# 微重力下溶液法晶体生长模型中 晶体生长界面稳定性的研究\*

霍崇儒<sup>1</sup>) 朱振 $1^2$ ) 葛培 $1^1$ ) 陈  $8^1$ )

<sup>1</sup>(中国科学院物理研究所,北京 100080)
 <sup>2</sup>(中央民族大学物理系,北京 100081)
 (1999年11月9日收到 2000年11月21日收到修改稿)

研究在微重力条件下溶液法晶体生长的一个二维数学模型中晶体生长界面的稳定性问题. 对晶体生长界面 为不同倾斜角度的平面的情况作了数值计算,计算结果表明有可能存在一个稳定的晶体生长界面,它应该是一个 在  $Y = \lambda$  这一端向后倾的适当形状的曲面.

关键词:微重力,溶液法晶体生长,二维模型,生长界面的稳定性 PACC:0260,0540,8110D

## 1 引 言

我们曾在一系列论文中<sup>[1-8]</sup>采用一个充满溶 液的长方体容器模型研究了微重力条件下溶液法晶 体生长的特性,假设长方体在 z 方向的尺寸足够 长,此模型在数学上简化为一个二维问题.在那些 论文中我们求得了在各种条件下偏微分方程组的定 态解及其弛豫特性.在晶体生长速率非常缓慢,满 足准稳态条件的情况下,作这样的处理是合理的. 同时,这样的处理也暗含了如下假设.模型的几何形 状不随时间而变化.在上述模型中并未涉及晶体的 生长,只是在最终获得了溶质浓度分布的定态解以 后,把在晶体生长界面法向上的溶质浓度梯度乘以 一个系数解释为晶体生长速率<sup>[1-3]</sup>.

在上述模型中晶体生长界面是平面(x = 0). 计算结果表明<sup>1-3 9,10</sup>,在各种条件下晶体生长速 率都是 y 的函数.这意味着,在晶体生长时生长界 面的形状会发生畸变,这与准稳态的假设是矛盾的. 因此有必要研究这样一个问题:是否存在一个稳定 的晶体生长界面?亦即是否存在这样一个晶体生长 界面(用曲线 x = f(y))来表示),以致模型中的晶体 生长界面取作 x = f(y)时,晶面在 x 方向上推进的 速率不随<sub>义</sub>而变.如果存在这样一个曲面,则在晶体生长的过程中其形状保持不变.

在研究晶体生长界面的稳定性问题时 须计算 在界面上晶体生长速率的分布 ,事实上界面动力学 效应是影响晶体生长速率的主要因素 ,界面上台阶 的形成对界面的稳定性有重大的影响 很多人研究 了这方面的问题<sup>11-14</sup>].在我们以前的系列论文中, 只是在文献 7 和 8 中以最简单的形式讨论了界面 动力学效应 在其他论文中略去了界面动力学效应. 计算结果表明 以这种方法处理的界面动力学效应 对计算结果有一定的影响,但并没有使晶体生长特 性发生根本性的改变 78]. 在微重力下与地面上生 长晶体的条件的根本区别是重力水平有几个数量级 的差异 由此导致在溶液中对流的强度有巨大的差 异.因此我们希望研究对流-扩散效应对晶体生长 界面稳定性的影响 为此 采用一个类似于以前采用 的不考虑界面动力学效应的模型[1]. 虽然用此模型 得到的结果与实际情况不同 但它可以把对流-扩散 效应单独显示出来 使问题单纯化 使我们清楚地了 解对流-扩散效应对晶体生长界面稳定性的影响。

为此,先对晶体生长界面为不同倾斜角度的平面的情况作计算.图1为采用的模型和坐标系,图1 (a)表示上端前倾的情况;图1(b)表示上端后倾的

<sup>\*</sup>中国科学院国家微重力实验室资助的课题.

