

行政院國家科學委員會專題研究計畫 期中進度報告

固化界面失穩及型態發展之非線性解析及可視化研究(1/3)

計畫類別：個別型計畫

計畫編號：NSC91-2214-E-002-027-

執行期間：91年08月01日至92年07月31日

執行單位：國立臺灣大學化學工程學系暨研究所

計畫主持人：藍崇文

報告類型：精簡報告

報告附件：出席國際會議研究心得報告及發表論文

處理方式：本計畫可公開查詢

中 華 民 國 92 年 5 月 28 日

目錄

摘要	1
第一章	
1-1 前言	3
1-2 文獻回顧	4
第二章 實驗器材與實驗步驟	
2-1 SCN之純化	6
2-2 薄膜觀察系統	7
2-3 實驗流程	9
第三章 研究成果與討論	
3-1 SCN純度量測	10
3-2 摻雜丙酮介面現象之觀察	11
3-3 實驗討論	15
第四章 數值模擬	
4-1 Introduction	16
4-2 Phase Field Model I—Dendritic Growth	17
4-3 Phase Field Model – Directional Solidification	20
未來工作展望	27
參考文獻	28

中文摘要

合金固化在材料加工處理上扮演重要的角色，所以合金界面現象研究一直深受國內外學者重視，每年均有大批人力投入研究，並發表論文，但較少人從事長時間尺度下之研究，本實驗室便自行建構長時間尺度觀察儀器，並製備極高純度之 SCN，如此便能將雜質效應最小化以便觀察雙成分合金固液界面對時間之演化現象。

本計劃除了最主要的實驗部分以外，最後還包含了利用相場模式 (phase field model) 來進行數值模擬，因為本實驗是在低溫度梯度和低拉速之下進行的，遠遠超過現在的電腦運算能力所能容忍的範圍。而本實驗室藉著既有的最先進的適應性網格能力，已經在這方面取得世界領先的地位，並發表許多有關相場模式模擬的文章，相信日後藉著物理與數值方法兩大方面來逼近，終究可以解決此一困難問題。

Abstract

Directional solidification of alloy play an important role during the material manufacture, there are so many people paying much attention to this project and many thesis were presented. But few people research the long time scale experiment. So we build the machine for long time scale observation, and we get the super pure SCN by ourselves. We can see the evolution of the solid-liquid interface formed during the thin film directional solidification.

Not only experimental procedures but also phase field model numerical simulations are included in this project. Because of Low temperature gradient and low pull speed, these calculations are much difficult in terms of the personal computer ability nowadays. However, based on the AMR (Adaptive Mesh Refinement) developed by our lab. , there are have many new publications and we have become one of the best groups in the phase-field model simulation field. It is believed that we will overcome by both physical and numerical approaching.

第一章 緒論

1-1 前言

合金固化現象在材料加工上包括合金鑄造及單晶成長扮演著重要的角色,當晶體生長時溶質偏析常因為自然對流的作用,以造成溶質局部的累積,在界面產生凹洞進而加速界面崩潰,其原因為合金固化時界面放出凝固熱,同時由於如直在固相跟液相兩處的溶解度不相同,在界面處會偏析而形成一邊界層進而影響到凝固溫度和界面型態當組成過冷發生,平整界面可能不穩定,進而發展成細胞狀或樹枝狀結構.

如何控制系統內的流動也是一項相當重要的課題傳統上控制對流的方式有很多種,如藉由外加磁場或是震動旋轉的方式來分散部分累積的溶質.在應用方面,例如在單晶生長平整界面是相當重要的晶體的品質及提純效率都仰賴著平整界面在合金鑄造方面透過控制樹枝狀的碎型結構能提升合金的品質,平整界面反倒是不被希望,因此界面崩潰的條件和崩潰後會如何發展溶質如何分佈在過去就一直是熱門研究領域.因此實驗室以自行製備之可視化系統觀察高純度之 SCN 摻雜丙酮之界面失穩現象,探討界面失穩時細胞狀結構隨時間變化的關係.

1-2 文獻回顧

材料固化時,在界面會有凝故熱放出而界面由於溶質場溫場及流場的交互作用下,平整界面的穩定性會受到影響,巨觀上會有界面的變形,而微觀上在界面可能會出現細胞狀或是樹枝狀的結構在過去四十多年來,已有許多有關於在合金固化程序中,平整界面在當一方向凝固時造成崩潰的判斷條件,最簡單的模式是由 Tiller[1]等人在 1953 年所提出的界面過冷模式,或稱為為結構不穩定模式,當界面溫度梯度不夠高時,在界面前的熔液會受溶質偏析的影響而過冷,此時若給定一小擾動則會引起界面崩潰,Tiller 等人的標準式:

$$V_c = \frac{GD_L k}{mc_0(1-k)}$$

V 為系統達穩定時的界面移動速度, m 為相圖上固化線的斜率, C_0 為邊界層外部的溶質濃度, D 為熔液的擴散係數,而 k 是平衡時的偏析係數上述關係說明如果我們想要得到一個較為穩定的界面系統我們就必須要增加溫度梯度,降低長速或是降低一開始的摻雜濃度,組成過冷模式對界面結構穩定提供了良好的預估,但他忽略了很多的物理現象,其中包括表面張力(或界面能),熱質傳及不穩定時所產生的型態,組成過冷對型態的影響,最大的進展算是 Mullins 和 Sekerka[2]在 1964 年提出的一個考慮熱質傳兩成分合金固化的線性穩定分析他們在界面加入擾動,但是他們並沒有考慮到流動對於界面失穩的影響後

