第 48 卷第 1 期　　硅　酸　盐　学　报　　Vol. 48，No. 1
2020 年 1 月　　JOURNAL OF THE CHINESE CERAMIC SOCIETY　　January，2020
http://www.gxyb.cbpt.cnki.net　　**DOI**：10.14062/j.issn.0454-5648.20190159

基于 LBM-CA 耦合模型的定向凝固多晶硅小平面枝晶生长数值模拟

马　旺，陈洪建，王　佳，李　日
(河北工业大学材料科学与工程学院，天津 300130)

摘　要：为了更好的研究高各向异性小平面枝晶生长。提出了一种综合考虑动力学各向异性和界面能各向异性的小平面枝晶生长的格子 Boltzmann 方法-元胞自动机(LBM-CA)耦合模型，对硅小平面枝晶的生长过程及生长形状进行模拟；验证所采用的新动力学各向异性方程的正确性；研究了界面能各向异性、动力学各向异性和过冷度对小平面枝晶生长的影响。结果表明：小平面枝晶较非小平面枝晶表现出更强的各向异性；界面能各向异性系数的增大，小平面枝晶生长的各向异性显著增大，生长速率变化、部分取向缺失；过冷度的增大，硅晶体由小平面晶粒生长变为小平面枝晶，其各向异性也显著增强，取向缺失增加，棱角更加明显，二次枝晶臂生长速率加快；动力学各向异性增大，二次枝晶臂生长速率、长度和数量均有增加。

关键词：多晶硅；数值模拟；小平面枝晶；格子 Boltzmann；元胞自动机
中图分类号：TQ174.75　　**文献标志码**：A　　**文章编号**：0454–5648(2020)01–0140–07
网络出版时间：2019–08–29



Numerical Simulation of Small Plane Dendrite Growth in Directionally Solidified Polysilicon Based on LBM-CA Coupling Model

MA Wang, *CHEN Hongjian*, *WANG Jia*, *LI Ri*
(School of Materials Science and Engineering, Hebei University of Technology, Tianjin 300130)

Abstract: To investigate the growth of high anisotropic planar dendrites, the growth process and the shape of silicon planar dendrites considering both dynamic anisotropy and interfacial energy anisotropy were simulated by a lattice Boltzmann method coupled based on a cellular automata (LBM-CA) model. The related dynamic anisotropic equation was proposed and verified. The effects of interfacial energy anisotropy, dynamic anisotropy and undercooling on the growth of planar dendrites were analyzed. The results show that the planar dendrites exhibit more intense anisotropy than non-planar dendrites, the anisotropy of planar dendrites increases with the increase of interfacial energy anisotropy coefficient, and the anisotropy of planar dendrites increases significantly with the growth rate and partial orientation loss. The planar dendrites grow, and the anisotropy and orientation loss increase with the increase of undercooling. The growth rate, length and number of secondary dendrite arms increase with the increase of kinetic anisotropy.

Keywords: polysilicon; numerical simulation; small plane dendrite; lattice Boltzmann; cellular automaton

传统的基于单一模型的宏观模拟很难得到晶体生长的微观组织信息。小平面枝晶的生长模型于 1960 年提出[1–2]。Fujiwara 等[3]通过原位观察法观察到硅小平面枝晶的生长过程并提出相应的生长模型。Lin 等[4]用相场法模拟孪晶相关小平面枝晶的生长。2008 年 Chen 等[5]用相场法模拟硅凝固过程中各向异性、过冷和耦合参数对枝晶形貌的影响，结果显示，采用正规化相场模型可得到小平面枝晶的形状，当各向异性参数 $\gamma \leqslant 0.13$ 时，枝晶稳态尖端速度达到一个稳定值，各向异性值增大，稳态尖端速度减小，尺寸变小。耦合参数增大，枝晶的小平面逐渐减小，该结论与 Wulff 理论结果相吻合。该

收稿日期：2019–03–15。　修订日期：2019–06–20。
基金项目：国家自然科学基金项目(51475138)。
第一作者：马　旺(1993—)，男，硕士。
通信作者：陈洪建(1966—)，男，博士，教授。
　　李　日(1966—)，男，博士，教授。

Received date: 2019–03–15.　**Revised date:** 2019–06–20.
First author: MA Wang (1993–), male, Master.
E-mail: 2879064176@qq.com
Correspondent author: CHEN Hongjian (1966–), male, Ph.D., Professor.
LI Ri (1966–), male, Ph.D., Professor.
E-mail: chhj@hebut.edu.cn; sdzllr@163.com

