Substrates und sein Restabilisierungsverhalten in Abhängigkeit von Schichtdicke und Schwerkraft behandelt.

Transportprozesse an der Fest-Fest-Grenzfläche werden vernachlässigt. Im allgemeineren Fall des nicht-starren Substrates, in dem diese Grenzfläche ebenfalls Deformationen unterliegt, sehen wir auch von der damit assoziierten Änderung der Grenzflächenenergie ab. Desgleichen berücksichtigen wir zwar die Änderung der potenziellen Energie infolge der Modulation der oberen Grenzfläche, aber nicht die kleine zusätzliche Änderung, die durch den Übergang der unteren Grenzfläche vom Referenzzustand zum tatsächlichen Zustand hervorgerufen wird.

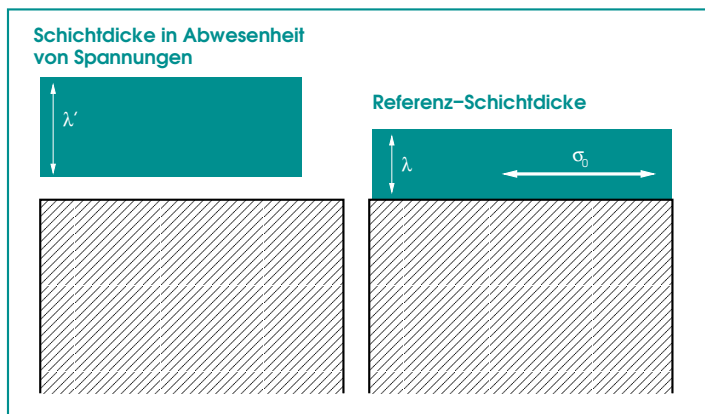


Abbildung 3.19.: Elastisches Material auf einem starren Substrat. Gegenüber dem halbunendlichen Modell tritt die dimensionslose Schichtdicke $\lambda = kL$ als neue Größe auf.

Das Modell wird wieder in dimensionslosen Koordinaten aufgestellt. Räumliche Größen werden mit der Wellenzahl k der Grundmode entdimensionalisiert. Gegenüber den bisherigen Modellen erscheint mit der Schichtdicke L ein neuer längenbehafteter Parameter. Wir vereinbaren

$$\lambda = Lk \quad (3.140a)$$

für die reduzierte (dimensionslose) Schichtdicke und definieren als Abkürzung zusätzlich

$$\Lambda = e^\lambda. \quad (3.140b)$$

Abbildung 3.19 zeigt die genaue Definition von λ : Die Schicht mit der ursprünglichen Dicke λ' wird im vorgespannten Zustand mit dem Substrat verbunden und erhält auf diese Weise

²⁷ Hatten wir im halbunendlichen Modell je Ordnung zwei Konstanten zu bestimmen, so sind es hier aufgrund der zusätzlichen Randbedingung vier. Lässt man weiter zu, dass auch das (dann wieder halbunendliche) darunterliegende Substrat elastischen Deformationen unterworfen ist, dann kommen zwei weitere Konstanten hinzu, und für jede weitere Schicht endlicher Dicke nochmals vier.

unter Annahme der ebenen Deformation (3.3) den Zustand

$$u_{xx,0} = \frac{1 - \nu^2}{E_Y} \sigma_0, \quad u_{xz,0} = 0, \quad u_{zz,0} = -\frac{\nu(1 + \nu)}{E_Y} \sigma_0 = -\frac{\nu}{1 - \nu} u_{xx,0}, \quad (3.141)$$

wobei σ_0 wieder die Spannung in x -Richtung bezeichnet. λ ist die resultierende Schichtdicke nach Anbringen dieser Vorspannung.

Bereits zu Beginn wurde ein die Länge l_1 eingeführt, die der GRIFFITHlänge [26] entspricht. Wir wiederholen noch einmal die Definition (3.13) von Seite 17:

$$l_1 = \frac{\gamma E_Y}{\sigma_0^2 (1 - \nu^2)} \quad (3.142)$$

Mit Hilfe von l_1 werden analog zum halburendlichen Modell die Vorfaktoren entdimensionalisiert. Da vorläufig nur das Modell mit starrem Substrat behandelt wird, sind dessen elastische Parameter ohne Belang.

3.4.2. Starres Substrat

Der Ansatz für das elastische Spannungsfeld ist wiederum ein AIRYPotenzial (3.26), welches nun aufgrund der zwei Grenzflächen die Form

$$\chi = \sum_{n=1}^{\infty} [(a_n + b_n z) e^{nz} + (c_n + d_n z) e^{-nz}] \cos(nx) \quad (3.143)$$

hat. Eine besser angepaßte Form des AIRYfunktionsansatzes erhält man, wenn man einige gemeinsame Faktoren berücksichtigt²⁸:

$$\chi = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\prod_{j=1}^n N_j} \left[\left(\frac{a_n}{n^2} + \frac{b_n}{n} z \right) e^{nz} + \left(\frac{c_n}{n^2} + \frac{d_n}{n} z \right) e^{-nz} \right] \cos(nx). \quad (3.144)$$

Wir beschränken uns für die lineare Analyse zunächst auf den untersten Summanden dieser Entwicklung und ziehen den Faktor α_1 aus den AIRYkoeffizienten heraus:

$$\chi = \frac{\alpha_1}{N_1} [(a_{1,0} + b_{1,0} z) e^z + (c_{1,0} + d_{1,0} z) e^{-z}] \cos(x). \quad (3.145)$$

²⁸ Die gemeinsamen Nenner N_j haben, soweit sie im Rahmen dieser Analyse berechnet worden sind, die Form

$$\begin{aligned} N_1 &= \tau (1 + \Lambda^4) + (1 + \tau^2 + 4 \lambda^2) \Lambda^2 \\ N_2 &= \tau (1 + \Lambda^8) + (1 + \tau^2 + 16 \lambda^2) \Lambda^4, \end{aligned}$$

mit der Definition aus Gleichung (3.146). Ohne Beweis wird angenommen, dass sie sich allgemein als

$$N_j = \tau (1 + \Lambda^{2j}) + (1 + \tau^2 + 4^j \lambda^2) \Lambda^{2j}$$

schreiben lassen.

Es gelte außerdem die Vereinbarung

$$\tau = 3 - 4\nu . \quad (3.146)$$

Die Grenzflächen sind im linearen, dimensionslosen Modell durch

$$\zeta_1 = \alpha_1 \cos(x) \quad \zeta_2 = -\lambda , \quad (3.147)$$

gegeben, und die Komponenten des Spannungstensors erhält man wie üblich durch zweimaliges Ableiten der AIRYfunktion (vgl. Gleichung (3.23) auf Seite 19, wobei die dimensionslose Vorspannung addiert wurde):

$$\begin{aligned} \sigma_{xx} &= 1 + \frac{\alpha_1}{N_1} [(a_{1,0} + b_{1,0}(z+2))e^z + (c_{1,0} + d_{1,0}(z-2))e^{-z}] \cos(x) \\ \sigma_{xz} &= \frac{\alpha_1}{N_1} [(a_{1,0} + b_{1,0}(z+1))e^z - (c_{1,0} + d_{1,0}(z-1))e^{-z}] \sin(x) \\ \sigma_{zz} &= -\frac{\alpha_1}{N_1} [(a_{1,0} + b_{1,0}z)e^z + (c_{1,0} + d_{1,0}z)e^{-z}] \cos(x) \end{aligned}$$

An der oberen Grenzfläche gelten die gleichen Randbedingungen wie im halbbunendlichen Modell: die Kraft in Normalenrichtung muss verschwinden, d.h.

$$\sigma \cdot \mathbf{n} = \mathbf{0} . \quad (3.148)$$

Diese Bedingung wird durch ein weiteres Paar von Gleichungen ergänzt, die an der unteren Grenzfläche gelten. Wir fordern in Einklang mit [65]

$$\mathbf{u}_A = \mathbf{u}_B . \quad (3.149)$$

Diese Bedingungen drückt man durch den Spannungstensor wie folgt aus [41]

$$1 = \left[\sigma_{xx} - \frac{\nu}{1-\nu} \sigma_{zz} \right]_{z=-\lambda} \quad 0 = \left[\partial_z \left(\sigma_{xx} + \frac{2-\nu}{1-\nu} \sigma_{zz} \right) \right]_{z=-\lambda} \quad (3.150)$$

Setzt man ζ_1 in (3.148) und ζ_2 in (3.150) ein und entwickelt bis zur Ordnung α_1 , so erhält man unter Vernachlässigung von Vorfaktoren die Gleichungen

$$\begin{aligned} 1 + a_{1,0} + b_{1,0} - c_{1,0} + d_{1,0} &= 0 \\ a_{1,0} + c_{1,0} &= 0 \\ (2b_{1,0}(1-\nu) + a_{1,0} - b_{1,0}\lambda) \Lambda^{-1} &= (2d_{1,0}(1-\nu) - c_{1,0} + d_{1,0}\lambda) \Lambda \\ (b_{1,0}(1-2\nu) - a_{1,0} + b_{1,0}\lambda) \Lambda^{-1} &= -(d_{1,0}(1-2\nu) + c_{1,0} - d_{1,0}\lambda) \Lambda . \end{aligned} \quad (3.151)$$

Sie liefern als Ergebnis

$$\begin{aligned} a_1 &= -\frac{1}{2} \frac{\Lambda^2 (-1 + 4\lambda^2 + \tau^2)}{N_1} & b_1 &= -\frac{(\Lambda^2 \tau + 1 + 2\lambda) \Lambda^2}{N_1} \\ c_1 &= \frac{1}{2} \frac{\Lambda^2 (-1 + 4\lambda^2 + \tau^2)}{N_1} & d_1 &= \frac{2\Lambda^2 \lambda - \Lambda^2 - \tau}{N_1} . \end{aligned} \quad (3.152)$$

Mit diesen Konstanten ist der elastische Zustand in der niedrigsten Ordnung vollständig bestimmt, und man kann über Gleichung (3.16) die Änderung der freien elastischen Energie berechnen. Sie hat die allgemeine Form

$$E_E = \frac{k}{2} \alpha_1^2 \frac{\tau(1 - \Lambda^4) - 4\Lambda^2 \lambda}{\tau(1 + \Lambda^4) + \Lambda^2(1 + 4\lambda^2 + \tau^2)}. \quad (3.153)$$

Die übrigen Energierterme unterscheiden sich nicht vom analogen Ausdruck im halburendlichen Modell, und wir erhalten

$$E = \frac{\alpha_1^2}{4} \left[k^2 + 2k \frac{\tau(1 - \Lambda^4) - 4\Lambda^2 \lambda}{\tau(1 + \Lambda^4) + \Lambda^2(1 + 4\lambda^2 + \tau^2)} + l_{12} \right]. \quad (3.154)$$

Man sieht unmittelbar, dass für große Schichtdicken, bei endlichen positiven k , im rechten Term von Gleichung (3.154) die Λ^4 -Terme dominieren, was abgesehen vom Vorfaktor auf $k^2 - 2k + l_{12}$ und damit die aus dem Kapitel 3.2.2 bekannten linearen Ergebnisse führt.

Diese Größen werden durch (3.154) für endliche λ einer Korrektur unterzogen. In [65] wurde der Fall $l_{12} = 0$ untersucht. Dafür ist bekannt, dass die obere marginale Wellenzahl bei einer endlichen Schichtdicke Null wird. Abbildung 3.20 zeigt dieses Verhalten.

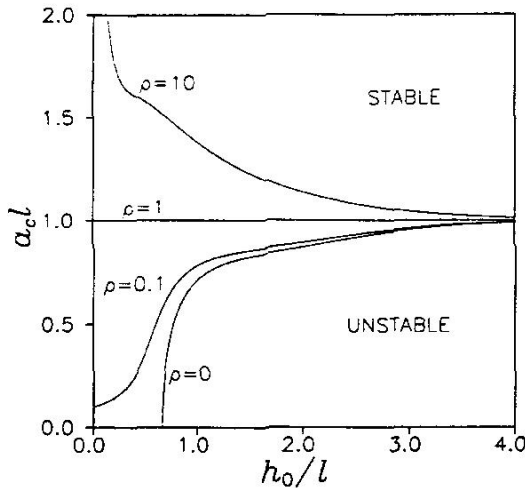


Abbildung 3.20.: Marginale Wellenzahl in Abhängigkeit von der Schichtdicke, nach SPENCER et. al. Reproduktion aus [65].

Der Kurvenverlauf muss so interpretiert werden, dass die Oberfläche bei einem starren Substrat unterhalb einer gewissen Schichtdicke stabil bleibt. Die Berechnung dieses Verhaltens ist nicht unmittelbar mit (3.154) zu bewerkstelligen. Das liegt an der Definition von λ (3.140a), das wie alle räumlichen Größen in Einheiten der Wellenzahl k gemessen wird. Entsprechend (3.140a) geht mit k auch λ gegen Null, während L endlich bleibt.

Um die Schichtdicke zu berechnen, bei der k Null wird, ersetzt man folglich in (3.154) λ und Λ durch ihre Definitionen entsprechend (3.146) und (3.140a), leitet nach k ab, setzt dann $k = 0$ und erhält so

$$\left. \frac{\partial E}{\partial k} \right|_{k=0} = \frac{1}{2} - \frac{4L}{1 + \tau} \quad (3.155a)$$

und daraus

$$L_{\min} = \frac{1 + \tau}{8} = \frac{1 - \nu}{2} . \quad (3.155b)$$

Für $\nu = 1/3$, entsprechend [65], ergibt sich eine kritische Filmdicke von $L_{\min} = 1/3$. Dies stimmt mit der Abbildung 3.20 überein, in der dieser Punkt aufgrund der um einen Faktor $1/2$ abweichenden Skalierungslänge bei $(2/3, 0)$ liegt.

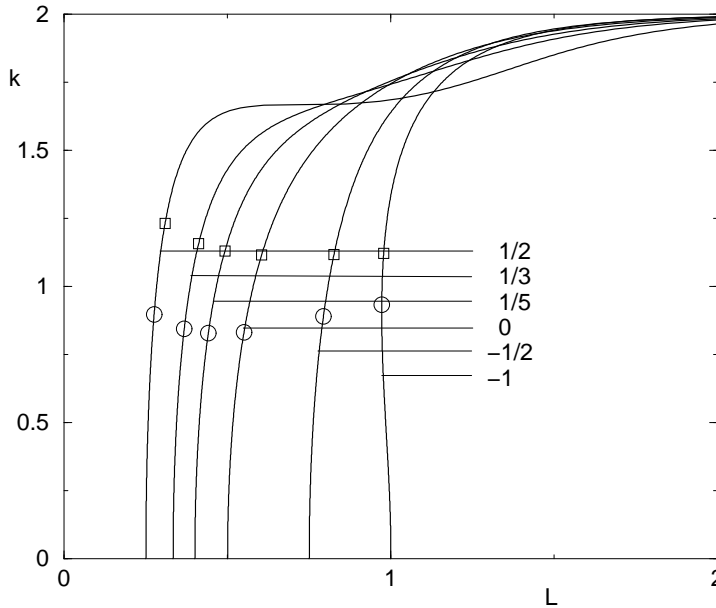


Abbildung 3.21.: (Obere) marginale Wellenzahl bei endlicher Schichtdicke im Modell ohne Gravitation für verschiedene POISSONZahlen. $\nu = 1/3$ entspricht [65]. Kreise markieren einen Wechsel des Vorzeichens des Koeffizienten von α_1^4 in der Energie; Quadrate einen Vorzeichenwechsel bei $\alpha_{2,0}$.

Lässt man ν frei und berechnet die Nullstellen der reduzierten Gesamtenergie (die marginalen Wellenzahlen) (Abbildung 3.21) so offenbart das Modell eine überraschende Eigenschaft: Bei gewissen exotischen POISSONZahlen in der Nähe von -1 findet trotz Abwesenheit des Schwerkraftterms eine Stabilisierung auf großen Wellenlängen statt. Allerdings dürfte dieser Fakt kaum Auswirkungen auf reale Systeme mit sich bringen. Im Übrigen stimmt die Kurve für $\nu = 1/3$ bis auf den bekannten Faktor $1/2$ mit der $\rho=0$ -Kurve aus Abbildung 3.20 überein.

Nun erfolgt eine schwach-nichtlineare Analyse des Problems mit Hilfe der Expansionsmethode, bis zur Ordnung α_1^4 in der Energie. Natürlich sind hier in jedem Schritt des Verfahrens fünf Koeffizienten statt drei zu bestimmen (vier AIRYkoeffizienten sowie ggf. der Entwicklungskoeffizient der Amplitude). Wir ergänzen den Ansatz für die Oberfläche (3.147) um die zweite Amplitude α_2 :

$$\zeta_1 = \alpha_1 \cos(kx) + \alpha_2 \cos(2kx) \quad (3.156)$$

Ganz wie im halbumendlichen Modell sind die AIRYkoeffizienten mit ungeraden zweiten Indizes Null. Die nächsthöheren Koeffizienten $\alpha_{2,0}$, $a_{2,0}$, $b_{2,0}$, $c_{2,0}$ und $d_{2,0}$ sowie $a_{1,2}$, $b_{1,2}$, $c_{1,2}$ und $d_{1,2}$ haben bereits eine beträchtlich komplizierte Form und werden hier nicht dargestellt. Stattdessen werden typische Größen in Form von Diagrammen angegeben.

