第 49 卷第 9 期
2021 年 9 月

硅 酸 盐 学 报
JOURNAL OF THE CHINESE CERAMIC SOCIETY

Vol. 49，No. 9
September，2021

http://www.gxyb.cbpt.cnki.net

**DOI**：10.14062/j.issn.0454-5648.20210023

# 基于 CA-LBM 三维模型的硅小平面枝晶生长数值模拟

杜 森[1]，马 旺[2]，陈 辉[1]，李 日[1]，陈洪建[1]

(1. 河北工业大学材料科学与工程学院，天津 300401；2. 石家庄海山实业发展总公司，石家庄 050208)

**摘 要**：为了解析硅小平面枝晶生长机制，真实再现其生长过程，建立了三维的元胞自动机-格子 Boltzmann 方法(CA-LBM)耦合模型，通过元胞自动机计算硅枝晶的生长，通过格子 Boltzmann 方法计算硅晶体凝固过程的温度场，通过硅晶体生长过程中释放出的凝固潜热将二者耦合，并引入高各向异性函数，对硅三维小平面枝晶的生长进行了数值模拟。分析了界面能各向异性及初始过冷度对三维小平面硅枝晶形貌的影响。结果表明：三维硅小平面枝晶具有很强的各向异性，三维模型能更真实准确地模拟硅小平面枝晶的生长。

**关键词**：三维数值模拟；硅小平面枝晶；格子 Boltzmann 方法；元胞自动机
**中图分类号**：TQ127.2　　**文献标志码**：A　　**文章编号**：0454–5648(2021)09–1964–06
**网络出版时间**：2021–07–23



## Numerical Simulation of Silicon Facet Dendrite Growth Based on CA-LBM 3D Model

*DU Sen*[1], *MA Wang*[2], *CHEN Hui*[1], *LI Ri*[1], *CHEN Hongjian*[1]
(1. School of Materials Science and Engineering, Hebei University of Technology, Tianjin 300401, China; 2. Shijiazhuang Haishan Industrial Development Corporation, Shijiazhuang 050208, China)

**Abstract:** In order to analyze the growth mechanism of silicon faceted dendrite and reproduce its growth realistically, a 3D model based on cellular automaton-lattice Boltzmann method was proposed. The growth of silicon dendrite was simulated *via* the cellular automaton. The temperature field of solidifying silicon crystal was calculated by the lattice Boltzmann method. The cellular automaton model and the lattice Boltzmann method were coupled together by the latent heat of solidification released during the growth of silicon crystals and a high anisotropy function was introduced, thus simulating the growth of 3D silicon faceted dendrite. The effects of interfacial energy anisotropy and initial undercooling on the morphology of 3D silicon faceted dendrite were analyzed. The results show that 3D silicon faceted dendrites have a strong anisotropy. The 3D model can simulate the growth of silicon faceted dendrites more realistically and accurately.

**Keywords:** 3D numerical simulation; silicon faceted dendrite; lattice Boltzmann method; cellular automaton

多晶硅是目前光伏电池的主要材料，多晶硅锭的微观形貌及微观缺陷会严重影响光伏电池效率，因此，探索其微观组织的形成机制是必要的。多晶硅的凝固微观组织为小平面枝晶。

早在 1960 年，就有学者提出了小平面枝晶的生长模型[1–2]，但是高温硅熔体的不透明带来的对其内部凝固过程的观测困难阻碍了更深入的实测研究。2002 年，Fujiwara[3–4]通过搭建的原位观测系统观察到了硅的小平面生长过程，并据此提出了原创的小平面枝晶生长模型，进一步揭示了硅晶体的生长过程，并解释了孪晶在生长中的作用。2005 年，Nagashio[5]分析了不同类型的硅小平面枝晶，提出硅晶体生长形貌随过冷度的增长而发生变化的原因是枝晶在高过冷度下会选择原子粗糙界面以促进原子

