

DOI: 10.24412/2077-8481-2024-1-35-45

УДК 621.746.6:542.65

**Ю. А. ЛЕБЕДИНСКИЙ**<sup>1</sup>, канд. физ.-мат. наук

**А. М. БРАНОВИЦКИЙ**<sup>2</sup>, канд. техн. наук

<sup>1</sup>Институт технологии металлов НАН Беларуси (Могилев, Беларусь)

<sup>2</sup>Белорусско-Российский университет (Могилев, Беларусь)

## МОДЕЛИРОВАНИЕ РОСТА КРИСТАЛЛОВ С ВЫСОКОЙ СТЕПЕНЬЮ АНИЗОТРОПИИ В ИЗМЕНЯЮЩИХСЯ УСЛОВИЯХ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ

### Аннотация

Реализован алгоритм моделирования роста кристаллов методом фазового поля с регуляризацией функции анизотропии поверхностного натяжения для двумерного случая. Расчеты сделаны для случая роста кристаллов кремния при сильном переохлаждении и для роста из расплава заэвтектических сплавов. Рассчитаны морфологии роста кристаллов в среде с флуктуирующей температурной зависимостью от уровня пространственных и временных флуктуаций для различной степени анизотропии. Рассчитано изменение морфологии для случая изменения анизотропии от четырехугольной к гексагональной симметрии во время роста. Оценено влияние сильной анизотропии для случая роста кристаллов в движущемся расплаве.

### Ключевые слова:

гранные кристаллы, микроструктура, метод фазового поля, моделирование, морфология первичных кристаллов.

### Для цитирования:

Лебединский, Ю. А. Моделирование роста кристаллов с высокой степенью анизотропии в изменяющихся условиях кристаллизации / Ю. А. Лебединский, А. М. Брановицкий // Вестник Белорусско-Российского университета. – 2024. – № 1 (82). – С. 35–45.

### Введение

Для кристаллизации металлов из расплава характерен так называемый «рыхлый» режим, когда атом из расплава может присоединиться к любому месту на поверхности кристалла. Иная ситуация наблюдается при кристаллизации неметаллов, например кремния. Атом или группа атомов могут присоединиться только к растущему на границе кристалла слою, заняв «ступеньку» между растущим слоем и предыдущим. При таком характере роста получаемые кристаллы имеют четко выраженные грани, что и обусловило их название *faceted* (или *facetted*) *crystals* – гранные кристаллы, в отличие от *unfaceted* кристаллов металлов.

Один из способов моделирования роста гранных кристаллов основан на использовании высоких значений пока-

зателя анизотропии поверхностного натяжения при расчетах методом фазового поля. Если для металлов характерными значениями анизотропии являются 2 %...3 %, то, например, для кристаллов кремния с кубической решеткой это значение равно 17 %. Под кривой поверхностью температура плавления вещества уменьшается – эффект Гиббса – Томсона. Но в некоторых направлениях для высокой анизотропии произойдет повышение температуры плавления, что противоречит принципам термодинамики. Чтобы избежать этого, моделирование роста кристаллов методом фазового поля осуществляется с учетом коррекции поведения функции анизотропии. На направлениях, где могло бы оказаться повышение температуры плавления, функция анизотропии заменяется на выражения, обеспечивающие соблюдение эффекта Гиббса – Томсона. Такая

процедура называется регуляризацией уравнений фазового поля [1–6].

При этом для корректно подобранных выражений для замены функции анизотропии оказывается, что такой кристалл не имеет участков поверхности, где угол между нормалью к поверхности и главными осями кристалла лежит в области повышения температуры плавления, описанной ранее. На «изломе» граней имеется просто резкий скачок направления нормали к поверхности.

Однако такой скачок имел бы место только при точном решении уравнений фазового поля с шагом, стремящимся к нулю. На практике ввиду конечности шага и неточностей аппроксимации производных от нормали по координатам (особенно вторых производных даже при их оптимальном подборе) вблизи излома у численно моделируемого кристалла имеются небольшие участки поверхности с «запрещенными» направлениями нормалей.

На основе подобных алгоритмов может моделироваться как рост кристаллов из расплава одного вещества, так и рост первичных кристаллов из расплава смеси двух компонентов. В первом случае рост кристаллов контролируется диффузией тепла. В такой ситуации рост кристаллов сильно зависит от геометрии системы и определяется в основном расположением глобальных мест стока тепла из затвердевающей системы. Вне экспериментов по направленному затвердеванию морфологию таких кристаллов трудно сравнивать с реальной.