模型通过耦合传统输运方程(Navier-Stokes 方程)实现，存在问题是：边界条件复杂、计算效率低和模拟失真。

格子 Boltzmann (LBM)方法是近几十年出现，并且使用和改进最迅速的方法。它基于分子动力学的理论来构建其特有的离散模型，和传统的非线性传输模型相比，有很多特有的优势。该法通过将符合物理规律的演化机制转化为形式简单、求解方便的线性方程组，通过附加松弛过程模拟复杂的非线性问题，极大地提高运算效率，具有天然的并行性，便于大规模的模拟和计算，能够处理复杂边界条件，求解宏观多物理场[6–8]。元胞自动机(CA)是一种随机性模拟方法，广泛应用于包括通信、信息传递、计算、构造、复制、竞争与进化等领域。现被很好的使用到晶体模拟领域[9–13]。本模拟通过建立小平面枝晶的 LBM-CA 耦合模型，模拟小平面枝晶的生长过程。相较于之前相场法，本模型计算效率高、并行性好。基本可以满足对工业生产级别的模拟。

1　模型的描述及数值计算方法

1.1　小平面枝晶生长 LBM 模型

采用单松弛时间 Lattice Bhatnagar-Gross-Krook (LBGK)方法的 D2Q9 模型[14]。考虑到潜热源项和浓度源项，用于计算速度、温度和溶质含量场分布函数的粒子时空演化方程式(1)～式(3) [15]如下：

$$f_i(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{e}_i\Delta t,t+\Delta t)= f_i(\boldsymbol{r},t)+\frac{1}{\tau_{\mathrm{f}}}\left(f_i^{\mathrm{eq}}(\boldsymbol{r},t)-f_i(\boldsymbol{r},t)\right)+F_i \tag{1}$$

$$h_i(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{e}_i\Delta t,t+\Delta t)= h_i(\boldsymbol{r},t)+\frac{1}{\tau_{\mathrm{t}}}\left(h_i^{\mathrm{eq}}(\boldsymbol{r},t)-h_i(\boldsymbol{r},t)\right)+H_i \tag{2}$$

$$\mathrm{g}_i(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{e}_i\Delta t,t+\Delta t)= g_i(\boldsymbol{r},t)+\frac{1}{\tau_{\mathrm{c}}}\left(g_i^{\mathrm{eq}}(\boldsymbol{r},t)-g_i(\boldsymbol{r},t)\right)+G_i \tag{3}$$

式中：r 和 t 分别为位置和时间；Δt 为时间步长；e_i 是 i 方向的速度；τ_{f}、τ_{t} 和 τ_{c} 分别为流场、温度场和溶质场的松弛时间，松弛时间表示每个粒子的分布函数(f_i、h_i 和 g_i)接近粒子平衡分布函数(f_i^{eq}、h_i^{eq} 和 g_i^{eq})的速度水平，f_i、h_i 和 g_i 分别表示速度、温度和溶质含量场的分布函数，f_i^{eq}、h_i^{eq} 和 g_i^{eq} 分别表示速度、温度和溶质含量场的平衡分布函数。F_i、H_i 和 G_i 分别为外力、热量和浓度的源项，外力源项 F_i 表示颗粒间的相互作用力，热源项 H_i 和浓度源项 G_i 为多晶硅生长过程中的潜热释放和溶质再分配。

1.2　小平面枝晶生长 CA 模型

模拟小平面枝晶的关键问题是小平面枝晶生长具有很强的各项异性。其各向异性体现在动力学各和界面能各向异性上。函数的极值将在π/2 和π/4 处取得。

界面能各向异性需考虑曲率过冷度。本模型中固液界面的总过冷度包括热力学和曲率过冷。见式(4)：

$$\Delta T=T_{\mathrm{L}}-T+\Gamma\cdot K\cdot a_{\mathrm{s}}(n) \tag{4}$$

式中：T_{L} 为液相线温度；T 为元胞格点温度；Γ为 Gibbs-Thomson 系数，可由$\gamma_{\mathrm{SL}}/\Delta S_{\mathrm{f}}$($\gamma_{\mathrm{SL}}$、$\Delta S_{\mathrm{f}}$ 分别为固液界面能和熵变)得出；K 为界面曲率，由方程式(5) [16]得：

$$K=\left[\left(\frac{\partial f_{\mathrm{s}}}{\partial x}\right)^2+\left(\frac{\partial f_{\mathrm{s}}}{\partial y}\right)^2\right]^{-3/2}\cdot \left[2\frac{\partial f_{\mathrm{s}}}{\partial x}\frac{\partial f_{\mathrm{s}}}{\partial y}\frac{\partial^2 f_{\mathrm{s}}}{\partial x\partial y}-\left(\frac{\partial f_{\mathrm{s}}}{\partial x}\right)^2\frac{\partial^2 f_{\mathrm{s}}}{\partial y^2}-\left(\frac{\partial f_{\mathrm{s}}}{\partial y}\right)^2\frac{\partial^2 f_{\mathrm{s}}}{\partial x^2}\right] \tag{5}$$