收稿日期：2021–01–07。　修订日期：2021–01–23。
基金项目：国家自然科学基金(51975182)；国家自然科学基金(51475138)。
第一作者：杜 森(1994—)，男，硕士研究生。
通信作者：陈洪建(1966—)，男，博士，教授。
　　李 日(1966—)，男，博士，教授。

**Received date:** 2021–01–07.　**Revised date:** 2021–01–23.
**First author:** DU Sen(1994–), male, Master candidate.
**E-mail:** dusen645@foxmail.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

的结合。2008 年，Chen 等[6]用相场法对硅小平面枝晶进行了数值模拟研究，计算再现了完整的枝晶生长形貌，并讨论了凝固过程中各向异性参数、过冷度和相场热场耦合参数的影响。近年来，Chen 和 Liao 等[7–9]用相场法对小平面及小平面枝晶进行了一系列的探索，取得了与实验结果符合较好的模拟结果，更加完善地解释了硅小平面枝晶的生长机制。

采用相场法追踪液固界面，其界面为序参量连续变化的界面，要想提高计算精度，就必须细分界面处的网格，进而延伸细化总体网格尺度，这会大大增加计算量，限制了相场法能够计算的区域尺度。而采用元胞自动机(CA)追踪液固界面，其界面为尖锐界面（界面只有一层网格），因此网格尺度比较相场法要大两个数量级甚至更高，能够大大增加计算域的范围，具有更为广阔的工业实用前景。

元胞自动机通过使用局部简单的规律来模拟复杂的物理现象，已经被广泛地应用于枝晶生长模拟。将计算区域划分成规则的多面体网格，定义网格元胞的状态并赋予其物理场的属性，依赖周围元胞的状态和属性进行生长演化。格子 Boltzmann 方法(LBM)是一种模拟复杂系统流体流动的方法，并在过去的几十年里迅速崛起。研究人员基于 LBM 对金属和合金凝固过程中的相变和微观组织演变进行了大量的研究[10–12]。LBM 起源于 Ludwig Boltzmann 的动力学理论，将流体系统描述为在格子上迁移和碰撞的微观粒子群的集合，具有天然的并行性，能极大提高计算效率。利用 CA-LBM 耦合模型，通过粒子群的演化对系统的宏观量进行模拟，可以有效地计算晶体生长过程的温度场、流场和溶质场。

以往采用 CA-LBM 耦合模型研究多晶硅生长局限于二维数值模拟[13–15]，并不能全面准确地反映出真实的硅晶体的生长过程，本研究在二维 CA-LBM 的基础上，进一步拓展到三维模型，并拟利用此模型分析研究三维情况下的硅小平面枝晶的形成机制。

# 1　数值模型

用 CA 模型计算硅枝晶的生长，用 LBM 模型计算硅晶体凝固过程的温度场，通过硅晶体生长过程中的固相率增长释放出的凝固潜热将 CA 与 LBM 耦合。

## 1.1　硅小平面枝晶生长的 CA 模型

硅小平面枝晶生长的动力是过冷度，固液界面处的过冷度$\Delta T$为：

$$\Delta T = T_{\mathrm{M}} - T - \Gamma K a_{\mathrm{s}}(\boldsymbol{n}) \tag{1}$$

式中：$T_{\mathrm{M}}$ 为熔点；$T$ 为格点处的实际温度；$\Gamma$ 为 Gibbs-Thomson 系数；$K$ 为界面曲率，由式(2)[16]求得：

$$K = \frac{1}{\Delta x}\left[1 - 2\left(f_{\mathrm{s}} + \sum_{i=1}^{N} f_{\mathrm{s}}^{i}\right) \Big/ (N+1)\right] \tag{2}$$

其中：$\Delta x$ 为元胞尺寸；$f_{\mathrm{s}}$ 为该元胞固相分数；$f_{\mathrm{s}}^{i}$ 为相邻元胞的固相分数；$N$ 为相邻元胞的总数。三维 CA 模型相邻元胞总数 $N$ 为 26。