Coriell[3]等人將流動考慮進來做線性分析他們依波數不同分為兩種型態,一為組要發生在長波長的流動不穩態,另一則為發生在短波長的毛細不穩態,在 Schaefer 和 Coriell[4]等人的實驗中,他們也發現在實際的生長時,側面的熱傳遞是無法消除的同時在凝固熱的影響下,除了界面會有相當程度的變形且熱對流的效應極大明顯的,溶質對流的效應並非唯一的控制機制,因此對流型態的穩定性準則在實際上的應用不高,最近在 Lee 和 Brown[5]的實驗中,他們觀察長時間尺度下 SCN 薄膜所發生的現象他們薄膜實驗並非一是個完美的二維尺度,因為 SCN 還是有厚度存在,這第三維空間必須嚴格要求溫度是固定的,否則無法有良好的量測結果透過此設備,能觀察溫度梯度,溶質濃度,表面移動速度,波長和時間的關係.

第二章 實驗器材與步驟

2-1 SCN之純化

本實驗中,使用和 Lee 和 Brown[5]類似的系統,即摻雜丙酮的系統,因鑒於摻雜的丙酮濃度很低,所以 SCN 的初始純度就極為重要,一般而言,市售的 SCN 純度只有 99%,所以必須自行純化以得到高純度的 SCN.

一般而言 SCN 的純化大多以區熔法提煉,使用區熔法雖然能得到濃度極高的 SCN,但卻沒有辦法在短時間內得到大量的產量,從文獻中得知 Rubinstein[6]以多段式區熔法純化 SCN 以得到高純度的 SCN,他們首先利用真空蒸餾把 SCN 蒸餾出,然後導入區熔所使用的坩鍋中,粗略將大部分的雜質去除以得到初步純化的 SCN,再將此 SCN 導入區熔所使用的坩鍋中,每一區熔區都至少以 2.8cm/hr 的速度區熔純化 20 次,所以在大約 40 天後可得到 SCN 純度達 99.99984~99.9997%.

雖然區熔法能得到高純度的 SCN,但是需要時間過長,所以欲在短時間內得到大量的 SCN,此法並可行.針對以上的缺點,LEE[7]等人在 1996 發展出一套真空蒸餾系統,加熱溫度在 160 度,冷凝器溫度在 65 度,真空度低於 50mTorr 的條件下蒸餾,使用此方法約可以在一星期之內得到 1500g 純度高達 99.99992%.

2-2 薄膜觀察系統

1.攝影系統

使用 SONY CCD 做影像擷取,並使用 inspector4.0 做影像處理.

2.顯微鏡系統

使用 Optem 顯微鏡,其放大倍率範圍為 10~240 倍.

3.高溫區及低溫區

為了使高低溫區溫度都是一樣的,所以使用熱傳導性質良好且加工容易的銅作為基材,低溫區冷卻方式為使用液體將熱量帶走,最低溫度可至-15 度,高溫區則是使用加熱帶作為加熱來源,加入最高溫度可達 460 度.其中溫度控制是透過 PID 控制器,PID 控制器會經過計算將溫度轉為 4~20mA 之訊號給 SSR,在依供給的訊號來整加熱帶的電流大小,以達到高溫區的溫度控制.