情况.图 1 表示垂直于 z 轴的前、后侧面为梯形的 一个四棱柱容器,容器内充满了晶体生长的母液.z方向的边长足够长,使得此模型在数学上简化为一 个二维问题.x 方向的边长为a,y 方向的边长为b. 左边的倾斜平面为晶体生长面,面上的温度取作常 量 $T_s$ ,表面处溶质浓度为 $T_s$ 温度下的饱和浓度 $c_s$ ; 右边的容器壁为溶质源,器壁表面(x = a)的温度取 作常量 $T_i$ ,表面处溶质浓度为 $T_i$ 温度下的饱和浓 度 $c(c_i > c_s, -$ 般说来, $T_i > T_s$ ).上、下器壁表面 (y = b 和y = 0)的温度T 取作x 的线性函数,从T= T(x = a).微重力的取向为- y方向.



(a)晶体生长界面的上端前倾



(b) 晶体生长界面的上端后倾 图 1 本文所用的模型及坐标系的示意图

#### 2 运动方程

采用在文献[2]中给出的 Navier-Stokes 方程 (忽略由溶质浓度 c 的变化而引起的溶液密度  $\rho$  的 变化 ,即假定系数  $\alpha \approx 0$  ) 连续性方程、对流-扩散方 程和导热方程 ,并引入流函数  $\phi$  和旋函数  $\varepsilon$ . 再引 入如下的无量纲参量  $\lambda$  ,无量纲自变量 X ,Y ,V 和 无量纲函数  $\Psi$  , $\Xi$  , $\theta$  , $\varphi$ :

$$\lambda = b/a$$
,  $X = x/a$ ,  $Y = y/a$ , (1)

$$\mathbf{V} = (a/\chi)\mathbf{v} , \qquad (2)$$

$$\Psi = (1/\gamma)\psi, \qquad (3)$$

$$\Xi = (a^2/\chi)\xi, \qquad (4)$$

$$\phi = (c_i - c)(c_i - c_s),$$
 (5)

$$= (T_i - T)/(T_i - T_s),$$
 (6)

其中 ν 是流体速度 ,χ 是热扩散系数. 这样就得到 下列无量纲化的偏微分方程组:

$$\nabla_R^2 \Xi = \frac{1}{Pr} \left( \frac{\partial \Psi}{\partial Y} \frac{\partial \Xi}{\partial X} - \frac{\partial \Psi}{\partial X} \frac{\partial \Xi}{\partial Y} \right) - Ra \frac{\partial \theta}{\partial X} (7)$$

$$\nabla_R^2 \theta = \frac{\partial \Psi}{\partial Y} \frac{\partial \theta}{\partial X} - \frac{\partial \Psi}{\partial X} \frac{\partial \theta}{\partial Y} , \qquad (8)$$

$$abla_R^2 oldsymbol{\Psi} = oldsymbol{\Xi}$$
 , (9)

$$\nabla_R^2 \phi = \frac{Sc}{Pr} \left( \frac{\partial \Psi}{\partial Y} \frac{\partial \phi}{\partial X} - \frac{\partial \Psi}{\partial X} \frac{\partial \phi}{\partial Y} \right), \quad (10)$$

其中算符∇<sub>R</sub><sup>2</sup>为

θ

$$\nabla_R^2 = \frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{\partial^2}{\partial Y^2} , \qquad (11)$$

*Ra*, *Pr*和 *Sc* 是三个无量纲数: Rayleigh 数、Prandtl 数和 Schmidt 数,分别由下列公式给出:

$$Ra = a^{3}\beta g_{0}g(T_{i} - T_{s})/(\chi \chi)$$
, (12)

$$Pr = \nu/\chi , \qquad (13)$$

$$Sc = \nu/D , \qquad (14)$$

其中 ν 是运动黏滞度 ,β 是热膨胀系数 ,D 是溶质扩 散系数 , $g_0$  是地面上的重力加速度 ,g 是相对的微 重力水平.

容器左边的边界面(晶体生长界面)用直线 X = ƒ(Y)表示,对于图1(a)的情况,

$$f(Y) = Y \tan \alpha$$
 , (15a)

其中  $\alpha$  是该直线与 Y 轴的夹角. 对于图 1( b )的 情况,

$$f(Y) = (Y - \lambda) \tan \alpha$$
 (  $\alpha$  为负值).  
(15b)