$a_{\mathrm{s}}(\boldsymbol{n})$为高各向异性的界面能函数，由下式[8]求得：

$$a_{\mathrm{s}}(\boldsymbol{n}) = (n_x^k + n_y^k + n_z^k)^{\alpha/k} \tag{3}$$

式中：$n_x$，$n_y$，$n_z$ 分别为界面法向量 $\boldsymbol{n}$ 在三维方向上的分量；$\alpha$ 和 $k$ 为影响各向异性强度的参数。

在过冷度的驱动下，界面生长速率 $v_{\mathrm{e}}$ 为：

$$v_{\mathrm{e}} = \mu(\boldsymbol{n})\Delta T \cdot g \tag{4}$$

其中：$\mu(\boldsymbol{n})$为生长速率系数，由式(5)求得：

$$\mu(\boldsymbol{n}) = \bar{\mu}(a_{\mathrm{s}}^2(\boldsymbol{n}) + W_0 a_{\mathrm{s}}(\boldsymbol{n}) t_{\mathrm{s}}(\boldsymbol{n}))^{-1} \tag{5}$$

式中：$\bar{\mu}$ 为动力学系数平均值；$W_0$ 为与平均扩散率和动力学有关的参数；$t_{\mathrm{s}}(\boldsymbol{n})$为动力学各向异性函数，设为 $a_{\mathrm{s}}^{-4}(\boldsymbol{n})$。

$g$ 为与邻位网格状态相关的状态因子[17]。

$$g = \min\left(\left(\sum_{m=1}^{6} S_m^{\chi_1} + \frac{1}{\sqrt{2}}\sum_{m=1}^{12} S_m^{\chi_2}\right) \Big/ 2, 1\right) \tag{6}$$

对于凝固界面：

$$S^{\chi_1}, S^{\chi_2} = \begin{cases} 0, (f_{\mathrm{s}} < 1) \\ 1, (f_{\mathrm{s}} = 1) \end{cases} \tag{7}$$

对于熔化界面：

$$S^{\chi_1}, S^{\chi_2} = \begin{cases} 0, (f_{\mathrm{s}} > 0) \\ 1, (f_{\mathrm{s}} = 0) \end{cases} \tag{8}$$

$S^{\chi_1}$ 为最近邻 6 个网格的状态参数；$S^{\chi_2}$ 为次近邻 12 个网格的状态参数。当$\Delta T > 0$ 时，为凝固界面；反之则为熔化界面。

生长带动固相分数增加，增量$\Delta f_{\mathrm{s}}$为：

$$\Delta f_{\mathrm{s}} = \frac{v_{\mathrm{e}}\Delta t}{\Delta x(n_x + n_y + n_z)} \tag{9}$$

其中：$\Delta t$ 为时间步长。

当固相分数增长到 1 时，固液界面元胞转化为固相元胞，并根据 Von Neumann 方法结合邻域限制法[18]捕获周围液相元胞转化为固液界面元胞，实现晶体的凝固生长。

## 1.2　枝晶生长过程传输计算的 LBM 模型

采用 D3Q15 模型，即三维空间中有 15 个离散速率 $\boldsymbol{e}_i$ ($i = 0 \sim 14$)，配置如下：

$$\boldsymbol{E}=\begin{bmatrix}0&1&-1&0&0&0&0&1&-1&1&-1&1&-1&1&-1\\0&0&0&1&-1&0&0&1&-1&1&-1&-1&1&-1&1\\0&0&0&0&0&1&-1&1&-1&-1&1&1&-1&-1&1\end{bmatrix} \tag{10}$$

