



Doctoral Thesis

Three-dimensional reconstruction of dendritic and doublon structures, morphological transitions and comparison with computer simulations

Author(s):

Singer, Herman Marius

Publication Date:

2004

Permanent Link:

<https://doi.org/10.3929/ethz-a-004833311> →

Rights / License:

[In Copyright - Non-Commercial Use Permitted](#) →

This page was generated automatically upon download from the [ETH Zurich Research Collection](#). For more information please consult the [Terms of use](#).

Diss. ETH No. 15627

**Three-dimensional reconstruction of
dendritic and doublon structures,
morphological transitions and comparison
with computer simulations**

A dissertation submitted to the

**SWISS FEDERAL INSTITUTE OF TECHNOLOGY
ZURICH**

for the degree of
Doctor of Natural Science

presented by

Herman Marius Singer
Dipl. Phys. ETH
born on the 5th of September 1977
citizen of Basel (BS)

accepted on the recommendation of

Prof. Dr. H. R. Ott, examiner
Dr. G. Faivre, Directeur de Recherches CNRS, coexaminer
Prof. Dr. J. H. Bilgram, coexaminer

Zurich, 2004

Abstract

In our experiments, we investigate *in situ* three-dimensional crystals during free growth into supercooled melt. The supercooling ΔT of the melt is the only control parameter and determines the morphology of the crystal. It can be varied in the range of $40\text{mK} \leq \Delta T \leq 220\text{mK}$, corresponding to about $0.6 \cdot 10^{-3} \leq \Delta \leq 4 \cdot 10^{-3}$ in dimensionless units. Dendritic, seaweed and doublon morphologies have been observed.

We present a method of reconstructing the three-dimensional shape of an experimentally grown xenon dendrite based on a hybrid approach of sophisticated image processing and measured parameters of dendrites. The reconstruction is quantitative and reveals more details than conventional techniques. We can prove that the development of the fourfold symmetry of the fins is not merely a result of a modulating perturbation but an intrinsic structure formation process. A quantitative investigation of the dendrite surface and volume shows in both cases a power law dependence on distance from the tip and temporal evolution. Three-dimensional doublons are studied experimentally and are reconstructed. A hyperbolic dependence of the width of the growth channel on supercooling is found. The temporal evolution of doublons and the relaxation to dendritic growth is analyzed and quantitatively reconstructed.

Dendritic growth from a pure substance into supercooled melt was simulated in two- and three-dimensional calculations of two different phase field models ([A.A. Wheeler, B.T. Murray and R.J. Schaefer, *Physica D* 66, 243 (1993)] and [A. Karma and W.-J. Rappel, *Phys. Rev. E* 57, 4323 (1998)]). Morphology diagrams of supercooling versus anisotropy of the surface tension for 2D and 3D simulations are presented and compared with the results of experiments and analytical studies. For high anisotropies the borderline between dendrites and seaweed in the 2D case is similar to analytical predictions, however discrepancies are found for low anisotropies: in phase field simulations the borderline behaves convex opposed to the concave borderline found in analytical calculations. The borderlines for 2D and 3D structures behave qualitatively similar however in the 3D case the borderline is shifted to higher anisotropies. In 2D a distinct domain of doublons is found, in 3D such a domain has not been observed. However by using special initial conditions doublons can be simulated in 3D as well.

Fractal dimensions (contour and area) have been determined by correlation method and an optimized box-counting algorithm. We present a technique to detect hidden length scales in experimental structures and find these length scales to depend on morphology.

In order to describe quantitatively the transition between morphologies a new morphology classification scheme based on rotational, scaling and translation (RST) invariant representations is presented. With this pattern matching method it is possible to analyze morphological transitions in the evolution of the crystal quantitatively as paths in the morphology space.

Kurzfassung

In unseren Experimenten untersuchen wir *in situ* dreidimensionale Kristalle, während sie in eine reine Schmelze aus unterkühltem Xenon hineinwachsen. Die Unterkühlung ΔT der Schmelze ist der einzige Kontrollparameter des Systems und bestimmt die Wachstumsmorphologie des Kristalls. Die Unterkühlung kann im Bereich $40\text{mK} \leq \Delta T \leq 220\text{mK}$, was in dimensionslosen Einheiten $0.6 \cdot 10^{-3} \leq \Delta \leq 4 \cdot 10^{-3}$ entspricht, variiert werden. Es wurden dendritische, Seaweed- und Doublon-Morphologien beobachtet.