Eine wichtige Größe ist der Vorfaktor zu α_1^4 in der Energie, denn er entscheidet über den Charakter der Instabilität. Es stellt sich heraus, dass dieser Wert keineswegs für alle Schicht-

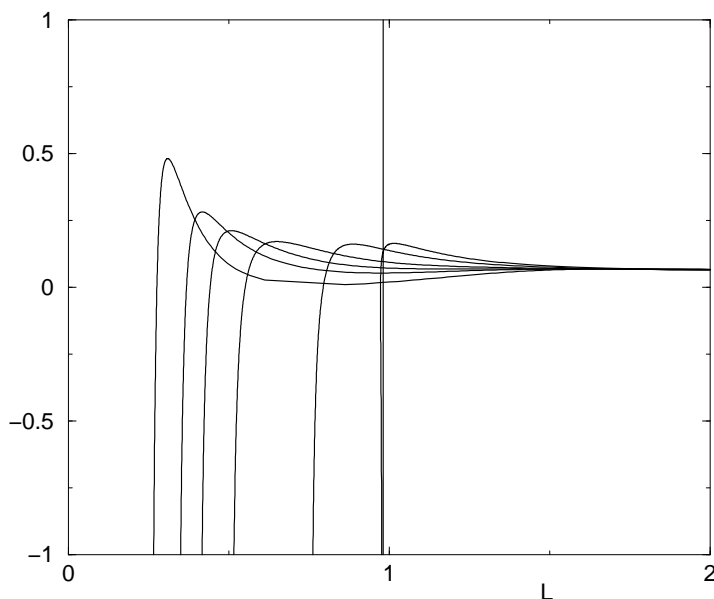


Abbildung 3.22.: Der Vorfaktor zu α_1^4 in der Gesamtenergie nach Minimierung der Amplitude α_2 für endliche Schichtdicken L . Die Kurven stehen von links nach rechts für dieselben POISSONZahlen wie in Abbildung 3.21. Für $\nu = 1/3$ liegt der Nulldurchgang z.B. bei $L = 0.367$.

dicken positiv ist, wie Abbildung 3.22 zeigt. Stattdessen existiert ein Nulldurchgang (ein trikritischer Punkt). Er liegt z.B. für $\nu = 1/3$ bei

$$L_{\text{tric}} = 0.367 \quad k_{\text{tric}} = 0.844. \quad (3.157)$$

Die Unregelmäßigkeit in der Kurve zu $\nu = -1$ ist einer Polstelle im Koeffizienten bei einer bestimmten Schichtdicke zu verdanken. Die Existenz einer Polstelle ist ein Hinweis darauf, dass die Methode im betrachteten Parameterbereich unzulänglich sein könnte.

Interessant gestaltet sich auch die Veränderung der sich entwickelnden Morphologie mit sinkender Schichtdicke. Im halbbunendlichen Modell hatten wir nach der Minimierung den Ausdruck

$$\alpha_2 = -\frac{1}{2} \frac{1}{k-1} \alpha_1^2$$

gefunden. Für die marginale Wellenzahl $k = 2$ ergibt sich daraus ein Vorfaktor $\alpha_{2,0} = -1/2$. Auch dieser ändert sich für endliche Schichten, wie man den Abbildungen 3.21 und 3.23 entnehmen kann.

Solange der Beitrag der zweiten Amplitude negativ ist, entwickelt sich eine oben abgeplattete Morphologie, wie sie bereits von Nozières [53] vorhergesagt wurde. Unterhalb einer gewissen Schichtdicke kehrt sich dieses Verhalten um, und das Modell sagt eine nach oben spitze und unten abgeplattete Morphologie, wie sie z.B. von der ROSENSWEIGinstabilität her bekannt ist, voraus.

3.4.3. Starres Substrat mit Berücksichtigung von Gravitation

Das Modell im Kapitel 3.4.2 hatte nur die elastische Energie und die Oberflächenenergie berücksichtigt. Innerhalb dieses Modells existiert ein linear instabiler k -Bereich, der für eine unendlich ausgedehnte Schicht in reduzierten Einheiten zwischen 0 und 2 liegt. Dieser

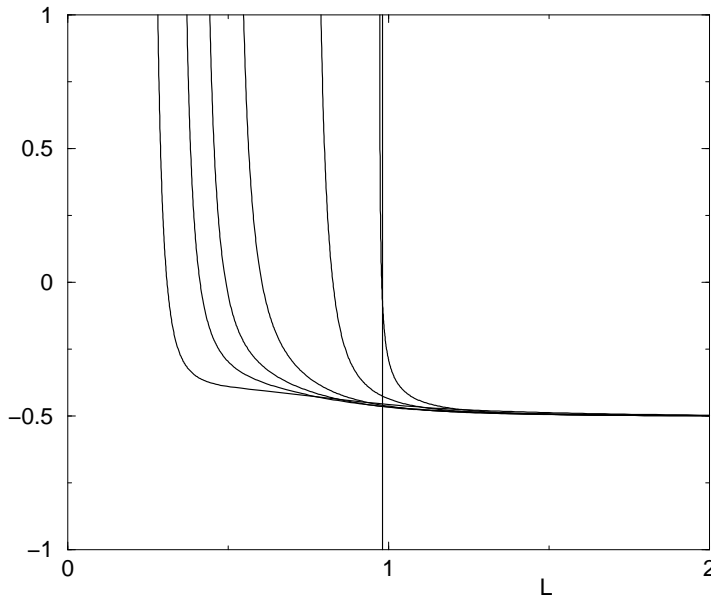


Abbildung 3.23.: $\alpha_{2,0}$, der erste Entwicklungskoeffizient von α_2 , in Abhängigkeit von der Schichtdicke. Für kleine Dicken weicht die bekannte Cuspmorphologie einer Peakmorphologie. Der Parameter nähert sich für große Schichtdicken $-1/2$. Die Kurven stehen von links nach rechts für dieselben POISSONzahlen wie in Abbildung 3.21.

Bereich wird für endliche Schichtdicken schmaler und kollabiert für ν nicht zu nahe bei -1 bei $k = 0$ und einer kritischen Dicke $L_{\min} = 1/2(1 - \nu)$.

Aus dem halbumendlichen Modell mit Gravitation ist bekannt, dass der zusätzliche Parameter l_{12} dieses Verhalten dahingehend verändert, dass der linear instabile Bereich von beiden Seiten her verkleinert wird, bis bei einem kritischen Parameter $l_{12,\text{crit}} = 1$ nur noch eine einzige Wellenzahl $k_{\text{crit}} = 1$ instabil ist. Aus der Tatsache heraus, dass k_{crit} zwischen den beiden marginalen Wellenzahlen des Modells ohne Gravitation liegt, ist zu erwarten, dass auch im Modell mit Gravitation Schichtdicken unterhalb L_{\min} stabil sind. Das soll im folgenden überprüft werden. Wir lassen also im weiteren $l_{12} \neq 0$ zu.

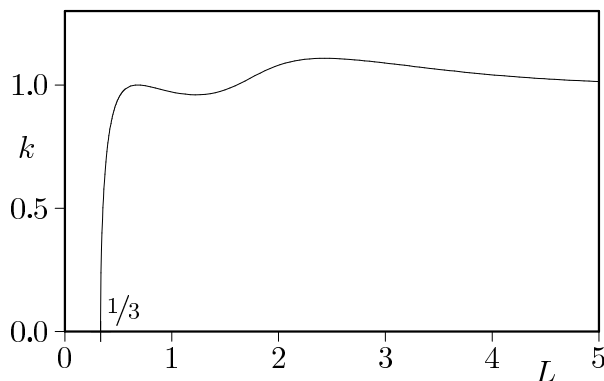


Abbildung 3.24.: Kritische Wellenzahl im Modell mit Gravitation für endliche Schichtdicken am Beispiel $\nu = 1/3$.

Abbildung 3.24 verdeutlicht am Beispiel $\nu = 1/3$, dass in der Tat die kritische Wellenzahl bei $L = 1/3$ auf Null zurückgeht. Allerdings zeigt sie im Übergangsbereich zwischen sehr großen und sehr kleinen Schichtdicken eine Art oszillierendes Verhalten, das schwer zu interpretieren ist. Plötzliche Änderungen in der Krümmung dieser Kurve sind allerdings auch schon im Modell ohne Gravitation (Abbildung 3.21) zu beobachten. Ähnlich verhält sich auch

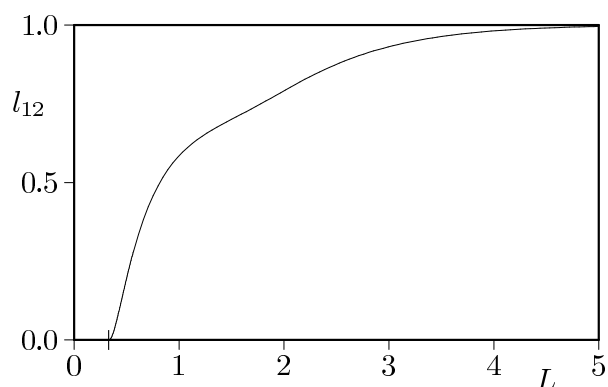


Abbildung 3.25.: Kritischer Parameter l_{12} im Modell mit Gravitation für endliche Schichtdicke am Beispiel $\nu = 1/3$

der Parameter $l_{12, \text{crit}}$. Er wird nie größer als im unendlichen Modell, sondern fällt für kleine Schichtdicken gegen Null ab. Folglich ist bei endlichen Systemen eine größere Vorspannung erforderlich, um die Instabilität auszulösen.

Interessant gestaltet sich der Charakter der Instabilität unter Einwirkung von Gravitation. Berechnet man nämlich unter Vorgabe der Schichtdicke und der zugehörigen kritischen Parameter k_{krit} und $l_{12, \text{krit}}$ den Vorfaktor zu α_1^4 im Energieausdruck, nachdem dieser bezüglich α_2 minimiert worden ist, so ergibt sich der Verlauf in Bild 3.26. Das Vorzeichen ändert sich zwei-

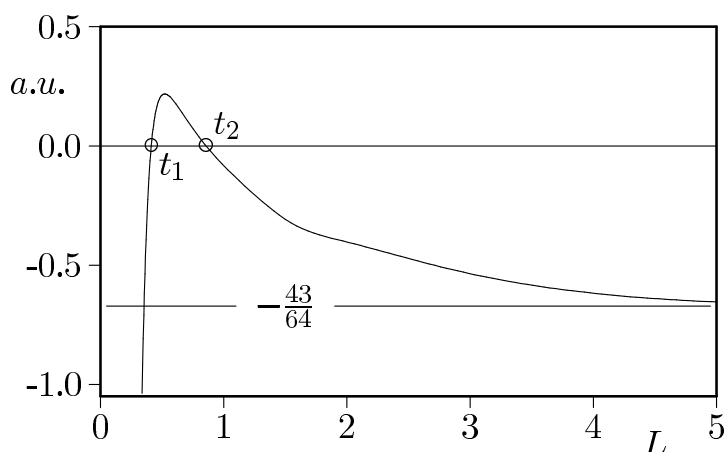


Abbildung 3.26.: Vorfaktor zu α_1^4 im Modell mit Gravitation. t_1 und t_2 bezeichnen die trikritischen Punkte, vgl. (3.158) am Beispiel $\nu = 1/3$

mal, und zwar ist das System für sehr kleine, aber noch instabile Schichtdicken subkritisch. Dann schließt sich ein gewisser superkritischer Bereich an, der dann in das bekannte subkritische Verhalten bei sehr großen L mündet. Der asymptotische Grenzwert dieses Koeffizienten liegt bei $-43/64$. Die trikritischen Punkte, wiederum für $\nu = 1/3$ berechnet, liegen bei

$$\begin{aligned} t_1 &:= \{L = 0.413, k = 0.796, l_{12} = 0.071\} \\ t_2 &:= \{L = 0.857, k = 0.987, l_{12} = 0.522\} . \end{aligned} \quad (3.158)$$

Die minimierte zweite Amplitude (Bild 3.27) zeigt erwartungsgemäß ein ähnliches Verhalten wie im Modell ohne Gravitation. Allerdings liegt die Schichtdicke, bei der die Morphologieänderung auftritt, mit $L = 0.503$ gegenüber $L = 0.412$ etwas höher.

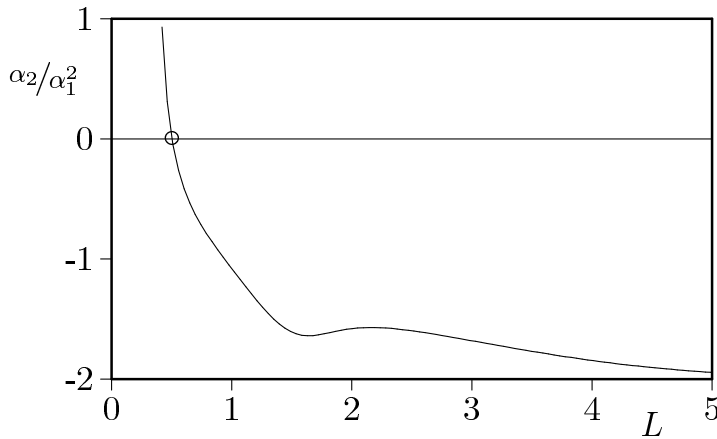


Abbildung 3.27.: Die minimierte Amplitude α_2 (über α_1^2) in Abhängigkeit von der Schichtdicke im Modell mit Gravitation. Der Nulldurchgang liegt bei $L = 0.503$

3.4.4. Weiches Substrat, $l_{12} = 0$

Nun lassen wir ein Substrat zu, das selbst elastisch ist. Die Deformation der zweiten Grenzfläche lassen wir nur in x -Richtung zu, d.h. die zweite Grenzfläche in Gleichung (3.147) bleibt in ihrem Verlauf erhalten. Da jedes Material durch zwei elastische Konstanten definiert ist, würde eine vollständige Betrachtung drei Materialparameter enthalten müssen und außerdem einen mit dem Schwerkraftterm assoziierten Parameter. Allerdings beträgt die POISSONSche Querkontraktionszahl für fast alle Materialien etwa $1/3$, so dass im Folgenden ohne wesentliche Einschränkungen $\nu_1 = \nu_2 := 1/3$ gesetzt wird. Der einzig maßgebliche Parameter ist dann das Verhältnis der beiden YOUNGmoduli

$$\rho := \frac{E_1}{E_2} = \frac{\mu_1}{\mu_2}. \quad (3.159)$$

Es steht zu erwarten, dass die lineare Analyse die Ergebnisse aus SPENCER et. al. [65] (Bild 3.20, S. 59) reproduziert. Diese Analyse wird anschließend durch eine schwach nichtlineare Betrachtung erweitert.

Der Ansatz in Form eines AIRYPotenzials wird nun wiederum gegenüber dem Ansatz (3.143) etwas komplexer, da wir das Bulkmaterial berücksichtigen müssen.

$$\chi_1 = \sum_{n=1}^{\infty} (a_n + b_n z) \cos(nkx) e^{nkz} + \sum_{n=1}^{\infty} (c_n + d_n z) \cos(nkx) e^{-nkz} \quad (3.160a)$$

$$\chi_2 = \sum_{n=1}^{\infty} (e_n + f_n z) \cos(nkx) e^{nkz} \quad (3.160b)$$

Bild 3.28 zeigt tatsächlich die Reproduktion der Ergebnisse aus [65]. Für die Berechnung des Verlaufes möglicher trikritischer Punkte betrachten wir zunächst das Verhalten für $L \rightarrow 0$. Folgende Nomenklatur wird eingeführt:

$$E = C_2 \alpha_1^2 + C_4 \alpha_1^4 \quad (3.161)$$

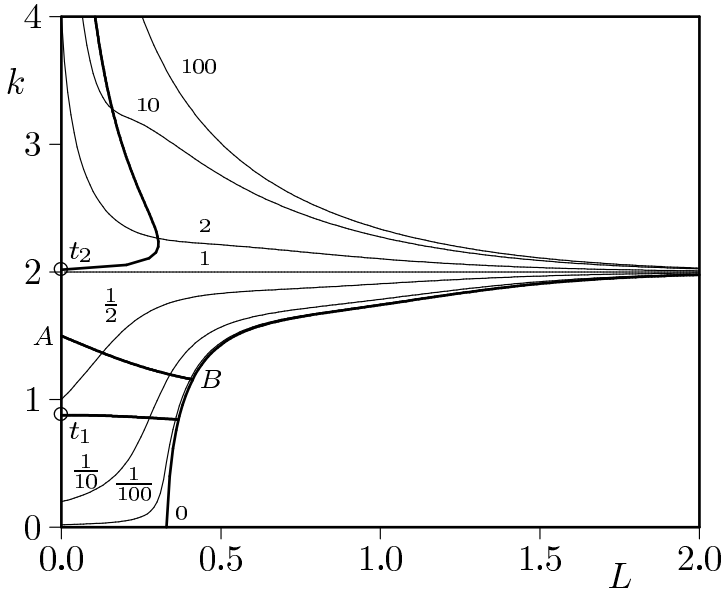


Abbildung 3.28.: Marginale Wellenzahlen für verschiedene Elastizitätsverhältnisse ρ (kleine Zahlen) im Modell ohne Berücksichtigung der Gravitation. Vergleiche auch Bild 3.20. Die fettgedruckten Linien durch t_1 und t_2 bezeichnen einen Wechsel des Stabilitätsverhaltens. t_2 ist *nicht* der Punkt $(0, 2)$! Unterhalb der Kurve \overline{AB} tritt eine Peakmorphologie an die Stelle der Cusps.