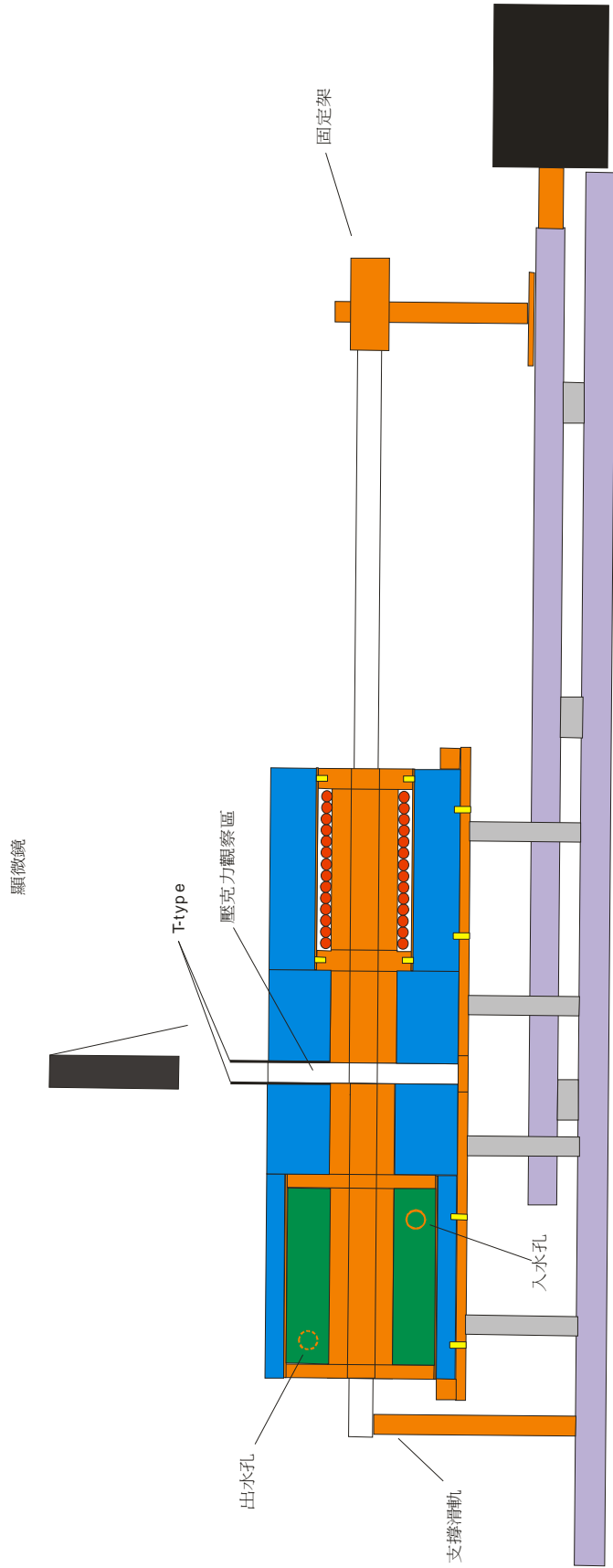
4.絕熱觀察區

使用熱傳道係數和銅相差甚遠的壓克力作為觀察區也因為壓克力為透明具光穿透性且具有和 SCN 相似的光折射率,故選用之.

5.移動系統

使用 oem650X 型步進馬達,RP2100 型微步控制器,線性滑軌等機械零件組合而成,線性滑軌的螺距為 1/40inch,可做精確的移動.

薄膜觀察裝置示意圖



- 冷卻劑
 - 加熱絲
 - 銅片
 - Teflon
 - 螺絲
- 系統 30cm 15cm 10cm 高
 加熱絲用陶瓷管包覆外覆高溫棉
 CE長度由 50cm 長為 5 支撐滑軌和固定架片

2-3 實驗流程

材料：

由廠商直接購得 SCN,此 SCN 純度為 99%,其熔點為 53~56 度,沸點為 265~267 度,外觀上為透明淺黃色富有彈性,由於純度不夠純,經過實驗室學長姐使用真空蒸餾後,得到 99.9999%的 SCN.

填裝 SCN 步驟：

1.將玻璃表面先以清潔劑清洗後再用丙酮清洗數次,在用去離子水清洗,待乾燥後,玻璃跟玻璃間使用 teflon 帶來形成 70 μ m 的 gap.

2.使用矽膠來黏封玻璃及鋁塊之間的隙縫由於玻璃和鋁塊之間的縫隙較大,故先以 teflon 帶纏繞,最後再用矽膠黏封.

3.等待矽膠乾後(約兩天),將儀器組裝,實驗所使用的氮氣純度為 99%,將 SCN 加熱融化,如此 SCN 能靠著重力流入 gap 中,一開始的 SCN 作為清洗玻璃之用,直至收集瓶中 SCN 為 10ml 停止填料,在填料口,出料口以矽膠封之,避免與大氣接觸.

第三章 實驗結果與討論

3-1 SCN 純度量測

我們使用顯微鏡系統來觀察 SCN 薄膜介面崩潰的現象,並紀錄不同時間下,細胞狀結構的波長,且使用快速傅立葉轉換來表示首先我們必須確定我們進料的純度因為要摻雜的濃度極為稀薄所以 SCN 的純度是很重要的,我們根據上述的實驗步驟填入 SCN 並透過不同移動速度來估算其濃度,我們使用的估算公式為 Tiller 等人的標準式:

$$V = DGK / m(T - K)$$

$$D = 1.27 \times 10^{-5} \text{ CM}^2/\text{S}$$

$$G = 10 \text{ }^{\circ}\text{C}/\text{cm}$$

$$K = 0.1$$

$$m = -2.22 \text{ }^{\circ}\text{C}/\text{mol}\% \text{ (acetone)} \text{ (假設不純物為丙酮的狀況)}$$