其中：f_{s}表示固相率；$a_{\mathrm{s}}(n)$为界面能各向异性函数，见式(6)：

$$a_{\mathrm{s}}(n)=\left(\vec{n}_x^{\,n}+\vec{n}_y^{\,n}\right)^{a/n} \tag{6}$$

式中：$\vec{n}_x$ 和 $\vec{n}_y$ 分别为 x 和 y 方向上的界面法向；a 和 n 是参数。

考虑到动力学各向异性，本模拟采用枝晶生长动力学模型(KGT)，在该模型中，生长速度与过冷度之间的关系可由方程(7)求出：

$$v_{\mathrm{e}}=\mu(\varphi)\Delta T^2 \tag{7}$$

式中：v_{e}为生长速率；ΔT 为过冷度；$\mu(\varphi)$为动力学系数方程，由式(8) [17]得：

$$\mu(\varphi)=\bar{\mu}q(\varphi) \tag{8}$$

$\bar{\mu}$ 是动力学系数的角平均值；动力学各向异性的方程 $q(\varphi)$[18]见式(9)

$$q(\varphi)=\left\{2-\left[1-\left(\frac{\cos(4\varphi)-1}{2}\right)^{\delta}\right]\right\}^{\lambda} \tag{9}$$

式中：φ为局部生长方向与 x 轴之间的夹角；δ和λ均为参数。

充分过冷时，一但熔体中生成晶核，将依赖于晶体取向，以择优生长的方式进行生长。其生长速率可由式(7)得出。其水平投影长度 $l(t)$可由式(10) [19]得到：

$$l(t)=\frac{\int_t^{t+\delta t}v_{\mathrm{e}}\left(\Delta T(t)\right)\mathrm{d}t}{\cos\theta+\sin\theta} \tag{10}$$

式中：δt 为时间步长。凝固分数 $f_s(t)$可由式(11)求得：

$$f_s(t)=\frac{l(t)}{\delta_x} \tag{11}$$

式中：δ_x 为相邻元胞间的距离。固液界面超过液相元胞中心线时，该元胞发生转变，并获取与固相元胞相同的晶体取向。

CA 模型有 3 种状态的元胞：固、液和界面。元胞以温度、溶质浓度、晶体取向和凝固分数来表征。界面元胞的凝固分数达到 1 时，属性变为固相。固相元胞将捕获周围液相元胞，使其转变为界面元胞。本模型采用随机之字形捕获规则[12]，以减弱网格自身引入的各向异性问题。

1.3 LBM-CA 耦合模型

本模拟采用格子 Boltzmann–元胞自动机(LBM–CA)耦合的方法模拟了硅小平面枝晶的生长，其中使用 LBM 进行流场、温度场的耦合计算，使用 CA 方法计算晶体的生长过程。二者使用同一套网格。LBM 对整个模拟计算的区域进行温度场等多物理场的计算和模拟。定义所模拟区域的相关物理量。使用 CA 方法对形核点周围的元胞进行捕获和转化，并且赋予被捕获元胞与捕获元胞相同的晶体取向，进而实现小平面枝晶的生长。

2 结果与讨论

硅本身的物理参数对模拟的小平面枝晶形貌有着很大的影响。其中，界面能各向异性、动力学各向异性凝固潜热以及过冷度等，都会影响小平面枝晶的生长及形貌。界面能各向异性增强，生长速率增大、部分取向缺失；过冷度的增大，硅晶体有小平面晶粒生长变为小平面枝晶，各向异性显著增强，取向缺失增加，棱角更加明显，二次枝晶臂生长速率加快；动力学各向异性增大，二次枝晶臂长度和数量均有增加。

2.1 CA 模拟小平面枝晶生长的验证

图 1 为动力学各向异性方程 $q(\varphi)$随角度 φ 的变化。式(9)在 45°和 135°取得最小值，在 0°、90°和 180°取得最大值，最小值的宽度由参数 δ 控制。由图 1 可以看出最小值分布范围，缺失取向，各向异性随出 δ 增大而增大。其中λ值为 1。

在四周为绝热的模拟区域中设置 1 个圆形晶核，过冷度为 10 K 时，对该晶核的生长进行了模拟的结果，如图 2 所示，该图为局部四分之一的界面随时间的演变，表明了生长形貌的变化。由图 2 可见，{110}面族有小平面形成，是典型的高各向异性材料枝晶生长的特征。从而，该方程的效果得到验证。