Im Falle $l_{12} = 0$ entspricht dann C_2 der reduzierten Energie aus Gleichung (3.154). C_4 wird wegen seines Umfanges hier nicht dargestellt. Ein trikritischer Punkt ist dadurch ausgezeichnet, dass sowohl C_2 als auch C_4 Null sind. Nun zeigt sich, dass

$$\begin{aligned} \lim_{L=0} C_2 &= \frac{1}{2} \left(\frac{k}{2} - \rho \right) \\ \lim_{L=0} C_4 &= \frac{k^3}{256(\rho - k)} [144\rho^4 + 256k(\rho^3 - \rho) \\ &\quad - 8\rho^3 - (112k + 111)\rho^2 + (54 + 4k)\rho + 12k^2 + 81] . \end{aligned} \quad (3.162)$$

Die nichtnegativen Lösungen dieses Systems sind

$$\rho_{L=0} = \{0.439, 1.009\} ,$$

und aus der ersten der Gleichungen (3.162) folgt entsprechend $k_{L=0} = 2\rho_{L=0}$. Sie sind in Bild 3.28 mit Kreisen gekennzeichnet. Für große L läßt sich das Verhalten des Energieausdruckes ebenfalls elegant diskutieren. Aus dem halbumendlichen Modell ist bekannt, dass die marginale Wellenzahl dann 2 beträgt. Die Wechselwirkung mit dem Substrat sollte in diesem Fall keine Rolle spielen. Deshalb müssen auch die Konstanten C_2 und C_4 unabhängig von ρ sein. In der Tat ergibt sich

$$\begin{aligned} \lim_{L=\infty} C_2 &= \frac{k}{2} \left(\frac{k}{2} - 1 \right) \\ \lim_{L=\infty} C_4 &= -\frac{1}{64} \frac{(3k^2 - 27k + 40)k^3}{k - 1} \end{aligned} \quad (3.163)$$

Aus C_2 folgt die erwartete marginale Wellenzahl, und auch C_4 ist unabhängig von ρ . Daher bleibt die Instabilität für jegliche Materialkombination im Limes $L \rightarrow \infty$ superkritisch²⁹. Als etwas aufwändiger erweist sich die Diskussion für beliebige L . Das Gleichungssystem $\{C_2 = 0, C_4 = 0\}$ kann für die Numerik vereinfacht werden, indem man L wieder durch λ/k ersetzt und den Parameter ρ variiert, beginnend bei den bekannten Werten für $L = 0$ ³⁰.

Die Lösungen sind die fettgedruckten Linien in Bild 3.28. Was folgt nun aus dem berechneten Verhalten? In der Tat ist das System für endliche Schichtdicken absolut instabil, wie bereits Spencer et. al. festgestellt haben. Ist das obere Material weicher als das untere, so sind die instabilen Wellenlängen extrem lang; für ein härteres Material in der Schicht dagegen kurz. Solange sich die elastischen Eigenschaften der Materialien ähneln ($\frac{E_1}{E_2} \in [0.439, 1.009]$), ist die Instabilität für alle Schichtdicken superkritisch. Für weichere bzw. härtere Schichtmaterialien existiert bei kleinen Schichtdicken ein subkritisches Intervall.

Schließlich erweist sich die Berechnung des Vorzeichens der minimierten Amplitude α_2 bei der marginalen Wellenzahl als interessant. Solange α_2 negativ ist, bilden sich die aus der halbunendlichen Theorie bekannten Cusplösungen aus. Dies ist im Bild 3.28 jedoch nur oberhalb der Kurve \overline{AB} gegeben. Darunter besteht die entstehende Morphologie aus nach oben zeigenden Spitzen.

3.4.5. Weiches Substrat mit Berücksichtigung von Gravitation

Nun erfolgt die Behandlung des allgemeinsten unter den vorgestellten Modellen für ein dünnes Substrat in zwei Dimensionen. Der reduzierte Ausdruck für die Gesamtenergie in zweiter Ordnung ist jetzt

$$\begin{aligned} \overline{E}_{\text{gesamt}} = & -\frac{k}{2} \frac{4\rho\Lambda^4 + 15(1+\rho)^2\Lambda^4 + 12(3+2\rho-5\rho^2)\lambda\Lambda^2 - 15(1-\rho)^2}{\left[4\rho\Lambda^4 + 15(1+\rho)^2\Lambda^4 + 15(1-\rho)^2 \right.} \\ & \left. + (12(3+2\rho-5\rho^2)\lambda^2 + 2(17-2\rho-15\rho^2))\Lambda^2 \right]} \\ & + \frac{k^2}{4} + \frac{l_{12}}{4}. \end{aligned} \quad (3.164)$$

Wir untersuchen zunächst das Verhalten im Limes $L \rightarrow 0$. Dann vereinfacht sich die Energie zu

$$E_{L=0} = \frac{1}{4} (k^2 + l_{12} - 2k\rho) . \quad (3.165)$$

²⁹ Die nichttrivialen Nullstellen von C_4 sind

$$k_{C_4=0} = \frac{9}{2} \pm \frac{1}{6} \sqrt{249} = \{1.87, 7.13\} ,$$

siehe [53].

³⁰ Dabei ist zu berücksichtigen, dass ρ für den Ast, der beim unteren trikritischen Punkt bei $L = 0$ beginnt, abgesenkt werden muss, bis $\rho = 0$ und damit das Ergebnis aus dem Modell des starren Substrates erreicht ist. Für den anderen Lösungsast muss ρ hingegen erhöht werden. Beachtet man dies nicht, so erhält man die formal richtigen, jedoch physikalisch sinnlosen Fortsetzungen der Lösungen für negative L .

Hieraus lassen sich bereits verschiedene Aussagen treffen. Aus dem System

$$E_{L=0} = 0, \quad \frac{\partial E_{L=0}}{\partial k} = 0,$$

welches bereits im halbumendlichen Modell benutzt wurde, um den Einsatzpunkt der Instabilität zu berechnen, erhält man die kritischen Parameter

$$l_{12,\text{krit.},L=0} = \rho^2 \tag{3.166a}$$

$$k_{12,\text{krit.},L=0} = \rho. \tag{3.166b}$$

Marginale Wellenzahlen folgen aus der Forderung

$$E_{L=0} = 0,$$

und damit

$$k_{12,\text{marg.},L=0} = \rho \pm \sqrt{\rho^2 - l_{12}}. \tag{3.167}$$

Für $\rho^2 < l_{12}$ existieren überhaupt keine reellen Lösungen, das heißt, dass die Oberfläche unter dieser Bedingung im Limes $L \rightarrow 0$ absolut stabil ist – eine Verallgemeinerung des Falles $\rho = 0, l_{12} = 0$.

Wenn $\rho^2 = l_{12}$ gilt, setzt die Instabilität genau beim Grenzwert $L = 0$ ein, und bei $\rho^2 > l_{12}$ ist für alle Schichtdicken ein ganzes Wellenzahlband linear instabil.

Das Verhalten für $L \rightarrow \infty$ ist bekannt: die Instabilität setzt bei $l_{12} = 1, k = 1$ ein. Für größere l_{12} ist die Oberfläche stabil, während bei kleineren l_{12} ein Wellenzahlbereich linear instabil ist, der bei $l_{12} = 0$ von $k = 0$ bis $k = 2$ reicht. Dieses Verhalten darf nicht von ρ abhängen, da der Abstand zum Substrat unendlich ist und somit keine Wechselwirkung stattfindet.

Wir berechnen nunmehr numerisch ein Kennlinienfeld, das für beliebig gewählte Parameter l_{12} und ρ den Einsatzpunkt der GRINFELDinstabilität angibt. Dazu lösen wir unter Vorgabe dieser Parameter das System

$$E = 0 \quad \frac{\partial E}{\partial k} = 0 \tag{3.168}$$

nach L und k . Wir konstatieren zunächst, dass es grundsätzlich zwei verschiedene Lösungsmannigfaltigkeiten gibt. Für weiche Schichten ($\rho < 1$) existieren nur Lösungen mit $l_{12} < 1$, und umgekehrt für harte Schichten nur solche mit $l_{12} > 1$. Das Ergebnis für weiche Schichten zeigt Bild 3.29.

Wie zu erwarten ist im Limit des starren Substrates die Kurve aus Bild 3.24 enthalten. Für $\rho \neq 0$ enden alle Kurven bei $L = 0$. Sie überschneiden sich zweimal bei $L \approx 0.5$ und $L \approx 1.6$ und laufen für große Schichtdicken gegen den Wert $k = 1$, was aus dem halbumendlichen Modell heraus auch zu erwarten war.

Als interessant erweist sich nun der Bereich, der durch eine fettgedruckte Linie in Bild 3.29 hervorgehoben worden ist und den als Ausschnittsvergrößerung das Bild 3.30 zeigt. Im Gegensatz zu allen Szenarien, die bisher untersucht worden sind und Gravitation berücksichtigen,

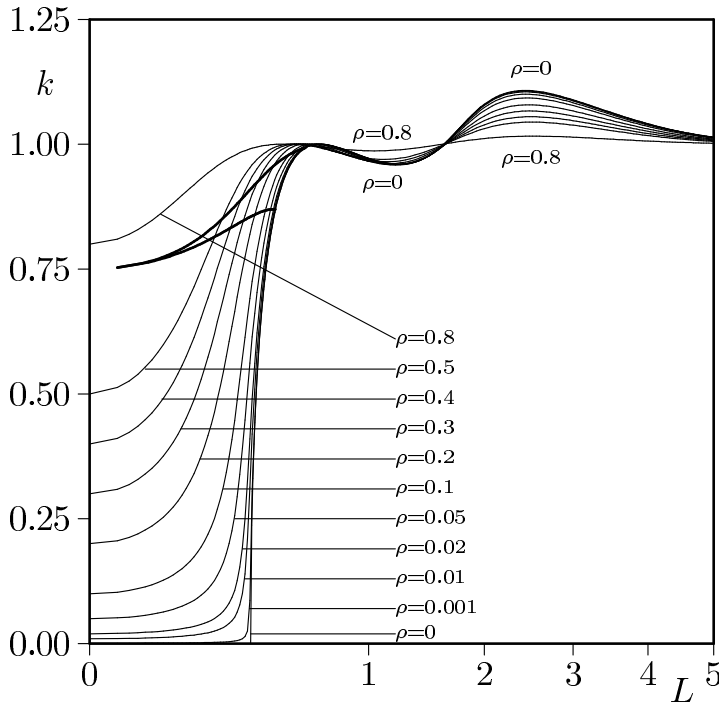


Abbildung 3.29.: Kennlinien des Einsetzens der GRINFELDinstabilität bei $l_{12} \neq 0$ für unterschiedliche Elastizitätsverhältnisse ρ im Bereich $[0, 1)$. Erläuterungen im Text.

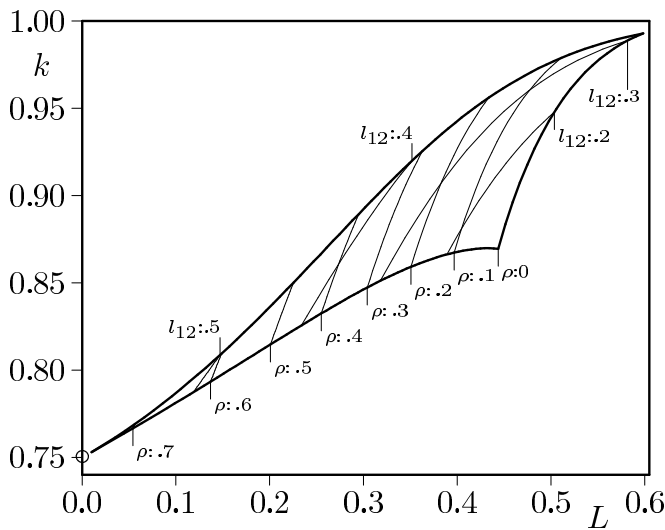


Abbildung 3.30.: Ausschnitt des superkritischen Bereiches aus Bild 3.29. Zusätzlich sind hier die Linien konstanter Parameter l_{12} und ρ eingetragen.

erweist sich hier ein Bereich als superkritisch, denn der Vorfaktor von α_1^4 in der Energieentwicklung ist positiv. Daraus folgt eine Restabilisierung bei kleiner Amplitude.

Die Lösungsmenge reicht beliebig dicht an den Punkt $(0, 3/4)$ heran, schließt diesen jedoch nicht ein.

Eine interessante Weiterführung dieser Untersuchungen bestünde darin, zu untersuchen, inwiefern höhere Terme im Energiepolynom dazu beitragen können, dass weitere Bereiche des Diagramms 3.30 stabilisiert werden.

4. Dreidimensionale Modelle

4.1. Einführende Bemerkungen

Das volle, dreidimensionale Problem ist bislang nur in linearer Näherung behandelt worden [27]. Eine neuere Arbeit mit P. BERGER [10] geht einen Schritt weiter zur schwach nicht-linearen Analyse. Hier wird unter gewissen Voraussetzungen an die Vorspannungen und die POISSONZahl ein zusätzlicher Übergang zwischen Rollen- und Rhombenmustern auftreten. Diese Berechnung wird im Rahmen der linearen Stabilitätsanalyse vorgestellt werden. Daran wird sich eine erweiterte schwach-nichtlineare Analyse anschließen, die das Verhalten der Instabilität entlang der gesamten kritischen Parametermenge aufklärt.

Die größere Komplexität des dreidimensionalen Problems resultiert nicht nur aus der Geometrie. Der Vorspannungstensor in der Ebene lautet jetzt

$$\Sigma_0 = \begin{pmatrix} \sigma_{xx,0} & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{yy,0} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.1)$$

und die Größen $\sigma_{xx,0}$ und $\sigma_{yy,0}$ können unabhängig voneinander beliebige Werte annehmen. Daher kann im dreidimensionalen Modell nicht mehr allgemein von der *kritischen Spannung* die Rede sein. Vielmehr wird der kritische Zustand des Systems durch eine Wechselbeziehung zwischen $\sigma_{xx,0}$ und $\sigma_{yy,0}$ gekennzeichnet sein. Darüberhinaus ist die GRINFELDinstabilität in zwei Dimensionen nicht vom Vorzeichen der Vorspannung abhängig. Hier kann sich hingegen ein signifikanter Unterschied des Systemverhaltens in Abhängigkeit vom Vorzeichen des Verhältnisses $\sigma_{xx,0}/\sigma_{yy,0}$ einstellen.

Die Komplexität wird weiterhin durch die Vielfalt der möglichen Oberflächenmodulationen erhöht. Abhängig vom Vorspannungszustand und den Materialparametern wird ein bestimmtes Muster ausgewählt werden, das aus mehreren überlagerten Basisstörungen zusammengesetzt werden kann, die in linearer Näherung natürlich voneinander unabhängig sind. Im halbunendlichen Modell steht nicht zu erwarten, dass lateral ausgedehnte Systeme anders als in zwei Dimensionen eine Restabilisierung zeigen, da auch hier das schon eingangs erwähnte Argument zutrifft, dass eine Anordnung ausreichend weit voneinander entfernter Vertiefungen immer einen effektiven Energiegewinn verspricht. Vielmehr ist analog zum zweidimensionalen Modell zu erwarten, dass die Dynamik im Endeffekt nach kurzer Zeit zu Cuspsingularitäten führt.

Schließlich sind die dreidimensionalen Modelle in der mathematischen Behandlung komplexer, weil hier ein Analogon zur AIRYfunktion fehlt. Wir werden also darauf angewiesen sein, die Randbedingungen zusammen mit den Gleichgewichtsbedingungen (2.3) unter Zuhilfenahme der BELTRAMI-MICHELL-Gleichungen (2.5) auszuwerten.

Prinzipiell genügt für die mathematische Repräsentation eines Oberflächenmusters ein Basissystem aus zwei orthogonalen Funktionenreihen. Allerdings nimmt man beträchtliche Ungenauigkeiten in Kauf, wenn man rhombische oder hexagonale Strukturen damit zu beschreiben versucht und die Rechnung auf niedrige Ordnungen beschränkt. Wir wählen daher die Symmetrie des Lösungsansatzes entsprechend der Symmetrie der Störung, und damit lassen wir im Falle der Untersuchung hexagonaler Strukturen auch Störungen der Ebene zu, die explizit aus drei Funktionensystemen bestehen.

4.2. Lineare Stabilitätsanalyse

Aus den BELTRAMI-MICHELL-Gleichungen (2.5) folgt, dass die Komponenten des Spannungstensors die Bipotenzialgleichung (2.6) erfüllen [46]. Es ist demzufolge zulässig, die allgemeine Form der AIRYfunktion als Ansatz für die Änderung jeder einzelnen Komponente zu verwenden. Wir schreiben in niedrigster Ordnung¹

$$\sigma_{ij} = \sum_{l=1}^n [(a_{ij,1,l} + b_{ij,1,l}z) \cos(\mathbf{k}_{1,l}\mathbf{x}) + (c_{ij,1,l} + d_{ij,1,l}z) \sin(\mathbf{k}_{1,l}\mathbf{x})] e^{|\mathbf{k}_{1,l}|z}. \quad (4.2)$$

In diesem Ansatz ist

$$\mathbf{x} = \begin{pmatrix} x e_x \\ y e_y \end{pmatrix},$$

und die Summation ist über alle Basismoden $l = 1 \dots n$ auszuführen. Die Zahl 1 in den Fußnoten der Koeffizienten und der Wellenzahlvektoren kennzeichnet, dass diese Größen zur ersten Ordnung gehören. Im Rahmen der linearen Stabilitätsanalyse existiert noch keine Wechselwirkung zwischen den einzelnen Moden. Daher genügt es vorerst, eine einzelne Basismode anzusetzen, deren Orientierung durch einen Winkel θ gekennzeichnet wird.

Wenn in höheren Ordnungen gerechnet wird, muss der Ansatz um sämtliche unabhängigen Linearkombinationen der Basismoden erweitert werden. Dies wurde im Prinzip schon bei der Entwicklungsmethode in zwei Dimensionen getan; aufgrund der Einschränkung auf nur eine Mögliche Richtung zeigte sich dieses Prinzip dort lediglich im Auftreten höherer Vielfacher der Argumente in den Winkelfunktionen.

Die Art des Ansatzes bietet den Vorteil der Möglichkeit systematischer Berechnungen und damit einer effizienten Computeralgebra-Umsetzung auf Kosten einer großen Anzahl von Koeffizienten $a_{ij,l}$, $b_{ij,l}$, $c_{ij,l}$ und $d_{ij,l}$. Bei Berücksichtigung der Symmetrie des Spannungstensors haben wir in niedrigster Ordnung und unter Annahme einer einzelnen Störung 24 Koeffizienten zu bestimmen. Die Normalspannungsbedingung allein liefert jedoch nur sechs Bestimmungsgleichungen. Es zeigt sich aber, dass die Koeffizienten nicht alle voneinander unabhängig sind und durch Berücksichtigung sowohl der elastischen Gleichgewichtsbedingung

¹ Alternativ ist auch die Verwendung von Exponentialfunktionen möglich. Die Anzahl der Koeffizienten halbiert sich dann, allerdings sind sie dann komplexe Zahlen.