В бинарных сплавах рост первичных кристаллов контролируется обычно скоростью диффузии второго компонента (примеси), которая имеет локальный характер. Это позволяет оценивать получаемую морфологию вне зависимости от глобальных граничных условий.

В отличие от металлических кристаллов для многих гранных кристаллов характерно изменение параметров кри-

сталлизации при изменении переохлаждения. Значительные изменения формы и степени анизотропии поверхностной энергии при различных переохлаждениях приводят к многообразию форм таких кристаллов. Достаточно упомянуть многообразие морфологии кристаллов кремния в эвтектических силуминах. Данная работа во многом посвящена изменению морфологии кристаллов при изменении переохлаждения как в температурных полях со значительными случайными флуктуациями, так и для случаев детерминированных изменений. При этом симметрия функции анизотропии может меняться с четырехугольной на шестиугольную (и наоборот) или на восьмиугольную. Также произведены расчеты для случая роста кристаллов с различной степенью анизотропии в условиях перемешивания.

Одним из уравнений роста кристаллов является уравнение Гиббса – Томсона, определяющее переохлаждение вблизи кривой поверхности, необходимое для затвердевания жидкой фазы. Данное переохлаждение зависит от второй производной по углам между нормалью к поверхности и осями координат. В литературе предложен ряд аппроксимаций для описания таких разрывных функций.

Численный метод фазового поля для расчета роста кристаллов фактически является единственным методом, позволяющим корректно описывать морфологическую эволюцию кристаллов. Но в данном случае метод сталкивается с рядом дополнительных трудностей, поскольку любая его формулировка содержит первые и вторые производные зависимости поверхностной энергии от направления нормали.

Метод фазового поля предполагает «размытие» резкой границы между фазами. В такой промежуточной зоне начинается диффузия атомов, зависящая от вида аппроксимации анизотропии, что создает дополнительные сложности и может приводить к некорректному

поведению решений при стремлении переходной зоны к нулю [1].

В настоящее время существует ряд попыток замены функции анизотропии со скачкообразным поведением на плавные функции с наличием вторых производных по направлениям в каждой точке. Такая процедура получила название регуляризации уравнений фазового поля в части описания поверхностной энергии [2–5].

Наибольшее распространение для решения прикладных задач получил метод [2, 6], основанный на замене вогнутой фигуры зависимости поверхностной энергии от направления нормали на выпуклую. Он показывает высокую эффективность при численных расчетах. Данный метод основан на регуляризации параметров, отвечающих за пространственную анизотропию поверхностного натяжения, характерную для гранного кристалла.

В численных моделях роста кристаллов используется уравнение Гиббса – Томсона, определяющее изменение температуры затвердевания перед кривой поверхностью. Для двумерного случая поверхности с кривизной  $K$  такое изменение пропорционально

$$\left( \gamma + \frac{\partial^2 \gamma}{\partial \theta^2} \right) K,$$

где  $\gamma(\theta)$  – зависимость поверхностной энергии от угла  $\theta$  между нормалью и обычно осью  $OX$ .

Для описания анизотропии для кубической решетки в двумерном случае используется зависимость

$$\gamma = \gamma_0 (1 + \varepsilon_4 \cos 4\theta), \quad (1)$$

где  $\varepsilon_4$  – параметр анизотропии.

Одним из методов представления анизотропии служит конструкция Вульфа – форма, при которой кристалл заданного объема обладает минимальной поверхностной энергией. Для малой анизотропии такая поверхность гладкая и выпуклая. Приближенно ее можно

рассматривать как круг (шар в трехмерном случае), поскольку шар имеет минимальную площадь поверхности при заданном объеме.

При увеличении анизотропии ряд ориентаций поверхности не может быть реализован и имеются разрывы в возможных направлениях нормали к поверхности. С увеличением анизотропии форма поверхности стремится к квадрату (кубу в трехмерном случае), т. е. имеем фактически только несколько возможных ориентаций поверхности. Это связано с тем, что все другие ориентации имеют значительно большую поверхностную энергию.

Пропадающие из конструкции Вульфа ориентации лежат в диапазоне, когда в угловой диаграмме  $\frac{1}{\gamma}$  имеются вогнутые участки. Это имеет место для случая, при котором переохлаждение равно нулю:

$$\gamma + \frac{\partial^2 \gamma}{\partial \theta^2} = 1 - 15\varepsilon_4 \cos 4\theta = 0. \quad (2)$$

В методе фазового поля используется параметр  $\varepsilon$ , определяющий вклад поверхностной энергии в общую энергию системы. Он описывает вклад в общую свободную энергию системы за счет изменения фазовой переменной – аналог граничной энергии, но для границы, «растянутой» на некоторую конечную величину.