采用 Bhatnagar-Gross-Krook(BGK)线性近似[19]的单弛豫时间的完全离散化的格子 Boltzmann 方程为：

$$f_i(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{e}_i\delta_t,t+\delta_t)=f_i(\boldsymbol{r},t)+\frac{1}{\tau_{\mathrm{f}}}(f_i^{\mathrm{eq}}(\boldsymbol{r},t)-f_i(\boldsymbol{r},t))+F_i \tag{11}$$

其中：$f_i$ 为 $i$ 方向上的分布函数；$\boldsymbol{r}$ 和 $t$ 分别为位置矢量和时间；$\delta_t$ 为格子时间步长；$\tau_f$ 为温度的弛豫时间；$f_i^{\mathrm{eq}}$ 为 $i$ 方向上的平衡分布函数，由式(12)得：

$$f_i^{\mathrm{eq}}(\boldsymbol{r},t)=\omega_i T(\boldsymbol{r},t) \tag{12}$$

其中：$\omega_i$ 为权重系数：

$$\omega_i=\begin{cases}16/72 & i=0\\ 8/72 & i=1\sim6\\ 1/72 & i=7\sim14\end{cases} \tag{13}$$

$T(\boldsymbol{r},t)$为格点处的宏观温度，由式(14)求得：

$$T(\boldsymbol{r},t)=\sum_{i=0}^{14}f_i(\boldsymbol{r},t) \tag{14}$$

$F_i$ 为热源项，是硅生长过程中释放出的凝固潜热，即：

$$F_i=\omega_i\Delta f_{\mathrm{s}}\Delta H_{\mathrm{f}}/C_{\mathrm{p}} \tag{15}$$

其中：$\Delta H_{\mathrm{f}}$为摩尔潜热；$C_{\mathrm{p}}$为摩尔液相热容。

## 2 结果与讨论

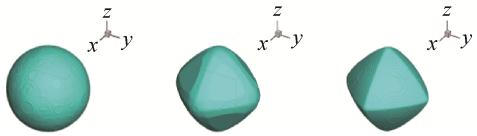
硅自身的界面能各向异性以及初始过冷度都会对小平面枝晶的生长造成影响。界面能各向异性大，优势生长方向生长得快，取向缺失明显；初始过冷度大，晶体可以突破小平面晶粒的形状生长成为小平面枝晶，一次枝晶臂变长并伴有二次枝晶臂出现。

### 2.1 CA 模型的验证

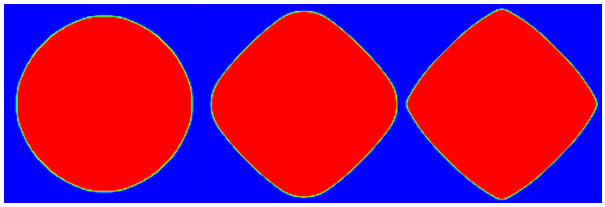
网格区域选取 140×140×140 个元胞，元胞尺寸 0.5 μm。因为模型采用立方体网格划分，网格自身的各向异性对模拟结果有影响。为了检验模型是否降低了网格自身的各向异性，初始设定为球形晶核。在区域中心设置一个球形核心，其表达式为：

$$\begin{cases}X^2+Y^2+Z^2\le R^2 & (\phi=2,\ \Delta T=0\ \mathrm{K})\\ X^2+Y^2+Z^2>R^2 & (\phi=0,\ \Delta T=2\ \mathrm{K})\end{cases} \tag{16}$$

其中：$X$，$Y$，$Z$ 分别为 3 个坐标值与中心点的差值；$R$ 为所设定的核心半径；$\phi$为元胞状态。$\phi$ = 0 时为液相元胞，$\phi$ = 1 时为固液界面元胞，$\phi$ = 2 时为固相元胞。熔体的初始过冷度为 2 K。模拟区域的外边界采用绝热的边界条件。取不同的界面能各向异性强度进行模拟。图 1a~图 1c 分别对应界面能各向异性参数 $\alpha=1.5$，$k=2.0$、5.5、9.5 的三维模拟结果，图 1d~图 1f 为 $y$–$z$ 面在三维模拟结果上的截面图。