(2.3) als auch der BELTRAMI-MICHELL-Gleichungen (2.5) gerade das benötigte System für die Bestimmung aller Koeffizienten zur Verfügung steht.

Wir vereinbaren Bezeichnungen, wie sie die Abbildung 4.1 zeigt. Im x - y -Kordinatensystem,

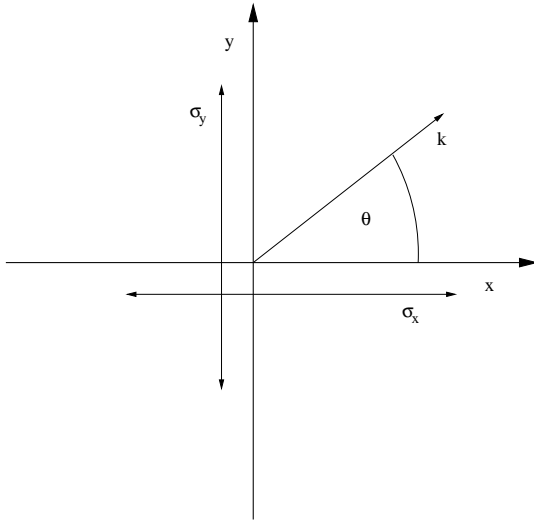


Abbildung 4.1.: Einzelne Störung in drei Dimensionen (Draufsicht). Das Koordinatensystem wird so gewählt, dass die Koordinatenrichtungen mit denen der Vorspannungskomponenten σ_x und σ_y übereinstimmen. Die Modulation mit dem Wellenzahlvektor \mathbf{k} erfolgt in einem Winkel θ zur x -Achse.

das in der Ebene der ungestörten Oberfläche liegt, bringen wir im Winkel θ zur Abszisse eine Störung der Form

$$\zeta(\mathbf{x}) = \alpha_1 \cos \mathbf{kx} \quad (4.3)$$

an. \mathbf{k} ($k_{1,1}$ im Kontext von Gleichung (4.2)) habe den Betrag k , und es gilt

$$\mathbf{k} = k \begin{pmatrix} \cos \theta \mathbf{e}_x \\ \sin \theta \mathbf{e}_y \end{pmatrix}. \quad (4.4)$$

Die Koodinatenachsen sind so gewählt, dass sie mit den Hauptachsen des Vorspannungszustandes zusammenfallen.

Abweichend von [10] wird die Untersuchung hier nicht anhand des chemischen Potentials, sondern über die freie Energie durchgeführt. Beide Methoden sind äquivalent, und der Aufwand der Methode der freien Energie ist nur scheinbar höher (sie beinhaltet eine Integration über die z -Komponente und eine weitere in Form der Mittelung über die Fläche), denn ab der zweiten Ordnung erweist sich das Sortieren nach trigonometrischen respektive Exponentialfunktionen als ähnlich komplex wie eine symbolische Integration.

Ein Effekt, der im Kontakt mit der Schmelze auftritt, und der sich mit Hilfe des chemischen Potentials sehr einfach plausibel machen lässt, sei allerdings erwähnt: Das Anbringen einer Vorspannung führt zunächst dazu, dass die Oberfläche um einen gewissen Betrag schmilzt, bis sich durch Wechselwirkung mit dem Schwerkraftterm ein neues Gleichgewicht eingestellt hat. Dieser Effekt übersteigt die Höhenvariation infolge der mechanischen Verformung beträchtlich. Der allgemeine Ausdruck für den elastischen Teil des chemischen Potentials in drei Dimensionen lautet

$$\Delta\mu_E = \frac{1}{2E_Y} \left[(1 + \nu) \tilde{\sigma}_{ij}|_h \tilde{\sigma}_{ij}|_h - \nu (\tilde{\sigma}_{kk}|_h)^2 \right]. \quad (4.5)$$

Die Tilden tragen dem Umstand Rechnung, dass in dem Fall, dass der Druck über dem Medium ungleich Null ist, nicht der tatsächliche Spannungstensor, sondern der mittels $\tilde{\sigma}_{ij} = \sigma_{ij} - \sigma_{nn}\delta_{ij}$ reduzierte Tensor einzusetzen ist. Die Tilde-Symbole werden künftig weggelassen, und die Randbedingung an der oberen Grenzfläche durchweg als $\sigma|_h \mathbf{n} = \mathbf{0}$ geschrieben. Die übrigen Beiträge zum chemischen Potenzial sind durch

$$\Delta\mu_S = -\gamma\kappa \qquad \Delta\mu_G = g \Delta\rho h \qquad (4.6)$$

gegeben. Durch Einsetzen der Vorspannungen (4.1) in die Summe aus Gleichung (4.5) und (4.6) (wobei der kapillare Anteil natürlich verschwindet, solange die Grenzfläche eben ist) erhalten wir eine Beziehung für die Änderung der Gleichgewichtshöhe infolge der elastischen Vorspannung. Wir definieren

$$\sigma_+ = \frac{1}{2}(\sigma_{xx,0} + \sigma_{yy,0}) \qquad \sigma_- = \frac{1}{2}(\sigma_{xx,0} - \sigma_{yy,0}) , \qquad (4.7)$$

und erhalten nach Vereinfachung

$$\Delta h = -\frac{(1-\nu)\sigma_+^2 + (1+\nu)\sigma_-^2}{E_Y g \Delta\rho} . \qquad (4.8)$$

Die neue Gleichgewichtshöhe wird im Folgenden als $z = 0$ definiert. Die elastische Energiedichte $E_E = 1/2\sigma_{ij}u_{ij}$ kann über das HOOKEsche Gesetz allein durch die Komponenten des Spannungstensors ausgedrückt werden:

$$w(\mathbf{x}) = \frac{1}{2E_Y} [(1+\nu)\sigma_{ij}\sigma_{ij} - \nu(\sigma_{kk})^2] . \qquad (4.9)$$

Daraus bestimmen wir wie üblich mittels

$$E_E = \left\langle \int_{-\infty}^{\zeta(\mathbf{x})} dz w(\mathbf{x}) \right\rangle \qquad (4.10)$$

die über die x - y -Ebene gemittelte elastische Energie. In diesem Kapitel entsprechen die Mittelungsklammern natürlich der Integration über ein Intervall bzw. eine Einheitszelle der Oberflächenstruktur und der Division durch deren Grundfläche. Für die Integration der elastischen Energiedichte (4.9) betrachten wir zunächst das Quadrat einer einzelnen Komponente. Mit $n = 1$ in Ansatz (4.2) ergibt sich nach längerer Rechnung in quadratischer Ordnung in α_1

$$\begin{aligned} \left\langle \int_{-\infty}^{\zeta(\mathbf{x})} dz \sigma_{ij}\sigma_{ij} \right\rangle &= \\ &\alpha_1^2 \left\langle \int_{-\infty}^{\zeta(\mathbf{x})} dz [\sigma_0 + (a+bz)\cos(\mathbf{kx})e^z + (c+dz)\sin(\mathbf{kx})e^z]^2 \right\rangle \\ &= \frac{1}{k} \left[\alpha_1^2 a\sigma_0 + \frac{\alpha_1^2}{8} (b^2 + d^2 + 2(a^2 + c^2 - ab - cd)) \right] . \end{aligned} \qquad (4.11)$$

Man beachte, dass in erster Ordnung der Betrag $k = 1$ und dass bei den Koeffizienten des Ansatzes auf Indizes verzichtet wurde. Wir verfolgen die schon bekannte Strategie, räumliche Koordinaten mit dem Betrag der Grundwellenzahl, k , zu skalieren. x , y und z , genau wie α_1 , sind also dimensionslose Parameter, und Differenziationen bzw. Integrationen erfordern das Anbringen eines Vorfaktors k bzw. k^{-1} , vgl. die letzte Zeile von Gleichung (4.11). Weiterhin wurde dieser allgemeine Spannungsterm mit einer Vorspannungskomponente σ_0 angesetzt, die natürlich nur in zwei der Komponenten tatsächlich ungleich Null ist. Mit Hilfe dieser Beziehung erweist es sich als einfach, bei einmal bekannten Koeffizienten die Änderung der elastischen Energie E_E zu berechnen.

Die Koeffizienten des elastischen Spannungsfeldes werden aus dem schon erwähnten Gleichungssystem

$$\begin{aligned} \sigma|_{z=\zeta(\mathbf{x})} \cdot \mathbf{n} &= \mathbf{0} \\ \partial_j \sigma_{ij} &= 0 \\ (1 + \nu) \partial_k \partial_k \sigma_{ij} + \partial_i \partial_j \sigma_{kk} &= 0 \end{aligned} \quad (4.12)$$

berechnet. Die Art der Berechnung ist wie auch in den folgenden umfangreicheren Modellen technisch aufwändig, beinhaltet aber keine grundsätzlichen Schwierigkeiten².

Man erhält für die elastische Energieänderung

$$E_E = -\frac{\alpha_1^2 (1 + \nu)}{2k E_Y} [(1 - \nu) (\sigma_-^2 + \sigma_+^2 + 2\sigma_- \sigma_+ \cos(2\theta)) + \sigma_-^2 \nu \sin^2(2\theta)] \quad (4.13)$$

Dieser Ausdruck hängt nicht nur von den Vorspannungen ab, sondern auch von der Orientierung θ der Störung. Die übrigen Energieterme, wieder mit dimensionslosen Amplituden formuliert, lauten

$$E_S = \frac{1}{4} \gamma \alpha_1^2 \quad E_G = \frac{g \Delta \rho}{4k^2} \alpha_1^2. \quad (4.14)$$

Sie hängen natürlich nicht von θ ab, und daher genügt die Betrachtung von (4.13) für die Diskussion, welche Mode am instabilsten ist. Wir bestimmen die Ableitung von E_E nach dem Winkel θ

$$\frac{\partial E_E}{\partial \theta} = -2 \frac{\alpha_1^2 \sigma_- (1 + \nu)}{E_Y k} \sin(2\theta) (\nu \sigma_- \cos(2\theta) - \sigma_+ (1 - \nu)) \quad (4.15)$$

und erkennen neben den trivialen Lösungen $\theta = 0$ und $\theta = \pi/2$ eine weitere Lösung der Form

$$\cos 2\theta = \frac{1 - \nu \sigma_+}{\nu \sigma_-}. \quad (4.16)$$

Grenzen wir zunächst die Bedingungen ein, unter denen diese Lösung existieren kann. Der Betrag des Quotienten $\frac{1-\nu}{\nu}$ ist im gesamten Definitionsbereich von ν ($-1 \dots 1/2$) größer gleich

² Entsprechende MAPLE-Arbeitsblätter sind vom Autor erhältlich.

1 (für $\nu \neq 1/2$ ist er größer als 1). Folglich ist im Gültigkeitsbereich der Lösung (4.16) der Betrag des Verhältnisses σ_+/σ_- kleiner gleich 1. Eine kurze Rechnung³ zeigt, dass sich diese Forderung nur erfüllen lässt, solange $\sigma_{xx,0}$ und $\sigma_{yy,0}$ verschiedene Vorzeichen tragen. Insbesondere impliziert Gleichung (4.16) damit keine Divergenz, da σ_- definitionsgemäß nur dann Null wird, wenn $\sigma_{xx,0} = \sigma_{yy,0}$, also unter der Bedingung gleicher Vorzeichen.

Setzen wir die drei Lösungen in den Ausdruck für die elastische Energieänderung ein, so erhalten wir

$$E_E = -\frac{\alpha_1^2(1+\nu)}{2E_Y k} [(1-\nu)\sigma_{xx,0}^2] \quad \theta = 0 \quad (4.17a)$$

$$E_E = -\frac{\alpha_1^2(1+\nu)}{2E_Y k} [(1-\nu)\sigma_{yy,0}^2] \quad \theta = \frac{\pi}{2} \quad (4.17b)$$

$$E_E = -\frac{\alpha_1^2(1+\nu)}{2E_Y k} \left[\frac{(\sigma_{xx,0} + \sigma_{yy,0})^2}{4\nu} - \sigma_{xx,0}\sigma_{yy,0} \right] \quad \cos 2\theta = \frac{1-\nu}{\nu} \frac{\sigma_+}{\sigma_-}, \quad (4.17c)$$

wobei die Formulierung so gewählt worden ist, dass einerseits gleiche Vorfaktoren erscheinen, und zum anderen die kürzere Form unter Verwendung der Variablen $\sigma_{xx,0}$ und $\sigma_{yy,0}$ benutzt wird. Offensichtlich sind alle drei Ausdrücke negativ, denn Lösung (4.17c) existiert, wie oben dargestellt, nur für verschiedene Vorzeichen von $\sigma_{xx,0}$ und $\sigma_{yy,0}$.

Da die anderen beiden Energieterme, die die Oberfläche stabilisieren, nicht von der Orientierung des Ansatzes $\zeta(\mathbf{x})$ abhängen, genügt für die Entscheidung, welche der Lösungen (4.17) ausgewählt wird, die Betrachtung des elastischen Terms allein. Natürlich wird diejenige Lösung zuerst instabil, die den größten Absolutbetrag aufweist. Im Vergleich zwischen den Lösungen (4.17a) und (4.17b) „gewinnt“ die Variante mit dem höheren Absolutbetrag der Vorspannung. Interessanter ist dagegen die Konkurrenz zwischen einer dieser Lösungen und (4.17c).

Es zeigt sich, dass der Betrag der Lösung (4.17c) genau dann größer als der von (4.17a) ist, wenn die Bedingung

$$\sigma_{yy,0} < -\sigma_{xx,0} (1-2\nu) \quad (4.18a)$$

erfüllt ist. Analog gewinnt (4.17c) gegenüber (4.17b), wenn

$$\sigma_{xx,0} < -\sigma_{yy,0} (1-2\nu) \quad (4.18b)$$

gilt. Diese Grenzen erhält man auch, wenn man in (4.16) die Werte $\theta = 0$ bzw. $\theta = \pi/2$ einsetzt. Daraus folgt, dass an den durch (4.18) gekennzeichneten Punkten die Lösungen (4.17a) bzw. (4.17b), die Wellenmustern parallel zu den Koordinatenachsen entsprechen, stetig in ein demgegenüber geneigtes Muster der Form (4.17c) übergehen.

Das gesamte Szenario der Abhängigkeit ausgewählter Lösungen ist in Abbildung 4.2 dargestellt. Der grau eingefärbte Bereich ist stabil; außerhalb von diesem zeigen sich die durch

3

$$\left(\frac{\sigma_+}{\sigma_-} \right)^2 \leq 1 \Rightarrow \sigma_{xx,0}\sigma_{yy,0} \leq -\sigma_{xx,0}\sigma_{yy,0} \Rightarrow \sigma_{xx,0}\sigma_{yy,0} \leq 0$$

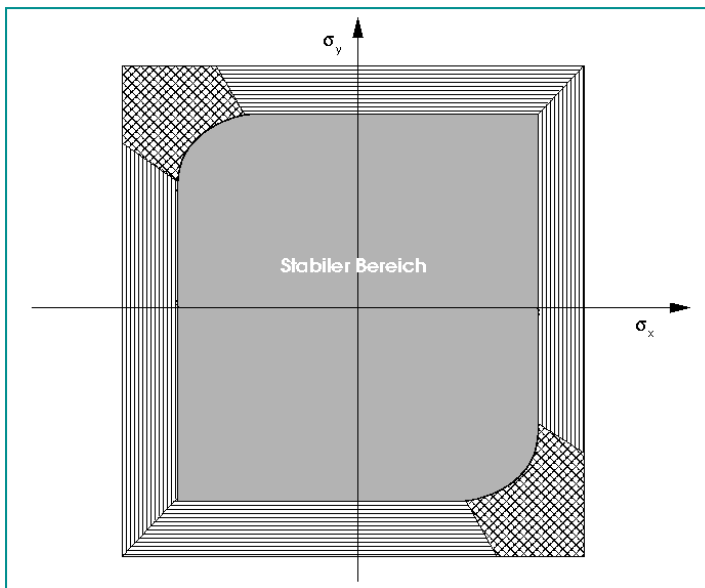


Abbildung 4.2.: Phasendiagramm der GRINFELDinstabilität an einem halbunendlichen, biaxial verspannten Festkörper bei festgehaltenem ν . Die kritischen Vorspannungen sind durch die Ränder des grauen Bereiches gegeben. Weitere Erläuterungen im Text.

die Textur angedeuteten Muster. Wir beschränken die Diskussion auf den Quadranten des Diagramms, der den Bereichen ❶ und ❷ entspricht. Hier ist offensichtlich $|\sigma_{xx,0}| > |\sigma_{yy,0}|$, wir haben also lediglich die Konkurrenz der Lösungen (4.17a) und (4.17c) zu berücksichtigen, da die Lösung (4.17b) immer durch die Lösung (4.17a) dominiert wird. Im Sektor ❶, dem Gültigkeitsbereich von Lösung (4.17a), entsteht ein Rollenmuster parallel zur y -Achse. Der Übergang zwischen den Bereichen ❶ und ❷ im Diagramm entspricht dem Erreichen der Bedingung (4.18a), und im Bereich ❷ dominiert eine Lösung, die nicht parallel zu einer der Koordinatenachsen verläuft.

Die neue Lösung (4.16) ist symmetrisch bezüglich des Vorzeichens von θ . Daraus folgt, dass in den Situationen, in denen diese Lösung dominiert, eigentlich zwei Moden instabil werden, die zur x -Achse symmetrisch liegen und zueinander einen Winkelabstand 2θ aufweisen. Daher ist a priori nicht klar, ob das entstehende Muster im Bereich ❷ der Abbildung 4.2 aus schrägen Rollen oder aus Rhomben besteht. Für Aussagen bezüglich der Dominanz einer der beiden Lösungen mit $\pm\theta$ ist eine schwach nichtlineare Analyse notwendig.