Как правило, вид его анизотропии совпадает с вышеприведенной формой для поверхностной энергии в уравнении Гиббса – Томсона:

$$\varepsilon(\theta) = \varepsilon_0 (1 + \varepsilon_4 \cos 4\theta). \quad (3)$$

При этом на углах  $\theta < \theta_m$  при большой анизотропии в диаграмме  $1/\varepsilon$  имеются вогнутые участки. Угол  $\theta_m$  определяется из соотношения

$$\varepsilon(\theta_m) \sin \theta_m + \frac{\partial \varepsilon}{\partial \theta} \cos \theta_m = 0. \quad (4)$$

Численное решение в этой области неустойчиво и имеет тенденцию быстро расходиться. Для регуляризации был использован метод модификации параметра  $\varepsilon$ , обеспечивающий выпуклую форму  $1/\varepsilon$ . Модифицированный параметр  $\tilde{\varepsilon}$  в первом квадранте имеет вид

$$\tilde{\varepsilon} = \begin{cases} \varepsilon(\theta) & \text{при } \theta_m \leq |\theta| \leq \pi/4; \\ \frac{\varepsilon(\theta_m) \cos \theta}{\cos(\theta_m)} & \text{при } |\theta| < \theta_m, \end{cases} \quad (5)$$

что соответствует замене вогнутого участка на выпуклый – на часть дуги окружности.

Аналогичные построения производятся для случая, когда исходная симметрия кристалла – гексагональная:

$$\varepsilon(\theta) = \varepsilon_0 (1 + \varepsilon_6 \cos 6\theta). \quad (6)$$

Здесь  $n$  – единичный вектор нормали к линии уровня  $\phi$ ,  $n = \nabla \phi / |\nabla \phi|$ ;  $\partial_x, \partial_y$  – частные производные по координатам;  $W_\phi = \frac{\partial W}{\partial \phi}$ . Аналогично поверхностной энергии время релаксации  $\tau = \tau_0 (1 + \varepsilon_4 \cos(4\phi))$ . Параметр «связи»  $\lambda$  может быть в достаточной степени произвольным и служит для проверки точности конкретной численной схемы.

### Вид регуляризованных уравнений фазового поля

В уравнения фазового поля входит угол  $\phi$ , аналогичный углу  $\theta$  между нормалью и осью  $X$ . В случае замены линии границы фаз на полосу конечной толщины  $W$  угол  $\phi$  определяется как угол между градиентом фазовой функции  $\phi$  и осью  $X$ :

$$\phi = \arctan \left( \frac{\partial \phi / \partial y}{\partial \phi / \partial x} \right). \quad (7)$$

При этом регуляризованное значение параметра толщины межфазного слоя представлено в [6].

При таком выборе функции анизотропии поверхностного натяжения уравнения фазового поля для случая затвердевания одного вещества имеют вид, различающийся в зависимости от угла  $\phi$ . Для случая, когда угол  $\phi$  не лежит в области регуляризованных значений,  $\frac{\pi}{2}i + \phi_m \leq \phi \leq \frac{\pi}{2}(i+1) - \phi_m$ ,  $i = 0 \dots 3$ , имеем известное уравнение для эволюции фазового поля  $\phi$  во времени  $t$  [7]

$$\begin{aligned} \tau(\phi) \frac{\partial \phi}{\partial t} = & \nabla \cdot (W(n)^2 \nabla \phi) - \partial_x [W(n)W_\phi(n) \partial_y \phi] + \\ & + \partial_y [W(n)W_\phi(n) \partial_x \phi] + \phi - \phi^3 - \lambda \theta \phi (1 - \phi^2)^2. \end{aligned}$$

Значение  $\phi_m$  находится из условия  $W(\phi_m) \sin \phi_m + \frac{\partial W}{\partial \phi} \cos \phi_m = 0$ , а зависимость  $W$  от угла моделирует симметрию с поворотом на  $\frac{\pi}{2}$ ,  $W = W_0 (1 + \varepsilon_4 \cos(4\phi))$ .