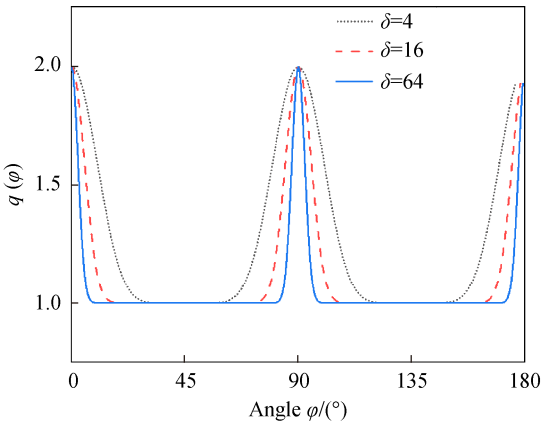


图 1 动力学各向异性方程 $q(\varphi)$

Fig. 1 Kinetic anisotropy equation $q(\varphi)$

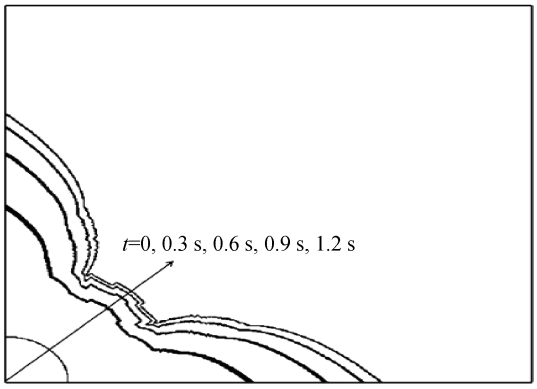


图 2 二维枝晶生长界面随时间变化示意图

Fig. 2 Schematic diagram of time-dependent of two-dimensional dendrite growth interface

2.2 硅小平面枝晶生长形状

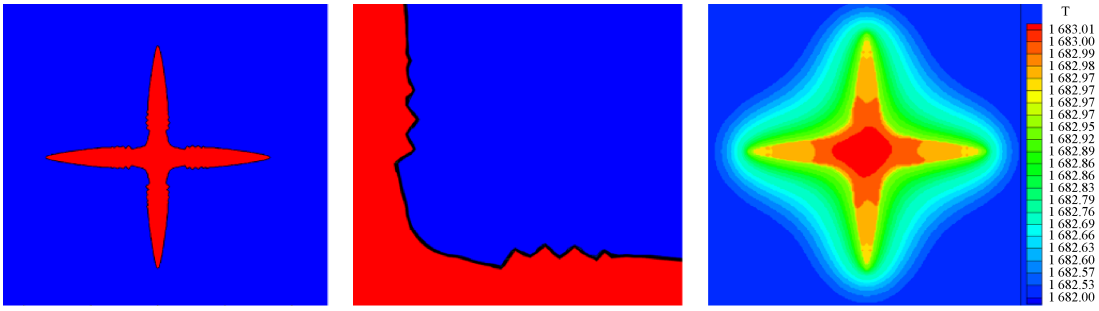
本模拟区域大小为 500 μm×500 μm，初始设定 r=30 μm 圆形晶核于过冷熔体中心，初始条件由式(12)给出：

$$\begin{cases}(X-250)^2+(Y-250)^2\leqslant 30^2 & (\phi=2,\ \Delta T=0\ \mathrm{K})\\ (X-250)^2+(Y-250)^2>30^2 & (\phi=0,\ \Delta T=30\ \mathrm{K})\end{cases} \tag{12}$$

式中：X 为[100]方向；Y 为[010]方向；ϕ代表元胞状态，ϕ=0 代表液相，ϕ=1 代表固液共存，ϕ=2 代表固相。4 个区域边界采用绝热边界条件。

图 3 为硅小平面枝晶在 t=0.12 s 时刻的生长形状。图 3a 为硅小平面枝晶生长形态。从图 3a 可见，小平面枝晶的各向异性更强，在{110}面族出现取向缺失。图 3b 为小平面枝晶局部形貌。从图 3 b 可以看出典型的小平面特征，且与文献[5]报道的枝晶生长形貌相似。图 3c 为生长过程温度

场。其对应于图 3a 硅小平面枝晶生长时刻的温度场，由图 3c 可以得出，温场形状与小平面枝晶形状相似，能很好地反应出其生长特点，且等温线为凹形。



(a) Dendrite morphology　　(b) Local morphology of faceted dendrites　　(c) Temperature field