Die neue Lösung erstreckt sich im übrigen im Falle $\nu = 1/2$ über den vollständigen rechten unteren Quadranten von Abbildung 4.2, und sie verschwindet für $\nu = 0$. Für hypothetische Materialien mit $\nu < 0$ verschwindet die Zusatzlösung offenbar ganz, da der stabile Bereich in Abbildung 4.2 dann ein Quadrat wird.

Berechnen wir anhand der verschiedenen Situationen aus Gleichung (4.17) die kritischen Parameter der Instabilität. Es zeigt sich, dass für die ersten beiden Szenarien das Ergebnis der zweidimensionalen Theorie reproduziert wird:

$$\sigma_{xx,0,\text{crit}}^2 = \frac{\sqrt{\gamma g \Delta \rho} E_Y}{1 - \nu^2} \quad (4.19a)$$

bzw.

$$\sigma_{yy,0,\text{crit}}^2 = \frac{\sqrt{\gamma g \Delta \rho} E_Y}{1 - \nu^2} \quad (4.19b)$$

Im dritten Fall lässt sich die Lösung angeben, wenn wir die transformierten Vorspannungen benutzen. Das Ergebnis lautet in diesem Fall

$$\sigma_{-, \text{crit.}}^2 = -\sigma_{+, \text{crit.}}^2 \frac{1 - \nu}{\nu} \pm \frac{E_Y \sqrt{g \Delta \rho \gamma}}{1 + \nu}, \quad (4.19c)$$

wobei diese Gleichung für positive ν nur mit dem Pluszeichen eine physikalisch sinnvolle Lösung darstellt, während sie für negative ν keine Bedeutung hat, da die Lösung hier nicht existiert. Der Betrag der kritischen Wellenzahl lautet in jedem Fall

$$k_{\text{crit.}} = \sqrt{\frac{g \Delta \rho}{\gamma}}. \quad (4.20)$$

4.3. Entdimensionalisierung

Vor der nichtlinearen Erweiterung des Modells wird eine geeignete Reskalierung eingeführt werden, ohne die man in den komplizierteren Varianten aufgrund des Umfangs der auftretenden Terme nicht auskommt. Wir benutzen dazu in Anlehnung an den aus dem zweidimensionalen Problem bekannten Faktor die Größe

$$w_0 = \frac{\sigma_{xx,0,\text{crit}}^2 (1 - \nu^2)}{2E_Y}. \quad (4.21)$$

Diese Definition entspricht allerdings im Gegensatz zum zweidimensionalen Modell *nicht* der elastischen Energiedichte des vorgespannten Zustandes, wie man schon daran erkennt, dass die Größe nicht von den tatsächlichen Spannungen $\sigma_{xx,0}$ oder $\sigma_{yy,0}$ abhängt. Die Energiedichte des Anfangszustandes beträgt

$$w_{0,3} = \frac{\sigma_{xx,0}^2 + \sigma_{yy,0}^2 - 2\nu\sigma_{yy,0}\sigma_{xx,0}}{2E_Y}. \quad (4.22)$$

Nun messen wir die Spannungen in Einheiten von $|\sigma_{xx,0,\text{crit}}|$ ($= |\sigma_{yy,0,\text{crit}}|$), es gilt also

$$\sigma_{ij} = |\sigma_{xx,0,\text{crit}}| s_{ij} \quad \sigma_{xx,0} = |\sigma_{xx,0,\text{crit}}| s_{xx,0} \quad \sigma_{yy,0} = |\sigma_{xx,0,\text{crit}}| s_{yy,0} \quad (4.23)$$

mit den dimensionslosen Spannungen $s_{xx,0}$ und $s_{yy,0}$. Damit lautet der Vorspannungstensor jetzt

$$S_0 = \begin{pmatrix} s_{xx,0} & 0 & 0 \\ 0 & s_{yy,0} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.24)$$

Die kritischen Spannungen betragen in den Gültigkeitsbereichen von (4.17a) beziehungsweise (4.17b) $s_{xx,0,crit} = \pm 1$ bzw. $s_{yy,0,crit} = \pm 1$, und die neue Lösung (4.17c) lautet jetzt

$$s_{-,crit.}^2 = (1 - \nu) \left(1 - \frac{1}{\nu} s_{+,crit.}^2 \right) \quad (4.25a)$$

bzw.

$$s_{yy,0,crit} = -(1 - 2\nu) s_{xx,0,crit} \pm 2\sqrt{\nu(1 - \nu)(1 - s_{xx,0,crit}^2)}. \quad (4.25b)$$

Diese Beziehung beschreibt im Spannungsdiagramm eine Ellipse, die für $\nu = 1/2$ zu einem Kreis und für $\nu = 0$ zur Geraden $s_{yy,0,crit} = -s_{xx,0,crit}$ entartet. Abbildung 4.3 zeigt die berechnete Lösungsschar für verschiedene POISSONZahlen im rechten unteren Quadranten des Phasendiagramms 4.2.

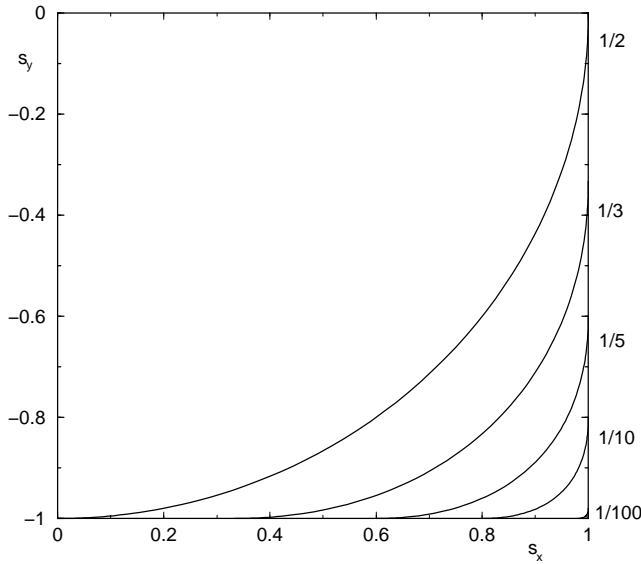


Abbildung 4.3.: Lösungsschar (4.25a) für verschiedene POISSONZahlen im Gültigkeitsbereich der neuen Lösung.

Die gemittelte elastische Energie beträgt dann

$$E_E = \frac{\sigma_{xx,0,crit}^2}{2E_Y k} \left\langle \int_{-\infty}^{\zeta(\mathbf{x})} dz [(1 + \nu) \sigma_{ij} \sigma_{ij} - \nu (\sigma_{kk})^2] \right\rangle, \quad (4.26)$$

wobei der bei der Integration auftretende Faktor k bereits berücksichtigt worden ist und das Mittelungsintegral jetzt ausschließlich dimensionslose Größen enthält. Die übrigen Energieteile sind

$$E_S = \gamma \left\langle \sqrt{1 + \zeta_x(\mathbf{x})^2 + \zeta_y(\mathbf{x})^2} - 1 \right\rangle \quad E_G = \frac{g \Delta \rho}{2k^2} \langle \zeta(\mathbf{x})^2 \rangle. \quad (4.27)$$

Wir definieren wieder typische Längen:

$$l_1 = \frac{\gamma}{2w_0} \quad l_2 = \frac{w_0}{g \Delta \rho} \quad l_{12} = \frac{l_1}{2l_2} = \frac{\gamma g \Delta \rho E_Y^2}{\sigma_{xx,0,crit}^4} \quad (4.28)$$

Entsprechend transformieren sich die Faktoren in (4.26) bzw. (4.27) nach Entdimensionalisierung von k

$$\gamma \rightarrow 2w_0l_1 \quad \frac{g \Delta\rho}{2k^2} \rightarrow \frac{w_0l_1l_{12}}{k^2} \quad \frac{\sigma_{xx,0,\text{crit}}^2}{2E_Yk} \rightarrow \frac{w_0l_1}{k(1-\nu^2)}. \quad (4.29)$$

Ersetzen wir die Vorfaktoren in (4.26) und (4.27) entsprechend (4.29) und dividieren alle Beiträge durch $\frac{2w_0l_1}{k^2}$, so erhalten wir schließlich die reduzierten Energieänderungen

$$\begin{aligned} E_E &= \frac{k}{2(1-\nu^2)} \left\langle \int_{-\infty}^{\zeta(\mathbf{x})} dz [(1+\nu)\sigma_{ij}\sigma_{ij} - \nu(\sigma_{kk})^2] \right\rangle \\ E_S &= k^2 \left\langle \sqrt{1 + \zeta_x(\mathbf{x})^2 + \zeta_y(\mathbf{x})^2} - 1 \right\rangle \quad E_G = \frac{l_{12}}{2} \langle \zeta(\mathbf{x})^2 \rangle. \end{aligned} \quad (4.30)$$

4.4. Schwach-nichtlineare Analyse

Betrachten wir nun ein System mit zwei Störungen, die die Winkel θ und $-\theta$ zur Abszisse in Abbildung 4.1 einschließen. Die Basisstörungen⁴ haben die Amplituden α_1 und α_2 , und deren Wechselwirkung generiert die Amplituden β_1 bis β_4 .

$$\begin{aligned} \zeta(\mathbf{x}) &= \alpha_1 \cos(\mathbf{k}_1\mathbf{x}) + \alpha_2 \cos(\mathbf{k}_2\mathbf{x}) \\ &+ \beta_1 \cos((\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2)\mathbf{x}) + \beta_2 \cos((\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)\mathbf{x}) \\ &+ \beta_3 \cos(2\mathbf{k}_1\mathbf{x}) + \beta_4 \cos(2\mathbf{k}_2\mathbf{x}) \end{aligned} \quad (4.31)$$

Wir haben die Szenarien aus der linearen Stabilitätsanalyse zu unterscheiden. In den Fällen 1 und 2 aus Gleichung (4.17) finden wir die Ergebnisse aus der zweidimensionalen Theorie wieder: setzen wir exemplarisch $\theta = 0$, betrachten also den Fall, der Rollenmuster parallel zur y -Achse ergibt.

Der Ausdruck für die Gesamtenergie entspricht in diesem Fall exakt der zweidimensionalen Lösung von NOZIÈRES [53], und die Minimierung am kritischen Punkt ergibt

$$\beta_1 = -2\alpha_1^2 \quad (4.32)$$

(die Amplituden α_1 und α_2 fallen zusammen, und es gibt für den Fall $\theta = 0$ nur eine Amplitude in der zweiten Ordnung), was erwartungsgemäß auf

$$E_{\text{crit.}} = -\frac{43}{64}\alpha_1^4 \quad (4.33)$$

führt. Eine analoge Diskussion kann man für $\theta = \pi/2$ führen. Interessanter ist natürlich das Verhalten der Instabilität im Gültigkeitsbereich der neuen Lösung (4.16).

⁴ Man beachte den Notationsunterschied zur zweidimensionalen Theorie: Alle α_n sind hier Amplituden der untersten Ordnung, und die Amplituden der nächsten Ordnung heißen β_n .

Die Formel für die Energie ist in der niedrigsten nichtlinearen Ordnung ein biquartischer und in α_1 und α_2 symmetrischer Ausdruck, der sowohl vom kritischen Vorspannungszustand $(s_{xx,0}, s_{yy,0})$ als auch von der POISSONZahl ν abhängt. Da die geschlossene Darstellung recht umfangreich ist, seien hier nur zwei Spezialfälle angegeben: der Übergangspunkt zwischen normaler und neuer Lösung ($\theta = 0$) und die Situation $s_{xx,0} = -s_{yy,0}$ ($\theta = \pi/4$).

$$E_{\theta=0} = -\frac{43}{64}\alpha_1^4 - \frac{43}{16}\alpha_1^2\alpha_2^2 - \frac{43}{64}\alpha_2^4 \quad (4.34a)$$

$$E_{\theta=\pi/4} = -\frac{11}{64}\alpha_1^4 - \frac{(6\sqrt{2} - \frac{43}{4})(1-\nu) + \frac{21}{16}\sqrt{2}}{4(1-\nu) - 3\sqrt{2}}\alpha_1^2\alpha_2^2 - \frac{11}{64}\alpha_2^4 \quad (4.34b)$$

Die erste der beiden Lösungen ist offensichtlich negativ; die Instabilität also weiter subkritisch. Dies trifft im halbunendlichen Modell vermutlich für alle Lösungen zu, doch ist eine genauere Untersuchung notwendig. Der mittlere Term der zweiten Lösung wechselt in Abhängigkeit von ν sein Vorzeichen.

Man analysiert dazu die Stabilität des allgemeinen Terms zu den Lösungen (4.34). Dies ist hier insofern besonders einfach als man zeigen kann, dass die Vorfaktoren zu α_1^4 bzw. α_2^4 grundsätzlich negativ sind. Sie lauten

$$A = -\frac{[11\nu^2 + 16(1+\nu)]\cos(8\theta) + [172 - 44(1-\nu)^2]\cos(4\theta) + 200 + 33\nu^2 - 104\nu}{64[\nu^2\cos(8\theta) + 4\nu(2-\nu)\cos(4\theta) + 3\nu^2 + 8(1-\nu)]} \quad (4.35)$$

Qualitativ kann man folgendermaßen diskutieren: Ein Potenzial der Form

$$A\alpha_1^4 + B\alpha_1^2\alpha_2^2 + A\alpha_2^4 \quad (4.36)$$

mit negativem A zeichnet genau dann überhaupt keine Richtung im Raum (α_1, α_2) aus, wenn $B = 2A$ ist (Abbildung 4.4 links). Für $B < 2A$ (beide negativ!) dominiert der gemischte Term (Abbildung 4.4 Mitte), und die Richtung des steilsten Abfalls ist einer der Zustände $|\alpha_1| = |\alpha_2|$, d.h. resultierenden Strukturen sind Rhomben. Für $B > 2A$ (Abbildung 4.4 rechts) wird hingegen eine der beiden Richtungen α_1 oder α_2 ausgewählt und es entsteht ein Wellenmuster.

Es bleibt zu bemerken, dass diese Diskussion nur für das Verhalten am Einsatz der GRINFELDinstabilität gültig ist. Die zunächst ausgewählten Muster werden sich im Lauf einer dynamischen Entwicklung verändern. Wichtig sind diese Betrachtungen aber als Vorbereitung auf die Untersuchung des dreidimensionalen Szenarios bei endlicher Schichtdicke, das eine Vielfalt an Strukturen erwarten läßt, die, wie das zweidimensionale Modell nahegelegt hat, auch stabil sein können.

4. Dreidimensionale Modelle

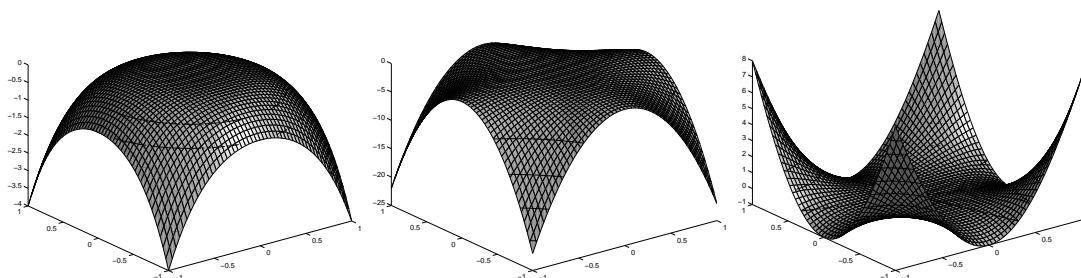


Abbildung 4.4.: Beispielpotentiale zur Diskussion der Auswahl von transienten Mustern am Einsatzpunkt der GRINFELDinstabilität. Abhängig vom Verhältnis der Parameter A und B in (4.36) zeigt der Gradient entweder in die Richtung der Amplitudenachsen oder in die Richtung der Winkelhalbierenden dazwischen.

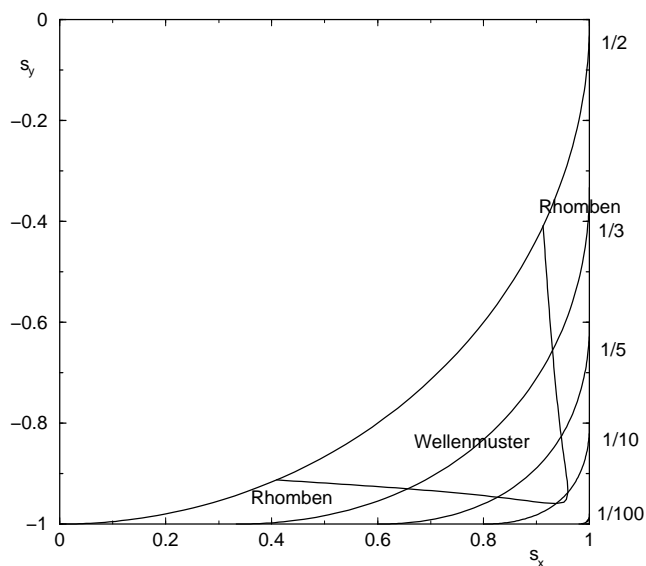


Abbildung 4.5.: Auswahl von transienten Rollen- bzw. Rhombenmustern am Einsatzpunkt der Instabilität für verschiedene POISSONzahlen

5. Zusammenfassung

Die GRINFELDinstabilität ist ein strukturbildendes System, bei dem infolge elastischer Spannungen parallel zu einer Festkörpergrenzfläche ein morphologischer Übergang von einer ebenen zu einer korrigierten Grenzfläche zu beobachten ist. Unter gewissen Bedingungen können diese neuen Strukturen stabil sein.

In dieser Arbeit wird ein Formalismus entwickelt, der es gestattet, die Veränderung der Freien Energie infolge von Oberflächenmodulationen in hoher Ordnung als Funktion der Grundamplitude zu berechnen. Diese sogenannte Expansionsmethode bietet die Möglichkeit einer effizienten Kalkulation der elastischen Feldgrößen und eröffnet damit in Verbindung mit der Verwendung von Computeralgebrasystemen Wege, stationäre Lösungen auch bei großen Störungen analytisch zu berechnen.