純度量測:

$$\text{高溫區: } 80 \text{ }^{\circ}\text{C}$$

$$\text{低溫區: } 35 \text{ }^{\circ}\text{C}$$

$$\text{溫度梯度: } 10 \text{ }^{\circ}\text{C}/\text{cm} \quad (\text{distance: } 1.7\text{cm})$$

$$\text{移動速度: } 2.2 \text{ m/s}$$

透過公式換算到此次填料濃度為 99.97%

3-2 摻雜丙酮介面現象之觀察

摻雜濃度=0.169%ACE

溫度梯度=30 °C/cm

高溫區=113 °C

低溫區 =15 °C

液態熔區 :24cm

Window size : 7021 m *1831 m

實驗在高溫和低溫區皆達到設定之溫度後靜置三小時以求介面穩定,

待三小時後施加速度:

V=0.87 m/s for 9000s

V=0.947 m/s for 19800s

V=0.999 m/s for 7200s

V=1.06 m/s for 3600s 見下圖一) (

將速度加至 0.87 m/s 後界面有下降的現象,經過 2.5 小時後界面仍然

呈平穩狀態,之後速度上升為 0.947 m/s,前兩小時介面仍然維持平穩,

在加速 130 分鐘後,於視窗左右兩邊有細胞狀結構出現波長約為

90 m,崩潰後 180 分鐘,出現了最大波長約為 400 m,崩潰後 210 分鐘,

大波長的 cell 中間開始有凹陷的現象,在崩潰後 230 分鐘,凹陷逐漸分

割大波長,原本為 400 m 的 cell,便分裂為三個小 cell,(FFT 所顯示的

波長在 100~200 m 之間有較強的 power)在這代表大波長較小波長不

穩定,透過 FFT 圖表能看出崩潰後 230~290 分鐘期間雖然有細胞的消

失和成長,但是波長幾乎集中於 100~250 m 之間(最強 power 之波長

約為 170 m),且 FFT 圖形頗為相似,故推想其已達平衡狀態,崩潰後 290 分鐘將速度在增高 0.999 m/s,因為將速度加快所以界面下降的距離較大,除此之外,從圖形也能看出 cell 的深度明顯有增加的現象,cell 的波長也有變大的趨勢,透過 FFT 能得知在崩潰後 290 分鐘時,波長為 200 m 並沒有顯著的 peak,但在崩潰後 310 分鐘 200 m 的 peak 變的較高,在崩潰後 330 分鐘,200 m 的 peak 已經是所有波長中出現頻率最高之值,20 分鐘後 cell 深度變為為原來的 2 倍,再經過 40 分鐘 cell 深度約為原來的 6 倍,(最強 power 之波長由 170 m 變成了 210 m),崩潰後 410 分鐘,將速度在增加為 1.06 m/s,300~450 m 的波長強度略為增加但沒有成為比例最高之波長上述之大波長在 430~470 分鐘內消失轉變為較小波長(約為 170 m,由 FFT 能明顯看出較強 power 之波長往左移動).