对于方程组(7)--(10)的边界条件类似于文献 4]中 的边界条件,可以表示为

$$\frac{\partial \Psi(X,Y)}{\partial X}\Big|_{X=f(Y)} = \frac{\partial \Psi(X,Y)}{\partial Y}\Big|_{X=f(Y)} = 0,$$
(16)
$$\frac{\partial \Psi(1,Y)}{\partial Y} = \frac{\partial \Psi(X,0)}{\partial Y} = \frac{\partial \Psi(X,\lambda)}{\partial Y} = 0.$$

$$\frac{\partial \Psi(1,Y)}{\partial Y} = \frac{\partial \Psi(X,D)}{\partial X} = \frac{\partial \Psi(X,X)}{\partial X} = 0 ,$$
(17)

$$\frac{\partial \Psi(X,Y)}{\partial X}\Big|_{X=1} = \frac{\partial \Psi(X,Y)}{\partial Y}\Big|_{Y=0}$$
$$= \frac{\partial \Psi(X,Y)}{\partial Y}\Big|_{Y=\lambda} = 0 \text{ (18)}$$

$$\Psi(X,Y)|_{X=f(Y)} = \Psi(1,Y) = \Psi(X,0)$$

$$= \Psi(X,\lambda), \quad (19)$$

$$\theta(X,Y)|_{X=f(Y)} = 1, \quad \theta(1,Y) = 0, (20)$$

$$\theta(X,0) = 1 - X, \quad \theta(X,\lambda) = 1 - \frac{X - f(\lambda)}{1 - f(\lambda)}, \quad (21a)$$

$$\theta(X,0) = 1 - \frac{X - f(0)}{1 - f(0)}, \quad \theta(X,\lambda) = 1 - X, \quad (21b)$$

$$\phi(X,Y)|_{X=f(Y)} = 1, \quad \phi(1,Y) = 0, (22)$$

 $\frac{\partial \not(X,Y)}{\partial Y}\Big|_{Y=0} = \frac{\partial \not(X,Y)}{\partial Y}\Big|_{Y=\lambda} = 0 ,(23)$ 其中(21a)式适用于图 1(a)的情况,f(\lambda)由(15a)

其中(21a) 民运用于图1(a)的情况,f(λ)田(15a) 式给出(21b)式适用于图1(b)的情况,f(0)由 (15b)式给出.

3 坐标变换

在计算时,把 *X*,*Y* 坐标系变换为 *X*<sub>1</sub>,*Y*<sub>1</sub> 坐标 系是比较方便的,变换公式为

 $Y_1 = Y$ ,  $X_1 = \frac{X - f(Y)}{1 - f(Y)}$ . (24) 此变换把图  $\chi(a)$ 或(b)所示的梯形变换为图  $\chi(c)$ 所 示的边长为 1 和  $\lambda$  的长方形,同时把图  $\chi(a)$ 或(b) 所示的不均匀网格变换为图  $\chi(c)$ 所示的方形网格.