图 3　硅小平面枝晶在 0.12 s 时刻生长形状

Fig. 3　Silicon faceted dendrite growth shape at 0.12 s moment

2.3　界面能各向异性对小平面枝晶生长的影响

界面能各向异性是材料自身所特有的物理性能，当材料确定后，其各向异性的大小也会确定。界面能各向异性强度对界面形态有显著影响。当 n<3.22，各向异性较弱，枝晶为稳定形态是较为平滑的；反之，当 n>3.22 时，枝晶界面会出现界面取向缺失，进一步生长形成枝晶外貌有明锐棱角的小平面枝晶。

图 4 为界面能各向异性强度从 n=3.5 到 n=15 的过程中硅小平面晶粒界面形貌的结果对比图。其中，固相晶核的温度为 1 683.0 K，熔体的过冷度为 3.3 K。边界选择绝热条件。图 4a～图 4e 中生长时间为 t =0.04 s。

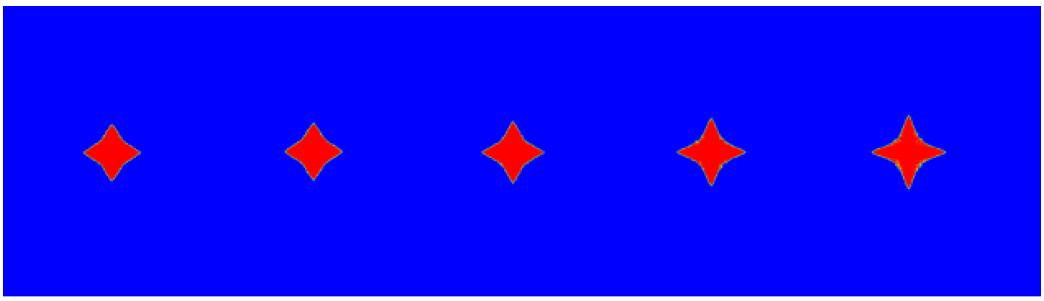
从图 4a 可以看出，当 n＝3.5 时，界面能各向异性较弱，且{110}面接很轻微的凹陷，各向异性较小。界面能各向异性变大时，竖直和水平方向的生长相较于其他方向处于优势地位，且优势方向的生长速率增大。劣势方向生长速率减缓，取向缺失进一步增加，晶体自身的各向异性更加明显。当 n＝9.0 时，小平面尺寸非常接近，并且固相缺失的晶体取向进一步减少，一次枝晶臂更加尖锐(图 4c)。当 n＝15.0 时，晶体生长为小平面枝晶并在枝晶臂间形成圆弧(图 4e)。

图 5a 中纵坐标值为晶粒尖端过冷度。从图 5 a 可以看出，在不同界面能各向异性强度下随着时间的延长晶粒尖端过冷度逐渐减小并且趋于平稳。这是由于凝固初期，凝固潜热的释放，y 轴正方向枝晶尖端的温度增加，硅晶体尖端的温度趋于稳定；凝固后期，绝热边界条件导致热量不能散出，使枝晶尖端过冷度进一步降低并趋于平稳。从图 5b 可见，枝晶的长度随时间基本成线性增加，枝晶长度随界面能各向异性增加而增加。

2.4　动力学各向异性参数δ对小平面枝晶生长形貌的影响

小平面枝晶的生长与动力学各向异性的强弱程度密切相关，动力学各向异性的强弱可以直接影响小平面枝晶的形貌特点。

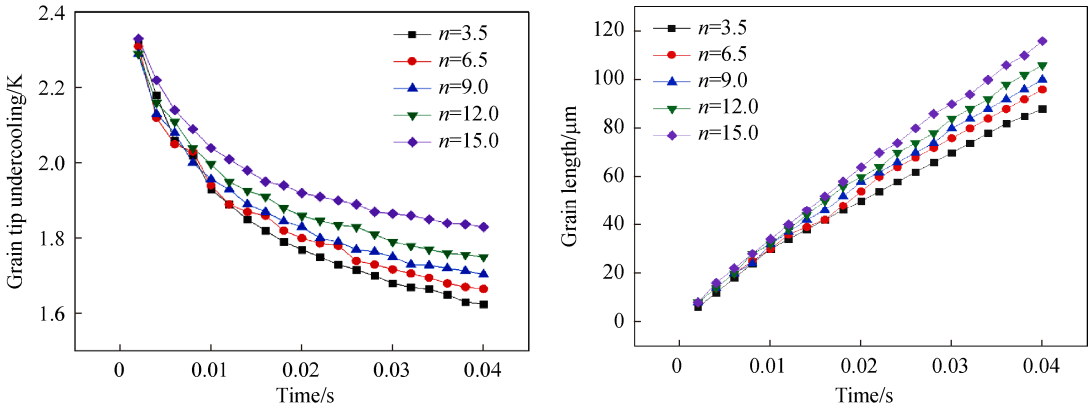
由图 6a～图 6c，为动力学各向异性参数δ=8、δ=64、δ=256 时，其他条件相同，　t =0.07 s 时，小平面枝晶的形貌特征。由图可见，当参数δ的取值