崩潰後

120分鐘



分鐘 330



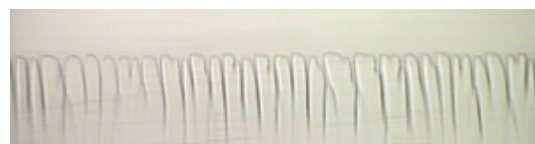
分鐘0



分鐘 350



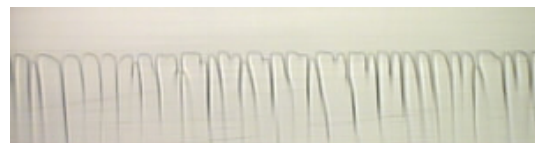
分鐘0



300分鐘



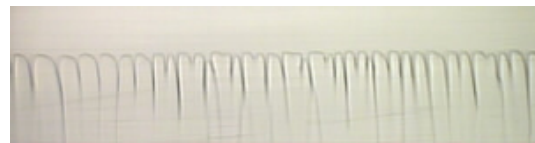
分鐘0



分鐘 410



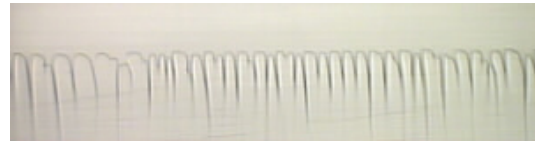
分鐘0



分鐘 430



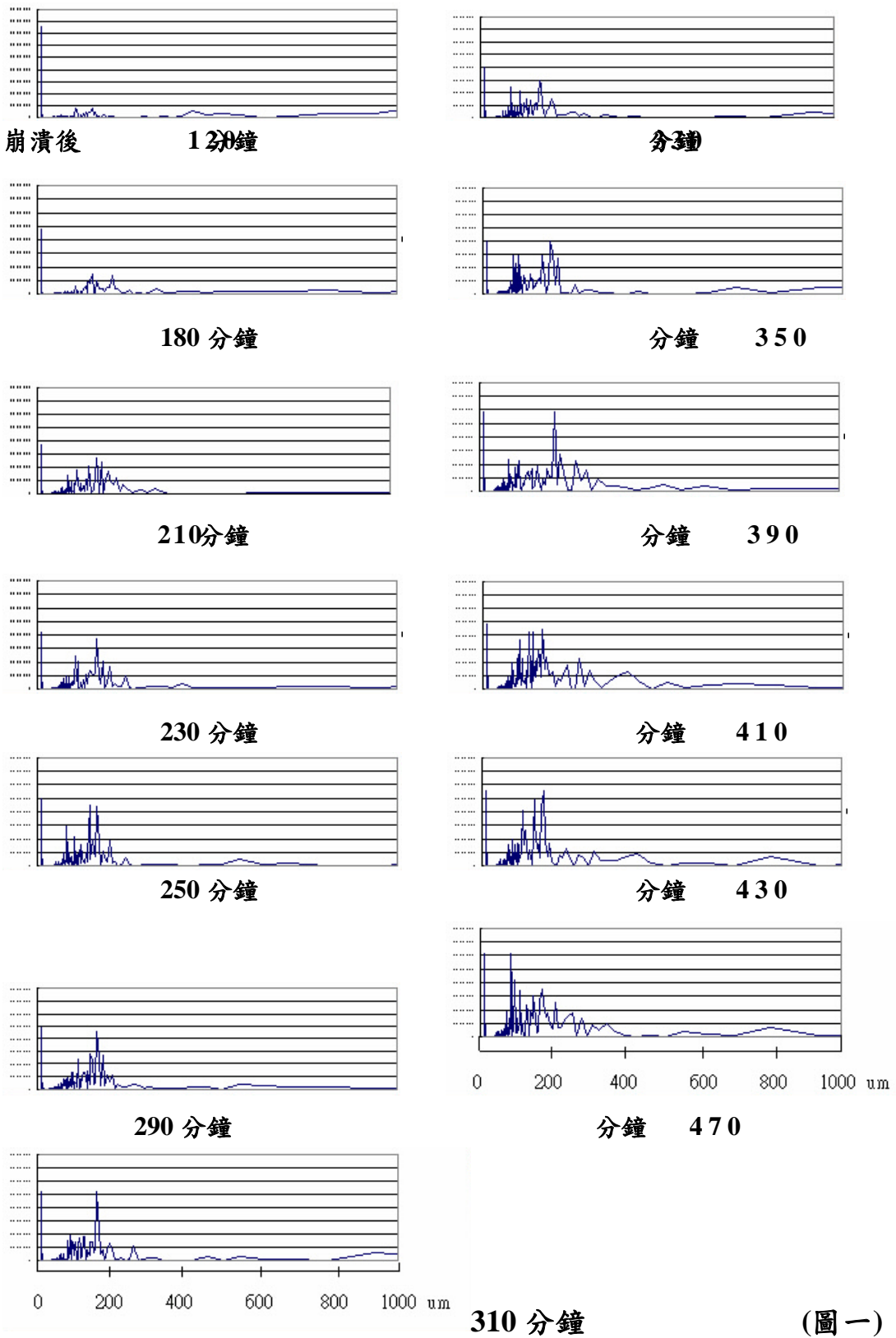
分鐘0



分鐘 470



分鐘0



3-3 實驗討論

上述實驗所用的填料方式是將玻璃 gap 中的氣體抽除,但只抽除到 6~7torr,仍有外界空氣滯留於其中,而 pump 能抽到 10^{-2} torr,這表示系統有漏氣的現象,所以改進之道應使用氮氣來 purge,讓乾燥的氮氣充滿其中並維持正壓,這樣氣體只會向外宣洩,外界的氣體並不會進入其中,至於抽氣方面,能使用一個大針筒來取代 pump,因為使用針筒抽氣所造成的壓力較小,外界富有水分的空氣較難進入玻璃 gap 中,此外在填料過程中需使用加熱帶以避免 SCN 凝固,此溫度不可過高,避免造成熱脹冷縮效應,因為熱脹冷縮會造成氣泡的產生影響實驗品質.至於攝影的時間必須錄長一點因為上述摻雜丙酮實驗速度為 1.06 m/s 持續一小時,觀察其波長分佈發現尚未達到平衡狀態所以錄影時間應延長為至少 2 小時,如此才可到達平衡狀態.