$$\begin{aligned} & \left(\frac{a}{a}\right) + \frac{1}{\left[1 - f(Y_{1})\right]^{2}} \frac{\partial^{2} \Xi}{\partial X_{1}^{2}} - \frac{2\tan(1 - X_{1})}{1 - f(Y_{1})} \frac{\partial^{2} \Xi}{\partial X_{1} \partial Y_{1}} + \frac{\partial^{2} \Xi}{\partial Y_{1}^{2}} - \frac{2\tan^{2} \alpha(1 - X_{1})}{\left[1 - f(Y_{1})\right]^{2}} \frac{\partial \Xi}{\partial X_{1}} \right] \\ &= \frac{1}{P_{f}\left[1 - f(Y_{1})\right]^{2}} \frac{\partial \Psi}{\partial Y_{1}} \frac{\partial \Xi}{\partial X_{1}} - \frac{\partial \Psi}{\partial X_{1}} \frac{\partial \Xi}{\partial Y_{1}} \right] - \frac{Ra}{1 - f(Y_{1})} \frac{\partial \theta}{\partial X_{1}}, \tag{25} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{P_{f}\left[1 - f(Y_{1})\right]^{2}} \frac{\partial \Psi}{\partial Y_{1}} \frac{\partial \Xi}{\partial X_{1}} - \frac{\partial \Psi}{\partial X_{1}} \frac{\partial \Xi}{\partial Y_{1}} \right] - \frac{Ra}{1 - f(Y_{1})} \frac{\partial \theta}{\partial X_{1}}, \tag{25} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{P_{f}\left[1 - f(Y_{1})\right]^{2}} \frac{\partial \Psi}{\partial X_{1}} - \frac{\partial \Psi}{\partial X_{1}} \frac{\partial \Xi}{\partial Y_{1}} - \frac{2\tan(1 - X_{1})}{1 - f(Y_{1})} \frac{\partial^{2} \theta}{\partial X_{1}} + \frac{\partial^{2} \theta}{\partial Y_{1}^{2}} - \frac{2\tan^{2} \alpha(1 - X_{1})}{\left[1 - f(Y_{1})\right]^{2}} \frac{\partial \theta}{\partial X_{1}} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{P_{f}\left[1 - f(Y_{1})\right]^{2}} \frac{\partial \Psi}{\partial X_{1}} - \frac{\partial \Psi}{\partial X_{1}} \frac{\partial \theta}{\partial Y_{1}} \right], \tag{26} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{P_{f}\left[1 - f(Y_{1})\right]^{2}} \frac{\partial \Psi}{\partial X_{1}} - \frac{\partial \Psi}{\partial X_{1}} \frac{\partial \theta}{\partial Y_{1}} \right], \tag{26} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{P_{f}\left[1 - f(Y_{1})\right]^{2}} \frac{\partial \Psi}{\partial X_{1}} - \frac{\partial \Psi}{\partial X_{1}} \frac{\partial \theta}{\partial Y_{1}} \right], \tag{26} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{P_{f}\left[1 - f(Y_{1})\right]^{2}} \frac{\partial \Psi}{\partial X_{1}} - \frac{\partial \Psi}{\partial X_{1}} \frac{\partial \theta}{\partial Y_{1}} \right], \tag{26} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{P_{f}\left[1 - f(Y_{1})\right]^{2}} \frac{\partial \Psi}{\partial X_{1}} - \frac{\partial \Psi}{\partial X_{1}} \frac{\partial \theta}{\partial Y_{1}} \right], \tag{26} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{P_{f}\left[1 - f(Y_{1})\right]^{2}} \frac{\partial^{2} \Phi}{\partial X_{1}} - \frac{2\tan(1 - X_{1})}{1 - f(Y_{1})} \frac{\partial^{2} \Psi}{\partial X_{1} \partial Y_{1}} + \frac{\partial^{2} \Psi}{\partial Y_{1}^{2}} - \frac{2\tan^{2} \alpha(1 - X_{1})}{\left[1 - f(Y_{1})\right]^{2}} \frac{\partial \Psi}{\partial X_{1}}} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{P_{f}\left[1 - f(Y_{1})\right]^{2}} \frac{\partial^{2} \Phi}{\partial X_{1}^{2}} - \frac{2\tan(1 - X_{1})}{1 - f(Y_{1})} \frac{\partial^{2} \Phi}{\partial X_{1} \partial Y_{1}} + \frac{\partial^{2} \Phi}{\partial Y_{1}^{2}} - \frac{2\tan^{2} \alpha(1 - X_{1})}{\left[1 - f(Y_{1})\right]^{2}} \frac{\partial \Psi}{\partial X_{1}}} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &= \frac{Sc}{P_{f}\left[1 - f(Y_{1})\right]^{2}} \frac{\partial^{2} \Phi}{\partial X_{1}} - \frac{2\tan(1 - X_{1})}{1 - f(Y_{1})} \frac{\partial^{2} \Phi}{\partial X_{1} \partial Y_{1}} + \frac{\partial^{2} \Phi}{\partial Y_{1}^{2}} - \frac{2\tan^{2} \alpha(1 - X_{1})}{\left[1 - f(Y_{1})\right]^{2}} \frac{\partial \Phi}{\partial X_{1}}} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{P_{f}\left[1 - f(Y_{1})\right]^{2}} \frac{\partial^{2} \Phi}{\partial X_{1}^{2}} - \frac{2\tan(1 - X_{1})}{1 - f(Y_{1})} \frac{\partial^{2} \Phi}{\partial X_{1}^{2}} - \frac{2\tan(1 - X_{1$$