Exemplarisch werden das halbunendliche Modell und die dünne Schicht in zwei Dimensionen behandelt. Außerdem wird das volle dreidimensionale Problem eines halbunendlichen Mediums um eine schwach nichtlineare Analyse erweitert.

Eine weitere neue Methode besteht in der Verwendung einer Klasse von Funktionen, die wir als Multizykloiden bezeichnen. Diese gestatten eine exakte Berechnung der Variation der freien Energie für eine große Klasse von Oberflächen. Die Multizykloidenmethode wurde auf das zweidimensional halbunendliche Modell angewendet und erbrachte eine signifikante Erweiterung der Vorstellungen über die Lösungsmannigfaltigkeit dieses Problems.

Die Menge Multizykloiden schließt im Übrigen Oberflächen ein, die Überhänge enthalten. Sie empfehlen sich damit als Ansatz für eine Vielzahl strukturbildender Systeme mit komplizierteren Morphologien.

Anhang A. Einzelheiten zu den Multizykloidenmodellen

A.1. Fourierzerlegung der Zykloide

Die Fourierzerlegung der Zykloide ist ein Problem, das in der Literatur schwer aufzufinden ist. Da jedoch im Verlauf dieser Arbeit häufig mit den Fouriermoden argumentiert wird, die in einer Zykloide enthalten sind, halte ich es an dieser Stelle für geboten, die entsprechende Herleitung anzugeben. Ich beschränke mich dabei auf solche Zykloiden, deren Cuspsingularitäten nach unten zeigen, die also dem Generator 3.62 auf Seite 34 entsprechen. Schreiben wir den Generator nochmals unter Vernachlässigung des konstanten Terms, der sich als nullte Mode ergeben wird, auf:

$$z(\xi) = \xi - i\rho e^{-i\xi}. \quad (\text{A.1})$$

Dabei ist i die imaginäre Einheit. Mit dem in Gleichung A.1 gewählten Ansatz entsprechen wir unserer Schreibweise aus [38], wobei wir eine allgemeine Variable gewählt haben, bei der die Wellenzahl keine Rolle spielt. Die Arbeit von Chiu and Gao [15] benutzt eine inverse Vorzeichenkonvention. Die parametrische Darstellung der Zykloide erhalten wir über

$$\begin{aligned} x(\xi) &= \Re(z(\xi)) = \xi - \rho \sin \xi \\ y(\xi) &= \Im(z(\xi)) = -\rho \cos \xi \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

Die n -te mode der Zerlegung sei mit a_n bezeichnet. Da die Zykloide in der gewählten Darstellung eine gerade Funktion ist, genügt die Benutzung von Cosinusmoden. Die Nullmode entspricht dem auf die Abszisse bezogenen Mittelwert der Kurve. Man errechnet ihn leicht über

$$a_0 = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \dot{x}(\xi)y(\xi)d\xi = \frac{\rho^2}{2}, \quad (\text{A.3})$$

wobei der Punkt die Ableitung nach ξ bezeichnet. Für die Berechnung der höheren Moden muß man beachten, daß die Variable x im Cosinus parametrisch einzusetzen ist. Die allgemeine Gleichung ist

$$a_n = \frac{2}{\pi} \int_0^\pi \dot{x}(\xi)y(\xi) \cos(nx(\xi))d\xi. \quad (\text{A.4})$$

Wir benutzen nun Definition A.2:

$$a_n = -\frac{2\rho}{\pi} \int_0^\pi (1 - \rho \cos \xi) \cos \xi \cos(n(\xi - \rho \sin \xi))d\xi. \quad (\text{A.5})$$

Mit den Abkürzungen

$$c_n := \cos n\xi \quad s_n := \sin n\xi$$

schreibt sich Gleichung A.5 formal als

$$a_n = -\frac{2\rho}{\pi} \int_0^\pi (1 - \rho c_1) c_1 \cos(n(\xi - \rho s_1)) d\xi \quad (\text{A.6})$$

Über Additionstheoreme gelangt man zur Formulierung

$$a_n = \frac{\rho}{2\pi} \int_0^\pi I(\xi) d\xi; \quad (\text{A.7})$$

$$I(\xi) = [((c_{n-2} + 2c_n + c_{n+2})\rho - 2(c_{n-1} + c_{n+1})) \cos(n\rho s_1) + ((s_{n-2} + 2s_n + s_{n+2})\rho - 2(s_{n-1} + s_{n+1})) \sin(n\rho s_1)]$$

Man beachte die Ähnlichkeit zwischen den oberen und unteren Klammerausdrücken im Integranden, die wir ausnutzen werden. Nun werden die Integralformeln 3.715 (2) und 3.715 (9) aus [25] herangezogen:

$$\int_0^\pi s_l \sin(zs_1) d\xi = \frac{\pi}{2} (1 - (-1)^l) J_l(z) \quad (\text{A.8})$$

$$\int_0^\pi c_l \cos(zs_1) d\xi = \frac{\pi}{2} (1 + (-1)^l) J_l(z)$$

Dabei sind $J_l(z)$ die BESSELfunktionen der Ordnung l . Folglich gilt

$$\int_0^\pi [c_l \cos(zs_1) + s_l \sin(zs_1)] d\xi = \pi J_l(z) \quad (\text{A.9})$$

und das Ergebnis der Gleichung A.7 lautet

$$a_n = \frac{\rho}{2} [\rho (J_{n-2}(n\rho) + 2J_n(n\rho) + J_{n+2}(n\rho)) - 2 (J_{n-1}(n\rho) + J_{n+1}(n\rho))] \quad (\text{A.10})$$

Jetzt nutzen wir die Formel 9.1.27 in [3] aus:

$$J_{n-1}(n\rho) + J_{n+1}(n\rho) = \frac{2}{\rho} J_n(n\rho), \quad (\text{A.11})$$

aus der sich auch die Beziehung

$$J_{n-2}(n\rho) + J_{n+2}(n\rho) + 2J_n(n\rho) = \frac{4(n-1)}{n\rho^2} J_n(n\rho) + \frac{4}{n\rho} J_{n+1}(n\rho) \quad (\text{A.12})$$

ergibt. Wir erhalten mit A.11 und A.12 für A.10:

$$a_n = 2 \frac{\rho J_{n+1}(n\rho) - J_n(n\rho)}{n}. \quad (\text{A.13})$$

A.2. Beweis der Formel für die mittlere quadratische Amplitude von Multizykloiden erster Art

Wir führen den Beweis für das Quadrat der mittleren quadratischen Amplitude, $\bar{\alpha}^2$. Entsprechend Gleichung (3.117, S. 47) lautet es für eine N-Zykoide

$$\bar{\alpha}_N^2 = \sum_{n=1}^N \left(\frac{\rho_n^2}{2n^2} \left(1 - \frac{n}{2} \sum_{j=1}^N \frac{\rho_j^2}{j} \right) - \sum_{j=1}^{N-n} \frac{\rho_n \rho_j \rho_{n+j}}{j(n+j)} \right). \quad (\text{A.14})$$

Offensichtlich ist diese Beziehung richtig für $N = 1$, vergleiche Gleichung (3.70):

$$\bar{\alpha}_1^2 = \frac{1}{4} \rho_1^2 (2 - \rho_1^2). \quad (\text{A.15})$$

Die Induktionsbehauptung formulieren wir in der hier absichtlich ausführlich dargestellten Form

$$\begin{aligned} \bar{\alpha}_{N+1}^2 - \bar{\alpha}_N^2 &= \underbrace{\frac{\rho_{N+1}^2}{2(N+1)^2} - \frac{\rho_{N+1}^2}{2(N+1)} \sum_{j=1}^N \frac{\rho_j^2}{j} - \frac{\rho_{N+1}^4}{4(N+1)^2}}_1 \\ &\quad - \underbrace{\frac{\rho_{N+1}}{N+1} \sum_{n=1}^N \frac{\rho_n \rho_{N+1-n}}{N+1-n}}_2, \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

die wir leicht aus Gleichung (A.14) ableiten können. Für den Beweis schreiben wir unter Benutzung der Gleichungen (3.116a) und (3.116b) sowie der Abkürzung $\cos(n\xi) = c_n$ die Formel

$$\bar{\alpha}_{N+1}^2 = \int \dot{x}_{N+1} y_{N+1}^2 d\xi \quad (\text{A.17})$$

explizit auf:

$$\begin{aligned} \bar{\alpha}_{N+1}^2 &= \int (\dot{x}_N - \rho_{N+1} c_{N+1}) \left(y_N - \frac{\rho_{N+1}}{N+1} c_{N+1} - \frac{\rho_{N+1}^2}{2(N+1)} \right)^2 d\xi \\ &= \int (\dot{x}_N - \rho_{N+1} c_{N+1}) \left(y_N^2 + \frac{\rho_{N+1}^2 c_{2(N+1)}}{2(N+1)^2} - 2 \frac{\rho_{N+1} c_{N+1} y_N}{N+1} \right. \\ &\quad \left. + \frac{\rho_{N+1}^3 c_{N+1}}{(N+1)^2} - \frac{\rho_{N+1}^2 y_N}{N+1} + \frac{\rho_{N+1}^2 (\rho_{N+1}^2 + 2)}{4(N+1)^2} \right) d\xi \end{aligned} \quad (\text{A.18})$$

Im zweiten Schritt wurde hier die Klammer ausmultipliziert und zusätzlich eine Umformung der trigonometrischen Funktion vorgenommen.

Berücksichtigt man, dass $\dot{x}_N(\xi)$ und $y_N(\xi)$ jeweils Cosinusmoden von 1 bis N enthalten, so entfällt unmittelbar der zweite Term des großen Klammersausdrucks, der vierte Term gibt in

Kombination mit dem zweiten Term der ersten Klammer $^{1/2}$, und der sechste Term, kombiniert mit der Eins aus \dot{x}_N (vgl. Gleichung (A.21)), bleibt als Konstante außerhalb des Integrals stehen:

$$\begin{aligned} \bar{\alpha}_{N+1}^2 = \int (\dot{x}_N - \rho_{N+1}c_{N+1}) \left(y_N^2 - 2 \frac{\rho_{N+1}c_{N+1}y_N}{N+1} - \frac{\rho_{N+1}^2 y_N}{N+1} \right) d\xi \\ - \frac{\rho_{N+1}^4}{2(N+1)^2} + \frac{\rho_{N+1}^2 (\rho_{N+1}^2 + 2)}{4(N+1)^2} \end{aligned} \quad (\text{A.19})$$

Wir formen (A.19) um, um den Differenzausdruck entsprechend der Formulierung (A.16) zu erhalten. Das Produkt des zweiten Terms der ersten und des dritten Terms der zweiten Klammer gibt ebenfalls keinen Integralbeitrag, und es verbleibt

$$\begin{aligned} \bar{\alpha}_{N+1}^2 - \bar{\alpha}_N^2 = -2 \frac{\rho_{N+1}}{N+1} \int \dot{x}_N y_N c_{N+1} d\xi - \frac{\rho_{N+1}^2}{N+1} \int \dot{x}_N y_N d\xi \\ - \rho_{N+1} \int y_N^2 c_{N+1} d\xi + \frac{2\rho_{N+1}^2}{N+1} \int y_N c_{N+1}^2 d\xi \\ - \frac{\rho_{N+1}^4}{2(N+1)^2} + \frac{\rho_{N+1}^2 (\rho_{N+1}^2 + 2)}{4(N+1)^2} \end{aligned} \quad (\text{A.20})$$

Für die übrigen vier nichttrivialen Integrale schreiben wir zunächst die Form der Funktionen y_N und \dot{x}_N auf:

$$\begin{aligned} y_N &= - \sum_{n=1}^N \frac{\rho_n}{n} \left(c_n + \frac{\rho_n}{2} \right) \\ \dot{x}_N &= 1 - \sum_{n=1}^N \rho_n c_n \end{aligned} \quad (\text{A.21})$$

Für das erste Integral in Gleichung (A.20) sind offensichtlich wegen der Funktion c_{N+1} nur diejenigen Komponenten des Produktes $y_N \dot{x}_N$ interessant, die einen Beitrag zur Funktion c_{N+1} liefern. Damit fallen die konstanten Terme heraus, und es gilt

$$\int \dot{x}_N y_N c_{N+1} d\xi = \int \sum_{n=1}^N \frac{\rho_n}{n} c_n \sum_{n=1}^N \rho_n c_n d\xi = \int \sum_{n=1}^N \sum_{j=1}^N \frac{\rho_n \rho_j}{2n} (c_{n+j} + c_{n-j}) d\xi \quad (\text{A.22})$$

Der rechte Term kann weder $N+1$ noch $-(N+1)$ erreichen und ist somit irrelevant. Der linke Term muss die Beziehung $n+j = N+1$ erfüllen, und damit ist

$$\int \dot{x}_N y_N c_{N+1} d\xi = \frac{1}{4} \sum_{n=1}^N \frac{\rho_n \rho_{N+1-n}}{n} . \quad (\text{A.23})$$

Eine ähnliche Argumentation führt für das dritte Integral aus Gleichung (A.20) auf

$$\int y_N^2 c_{N+1} d\xi = \frac{1}{4} \sum_{n=1}^N \frac{\rho_n \rho_{N+1-n}}{n(N+1-n)}. \quad (\text{A.24})$$

Im zweiten Integral in Gleichung (A.20) tragen die Produkte der konstanten Terme und die Produkte der Cosinusterme zum Integral bei, und es ergibt sich

$$\int y_N \dot{x}_N d\xi = - \sum_{n=1}^N \frac{\rho_n^2}{2n} + \int \sum_{n=1}^N \frac{\rho_n}{n} c_n \sum_{n=1}^N \rho_n c_n d\xi = 0. \quad (\text{A.25})$$

Im vierten Integral schließlich formt man zunächst das Cosinusquadrat um. Der Term $c_{2(N+1)}$ wird aufgrund der Beschaffenheit von y_N nicht zum Integral beitragen, und es verbleibt lediglich das Produkt der konstanten Anteile:

$$\int y_N c_{N+1}^2 d\xi = \frac{1}{2} \int y_N (1 + c_{2(N+1)}) d\xi = -\frac{1}{4} \sum_{n=1}^N \frac{\rho_n^2}{n}. \quad (\text{A.26})$$

Die Gleichung (A.20) lautet folglich

$$\begin{aligned} \bar{\alpha}_{N+1}^2 - \bar{\alpha}_N^2 &= -\frac{\rho_{N+1}}{2(N+1)} \sum_{n=1}^N \frac{\rho_n \rho_{N+1-n}}{n} - \frac{\rho_{N+1}}{4} \sum_{n=1}^N \frac{\rho_n \rho_{N+1-n}}{n(N+1-n)} \\ &\quad - \frac{\rho_{N+1}^2}{2(N+1)} \sum_{n=1}^N \frac{\rho_n^2}{n} - \frac{\rho_{N+1}^4}{2(N+1)^2} + \frac{\rho_{N+1}^2 (\rho_{N+1}^2 + 2)}{4(N+1)^2} \\ &= \underbrace{-\frac{\rho_{N+1}}{N+1} \sum_{n=1}^N \frac{3N+3-2n}{4n(N+1-n)} \rho_n \rho_{N+1-n}}_2 + \underbrace{\frac{\rho_{N+1}^2}{2(N+1)} \left[\frac{2-\rho_{N+1}^2}{2(N+1)} - \sum_{n=1}^N \frac{\rho_n^2}{n} \right]}_1. \end{aligned} \quad (\text{A.27})$$

Teil 1 können wir hier unmittelbar mit Teil 1 aus Gleichung (A.16) identifizieren. Die Identität für die Terme 2 leuchtet nicht sofort ein. Wir müssen also noch zeigen, dass

$$\sum_{n=1}^N \frac{3N+3-2n}{4n(N+1-n)} \rho_n \rho_{N+1-n} = \sum_{n=1}^N \frac{1}{N+1-n} \rho_n \rho_{N+1-n} \quad (\text{A.28})$$

gilt. Eine einfache Umformung führt unter Vernachlässigung eines Vorfaktors $3/4$ auf

$$\sum_{n=1}^N \frac{\rho_n \rho_{N+1-n}}{n} = \sum_{n=1}^N \frac{\rho_n \rho_{N+1-n}}{N+1-n}, \quad (\text{A.29})$$

und die Identität kann man mittels Variablentransformation zeigen. Damit ist Formel (A.14) bewiesen.

A.3. Zur Topologie von Doppelzykloiden

Die Symmetriebedingung (3.122) vereinfacht sich im Falle der Doppelzykloide zu

$$\rho_1 = 0. \quad (\text{A.30})$$

Im Parameterraum $\{\rho_1, \rho_2\}$ genügt es damit, den Bereich $\rho_1 \geq 0$ zu untersuchen; links von $\rho_1 = 0$ könnten wir ein gespiegeltes, topologisch identisches Diagramm mit um π verschobenen Kurven zeichnen.