(a) $\alpha=1.5$，$k=2.0$ (b) $\alpha=1.5$，$k=5.5$ (c) $\alpha=1.5$，$k=9.5$



(d) $\alpha=1.5$，$k=2.0$ (e) $\alpha=1.5$，$k=5.5$ (f) $\alpha=1.5$，$k=9.5$

图 1 不同界面能各向异性的对比结果

Fig. 1 Comparison results of different interfacial energy anisotropy

如图 1a 和图 1d 所示，当界面能各向异性参数为 $\alpha=1.5$，$k=2.0$ 时，晶核在生长过程中，始终保持为球形，说明此时晶体的生长各向同性，即模型已经消除了网格自身的各向异性。图 1b 和图 1e 中的各向异性参数为 $\alpha$ = 1.5，$k$ = 5.5，可以看出生长结果出现了较强的各向异性，但顶角处仍为曲率较小的圆角。图 1c 和图 1f 各向异性参数为 $\alpha$ = 1.5，$k$ = 9.5，各向异性的特征更加明显，结果表现出曲率较大的尖锐的顶角。以上说明建立的三维 CA 模型可以在消除网格自身各向异性的前提下实现对高各向异性晶体的模拟。

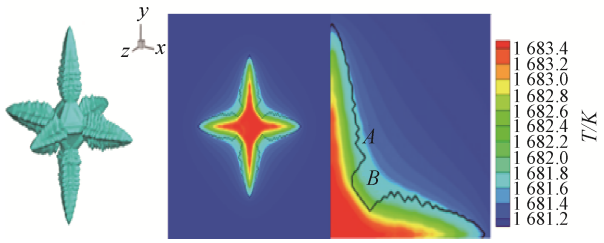
### 2.2 硅小平面枝晶三维形貌

硅在自由生长状态下平衡形状为正八面体[7]。在模拟区域中心设置一个正八面体核心，其表达式为：

$$\begin{cases}|X|+|Y|+|Z|\le10 & (\phi=2,\ \Delta T=0\ \mathrm{K})\\ |X|+|Y|+|Z|>10 & (\phi=0,\ \Delta T=2\ \mathrm{K})\end{cases} \tag{17}$$

图 2a 为硅小平面枝晶的三维形貌模拟结果。由图 2a 可以看出，整个枝晶表现出典型的小平面特征。因为高各向异性导致取向缺失，一次枝晶臂间产生平直的棱，一次枝晶臂上也表现出参差的小平面界面形状。图 2b 为硅小平面枝晶三维形貌对应的温场截面图，其中，外围的黑色线条是固相率的边界线。可见，枝晶生长前沿是负温梯，即枝晶尖端伸入到了过冷熔体中。因为初始时刻设置晶核为 1 683 K，周围是过冷度为 2 K 的过冷熔体，边界条件设置为绝热，晶核高温区的温度会向周围熔体中

扩散，同时随生长的进行，硅熔体凝固也会释放出潜热，造成前沿的负温度梯度，这也符合枝晶的生长条件。图 2c 为图 2b 的右上角的局部图，枝晶臂上 *A* 处形成了较大的小平面尖角，*B* 处是枝晶臂间因为取向缺失形成的小平面区域。




(a) Dendrite morphology　(b) Temperature field　(c) Local temperature field

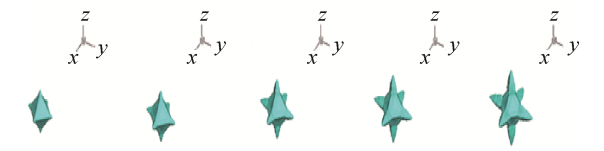
图 2　三维硅小平面枝晶

Fig. 2　Three dimensional silicon facet dendrite

将该形貌与 Nagashio 等实验结果中<100>$_{<100>}$小平面枝晶的截面图[5]进行对比，同为自由状态下生长的硅小平面枝晶，两者表现出极大的相似性。将该形貌与 Chen 等相场法模拟结果[6]进行对比，可以看到图 2b 中枝晶的二维截面形貌与相场法二维模拟结果相似，在一次枝晶臂上都有参差的小平面界面。