第四章 數值模擬

4-1 Introduction

相場模式(Phase field model)是目前在固化模擬問題領域中唯一可以解決複雜介面問題的方法，傳統的利用網格在介面處扭曲的方法雖然也可以處理很複雜的介面但是不能解決二維固化 固液界面間複雜的溶質包圍(Solute trapping)、吞噬、分裂等複雜現象，因為這意味著網格也要隨著固體和液體生成和消失，而這點是固液界面模式所無法作到的，然而相場模式也有其問題存在，那就是當界面厚度（一個在相場模式中重要的參數，代表模擬界面的厚度）越厚，所求出來的結果可能會自動發生溶質包圍[10]，且當固相或液相的擴散係數（熱或溶質）不相等時，能量或溶質的守恆性會被破壞[11]，然而最大的問題是，所使用的最小網格一定要比界面厚度小，才能解析此界面，也就是說，若我們的界面厚度在奈米等級，以現在的電腦能力，我們最多只能解析到微米級的區域大小，然而很多材料製程輸送現象的尺度都遠超過這個等級，所以界面厚度勢必要增加，這就面臨了物理與計算之間的矛盾。

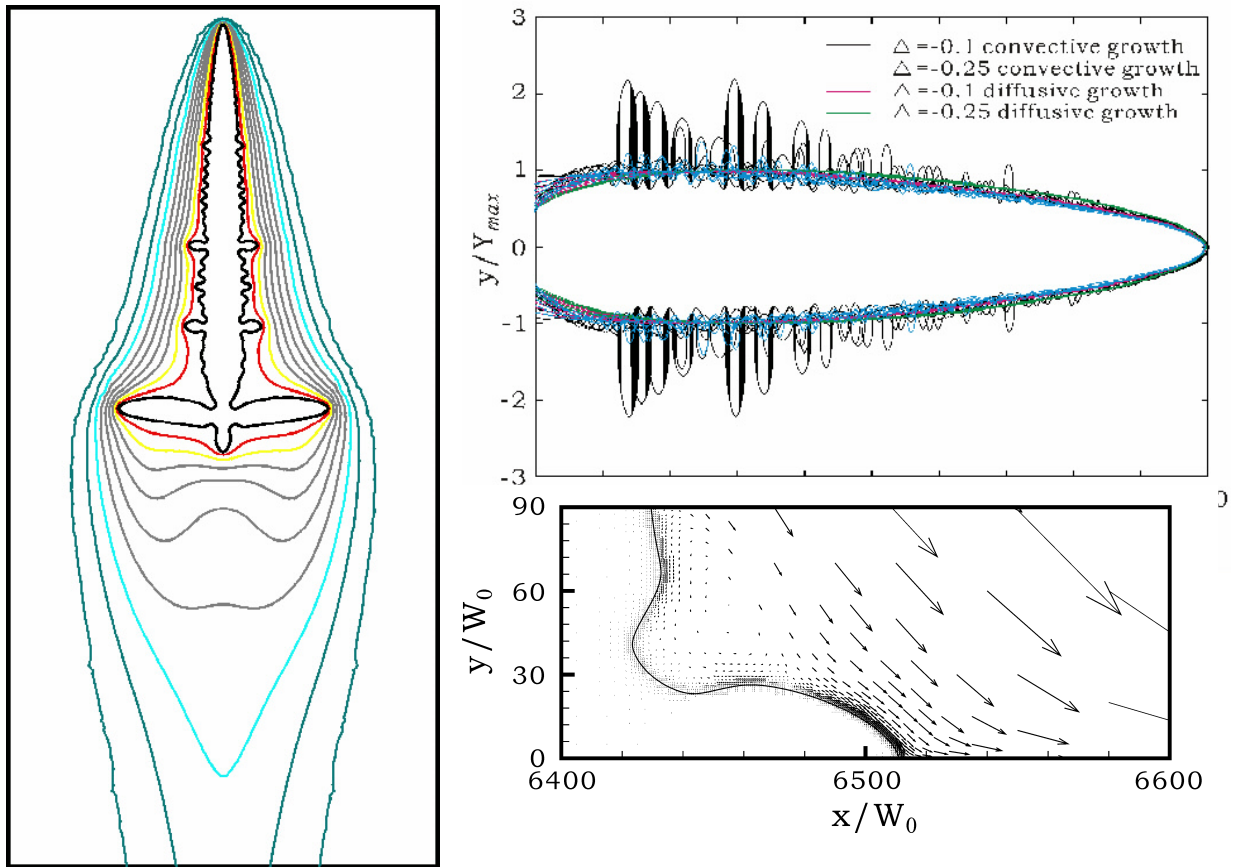
4-2 Phase Field Model I—Dendritic Growth

相場模式最常應用到的例子就是樹枝狀晶體生長，一般常看到的雪花，就是典型的例子，樹枝狀晶體的生長在固化問題上已經有很多的物理理論以及實驗分析，然而在模擬上，卻因為界面形態過於複雜，在電腦能力還不夠強的時候，仍然難以模擬，所以相場模式最初開發出來以後，便由模擬樹枝狀晶體生長開始了其應用的價值，我們若要利用相場模式來完整模擬單相固化的現象，也必須由此開始。