Es wurde eine neue Methode zur Rekonstruktion der dreidimensionalen Form eines experimentell gewachsenen Xenondendriten entwickelt. Die Methode besteht aus einer Kombination aus komplexer Bildverarbeitung und der Ausmessung von Wachstumsparametern des Dendriten. Diese Rekonstruktion ist quantitativ und ermöglicht genauere Auflösungen als konventionelle Verfahren. Es war möglich zu zeigen, dass das Wachstum der vierfach-symmetrischen Rippen nicht nur das Resultat einer aufmodulierten Störung, sondern eine intrinsische Eigenschaft des Strukturbildungsprozesses ist. Eine quantitative Untersuchung der Dendritenoberfläche und des Volumens zeigt in beiden Fällen eine Potenzabhängigkeit von der Distanz zur Spitze und der zeitlichen Entwicklung. Dreidimensionale Doublonen wurden experimentell erzeugt und mit Hilfe dieser neu entwickelten Methode rekonstruiert. Der Wachstumskanal der Doublonen zeigt eine hyperbolische Abhängigkeit von der Unterkühlung auf. Die zeitliche Entwicklung der Doublonen und deren Relaxation zu dendritischem Wachstum wurde analysiert und quantitativ rekonstruiert.

Dendritisches Wachstum einer reinen Substanz in ihre unterkühlte Schmelze wurde mittels zweier verschiedener Phasenfeld-Modelle in zwei und drei Dimensionen simuliert [A.A. Wheeler, B.T. Murray und R.J. Schaefer, *Physica D* 66, 243 (1993)] und [A. Karma und W.-J. Rappel, *Phys. Rev. E* 57, 4323 (1998)]. Es wurden Morphologiediagramme in den Parametern Unterkühlung gegen Anisotropie der Oberflächenspannung für 2D und 3D Simulationen errechnet und mit experimentellen Resultaten und analytischen Rechnungen verglichen. Für hohe Anisotropien ist die Morphologie-Grenze für 2D Strukturen zwischen Seaweed und Dendriten ähnlich zu analytischen Vorhersagen, es wurden jedoch Diskrepanzen für kleine Anisotropien gefunden: In den Phasenfeldsimulationen verhält sich die Morphologie-Grenze konvex im Gegensatz zu den analytischen Rechnungen, die eine rein konkave Grenze vorhersagen. Die Morphologie-Grenzen für 2D und 3D Strukturen verhalten sich qualitativ ähnlich, im dreidimensionalen Fall verschiebt sich die Grenze jedoch in Richtung höherer Anisotropien. Im zweidimensionalen Fall wurde eine Parameterregion gefunden, wo sich Doublonen bildeten. Im dreidimensionalen Fall wurde keine solche Region beobachtet. Es war jedoch, unter Verwendung spezieller Anfangsbedingungen, möglich, Doublonen auch in drei Dimensionen zu simulieren.

Für die experimentell gemessenen Daten verschiedener Wachstumsmorphologien wurde die fraktale Dimension der Kontur und der Projektionsfläche mittels Korrelations- und Boxdimension bestimmt. Ein neuer Algorithmus wurde entwickelt,

welcher es ermöglicht, in scheinbar skaleninvarianten Daten versteckte Längenskalen zu finden. Die Analyse dieser versteckten Skalen zeigte, dass sie von der Morphologie abhängen.

Um Morphologieübergänge quantitativ zu beschreiben, wurde ein neues Morphologie-Klassifikationschema entwickelt, das auf einer Darstellung der Daten basiert, die invariant ist unter Rotation, Skalierung und Translation (RST). Mit dieser Musterrerkennungsmethode war es möglich morphologische Übergänge in der Entwicklung des Kristalls zu erfassen und als quantitative Pfade im Morphologieraum darzustellen.