### 2.3　界面能各向异性对硅小平面枝晶形貌的影响

在硅枝晶生长过程中，表现在界面能上的各向异性对枝晶的生长形貌有很大的影响。图 3 为在不同界面能各向异性强度下小平面枝晶三维形貌的对比研究，图 3a~图 3e 中的界面能各向异性参数 *k* 由 3.5 逐步增加至 12.5。图 3a~图 3e 中所示均为凝固时间为 0.06 s 时的计算结果。在界面能各向异性较小时，枝晶的稳定性较高，三维形貌较光滑，枝晶生长出的一次枝晶臂较为短小；而在界面能各向异性较大时，优先生长方向有着明显高于其他方向的生长速率，造成一次枝晶臂较长，同时枝晶表面会有取向缺失导致的小平面粗糙界面出现。



(a) $k$ = 3.5　(b) $k$ = 5.5　(c) $k$ = 7.5　(d) $k$ = 9.5　(e) $k$ = 12.5

图3　不同界面能各向异性强度下小平面枝晶生长的三维形貌

Fig. 3　Three dimensional morphology of faceted dendrite growth with different interfacial energy anisotropy

取上述界面能各向异性参数时，枝晶 *z* 轴正方向的尖端过冷度如图 4 所示。可见枝晶尖端过冷度随生长的进行由高到低变化，并且 0.02 s 前降低较快，0.02 s 后降低较慢，逐渐趋近稳定。这是因为在生长初期，晶核曲率较小，其曲率过冷也较小，导致驱动晶粒生长的过冷度较大。这就使得晶粒在相应方向上的固相率增长较快，即生长较快，在高各向异性的影响下，晶粒的尖端变得更加尖锐，曲率更大，曲率过冷增加，作用于晶粒生长的过冷度减小。同时其生长会释放出凝固潜热，使生长区域的温度逐渐升高，也会使过冷度减小。这就造成了初期的尖端过冷度降低较快。后期枝晶的尖端曲率变化不再明显，并且随着过冷度的降低，枝晶生长变慢，释放出的凝固潜热相应减少，枝晶生长前沿的曲率过冷和热力学过冷趋于平衡，从而使后期枝晶尖端过冷度降低缓慢并趋于稳定。同时由图 4 可得，界面能各向异性越高，在优先生长方向上的枝晶尖端过冷度也越高。这是因为界面能各向异性越高，晶粒尖端曲率过冷就会越小，作用于尖端生长的过冷度就越大。