利用既有的適應性網格架構 [12]，本實驗室完成了許多在數值上可說是不可能的任務的模擬，發表了很多文章 [13-15]，使本實驗室在這方面已經取得了世界領先的地位，其中最具代表性的文章如下：

1. 在強制對流下的單成分樹枝狀生長[13]

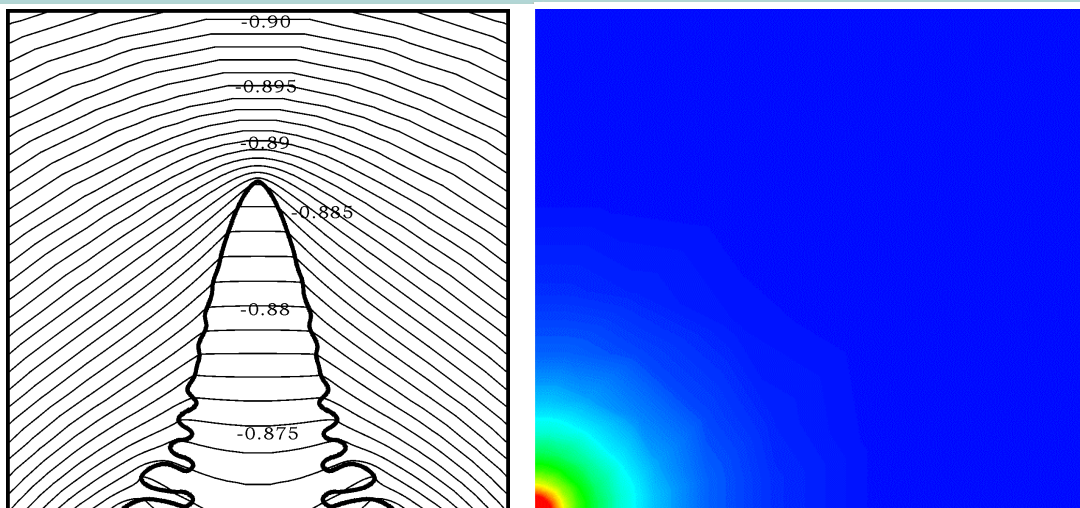
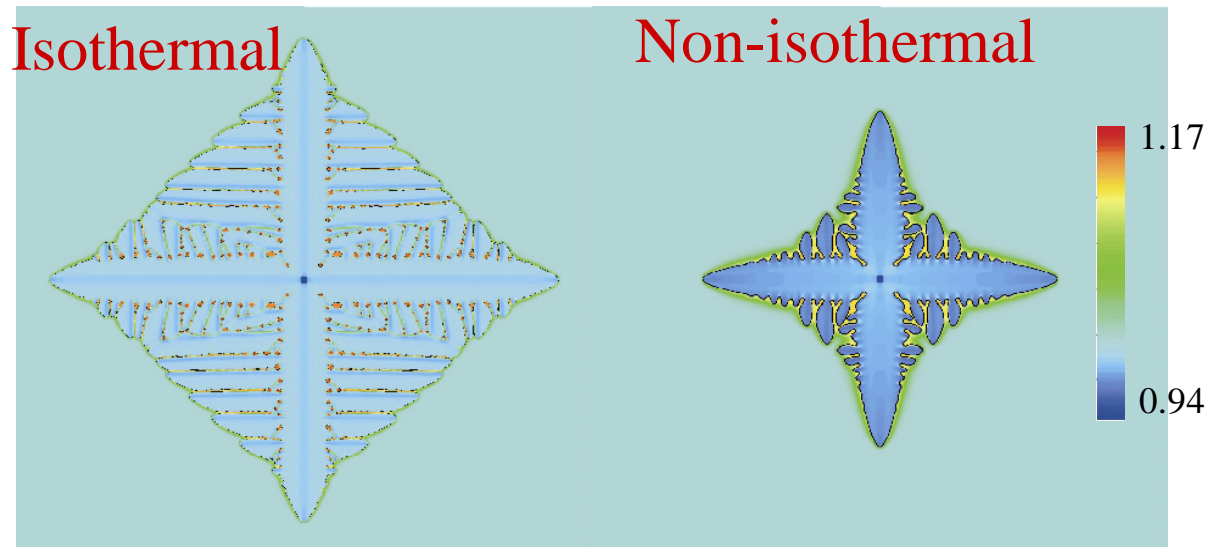
從圖二可以看到晶體的生長形狀、溫場分布、自我相似性分析、以及流場分布，其主要的困難度在於在低過冷的環境中，晶體要發展成完整的型態需要較久的時間，另外就是為了要使模擬區域符合熱場和流場的 Dirichlet 邊界條件，模擬區域要遠比晶體發展區域大很多，利用適應性網格架構，我們克服了這個問題。



圖二 強制對流下的單成分樹枝狀晶體生長

2. 雙成分樹枝狀晶體的生長[14]