Einen Überblick über die Topologie der Doppelzykloiden zeigt die Abbildung (A.1). Wie

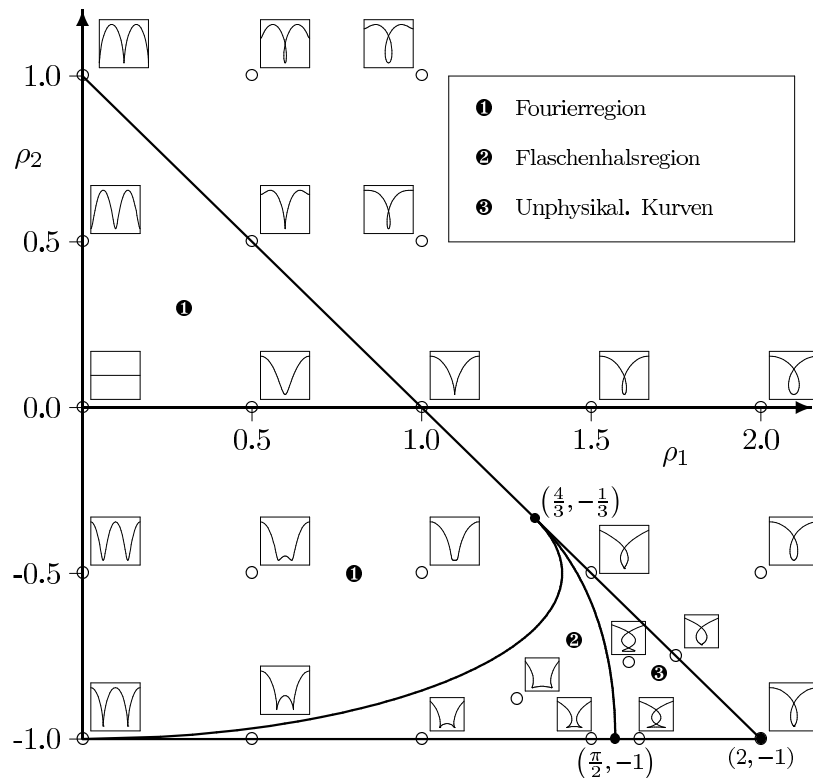


Abbildung A.1.: Topologie von Doppelzykloiden mit nichtnegativen ρ_1 . Die Darstellungen in den kleinen Bildern umfassen in einigen Fällen nicht das volle Grundintervall, sondern wurden eingengt, um die typischen Merkmale besser herausstellen zu können.

erwartet finden wir im Bereich $\rho_1 \in [0, 1], \rho_2 = 0$ die Monozykloide wieder. Das Diagramm zeigt aber auch, dass bezüglich des Parameters ρ_2 keineswegs Symmetrie herrscht. Wir unterscheiden innerhalb des Cuspraumes¹, der durch die Geraden $\rho_1 + \rho_2 = 1$ und $\rho_2 = -1$ begrenzt ist, drei verschiedene Regionen, die jeweils unterschiedliche Typen von Kurven enthalten:

¹ Der Cuspraum ist der Teil des Parameterraumes, der den Ursprung, entsprechend einer geraden Linie entlang $y = 0$, einschließt und durch das erstmalige Auftreten von einer oder mehreren Cuspsingularitäten begrenzt ist.

- ❶ Die Fourierregion enthält Kurven die keine Überhänge aufweisen und somit alternativ auch durch eine Fourierreihe darstellbar wären.
- ❷ Die Flaschenhalsregion enthält Kurven mit Überhängen.
- ❸ Dieser Bereich umfasst Kurven mit Selbstüberschneidungen, die ohne die Bildung einer Cuspsingularität auftreten. Sie sind physikalisch irrelevant, jedoch im Cuspraum enthalten.

Hier bestätigt sich die eingangs aufgestellte Behauptung, dass Kurven, die durch Multizykloiden beschrieben werden, solche mit Überhängen einschließen. Dies eröffnet ein weites Feld für Arbeiten an strukturbildenden Systemen mit derartigen Morphologien.

Cuspgrenzen

Die Bedingung für das Auftreten einer Cusp lautet:

$$\dot{\zeta}(\xi) = 0. \quad (\text{A.31})$$

Die konkrete Form dieser Forderung für den Fall von Doppelzykloiden $\zeta_2(\xi)$ ist

$$1 - \rho_1 c_1 - \rho_2 c_2 + i(\rho_1 s_1 + \rho_2 s_2) = 0, \quad (\text{A.32})$$

mit den bekannten Abkürzungen für die Funktionen der mehrfachen Winkel. Trigonometrische Umformungen und Trennung von Real- und Imaginärteil führen auf die Form

$$1 - \rho_1 c_1 - 2\rho_2 c_1^2 + \rho_2 = 0 \quad (\text{A.33a})$$

$$\sqrt{1 - c_1^2}(\rho_1 + 2\rho_2 c_1) = 0 \quad (\text{A.33b})$$

Nun betrachten wir c_1 als eine Variable, die im Bereich $[-1, 1]$ definiert ist. Die Gleichung (A.33b) wird entweder Null, wenn die Wurzel verschwindet oder wenn der rechte Faktor Null wird. Der erste Fall tritt nur ein, wenn c_1 die Werte $+1$ oder -1 annimmt. Dann folgen aus Gleichung (A.33a) die Bedingungen

$$1 - \rho_1 - \rho_2 = 0 \quad (\text{A.34a})$$

$$1 + \rho_1 - \rho_2 = 0, \quad (\text{A.34b})$$

die in allgemeinerer Form bereits von Gleichung (3.120) (vgl. Seite 48) her bekannt sind. Die Bedingung (A.34a) ist in Abbildung A.1 durch die Linie repräsentiert, die die Punkte $(0, 1)$ und $(2, -1)$ verbindet; die andere entspricht ihrem Spiegelbild bezüglich der Ordinate für negative ρ_1 .

Lässt man Werte $|c_1| < 1$ zu, so muss notwendigerweise der zweite Faktor in Gleichung A.33b verschwinden. Setzt man den sich daraus ergebenden Ausdruck $\rho_1 = -2\rho_2 c_1$ in Gleichung (A.33a) ein, so folgt unmittelbar die zusätzliche Cuspsbedingung $1 + \rho_2 = 0$ oder

$$\rho_2 = -1. \quad (\text{A.35})$$

Es handelt sich um die untere Linie in Abbildung A.1, und sie unterscheidet sich von den zuvor gefundenen dadurch, dass entlang der gesamten Linie zwei Cusps gleichzeitig existieren. Eine genauere Untersuchung wird nun zeigen, dass die Cuspbedingungen nicht in jedem Fall die einzigen Einschränkungen für physikalisch sinnvolle Doppelzykloiden darstellen.

Einige Beispielplots von Kurven im Parameterdreieck zwischen den Punkten $(0, 1)$, $(0, -1)$ and $(2, -1)$ (vgl. Abbildung A.1 auf Seite 88) zeigen, dass neben der Region ❶, die wir aufgrund der eindeutigen Funktionen als Fourierregion bezeichnen, zwei weitere Gebiete existieren, die im Hinblick auf physikalische Modelle besonders ausgezeichnete Eigenschaften aufweisen.

Bereich ❷ enthält Funktionen, die um ihre Minima herum Überhänge aufweisen. Sie sind physikalisch sinnvoll, aber natürlich nicht mit Hilfe einer physikalischen Theorie auffindbar, die auf Fourierzerlegung basiert, was diese Ansätze so erfolgversprechend macht. Dort, wo sich dieser „Flaschenhals“ schließt, beginnt die Region ❸, wobei die Oberfläche zwei Selbstüberschneidungen ausbildet, ohne zuvor eine Cuspsingularität durchlaufen zu haben.

Trennlinien zwischen den Bereichen ❶, ❷ und ❸

Das Verschließen des „Flaschenhalses“ zwischen ❷ und ❸ ist durch zwei Bedingungen gekennzeichnet:

1. Am Berührungspunkt der beiden Kurvenstücke muss der Anstieg unendlich sein, d.h. keine Änderung in x -Richtung oder

$$\dot{x}(\xi) = 1 - \rho_1 c_1 - \rho_2 c_2 = 0. \quad (\text{A.36a})$$

2. Wegen der Symmetrie des Problems muss der Berührungspunkt die x -Koordinate eines Minimums haben, also $\xi = 0$ für $\rho_1 > 0$. Mit $s_n = \sin(n\xi)$ lautet diese Bedingung

$$x(\xi) = \xi - \rho_1 s_1 - \frac{\rho_2}{2} s_2 = 0. \quad (\text{A.36b})$$

Die Kurve zwischen den Bereichen ❷ und ❸ in Abbildung A.1 ist die numerische Lösung dieses Systems für $\xi = 0 \dots \Pi/2$; größere ξ ergeben eine Verlängerung der Lösungskurve aus dem Cuspbereich heraus. Die Lösungskurve nähert sich für $\xi \rightarrow 0$ dem Punkt $(4/3, -1/3)$ an und schneidet bei $\xi = \pi/2$ den Punkt $(\pi/2, -1)$.

Die Kurve zwischen den Bereichen ❶ und ❷ kann hingegen analytisch berechnet werden. Wiederum müssen wir für gewisse ξ die Bedingung (A.36a) fordern, jedoch ändert sich hier zusätzlich an der gleichen x -Koordinate, die diesmal nicht im Minimum liegen muss, die Richtung bezüglich x , d.h. die Funktion $x(\xi)$ hat dort einen Umkehrpunkt, und wir haben somit zu fordern:

$$\ddot{x}(\xi) = \rho_1 s_1 + 2\rho_2 s_2 = 0. \quad (\text{A.36c})$$

Die Lösung kann explizit angegeben werden und lautet

$$\rho_1 = \pm \sqrt{-2\rho_2(1 + \rho_2)}. \quad (\text{A.37})$$

Sie ist definiert² für $\rho_2 \in [-1, -1/3]$.

Beide Kurven treffen sich somit in dem gemeinsamen Punkt $(4/3, -1/3)$. Dieser Punkt hat die spezielle Eigenschaft, dass er die „tiefste“ Cusp darstellt, die durch Doppelzykloiden repräsentierbar ist, da hier zusätzlich auch noch die Bedingung $\ddot{x}(0) = 0$ erfüllt ist³.

A.4. Berechnungen zum Multizykloidenmodell

Betrachten wir zunächst solche Lösungsäste, die mit der Abszisse $\bar{\alpha} = 0$ verbunden sind, die also für $l_{12} = 0 \dots 1$ entstehen. In diesen Fällen startet man in der Nähe dieser Lösung, für die bekannt ist, dass k bei $1 \pm \sqrt{1 - l_{12}}$ liegt (vergleiche Abbildung 3.13). In der Nähe dieser Punkte ist zu erwarten, dass stationäre Lösungen durch die Amplitude ρ_1 dominiert sind.

Dann bewegt man sich in kleinen Schritten diesen Lösungsast entlang und benutzt eine oder mehrere der vorangegangenen Lösungen für die Erzeugung der Startwerte für die neue Lösung. Dieses Vorgehen sichert die Konvergenz des Formalismus. Im hier verwendeten Programm wurden die Startwerte aus sechs vorangegangenen Punkten interpoliert.

Die natürliche Herangehensweise wäre nun, die Parameter k und l_{12} vorzugeben und dann numerisch den Satz der ρ_n zu bestimmen. Es stellt sich heraus, dass dieses Vorgehen Probleme bereitet, sobald man zu solchen Lösungskurven in Abbildung 3.14 kommt, die in k mehrdeutig sind. Es erweist sich zudem, dass bis auf Ausnahmefälle auch die ρ_n nicht monoton mit den Lösungsmengen verlaufen. Daher erweitern wir das Gleichungssystem durch die Forderung $\bar{\rho} = \text{const.}$ und versuchen den Parametersatz $(l_{12}, \rho_1 \dots \rho_N)$ zu berechnen.

Für die JACOBI-matrix und die Verifikation der Stabilität der Lösungen müssen wir die zweiten Ableitungen von (3.137), (3.138a) und (3.138b) bestimmen. Die Formeln für die Oberflächenenergie und für die potenzielle Energie lauten mit $\rho_0 := -1$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 E_S}{\partial \rho_n \partial \rho_m} = & \left\langle \frac{c_{n-m}}{(f_2(\bar{\rho}, \xi))^{1/2}} \right\rangle \\ & - \left\langle \frac{\left(\sum_{l=1}^n c_l \rho_{n-l} + \sum_{l=0}^{N-n} c_l \rho_{n+l} \right) \left(\sum_{l=1}^m c_l \rho_{m-l} + \sum_{l=0}^{N-m} c_l \rho_{m+l} \right)}{(f_2(\bar{\rho}, \xi))^{3/2}} \right\rangle \end{aligned} \quad (\text{A.38})$$

2 Aus $\ddot{x}(\xi) = 0$ folgt (außer bei $\sin \xi = 0$) $\cos \xi = -\frac{\rho_1}{4\rho_2}$. Einsetzen in Gleichung (A.36a) ergibt $\rho_2 + \frac{1}{8}\rho_1^2 + \rho_2^2 = 0$, mit der Lösung

$$\rho_1 = \pm 2\sqrt{-2\rho_2(1 + \rho_2)}.$$

Damit ρ_1 reell ist, muss $\rho_2 \in [-1, 0]$ gelten. Aufgrund von $\cos \xi = -\frac{\rho_1}{4\rho_2}$ müssen wir weiterhin

$$\left| \frac{2\sqrt{-2\rho_2(1 + \rho_2)}}{4\rho_2} \right| \leq 1$$

fordern, was nach Quadrieren und Kürzen auf die zusätzliche Einschränkung $\rho_2 \leq -\frac{1}{3}$ führt.

3 In diesem speziellen Fall ist sogar die vierte Ableitung Null.

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 E_G}{\partial \rho_n \partial \rho_m} &= \frac{1}{n} \left[\delta_{n,m} \left(\frac{1}{n} - \sum_{j=1}^N \frac{\rho_j^2}{j} \right) - 2 \frac{\rho_n \rho_m}{m} \right] \\ &\quad - \frac{\rho_{|n-m|}}{\min \{m, n\} |n-m|} && m \neq n \\ &\quad - \frac{\rho_{m+n}}{mn} && m+n \leq N \end{aligned} \quad (\text{A.39})$$

Der elastische Term bereitet Probleme, da er die Parameter α_n enthält, die nicht als explizite Funktionen der ρ_n gegeben sind. Für kleine Ordnungen bis etwa $N = 7$ ist der Aufwand vertretbar, die α_n mit einem CAS wie MAPLE explizit als $\alpha_n(\rho)$ zu berechnen und die Ableitungen automatisch zu bestimmen. Für exaktere Berechnungen erweist sich jedoch die Anwendung eines numerischen Verfahrens als notwendig.

Hier setzen wir voraus, dass wir die Matrix der Ableitungen $\partial w(\xi)/\partial \rho_m$ nach Gleichung (A.47) bestimmt haben. Die zweite Ableitung folgt dann aus Gleichung (3.137):

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 E_E}{\partial \rho_n \partial \rho_m} &= \frac{1}{nk} \cdot \\ &\quad \cdot \left\langle \frac{\partial w(\xi)}{\partial \rho_m} [S_n y'(\xi) - (C_n + \rho_n) x'(\xi)] + w(\xi) [C_{n-m} - \delta_{m,n} x'(\xi) + \rho_n C_m] \right\rangle. \end{aligned} \quad (\text{A.40})$$

Für die Ableitung der elastischen Energiedichte nach den ρ_n modifizieren wir die Gleichungen (3.131) und (3.133): Wir stellen Gleichung (3.131) nach α_n um, wobei wir vereinbaren, dass $\sum_{j=1}^0 [\dots] = 0$.

$$\alpha_n = \frac{1}{n} \left[\epsilon_n - \sum_{j=1}^{n-1} \rho_j \epsilon_{n-j} \right], \quad n = 1 \dots N. \quad (\text{A.41})$$

Gleichung (3.133) lautet

$$\alpha_n = \sum_{j=n}^N \epsilon_{j-n} \frac{\rho_j}{j}, \quad n = 1 \dots N. \quad (\text{A.42})$$

Subtrahieren wir (A.41) von (A.42), so entsteht ein Gleichungssystem für die ϵ_n :

$$n \sum_{j=1}^N \epsilon_{|j-n|} \frac{\rho_j}{\max \{j, n\}} = \epsilon_n, \quad n = 1 \dots N \quad (\text{A.43})$$

Die α_n können dann mit Hilfe einer der Gleichungen (A.41) oder (A.42) bestimmt werden. Stehen die ϵ_n fest, so kann man aus Gleichung (A.43) Gleichungssysteme für die Ableitungen $\partial \epsilon_n / \partial \rho_m$, $m = 1 \dots N$ ableiten:

$$n \sum_{j=1}^N \frac{\partial \epsilon_{|j-n|}}{\partial \rho_m} \frac{\rho_j}{\max \{j, n\}} + \frac{n \epsilon_{|n-m|}}{\max \{m, n\}} = \frac{\partial \epsilon_n}{\partial \rho_m}, \quad m, n = 1 \dots N. \quad (\text{A.44})$$

Schreibt man (A.44) als Matrixgleichung, so stellt man fest, dass nur die rechte Seite explizit von m abhängt. Folglich kann man *alle* Ableitungen mit einer einzigen Matrixinversion berechnen. Analog zu den α_n folgen dann die $\partial\alpha_n/\partial\rho_m$ aus der Ableitung von (A.42) nach ρ_m :

$$\frac{\partial\alpha_n}{\partial\rho_m} = \frac{\delta_{m,n}}{2n} + \sum_{j=n+1}^N \frac{1}{j} \left[\frac{\partial\epsilon_{j-n}}{\partial\rho_m} \rho_j + \delta_{j,m} \epsilon_{j-n} \right], \quad m, n = 1 \dots N \quad (\text{A.45})$$

Diese Ergebnisse gehen in die Ableitung $\partial w(\xi)/\partial\rho_m$ ein. Dafür wiederholen wir noch einmal Gleichung (3.134):

$$w(\xi) = \frac{1}{2} \left[1 + 4 \frac{f_1(\bar{\rho}, \xi)}{f_2(\bar{\rho}, \xi)} \right]^2. \quad (\text{A.46})$$

Die Ableitung lautet natürlich allgemein

$$w'(\xi) = 4 \left(1 + 4 \frac{f_1(\bar{\rho}, \xi)}{f_2(\bar{\rho}, \xi)} \right) \frac{f_1'(\bar{\rho}, \xi) f_2(\bar{\rho}, \xi) - f_1(\bar{\rho}, \xi) f_2'(\bar{\rho}, \xi)}{f_2(\bar{\rho}, \xi)^2}, \quad (\text{A.47})$$

wobei der Apostroph hier die Ableitung nach ρ_m kennzeichnet. Hierbei haben wir die Ableitungen von $f_1(\bar{\rho}, \xi)$ und $f_2(\bar{\rho}, \xi)$ (vgl. Seite 51) gemäß

$$f_1'(\bar{\rho}, \xi) = \sum_{n=1}^N n [\alpha_n' (C_n - \rho_n)] - m\alpha_m - \sum_{n=1}^{N-1} C_n \sum_{j=1}^{N-n} \left\{ (j+n) [\delta_{j,m} \alpha_{j+n} + \rho_j \alpha_{j+n}'] + j [\delta_{j+n,m} \alpha_j + \rho_{j+n} \alpha_j'] \right\} \quad (\text{A.48a})$$

$$f_2'(\bar{\rho}, \xi) = 2 \left\{ \rho_m - C_m + \sum_{n=1}^{N-1} C_n \sum_{j=1}^{N-n} [\delta_{j,m} \rho_{j+n} + \delta_{j+n,m} \rho_j] \right\} \quad (\text{A.48b})$$

einzusetzen.