$$\frac{\partial \Psi(0, Y_1)}{\partial Y_1} = \frac{\partial \Psi(1, Y_1)}{\partial Y_1} = \frac{\partial \Psi(1, 0)}{\partial X_1}$$
$$= \frac{\partial \Psi(X_1, \lambda)}{\partial X_1} = 0, \quad (29)$$
$$\frac{\partial \Psi(X_1, Y_1)}{\partial X_1} \Big|_{X_1=0} = \frac{\partial \Psi(X_1, Y_1)}{\partial X_1} \Big|_{X_1=1}$$
$$= \frac{\partial \Psi(X_1, Y_1)}{\partial Y_1} \Big|_{Y_1=0}$$
$$= \frac{\partial \Psi(X_1, Y_1)}{\partial Y_1} \Big|_{Y_1=\lambda}$$
$$= 0, \quad (30)$$
$$\Psi(0, Y_1) = \Psi(1, Y_1) = \Psi(X_1, 0)$$

$$\Psi(0, Y_1) = \Psi(1, Y_1) = \Psi(X_1, 0)$$
  
=  $\Psi(X_1, \lambda) = 0$ , (31)  
 $\theta(0, Y_1) = 1$ ,  $\theta(1, Y_1) = 0$ , (32)  
 $\theta(X_1, 0) = \theta(X_1, \lambda) = 1 - X_1$ , (33)

$$\oint (0, Y_1) = 1, \quad \oint (1, Y_1) = 0, \quad (34)$$

$$\left. \frac{\partial \oint (X_1, Y_1)}{\partial Y_1} \right|_{Y_1 = 0} - \frac{\tan (1 - X_1)}{1 - f(0)} \frac{\partial \oint (X_1, 0)}{\partial X_1} = 0,$$

$$(35)$$

$$\frac{\partial \oint (X_1, Y_1)}{\partial Y_1} \Big|_{Y_1 = \lambda} - \frac{\tan(1 - X_1)}{1 - f(\lambda)} \frac{\partial \oint (X_1, \lambda)}{\partial X_1} = 0.$$
(36)

#### 4 计算与结果

采用图 2(c)所示的网格,将偏微分方程组 (25)-(28)连同表示边界条件的(29)-(36)式化为 差分方程组,用带弛豫参量的迭代法<sup>15]</sup>求方程组的 数值解.在计算中各个参数的取值为  $Ra = 5 \times 10^4$ 或 5 × 10<sup>5</sup>, Pr = 6,  $Sc = 10^2$ ,  $\lambda = 0.2$ ,  $\tan \alpha = 0$ . 3375, 0.1429, 0.0363, 0, -0.0363, -0.1429, -0.3375.在求得 $\theta$ ,  $\phi$ ,  $\Psi$ ,  $\Xi$ 的稳态解以后,把求 得的  $\phi$ ( $X_1$ ,  $Y_1$ )变换回到 X, Y 坐标系,在 X, Y 坐 标系中计算晶体生长界面上各点的晶体生长速度.

图 3 表示晶体生长的过程. 在晶体生长界面上 溶质浓度梯度的方向垂直于晶体生长界面,因此晶 体生长速度的方向也垂直于晶体生长界面,用  $V_{cg}$ 表示无量纲化晶体生长速度. 在 t 时刻界面处于A 位置,在 t +  $\Delta t$  时刻界面移动到B 位置(见图 3),A 直线和 B 直线之间的距离为 $ab = V_{cg}\Delta t$ ,界面在 X 方向上推进的距离为





$$ac = \frac{ab}{\cos \alpha} = \frac{V_{\rm cg}\Delta t}{\cos \alpha}.$$
 (37)

所以界面沿 X 方向推进的无量纲化速率(称为无量 纲化的 X 方向晶体生长速率 ,用  $V_{cr}$  , 表示 )为

$$V_{\text{cg},X} = \frac{ac}{\Delta t} = \frac{V_{\text{cg}}}{\cos \alpha}$$
 , (38)

无量纲化晶体生长速度由下式给出[4]:

$$V_{cg} = \frac{(c_i - c_s)Pr}{\rho_c Sc} \nabla_R \phi |_{X=f(Y)}$$
$$= -\eta \frac{Pr}{Sc} \nabla_R \phi |_{X=f(Y)}, \qquad (39)$$