(a) n=3.5　　(b) n=6.5　　(c) n=9.0　　(d) n=12.0　　(e) n=15.0

图 4　枝晶界面生长形状

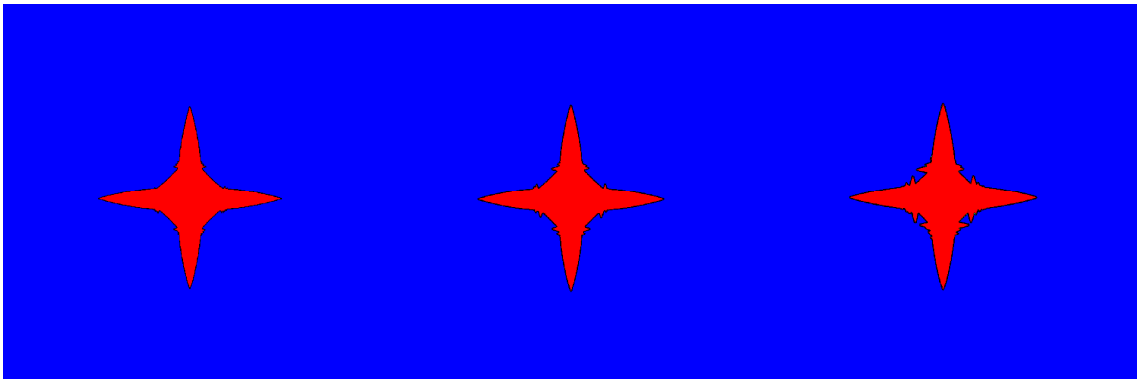
Fig. 4　Dendrite interface growth shape



(a) Undercooling of the grain tip (b) Grain length

图 5 界面能各向异性对 y 轴正方向晶粒尖端过冷度和晶粒长度的影响

Fig. 5 Influence of interfacial anisotropy on the undercooling and grain length of the grain in the positive y-axis direction



(a) δ=8 (b) δ=64 (c) δ=256

图 6 不同动力学各向异性参数(δ)下枝晶生长界面形态

Fig. 6 Interfacial morphology of dendrite growth under different kinetic anisotropic parameters(δ)

增大的同时，枝晶的各向异性明显增强，二次枝晶的数量和大小都有了较为显著的增加。出现该情形的原因是由于动力学各向异性的增强，使得枝晶在优势方向上的生长处于优势地位，生长速度也相应的增大，从而体现为二次枝晶的生长。

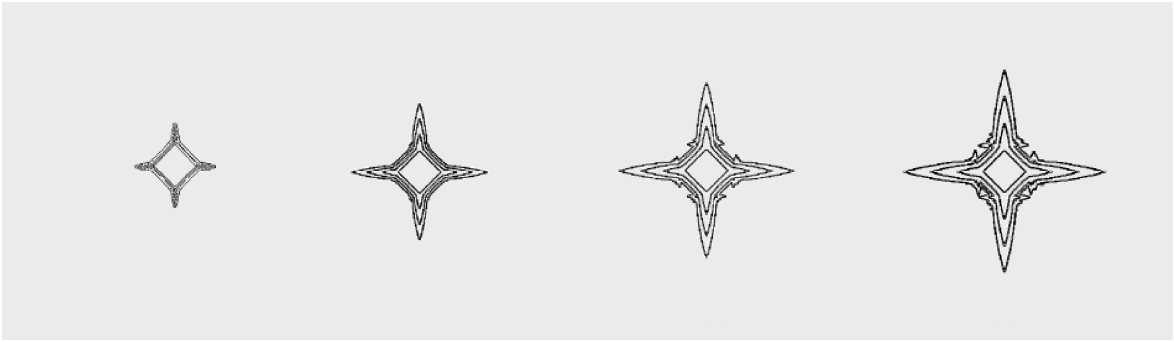
2.5 过冷度对小平面枝晶生长的影响

初始过冷度对硅小平面枝晶生长的形貌会产生很大影响。本节讨论纯硅晶体在 15～45 K 过冷条件下的固液界面生长形态，暂不考虑孪晶对晶体生长的影响。

图 7 为生长时间 t = 0.090 0 s 时的单晶硅固液界面形态。输出的间隔 t=0.022 5 s。由图 7 可见，随过冷度增加，硅晶体由小平面生长转变为小平面枝晶生长。随着时间推移在水平和竖直方向上枝晶生长速率和生长长度增大，出现典型的小平面枝晶形态，并且在ΔT =39 K 时出现侧枝晶分支。