Значение безразмерного переохлаждения

$$\theta = \frac{T - T_m}{L/c_p},$$

где  $T$  – текущая температура;  $T_m$  – температура плавления;  $L$  – теплота плавления;  $c_p$  – теплоемкость при постоянном давлении. Оно может как задаваться, например, в изотермическом приближении, так и рассчитываться на основе уравнения теплопереноса.

Для случаев замены функции анизотропии на регуляризованные выражения уравнение для фазового поля значительно упрощается вследствие такого их выбора:

– для углов  $\left(\frac{\pi}{2}i - \varphi_m\right) \leq \varphi \leq \left(\frac{\pi}{2}i + \varphi_m\right)$ ,  
 $i = 0, 2$ , имеем

$$\tau(\varphi_m) \left(\frac{\cos \varphi}{\cos \varphi_m}\right)^2 \frac{\partial \phi}{\partial t} =$$

$$= \tau_0 \left[\frac{W(\varphi_m)}{\cos \varphi_m}\right]^2 \phi_{xx} + \phi - \phi^3 - \lambda \theta \phi (1 - \phi^2)^2;$$

– для углов  $\left(\frac{\pi}{2}i - \varphi_m\right) \leq \varphi \leq \left(\frac{\pi}{2}i + \varphi_m\right)$ ,  
 $i = 1, 3$ , имеем

$$\tau(\varphi_m) \left(\frac{\sin \varphi}{\cos \varphi_m}\right)^2 \frac{\partial \phi}{\partial t} =$$

$$= \tau_0 \left[\frac{W(\varphi_m)}{\cos \varphi_m}\right]^2 \phi_{yy} + \phi - \phi^3 - \lambda \theta \phi (1 - \phi^2)^2.$$

Для описания кристаллизации первичных кристаллов в бинарных сплавах (основной компонент (растворитель) + второй компонент (примесь), где основной компонент образует первичные кристаллы) уравнения фазового

поля имеют ту же форму, за исключением замены термического переохлаждения на комбинированное термическое и концентрационное:

$$\theta \Rightarrow \theta + M c_\infty U.$$

Здесь  $M$  – безразмерный наклон линии liquidus,  $M = \frac{-m(1-k)}{L/c_p}$ ;  $m$  – раз-  
 мерный наклон;  $k$  – коэффициент равновесного распределения примеси;  $c_\infty$  – начальная концентрация примеси в расплаве;  $U$  – безразмерная концентрация примеси,

$$U = \frac{\frac{2c/c_\infty}{1+k-(1-k\phi)} - 1}{1-k},$$

где  $c$  – локальная концентрация примеси;  $L$  – тепловыделение при затвердевании на единицу объема;  $c_p$  – теплоемкость.

К уравнениям фазового поля также добавляется уравнение диффузии для концентрации примеси  $U$  с учетом поправок, учитывающих конечную толщину переходной зоны между фазами. Величины  $W_0$  и  $\tau_0$  определяются в зависимости от конкретной задачи [8].

### ***Рост граничных кристаллов в среде с флуктуирующими параметрами***

Рост кристаллов – существенно неустойчивый во времени процесс. Малые локальные изменения в ходе роста из-за флуктуаций температуры, дефектов кристаллической решетки, наличия дендритов – «соседей», случайного движения расплава, вращения кристалла в расплаве и т. д. могут приводить к существенному изменению морфологии.

Как правило, для небольших переохлаждений кристаллы кремния имеют гексагональную решетку. Но с ростом переохлаждения часто имеет место пе-

реход к квадратной решетке с анизотропией вида (3).

На основе алгоритмов, описанных ранее, были произведены расчеты для эволюции дендрита кремния в среде с флуктуирующими во времени и пространстве значениями температуры. Общая случайная составляющая представляла произведение временной и пространственной компонент. В размерных координатах шаг был порядка 10 нм. Расчеты выполнены для сетки  $1000 \times 1000$  со средним переохлаждением 40 К.

В общем, для всех расчетов хорошо заметно сохранение в целом дендритной структуры. Это существенное отличие относительно роста кристаллов из металла, для которых при похожих параметрах флуктуаций наблюдалась бы полная потеря дендритной морфологии. По-видимому, значительно бóльшая анизотропия поверхностного натяжения для кремния сыграла существен-

ную роль в сохранении дендритной морфологии. Напомним, что коэффициент Гиббса – Томсона, определяющий влияние поверхностного натяжения на рост кристалла, для кремния примерно на порядок больше, чем для алюминия [11]. Значение анизотропии поверхностной энергии для кремния в 5–7 раз выше [10]. Все это приводит к тому, что для подобранных периодов и величины флуктуаций, при которых кристалл алюминия имел бы произвольное число ветвей, изогнутых в различных направлениях, кристалл кремния имеет явно выраженные первичные ветви. Вторичные и третичные ветви тоже в целом сохраняют дендритную ориентацию для решеток с кубической симметрией.