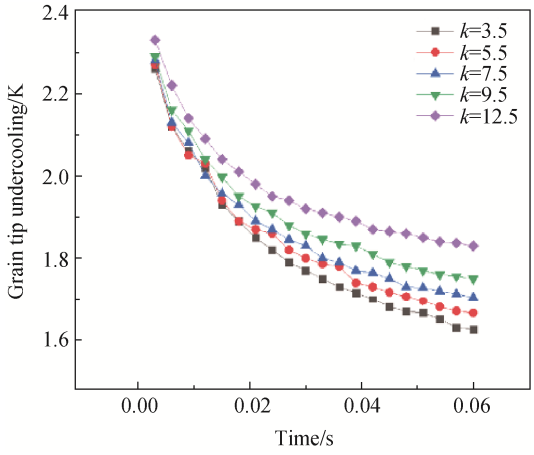



图 4　界面能各向异性对 *z* 轴正方向晶粒尖端过冷度的影响

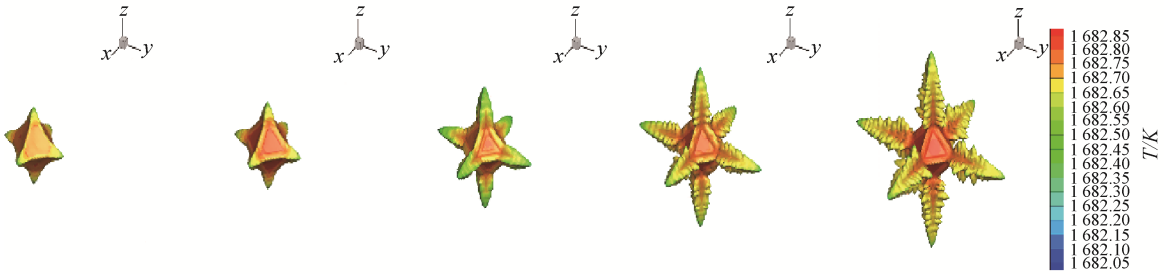
Fig. 4　Effect of interfacial energy anisotropy on the undercooling of the grain tip in the positive *z*-axis

### 2.4　过冷度对硅小平面枝晶形貌的影响

作为熔体凝固的驱动力，过冷度是影响晶体生长的重要因素之一。图 5 为不同初始过冷度下硅小平面枝晶三维形貌。由图 5 可见，在不同初始过冷度条件下，相同的生长时间后，硅晶粒形貌显著不同。

由图 5a~图 5b 可见，初始过冷度较小，生长较为缓慢，晶粒表面较为光滑。由图 5c~图 5e 可见，初始过冷度逐渐增大，一次枝晶臂的生长明显加快，其表面出现了尖锐的小平面界面并逐渐演变成二次枝晶臂。这是因为在过冷度较大的条件下，一次枝晶臂表面也受到了高各向异性的影响。同时由于初始过冷度越大，枝晶生长越快，熔体凝固时所释放

出的潜热也就越多。从图 5a 到图 5e，枝晶的中心的温度越来越高，释放出的凝固潜热聚集在晶核处以及枝晶臂间，进一步抑制了非优势方向的生长，使枝晶的各向异性得到了更强的体现。




(a) $\Delta T$ = 0.5 K (b) $\Delta T$ = 1 K (c) $\Delta T$ = 2 K (d) $\Delta T$ = 3 K (e) $\Delta T$ = 4 K

图 5 不同初始过冷度下硅小平面枝晶三维形貌

Fig. 5 Three dimensional morphology of silicon faceted dendrite with different initial undercooling

取上述初始过冷度时，枝晶 *z* 轴正方向的尖端过冷度如图 6 所示。初始过冷度越大，枝晶的尖端过冷度也越大，并且随着生长的进行，过冷度逐渐降低。同时还可以发现枝晶尖端过冷度普遍比熔体初始过冷度低，最主要的原因是枝晶的生长需要克服曲率过冷，模拟时设置的熔体初始过冷度要减去曲率过冷才是枝晶的尖端过冷度。

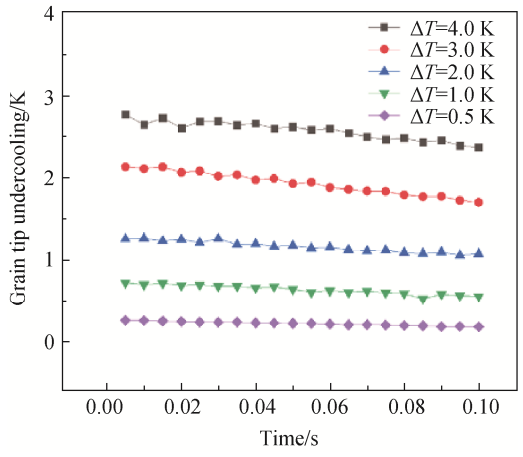



图 6 初始过冷度对 *z* 轴正方向枝晶尖端过冷度的影响

Fig. 6 Effect of initial undercooling on the undercooling of the dendrite tip in the positive *z*-axis