进一步探讨枝晶尖端温度分布及枝晶生长速度和初始过冷度之间的关系，图 8 为在不同过冷度下生长过程中枝晶尖端的过冷度以及枝晶长度的关系。图 8a 为小平面枝晶的枝晶尖端过冷度与模拟初期所给定的过冷度成正比关系。从图 8a 可以看出，硅小平面枝晶的枝晶尖端稳定性与模拟所设的初始过冷度有直接的关系，所设置的初始过冷度越大，则对应的小平面枝晶尖端的稳定性就越差。当ΔT =15 K 时，枝晶尖端过冷较为稳定且缓慢减小；当ΔT =45 K 时，枝晶尖端的过冷度随着凝固时间的延长呈现出不断起伏的不稳定结果。从图 8b 可以看出，随着凝固时间的延长，枝晶长度呈线性增加，符合实际情况。当模拟的所给的初始过冷度增大时，图线的斜率增加，即枝晶的生长速度加快。通过图 8b 可得对应的枝晶生长速度分别约为 0.720、1.422 和 2.537 mm/s。

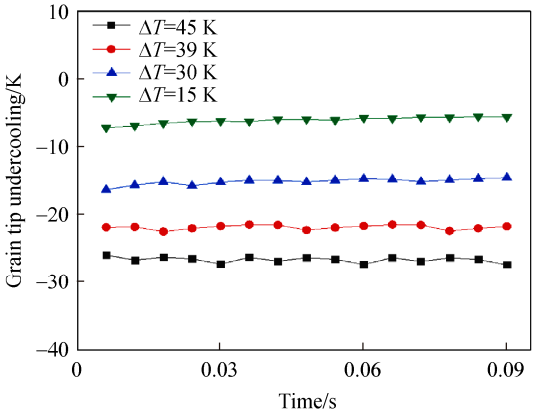
利用 CA 耦合 LBM 方法模拟出的小平面枝晶生长结果与实际低过冷度下硅凝固表面形态基本一致[20]。



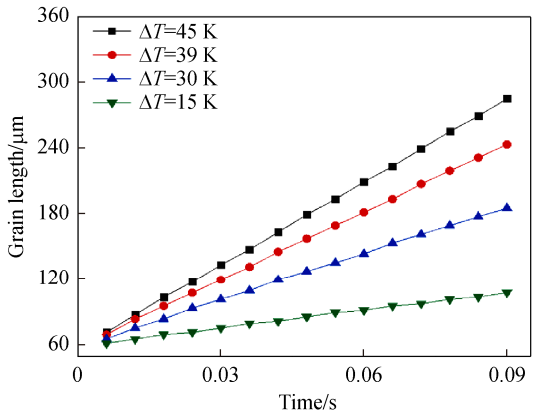
(a) ΔT = 15 K　(b) ΔT = 30 K　(c) ΔT = 39 K　(d) ΔT = 45 K

图 7　不同过冷度(ΔT)下枝晶生长界面形态

Fig. 7　Interface morphology of dendrite growth under different undercooling(ΔT)



(a) Undercooling of the grain tip in the positive *y*-axis



(b) Grain length

图 8　初始过冷度对 *y* 轴正方向晶粒尖端过冷度和晶粒长度的影响

Fig. 8 Effect of initial undercooling on the undercooling and grain length of the grain in the positive *y*-axis direction

3　结论

建立了高各向异性硅小平面枝晶生长的 LBM-CA 耦合模型，并对该模型进行验证，证明所建立模型的正确性。分析枝晶形貌演变与温场，并讨论界面能各向异性、动力学各向异性和初始过冷度对小平面枝晶形貌的影响。

1) 小平面枝晶与非小平面枝晶不同，其表现出更强的各向异性。枝晶{110}方向有典型小平面和取向缺失，有二次枝晶臂出现。在负温梯下生长，等温线呈凹形。

2) 界面能各向异性对枝晶形貌有显著影响，界面能各向异性增大，晶体在特定方向上的生长优势明显，生长速率增加，非优势生长方向晶体缺失取向增加。晶粒尖端过冷度分布拟合曲线和晶粒长度变化曲线验证了其合理性。

3) 过冷度的增大，硅晶体由小平面晶粒生长为小平面枝晶，出现小平面，缺失取向增加，棱角更加明显，二次枝晶臂生长速率加快。过冷度增大，界面温度不稳定，生长速率加快。

本模拟可以较为准确再现小平面枝晶的实际生长过程，提供可视的生长过程。由于硅材料不透明所以，实验观察很难得到连续的生长过程。本文对于过冷度、各向异性等的讨论和模拟计算，可以对实际的晶体生长实验给出合理的理论指导。

在实际晶体生长实验中，过冷度对小平面枝晶的影响很难在其生长过程中观察以及体现出。而本模拟则给出了过冷度对小平面枝晶的影响以及其进一步的影响趋势，这就能对实际实验给出较为精确的指导。硅晶体生长的实际实验的实验周期长，消耗大，实验与模拟结合，可以在达到研究目的的前提下大大节约成本。

参考文献:

[1] HAMILTON D R, SEIDENSTICKER R G. Propagation mechanism of germanium dendrites[J]. J Appl Phys, 1960, 31(7): 1165–1168.