Увеличение пространственной частоты осцилляций температуры приводит к более выраженной дендритной морфологии (рис. 1).

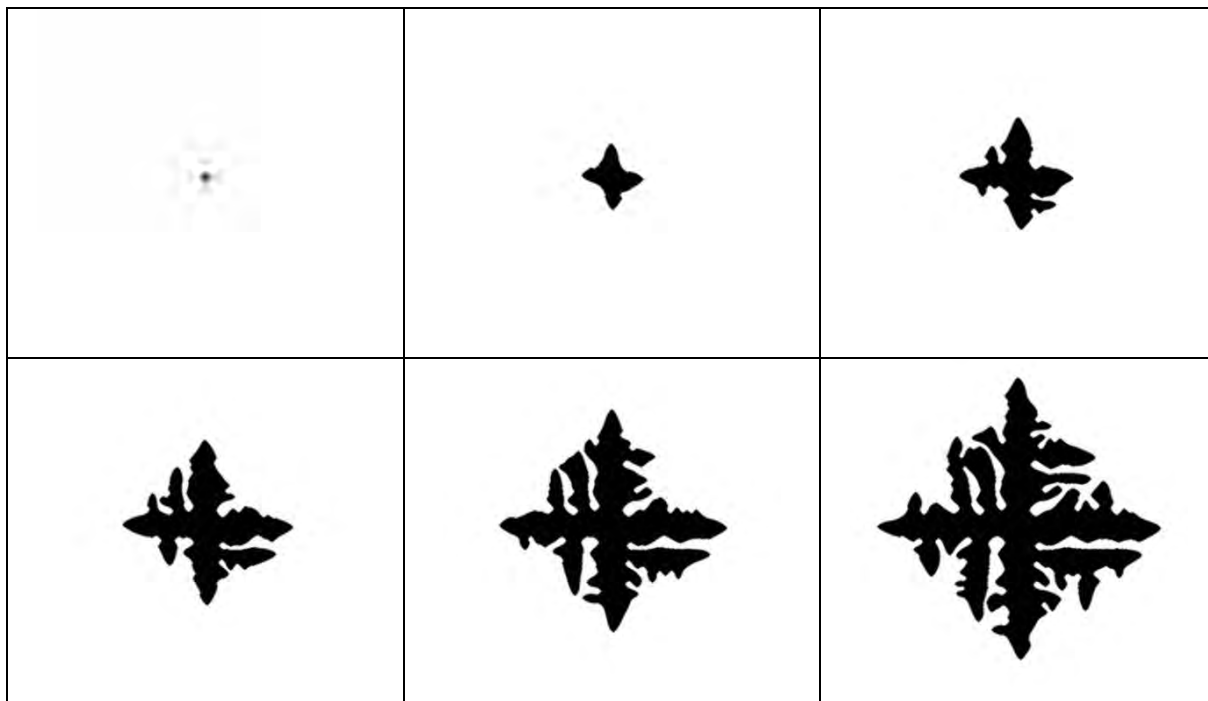


Рис. 1. Рост дендрита кремния с сильными пространственными флуктуациями переохлаждения, величина флуктуаций температуры до 25 % от общего значения переохлаждения, временные флуктуации отсутствуют

Уменьшение размаха пространственных флуктуаций сказывается на морфологии довольно слабо. По-видимому, неустойчивость роста в зоне последних по времени рисунков эволюции кристалла в каждой серии уже достаточно велика. В этих условиях кристалл имеет примерно одинаковую морфоло-

гию для всех начальных наборов флуктуаций.

Отметим также, что для малой амплитуды вторичных и третичных ветвей профиль периметра кристалла представляет из себя «пилу», в отличие от синусоидального возмущения при малой анизотропии (рис. 2).



Рис. 2. Увеличенный фрагмент части изображения из серии (см. рис. 1)

### ***Морфология граничных кристаллов при расщеплении растущей ветви с изменением условий роста***

При кристаллизации многих веществ с большой анизотропией поверхностного натяжения, например кремния, имеет место появление новых направлений роста кристалла с увеличением роста переохлаждения [12, 13]. Если направление температурного градиента не совпадает с осью кристалла, вдоль которой наблюдается преимущественный рост, может происходить расщепление растущей ветви на ряд новых. При этом могут наблюдаться как две сросшиеся ветви, например при двойниковании, так и весьма многочисленные ветви, растущие из одной исходной.