Tabellenverzeichnis

3.1. Die für die lineare und die erste nichtlineare Ordnung notwendigen AIRYkoeffizienten und Amplitudenkoeffizienten	29
---	----

Abbildungsverzeichnis

1.1. Aufnahme aus [70]	4
1.2. Natriumchloratkristall unter Spannung.	5
1.3. Basaltsäulen.	6
1.4. PA–MBO -System	6
1.5. Quantenpunkt aus InAs auf GaAs, TEM-Aufnahme in $\langle 110 \rangle$ -Projektion.	7
1.6. Vergrößerter und nachbearbeiteter Ausschnitt aus Abbildung 1.5.	8
3.1. Dispersionsrelation der GRINFELDinstabilität für Schmelzen/Erstarren	24
3.2. Dispersionsrelation der GRINFELDinstabilität für Oberflächendiffusion	24
3.3. Lineares Verhalten der Gesamtenergie	25
3.4. Anwachsen der Koeffizienten der Energie am kritischen Punkt	30
3.5. Parameterbereich, für den der quartische Term der Energie positiv ist.	30
3.6. Stationäre Lösungen nach der Expansionsmethode	31
3.7. Oberflächenmorphologien einiger Lösungspunkte, korrespondierend zur genauesten Lösung in Abbildung 3.6	32
3.8. Stationäre Lösungsmannigfaltigkeiten	32
3.9. Verkürzte, spitze und verlängerte Zykloide	34
3.10. Klassische Zykloide im Bereich $\rho = \pm 1$	35
3.11. Monozykloidenmodell, Vergleich der mittleren quadratischen Amplitude mit der SPENCER-MEIRON-Lösung	44
3.12. Monozykloidenmodell, Vergleich der Cuspradien mit der SPENCER-MEIRON-Lösung	45
3.13. Stationäre Lösungen des Monozykloidenmodells	45
3.14. Stabiler Lösungsbereich des Monozykloidenmodells	46
3.15. Vergleich der Amplituden im gravitationsfreien Modell	53
3.16. Krümmungsradien bei $\xi = 0$ im gravitationsfreien Modell	54
3.17. Die ersten fünf Amplituden im Modell mit $N = 30$	54
3.18. Stationäre Lösungen des Multizykloidenmodells bei verschiedenen L_{12}	55
3.19. Elastisches Material auf einem starren Substrat	56
3.20. Marginale Wellenzahl in Abhängigkeit von der Schichtdicke, aus [65]	59
3.21. Marginale Wellenzahl bei endlicher Schichtdicke	60
3.22. Vorfaktor zu α_1^4 in der Gesamtenergie für endliche Schichtdicken	61
3.23. Minimierte Amplitude α_2 , in Abhängigkeit von der Schichtdicke	62
3.24. Kritische Wellenzahl im Modell mit Gravitation für endliche Schichtdicken am Beispiel $\nu = 1/3$	62

3.25. Kritischer Parameter l_{12} im Modell mit Gravitation für endliche Schichtdicke am Beispiel $\nu = 1/3$	63
3.26. Vorfaktor zu α_1^4 im Modell mit Gravitation	63
3.27. Minimierte Amplitude α_2 , in Abhängigkeit von der Schichtdicke im Modell mit Gravitation	64
3.28. Marginale Wellenzahlen für verschiedene Elastizitätsverhältnisse; $l_{12} = 0$	65
3.29. Kennlinien der GRINFELDinstabilität bei $l_{12} \neq 0$	68
3.30. Ausschnitt des superkritischen Bereiches aus Bild 3.29. Zusätzlich sind hier die Linien konstanter Parameter l_{12} und ρ eingetragen.	68
4.1. Koordinatensystem und Wellenzahlvektor für die dreidimensionale Analyse	71
4.2. Phasendiagramm der GRINFELDinstabilität an einem halbunendlichen, biaxial verspannten Festkörper	75
4.3. Lösungsschar (4.25a) für verschiedene POISSONzahlen im Gültigkeitsbereich der neuen Lösung.	77
4.4. Beispielpotenziale zur Diskussion der Auswahl von transienten Mustern am Einsatzpunkt der GRINFELDinstabilität. Abhängig vom Verhältnis der Parameter A und B in (4.36) zeigt der Gradient entweder in die Richtung der Amplitudenachsen oder in die Richtung der Winkelhalbierenden dazwischen.	80
4.5. Auswahl von transienten Rollen- bzw. Rhombenmustern am Einsatzpunkt der Instabilität für verschiedene POISSONzahlen	80
A.1. Topologiediagramm für Doppelzykliden	88

Literaturverzeichnis

- [1] www.trafficforum.org.
- [2] Deutsche Aphorismen (G. Fieguth, ed.), Reclam, Stuttgart, 1978, p. 206.
- [3] Milton Abramowitz and Irene A. Stegun (eds.), *Pocketbook of mathematical functions*, Harri Deutsch, Thun, Frankfurt/Main, 1984, Abridged Edition of "Handbook of Mathematical Functions".
- [4] I.S. Aranson and L. Kramer, *The world of the Complex Ginzburg-Landau equation*, Rev. Mod. Phys. **74** (2002), 99–143.
- [5] R.J. Asaro and W.A. Tiller, Metall. Trans. **3** (1972), 1789.
- [6] Atilla Aydin and James M. DeGraff, *Evolution of polygonal fracture patterns in lava flows*, Science **239** (1988), 471–471.
- [7] Hans-Paul Bahrdt, *Schlüsselbegriffe der Soziologie*, 3rd ed., Beck, München, 1987.
- [8] Philip Ball, *The self-made tapestry*, Oxford University Press, Oxford, 1999.
- [9] Hans-Jochen Bartsch, *Mathematische Formeln*, 15th ed., Buch- und Zeit-Verlagsgesellschaft mbH, Köln, 1988.
- [10] Patrick Berger, Peter Kohlert, Klaus Kassner, and Chaouqi Misbah, *Pattern selection in bi-axially stressed solids*, Phys. Rev. E **90** (2003), 176103.
- [11] J. Berréhar, C. Caroli, C. Lapersonne-Meyer, and M.Schott, *Surface patterns on single-crystal films under uniaxial stress: Experimental evidence for the Grinfeld instability*, Phys. Rev. B **46** (1992), no. 20, 13487–13496.
- [12] S. Bose and E. Schöll, *Optimization of the size distribution of self-organized quantum dots*, Proceedings of the 7th International Symposium on Nanostructure: Physics and Technology (St. Petersburg), Ioffe Institut, 1999, pp. 506–509.
- [13] E. Brener and R. Spatschek, *Fast crack propagation by surface diffusion*, Phys. Rev. E **67** (2003), 016112.
- [14] K.M. Chen, D.E. Jesson, and S.J. Pennycook, *Critical nuclei shapes in the stress-driven 2D-to-3D transition*, Phys. Rev. B **56** (1997), no. 4, R1700–R1703.

- [15] C.-H. Chiu and H. Gao, *Stress singularities along a cycloid rough surface*, International Journal of Solids and Structures **30** (1993), no. 21, 2983–3012.
- [16] Nicolas Combe, Pablo Jensen, and Lean-Louis Barrat, *Stable unidimensional arrays of coherent strained islands*, cond-mat/0106587 (2001).
- [17] M.C. Cross and P.C. Hohenberg, *Pattern formation outside of equilibrium*, Rev. Mod. Phys. **65** (1993), no. 3, 851–1112.
- [18] James M. DeGraff and Atilla Aydin, *Surface morphology of columnar joints and its significance to mechanics and direction of joint growth*, Geological Society of America bulletin **99** (1987), 605–617.
- [19] René Friedrichs and Andreas Engel, *Pattern and wave number selection in magnetic fluids*, Phys. Rev. E **64** (2001), 021406.
- [20] Emanuel Del Gado, Lucilla de Arcangelis, and Antonio Coniglio, *Viscosity critical behaviour at the gel point in a 3d lattice model*, European Physical Journal E **2** (2000), 359.
- [21] A. Gailitis, *Formation of the hexagonal pattern on the surface of a ferromagnetic fluid in an applied magnetic field*, J. Fluid Mech. **82** (1977), 401–413.
- [22] H. Gao, *A boundary perturbation analysis for elastic inclusions and interfaces*, Int. J. Solids Structures **28** (1991), no. 6, 703–725.
- [23] ———, *Stress concentration at slightly undulating surfaces*, J. Mech. Phys. Solids **39** (1991), no. 4, 443–458.
- [24] Huajian Gao and William D. Nix, *Surface roughening of heteroepitaxial thin films*, Annu. Rev. Mater. Sci. **29** (1999), 173–209.
- [25] I. Gradstein and I. Ryzhik, *Summen-, Produkt- und Integraltafeln*, 1st ed., vol. 1, Harri Deutsch, Thun, Frankfurt/Main, 1981.
- [26] A.A. Griffith, Phil. Trans. Roy. Soc. London **A 221** (1920), 163.
- [27] M. Grinfeld, *Two-dimensional islanding atop stressed solid helium and epitaxial films*, Phys. Rev. B **49** (1994), 8310–8319.
- [28] M. A. Grinfeld and P. M. Hazzledine, *Rearrangement at coherent interfaces in heterogeneous solids*, Phil. Mag. Lett. **74** (1996), no. 1, 17–23.
- [29] ———, *Role of vacancies in slow evolution of a traction-free interface*, Europhys. Lett. **37** (1997), no. 6, 409–413.

- [30] M.A. Grinfeld, Dokl. Akad. Nauk. SSSR **290** (1986), 1358, (Sov. Phys. Dokl., **31**, 831 (1986)).
- [31] A. Groisman and E. Kaplan, *An experimental study of cracking induced by desiccation*, Europhys. Lett. **25** (1994), no. 6, 415–420.
- [32] J.E. Guyer and P.W. Voorhees, *Morphological stability of alloy thin films*, Phys. Rev. B **54** (1996), no. 16, 11710–11724.
- [33] Brian Hayes, *The easiest hard problem*, American Scientist **90** (2002), 113 – 117.
- [34] T. Hornig, I.M. Sokolov, and A. Blumen, *Patterns and scaling in surface fragmentation processes*, Physical Review E **54** (1996), no. 4, 4293–4298.
- [35] Zhi-Feng Huang and Rashmi C. Desai, *Stress-driven instability in growing multilayer films*, Phys. Rev. B **67** (2003), 075416.
- [36] J.W. Hutchinson and V. Tvergaard, *Surface instabilities on statically strained plastic solids*, Int. J. Mech. Sci. **22** (1980), 339–354.
- [37] Jens Kappey, *Directional solidification under stress*, Ph.D. thesis, Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, 2000.
- [38] K. Kassner, C. Misbah, J. Müller, J. Kappey, and P. Kohlert, *Phase field under stress*, Phys. Rev. E **63** (2001), 036117.
- [39] K. Kassner and C Misbah, *Non-linear evolution of a uniaxially stressed solid: A route to fracture?*, Europhys. Lett. **28** (1994), no. 4, 245–250.
- [40] K. Kassner and C. Misbah, *Amplitude equations for systems with long-range interactions*, Phys. Rev. E **66** (2002), 026102.
- [41] Klaus Kassner, *Unveröffentlichte Notizen*.
- [42] So Kitsunezaki, *Fracture patterns induced by desiccation in a thin layer*, Physical Review. E **60** (1999), no. 6, 6449–6464.
- [43] P. Kohlert, K. Kassner, and C. Misbah, *High-order weakly nonlinear analysis of the Grinfeld instability*, (2003), to be published.
- [44] ———, *Large amplitude behaviour of the Grinfeld instability: A variational approach*, European Physical Journal B (2003), to be published.
- [45] D. Köhn, D.K. Dysthe, and B. Jamtveit, *Transient dissolution patterns on stressed crystal surfaces*, Geochimica et Cosmochimica Acta (to be published).

- [46] L.D. Landau and E.M. Lifschitz, *Elastizitätstheorie*, 5th ed., Lehrbuch der Theoretischen Physik, vol. 7, Akademie - Verlag Berlin, 1983.
- [47] Kwan-Tai Leung and J.V. Andersen, *Phase transition in a spring-block model of surface fracture*, Europhys. Lett. **38** (1997), no. 8, 589–594.
- [48] A. Levermann and I. Procaccia, *Bi-laplacian growth patterns in disordered media*, Phys. Rev. Lett. **89** (2002), 234501.
- [49] Paul Meakin, *Models for material failure and deformation*, Science **252** (1991), 226–234.
- [50] Gerhard Müller, *Trocknungsrisse in Stärke*, Physikalische Blätter **55** (1999), no. 10, 35–37.
- [51] Judith Müller, *Study of stress-induced morphological instabilities*, Ph.D. thesis, Centre for the Physics of Materials, Dept. of Physics, McGill University, Montréal, Quebec, 1998.
- [52] P. Nozières, *Shape and growth of crystals*, Solids Far from Equilibrium (Cambridge) (C. Godrèche, ed.), Cambridge University Press, 1992.
- [53] ———, *Amplitude expansion for the Grinfeld instability due to uniaxial stress at a solid surface*, J. Phys. I France **3** (1993), 681–686.
- [54] V.G. Oshnian and L. Benguigui, *Continuum model of heterogenous gels: Formation and elastic properties*, J. Phys. II France **6** (1996), 1585 – 1596.
- [55] H.-J. Pi, S.-Y. Park, J. Lee, and K. J. Lee, *Super-lattice, rhombus, square, and hexagonal standing waves in magnetically driven ferrofluid surface*, arXiv:cond-mat/0005224 + (2000).
- [56] W.H. Press, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling, and B.P. Flannery, *Numerical recipes in c*, Cambridge University Press, 1999.
- [57] Michael P. Ryan and Charles G. Sammis, *Cyclic fracture mechanics in cooling basalt*, Geological Society of America bulletin **89** (1978), 1295–1308.
- [58] Ken Sekimoto and Kyozi Kawasaki, *Elastic instabilities and phase coexistence of gels*, Physica A **154** (1989), 384 – 420.
- [59] A.P.S. Selvadurai, *The biharmonic equation, poisson's equation*, Partial Differential Equations in Mechanics, vol. 2, Springer-Verlag, Berlin, 2000.
- [60] L.L. Shanahan and B.J. Spencer, *Equilibrium shapes of small three-dimensional Stran-ski-Krastanow islands in epitaxially-strained solid films*, subm. to Interfaces and Free Boundaries (2000).

- [61] K. Simonyi, *Kulturgeschichte der Physik*, Verlag Harri Deutsch, Frankfurt a. M., 2001.
- [62] R. Spatschek and E. Brener, *Grinfeld instability on crack surfaces*, *Phy. Rev. E* **64** (2001), 046120.
- [63] B.J. Spencer and D.I. Meiron, *Nonlinear evolution of the stress-driven morphological instability in a two-dimensional semi-infinite solid*, *Acta metall. mater.* **42** (1994), no. 11, 3629–3641.
- [64] B.J. Spencer, P. W. Vorhees, and J. Tersoff, *Morphological instability theory for strained alloy film growth: the effect of compositional stresses and species-dependent surface mobilities on ripple formation during epitaxial film deposition*, *subm. to Phys. Rev. B* (2000).
- [65] B.J. Spencer, P.W. Vorhees, and S.H. Davis, *Morphological instability in epitaxially strained dislocation-free solid films*, *Phys. Rev. Lett.* **67** (1991), no. 26, 3696–3699.
- [66] ———, *Morphological instability in epitaxially strained dislocation-free solid films: Linear stability theory*, *J. Appl. Phys.* **73** (1993), no. 10, 4955–4970.
- [67] D.J. Srolovitz, *On the stability of surfaces of stressed solids*, *Acta metall.* **37** (1988), no. 2, 621–625.
- [68] O. Steinbock, E. Kasper, and S. C. Müller, *Complex pattern formation in the polyacrylamide – methylene blue – oxygen reaction*, *J. Phys. Chem. A* **103** (1999), 3442–3446.
- [69] M. Thiel, A. Willibald, P. Evers, A. Levchenko, P. Leiderer, and S. Balibar, *Stress-induced melting and surface instability of ^4He crystals*, *Europhys. Lett.* **20** (1992), 707–713.
- [70] R.H. Torii and S. Balibar, *Helium crystals under stress: The Grinfeld instability*, *J. Low Temp. Phys.* **89** (1992), no. 1/2, 391–400.
- [71] Robert C. Yates, *Curves and their properties*, *Classics in Mathematics Education*, no. 4, The National Council of teachers of mathematics, 1952.
- [72] H.H. Yu and Z. Suo, *Delayed fracture of ceramics caused by stress-dependent surface reactions*, *Acta Mater.* **47** (1999), 77.

Lebenslauf

Name	Peter Kohlert
Geburtstag	9. Februar 1972
Geburtsort	Calbe (Saale)
Familienstand	ledig
Nationalität	Deutsch
Adresse	Lessingstraße 48, 39240 Calbe

1978 – 1988	Polytechnische Oberschule, Calbe
1988 – 1990	Spezialklasse für Mathematik und Naturwissenschaften, TU Magdeburg, Abitur
1990 – 1991	Zivildienst
1991 – 1997	Diplomstudium Physik, Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg Diplom über Charakterisierung von nanostrukturiertem Germanium
seit 1997	Doktorand am Institut für Theoretische Physik der Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg in der Abteilung für Computerorientierte Theoretische Physik