[2] WAGNER R S. On the growth of germanium dendrites[J]. Acta Metall, 1960, 8(1): 57–60.

[3] FUJIWARA K, MAEDA K, USAMI N, et al. Growth mechanism of

Si-faceted dendrites[J]. Phys Rev Lett, 2008, 101(5): 055503.

[4] LIN H K, LAN C W. Three-dimensional phase field modeling of silicon thin-film growth during directional solidification: Facet formation and grain competition[J]. J Cryst Growth, 2014, 401(9): 740–747.

[5] ZHI C, CHEN C L, HAO L M. Numerical simulation of facet dendrite growth[J]. Trans Nonferrous Met Soc China, 2008, 18(4): 938–943.

[6] YIN H, FELICELLI S D, WANG L. Simulation of a dendritic microstructure with the lattice Boltzmann and cellular automaton methods[J]. Acta Mater, 2011, 59(8): 3124–3136.

[7] ESHRAGHI M, FELICELLI S D, JELINEK B. Three dimensional simulation of solutal dendrite growth using lattice Boltzmann and cellular automaton methods[J]. J Cryst Growth, 2012, 354(1): 129–134.

[8] 桂云鹏. 基于LB-CA的耦合模型模拟铝合金在对流中的枝晶生长[D]. 南昌: 南昌大学) 2014.
GUI Yunpeng. Simulation of dendrite growth in convection of aluminium alloy based on LB-CA coupling model (in Chinese, dissertation). Nanchang: Nanchang University, 2014.

[9] ZHAO Y, QEN R S, CHEN D F. A three-dimensional cellular automata model coupled with finite element method and thermodynamic database for alloy solidification[J]. J Cryst Growth, 2013, 377(1): 72–77.

[10] CHAHOUND M, FEHLY D, WEHMANN H H, et al. Cellular-automata-based simulation of anisotropic crystal growth[J]. J Cryst Growth, 2000, 220(4): 471–479.

[11] ZINOVIEVAa O, ZINOVIEV A, PLOSHIKHIN V, et al. A solution to the problem of the mesh anisotropy in cellular automata simulations of grain growth[J]. Comput Mater Sci, 2015, 108: 168–176.

[12] WEI L, LIN X, WANG M, et al. A cellular automaton model for the solidification of a pure substance[J]. Appl Phys A, 2011, 103(1): 123–133.

[13] ZHAO Y, BILLINGS S A, COCA D. Cellular automata modelling of dendritic crystal growth based on Moore and von Neumann neighbourhoods[J]. Int J Model Ident Control, 2008, 6(2): 119–125 (117).

[14] ESHRAGHI M, JELINEK B, FELICELLI S D. Large-scale three-dimensional simulation of dendritic solidification using lattice Boltzmann method[J]. J Met, 2015, 67(8): 1786–1792.

[15] SUN D K, ZHU M F, PAN S Y, et al. Lattice Boltzmann modeling of dendritic growth in forced and natural convection[J]. Comput Math Appl, 2011, 61(12): 3585–3592.

[16] PAN S, ZHU M. A three-dimensional sharp interface model for the quantitative simulation of solutal dendritic growth[J]. Acta Mater, 2010, 58(1): 340–352.

[17] UEHARA T, SEKERKA R F. Phase field simulations of faceted growth for strong anisotropy of kinetic coefficient[J]. J Cryst Growth, 2003, 254(1/2): 251–261.

[18] LIN H K, CHEN H Y, LAN C W. Phase field modeling of facet formation during directional solidification of silicon film[J]. J Cryst Growth, 2014, 385(1): 134–139.

[19] LIAN Q, LIU W, LI R, et al. Numerical simulation of multi-crystalline silicon crystal growth using a macro–micro coupled method during the directional solidification process[J]. Appl Sci, 2016, 7(1): 21–26.

[20] AOYAMA T, KURIBAYASHI K. Influence of undercooling on solid/liquid interface morphology in semiconductors[J]. Acta Mater, 2000, 48(14): 3739─3744.