其中  $\rho_c$  是晶体的密度 ,算符 $\nabla_R$  为

$$\nabla_R = \mathbf{e}_X \frac{\partial}{\partial X} + \mathbf{e}_Y \frac{\partial}{\partial Y} , \qquad (40)$$

因此

$$V_{cg,X} = \frac{\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{V}_{cg}}{\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{e}_{X}}$$

$$= -\eta \frac{Pr}{Sc} \left[ \boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{e}_{X} \frac{\partial \varphi}{\partial X} \right|_{X=f(Y)}$$

$$+ \boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{e}_{Y} \frac{\partial \phi}{\partial Y} \Big|_{X=f(Y)} \frac{1}{\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{e}_{X}}$$

$$= -\eta \frac{Pr}{Sc} \left[ \frac{\partial \phi}{\partial X} \right|_{X=f(Y)}$$

$$- \tan \alpha \frac{\partial \phi}{\partial Y} \Big|_{X=f(Y)} \left]. \qquad (41)$$

不难证明,此式对于图 1(b)的情况( $\alpha$ 为负值)依然 成立.以上式中的  $e_X$ ,  $e_Y$ 和n 各为X方向、Y方向和 界面法向的单位矢量(见图 3).

通过计算得知  $V_{cg,X} \in Y$  的函数,计算结果如 图 4 所示. 由图 4 可知,1)当  $\alpha \ge 0$  时,X 方向晶体 生长速率随 Y 而增大,而且倾角  $\alpha$  越大,则增大的 比例也越大. 这说明,当晶体从 X = 0 平面开始往 前生长时,由于  $Y = \lambda$ 这一端的生长速率较大,晶



(a)  $Ra = 5 \times 10^4$ 



(b) *Ra* = 5×10<sup>5</sup> 图 4 晶体生长表面呈不同倾斜角度时, *X* 方向晶体生长速率 随 *Y* 的变化

体生长界面的  $Y = \lambda$  这一端将逐渐向前倾,而且倾 斜角度越来越大. 2)当  $\alpha < 0$  时, X 方向晶体生长 速率作为 Y 的函数是一条 S 形的曲线,而且对于某 个  $\alpha$  值, X 方向晶体生长速率在 Y = 0 和  $Y = \lambda$  这 两端是相等的.

上述结果在物理上可以这样解释 :当  $\alpha = 0$  时, 容器内的流线图由文献 1]的图 4 和文献 2]的图 4 给出,在本文的情况下,流体是逆时针方向流动的. 溶质源在右边,在容器上部溶液从右向左流动,这样 导致在晶体生长面的上部晶体生长速率较快,下部 晶体生长速率较慢(见图4(a)).在容器左上角是直 角,而流线是平滑地弯曲的,因此在角上溶液的流速 为零.这导致在对流较强(Ra较大)时,虽然总的说 来晶体生长面上部的晶体生长速率比下部的快,但 是在最上端的晶体生长速率反而变小了(见图 4(b)). 当a < 0时,容器左上角变成锐角,溶液更不 容易流入这个角.因此与a = 0的情况相比,晶体生 长界面上端的晶体生长速率变小;而在界面的下部 溶液的流向是朝着生长界面的,所以与a = 0的情 况相比较,晶体生长速率变大.这样  $V_{cg,X}$  Y 曲线 变成 S 形了.

虽然对于某个负的  $\alpha$  值,  $V_{cg,X}(Y = 0) = V_{cg,X}(Y = \lambda)$ ,但是由于 X方向晶体生长速率仍是 Y的函数,因此这个向后倾的平面形晶体生长界面仍然是不稳定的.但是如果把以适当角度后倾的平面修正为适当形状的曲面,有可能使得 X 方向晶体 生长速率不随 Y 而变.

### 5 结论与讨论

计算结果表明,对于我们所采用的模型有可能 存在一个稳定的晶体生长界面,它应该是一个上端 以适当的角度向后倾并取适当形状的曲面. 当模型 中的晶体生长界面取作这样一个曲面时, *X* 方向晶 体生长速率是常量,不随 Y 而变,在晶体生长过程 中界面的形状保持稳定不变. 我们已经设计出一个 计算方案,下一步工作是设法把稳定界面的形状 *X* = <u>f(Y</u>)计算出来(如果存在).