Конкретные механизмы расщепления могут быть весьма различны, однако в любом случае морфология роста

должна подчиняться термодинамическим законам сохранения.

Метод фазового поля роста кристаллов давно и успешно используется для анализа морфологии растущих кристаллов и ее изменения при изменении условий роста. Тогда возникает вопрос попытки моделирования расщепления ветвей на основе метода фазового поля путем модификации функции углового распределения анизотропии поверхностного натяжения. В отличие от кристаллов с малой анизотропией, например металлов, морфология растущих ветвей неметаллов, минералов и т. п. малочувствительна к небольшим изменениям функции анизотропии. Однако введение значительного количества шума в расчеты может вызвать расщепление. При этом физическая природа этого шума не конкретизируется – это могут быть дефекты роста кристаллов,

значительное локальное изменение температурного градиента или градиента концентраций элементов кристалла и расплава и т. д. Известно, что при моделировании рост гранных кристаллов существенно зависит от уровня шума [14]. Дополнительная потеря энергии за счет возможной «неполной стыковки» старых и новых ветвей не учитывалась.

Для анализа данного явления был проведен ряд численных экспериментов по росту гранных кристаллов. Расчеты производились для случая роста первичных кристаллов из бинарного сплава. Была использована модельная среда с безразмерными параметрами: переохлаждение:  $\theta = -0,46$ ,  $\lambda = 1$ , безразмерный коэффициент диффузии  $\tilde{D} = 0,5$ . Размер

пространственного узла – 0,8; временно – 0,01. Начальный радиус зародыша составлял 11 узлов сетки.

Ввиду большого значения переохлаждения заметны случаи «попадания в ловушку» примеси, не успевшей диффундировать в расплав (белые пятна внутри черных первичных кристаллов на рисунках).

Угловое распределение анизотропии зависело от переохлаждения. Начальное распределение с шестиугольной симметрией (относительно поворота на 60 град) с изменением переохлаждения со временем заменяется на четырехугольную симметрию. Заметны переориентация направления роста ветвей и появление новых (рис. 3).



Рис. 3. Половина растущего кристалла с изменением во времени степени переохлаждения и симметрии функции анизотропии поверхностного натяжения, начальная гексагональная симметрия сменяется на четырехугольную

Здесь расчеты выполнялись для случая роста первичных кристаллов из бинарного сплава, т. е. скорость роста определялась локальной скоростью удаления второго компонента (примеси) из зоны вблизи границы твердой фазы. Для ускорения расчетов использован режим дополнительного удаления примеси из расплава на достаточно большом расстоянии от границы твердого кристалла. Практически не влияя на морфологию кристаллов, такой режим значительно ускоряет процесс счета, поскольку большая часть времени тратится на расчеты уравнения диффузии во всем вычислительном домене. Уравнение же для фа-

зового поля решается только в достаточно узкой зоне вблизи границы кристалла.

Более того, такое удаление примеси имеет под собой и реальные основания, поскольку частично учитывает конвекцию в расплаве, влияние которой может значительно превышать влияние диффузии на удаление примеси от границы.

Также была рассчитана эволюция первичных кристаллов в случае вышеописанного бинарного сплава с перемешиванием. Был рассчитан рост кристаллов с различной степенью анизотропии для одинаковой интенсивности перемешивания (рис. 4).