## 3 结论

建立了基于 CA-LBM 耦合的三维硅小平面枝晶生长的数值模型。在验证模型的正确性的基础上，计算了硅小平面枝晶的三维形貌，同时分析讨论了界面能各向异性和初始过冷度对硅枝晶形貌的影响。

1) 三维硅小平面枝晶具有很强的各向异性。高各向异性导致取向缺失，枝晶臂上也表现出典型的小平面界面形状。

2) 界面能各向异性对三维枝晶的生长形貌有很大的影响，界面能各向异性大，优势生长方向生长得快，取向缺失明显。

3) 初始过冷度大，晶体可以突破小平面晶粒的均匀多面体形状而转变为小平面枝晶，一次枝晶臂变长并伴有二次枝晶臂的出现。

**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, NAKAJIMA K, UJIHARA T, et al. *In situ* observations of crystal growth behavior of silicon melt[J]. J Cryst Growth, 2002, 243(2): 275–282.

[4] FUJIWARA K, MAEDA K, USAMI N, et al. Growth mechanism of Si-faceted dendrites[J]. Phys Rev Lett, 2008, 101(5): 055503.

[5] NAGASHIO K, KURIBAYASHI K. Growth mechanism of twin-related and twin-free facet Si dendrites[J]. Acta Mater, 2005, 53(10): 3021–3029.

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

[7] CHEN G Y, LIN H K, LAN C W. Phase-field modeling of twin-related faceted dendrite growth of silicon[J]. Acta Mater, 2016, 115: 324–332.

[8] CHEN G Y, LAN C W. Understanding the facet formation mechanisms of Si thin-film solidification through three-dimensional phase-field modeling[J]. J Cryst Growth, 2017, 474: 166–170.

[9] LIAO T J, KANG Y S, Lan C W. In situ observation of crystal/melt interface and infrared measurement of temperature profile during directional solidification of silicon wafer[J]. J Cryst Growth, 2018, 499: 90–97.

[10] HUANG R, WU H, CHENG P. A new lattice Boltzmann model for solid–liquid phase change[J]. Int J Heat Mass Transf, 2013, 59: 295–301.

[11] HUANG R, WU H. An immersed boundary-thermal lattice Boltzmann method for solid–liquid phase change[J]. J Comput Phys, 2014, 277: 305–319.

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

[13] ZHANG Y X, LI R, WANG J, et al. Cellular automaton modeling of the transition of multi-crystalline silicon from a planar faceted front to equiaxed growth[J]. Appl Sci-Basel, 2017, 7(12): 1251.

[14] WANG J, LI R, LI N, et al. Cellular automaton modeling of silicon facet formation during directional solidification[J]. Crystals, 2018, 8(11): 399.

[15] 马旺, 陈洪建, 王佳, 等. 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[J]. 硅酸盐学报, 2020, 48(1): 140–146.
MA Wang, CHEN Hongjian, WANG Jia, et al. J Chin Ceram Soc, 2020, 48(1): 140–146.

[16] NASTAC L. Numerical modeling of solidification morphologies and segregation patterns in cast dendritic alloys[J]. Acta Mater, 1999, 47(17): 4253–4262.

[17] ZHU M F, LEE S Y, HONG C P. Modified cellular automaton model for the prediction of dendritic growth with melt convection[J]. Phys Rev E, 2004, 69(6): 061610.

[18] WEI L, LIN X, WANG M, et al. Orientation selection of equiaxed dendritic growth by three-dimensional cellular automaton model[J]. Physica B, 2012, 407(13): 2471–2475.

[19] BHATNAGAR P L, GROSS E P, KROOK M. A model for collision processes in gases. I. Small amplitude processes in charged and neutral one-component systems[J]. Phys Rev, 1954, 94(3): 511–525.