在本文采用的模型中,只考虑溶液中的对流-扩 散作用,不考虑晶体的晶格结构及其对晶体生长的 影响.实际上,晶格结构对晶体生长的影响是不可 忽略的,例如,晶体生长速度是各向异性的,沿不同 方向的晶体生长速度有相当大的差异;在原子或分 子落到晶面上形成台阶的时候,晶体生长速率将会 显著地加快(与平坦晶面的生长速率相比较).在本 文的模型中不考虑这些重要的效应,所以本文计算 得到的晶体生长速率与实际情况相比可能有相当大 的差异,计算结果只是反映了微重力条件下溶液法 晶体生长过程中对流 – 扩散效应对晶体生长速度的 影响.

- [1] C. R. Huo, P. W Ge, Z. Y Xu, Z. H. Zhu, J. Cryst. Growth, 114(1991) A86.
- [2] Z. Y. Xu, C. R. Huo, P. W. Ge, Z. H. Zhu, J. Cryst. Growth, 125(1992),135.
- [3] Z. Y. Xu, C. R. Huo, P. W. Ge, Z. H. Zhu, J. Cryst. Growth ,129 (1993) 506.
- [4] Z. Y. Xu, C. R. Huo, P. W. Ge, Z. H. Zhu, J. Cryst. Growth ,137 (1994) 538.
- [5] Z. Y. Xu, C. R. Huo, P. W. Ge, Z. H. Zhu, Commun. Theor. Phys., 24 (1995),159.
- [6] C. R. Huo, Z. Y. Xu, W. D. Huang, P. W. Ge, Z. H. Zhu, J. Cryst. Growth 158 (1996) 359.
- [7] Z. H. Zhu, P. W. Ge, C. R. Huo, Z. Y. Xu, Commun. Theor. Phys., 30(1998),391.
- [8] Z.H. Zhu, P.W. Ge, C.R. Huo, Z.Y. Xu, Acta Physica

Sinica ( Overseas Edition ) ,7 (1998 ) 801.

- [9] J.K. Baird, E. J. Meehan, A. L. Xidis, S. B. Howard, J. Cryst. Growth, 76 (1986), 694.
- [10] H. Lin, F. Rosenberger, J. I. D. Alexander, A. Nadarajah, J. Cryst. Growth, 151(1995), 153.
- [11] P.G. Vekilov, H. Lin, F. Rosenberger, Phys. Rev., E55 (1997) 3202.
- [12] S.R. Coriell, A.A. Chernov, B.T. Murray, G.B. McFadden, J. Cryst. Growth, 183(1998), 669.
- [13] P.G. Vekilov, F. Rosenberger, H. Lin, B. R. Thomas, J. Cryst. Growth, 196 (1999), 261.
- [14] F. Rosenberger, H. Lin, P. G. Vekilov, Phys. Rev., E59 (1999), 3155.
- [15] S. E. Koonin , Computational Physics (Benjamin , Cummings , 1986).

## THE STABILITY OF THE CRYSTAL GROWTH FACE IN A MODEL FOR CRYSTAL GROWTH FROM SOLUTION UNDER MICROGRAVITY\*

HUO CHONG-RU<sup>1</sup>) ZHU ZHEN-HE<sup>2</sup>) GE PEI-WEN<sup>1</sup>) CHEN DONG<sup>1</sup>)

<sup>1</sup> (Institute of Physics ,Chinese Academy of Sciences ,Beijing 100080 ,China ) <sup>2</sup> (Department of Physices ,Central University for Nationalities ,Beijing 100081 ,China ) (Received 9 November 1999 ; revised manuscript received 21 November 2000 )

#### Abstract

The stability of the crystal growth face in a two-dimensional mathematical model of crystal growth from solution under microgravity is studied. The growth rate of a crystal is calculated for various tilt angles of the crystal growth face. It is known from the results of calculation that there exists possibly a stable growth face of the crystal. This face should be a suitably shaped curve with the upper end of the face tilting backwards.

 $\label{eq:keywords:microgravity, crystal growth from solution, two-dimensional model, stability of crystal growth interface PACC: 0260, 0540, 8110D$ 

<sup>\*</sup> Project supported by the Foundation of the National Microgravity Laboratory of Chinese Academy of Sciences.