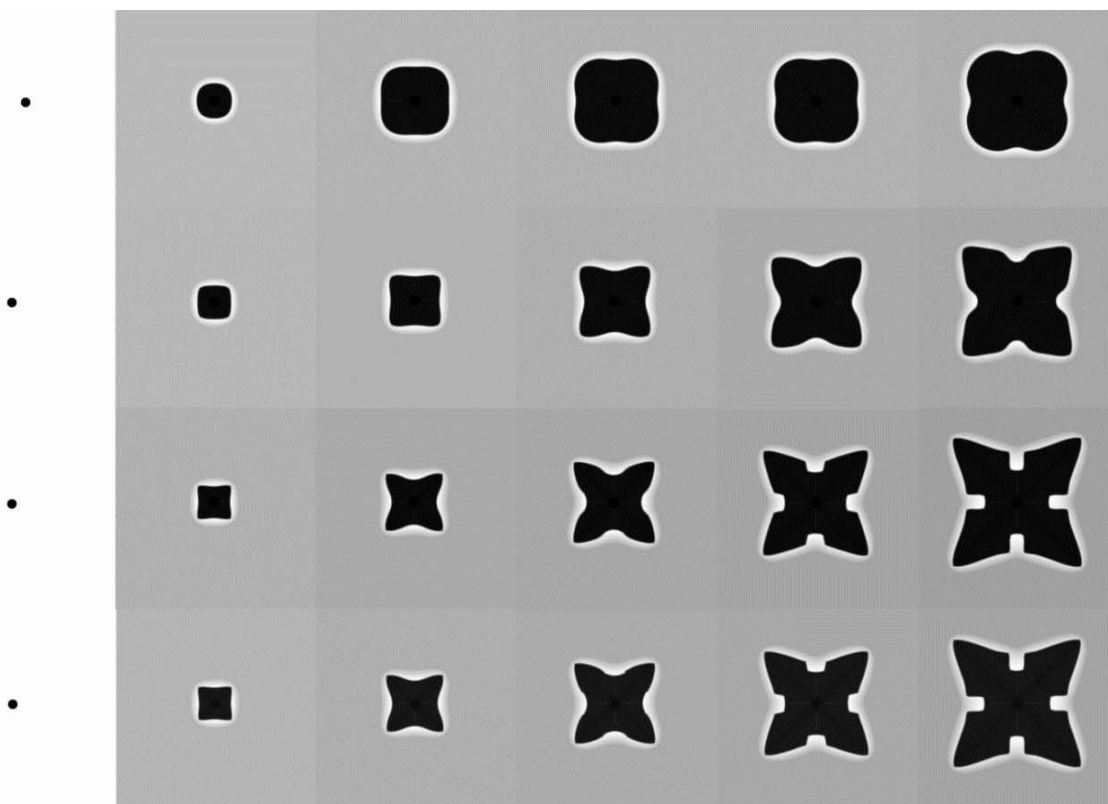


Рис. 4. Эволюция кристалла при росте с перемешиванием для различных степеней анизотропии. Ряды рисунков соответствуют значениям анизотропии  $\varepsilon_4$ : 0,01; 0,03; 0,09 и 0,17 (регуляризованное решение) сверху вниз

Два последних варианта анизотропии 0,09 и 0,17 близки друг к другу. Практически перемешивание не влияет на морфологию кристаллов для случая анизотропии более 0,09.

Как упоминалось ранее, большое многообразие возможных направлений роста гранных кристаллов приводит к большому количеству возможных морфологий. Однако такие морфологии продолжают сохранять основное свойство гранных кристаллов – отсутствие определенных ориентаций граней с высокой поверхностной энергией. Просто с изменением направления главных осей кристаллов изменяются и ориентации возможных нормалей к поверхности. Тем не менее гранные кристаллы значительно менее подвержены такому искажению формы, как изгиб поверхности или ветви на произвольный угол относительно главных осей.

### Заключение

Регуляризованный алгоритм был реализован программно как для случая расплава из одного элемента, так и для роста первичных кристаллов в бинарных сплавах. Проведен анализ отличий морфологии гранных (faceted) кристаллов от обычных (unfaceted).

Большинство отличий связано с невозможностью гранных кристаллов иметь плавно изогнутую поверхность.

1. Возмущение плоского фронта, приводящее к росту ветвей, имеющее для обычных кристаллов вид синусоиды, для гранных кристаллов имеет вид «пилы».

2. Для металлических кристаллов ветви плавно изгибаются при обходе препятствий, например зон повышенной температуры или концентрации второго компонента. Для гранных кри-

сталлов ветви должны только расщепляться для обхода.

3. Проведено моделирование роста в условиях флуктуаций температуры по времени и пространству. По сравнению с обычными кристаллами влияние таких флуктуаций на морфологию значительно меньше.

4. При изменении переохлаждения у таких кристаллов часто добавляются/пропадают различные направления роста – изменяется вид функции

анизотропии. Проведено моделирование роста с одновременным изменением переохлаждения и симметрии функции анизотропии в определенной области пространства. Приведены примеры морфологии расщепления ветвей.

5. Произведены расчеты для оценки влияния перемешивания расплава на морфологию кристаллов различной степени анизотропии. Показано, что при степени анизотропии выше 9 % влияние перемешивания мало.

#### СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. A new phase-field model for strongly anisotropic systems / S. Torabi [et al.] // Proc. R. Soc. A. – 2009. – Vol. 465. – P. 1337–1359.
2. **Eggleston, J. J.** Ordered growth of nanocrystals via a morphological instability / J. J. Eggleston, P. W. Voorhees // Appl. Phys. Lett. – 2002. – Vol. 80. – P. 306–308.
3. **Wise, S. M.** Solving the regularized, strongly anisotropic Cahn-Hilliard equation by an adaptive non-linear multigrid method / S. M. Wise, J. Kim, J. S. Lowengrub // J. Comp. Phys. – 2007. – Vol. 226. – P. 414–446.
4. **Ratz, A.** Higher order regularization of anisotropic geometric evolution equations in three dimensions / A. Ratz, A. Voigt // J. Comput. Theor. Nanosci. – 2006. – № 3. – P. 560–564.
5. **Wheeler, A. A.** Phase-field theory of edges in an anisotropic crystal / A. A. Wheeler // Proc. R. Soc. A. – 2006. – Vol. 462. – P. 3363–3384.
6. **Eggleston, J. J.** A phase-field model for highly anisotropic interfacial energy / J. J. Eggleston, G. McFadden, P. W. Voorhees // Physica D. – 2001. – Vol. 150. – P. 91–103.
7. Phase-field modeling of binary alloy solidification with coupled heat and solute diffusion / J. C. Ramirez [et al.] // Physical Review E 69. – 2004.
8. **Марукович, Е. И.** Моделирование роста дендритов при кристаллизации с малым переохлаждением силуминовых сплавов на основе метода фазового поля / Е. И. Марукович, А. М. Брановицкий, Ю. А. Лебединский // Весці НАН Беларусі. Сер. фіз.-тэхн. навук. – 2009. – № 1. – С. 4–13.
9. Phase-field modeling for facet dendrite growth of silicon / H. Kasajima [et al.] // Science and Technology of Advanced Materials. – 2003. – № 4. – P. 553–557.
10. Turbulent transport of oxygen in the Czochralski growth of large silicon crystals / T. Zhang [et al.] // Journal of Crystal Growth. – 1999. – Vol. 198/199 (1). – P. 141–146.
11. **Diepers, H.-J.** History effects during the selection of primary dendrite spacing. Comparison of phase-field simulations with experimental observations / H.-J. Diepers, D. Ma, I. Steinbach // Journal of Crystal growth. – 2002. – Vol. 237–239. – P. 149–163.
12. **Napolitano, R. E.** Faceted Solidification Morphologies in Low-Growth-Rate Al-Si Eutectics / R. E. Napolitano, H. Meco, C. Jung // JOM. – 2004. – Vol. 56. – P. 16–21.
13. **Shahani, A.** The mechanism of eutectic growth in highly anisotropic materials / A. Shahani, X. Xiao, P. Voorhees // Nat Commun. – 2016.
14. Phase-field crystal simulation facet and branch crystal growth / Z. Chen [et al.] // Applied Physics A. – 2018.

Статья сдана в редакцию 8 декабря 2023 года

Контакты:

yura\_lebedinsky@mail.ru (Лебединский Юрий Анатольевич);  
inmet@mail.ru (Брановицкий Александр Михайлович).

**Y. A. LEBEDINSKY, A. M. BRANOVITSKY**

## **SIMULATION OF CRYSTAL GROWTH WITH A HIGH DEGREE OF ANISOTROPY UNDER VARYING CRYSTALLIZATION CONDITIONS**

### **Abstract**

An algorithm for modeling crystal growth has been implemented by using the phase field method with regularizing the surface tension anisotropy function for the two-dimensional case. Calculations have been made for the silicon crystal growth under strong supercooling and for the growth from a hypereutectic Al-Si melt. The morphologies of crystal growth in a medium with a fluctuating temperature dependence upon the level of spatial and temporal fluctuations have been calculated for various anisotropy degrees. The morphology change is calculated for the case when the anisotropy changes from quadrangular to hexagonal symmetry during the growth. The impact of strong anisotropy is assessed for the case of crystal growth in a moving melt.

### **Keywords:**

faceted crystals, microstructure, phase field method, modeling, morphology of primary crystals.

### **For citation:**

Lebedinsky, Y. A. Simulation of crystal growth with a high degree of anisotropy under varying crystallization conditions / Y. A. Lebedinsky, A. M. Branovitsky // Belarusian-Russian University Bulletin. – 2024. – № 1 (82). – P. 35–45.