由圖三，我們可以看到恆溫和非恆溫發展的晶體形狀和溶質分布，這個問題最困難的地方是，合金系統的热擴散係數遠比溶質的擴散係數（控制晶體的生長）要大上好幾個等級，所以如果要模擬非恆溫的雙成分樹枝狀晶體生長，則計算區域要遠比晶體成長區域大很多，同樣的，有了適應性網格的架構，我們很有效率的解決這個問題。



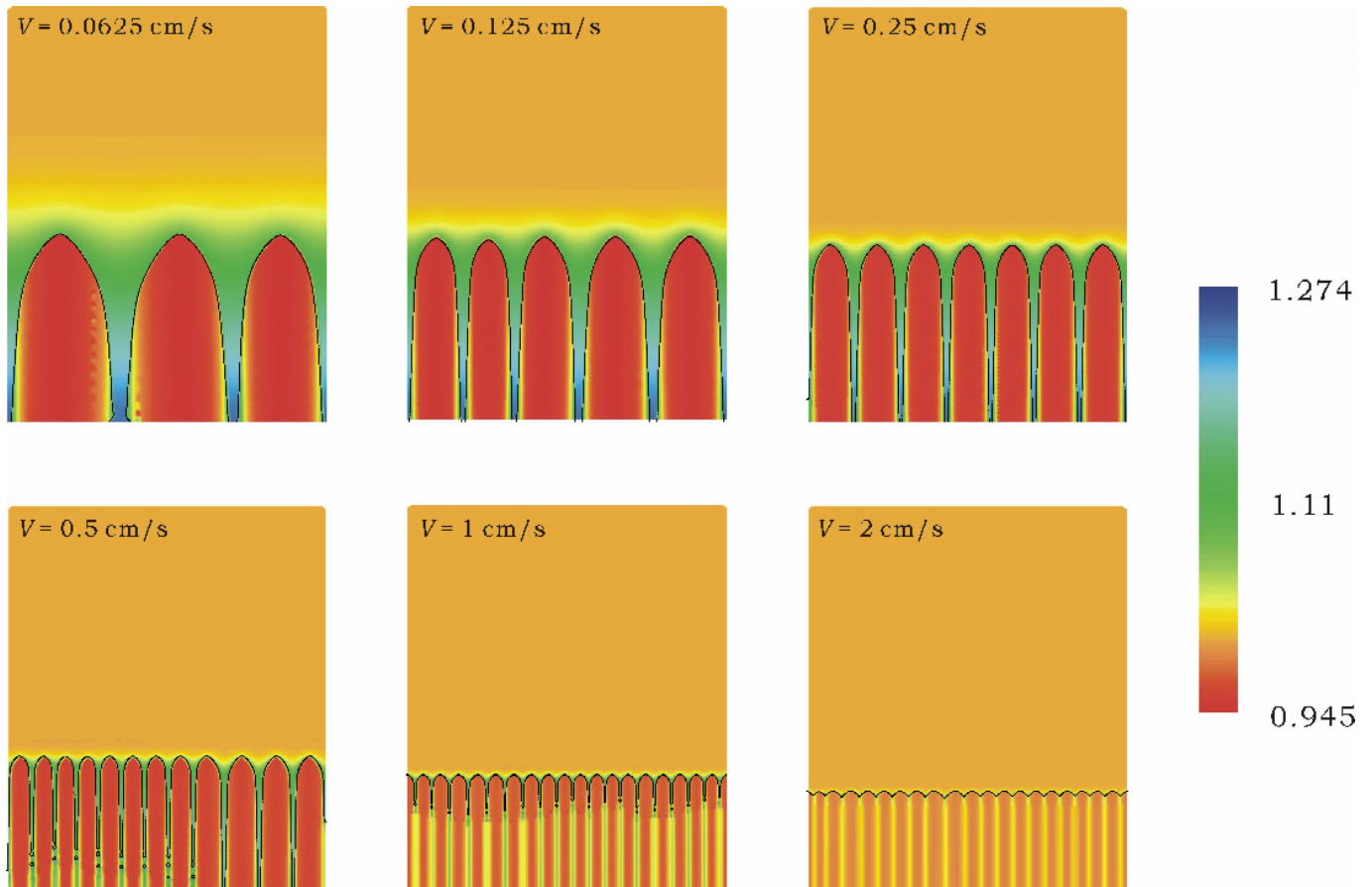
$W = 4001$

圖三 雙成分樹枝狀晶體生長

4-3 Phase Field Model – Directional Solidification

許多文獻都已經利用相場模式來解決單相 (Directional solidification) 問題, 其中 Boettinger 和 Warren 不但發表了有名的 WBM model 來解決合金 (Binary alloy) 問題, 並且在 1999 年發表了第一篇利用相場模式來模擬單相固化的文章[16], 其模擬的系統是銅鎳合金(Ni/Cu system), 它模擬了一個高溫度梯度、高拉速, 以及高參雜的系統, 正因為如此, 其達到穩定的真實時間大概都在微秒左右(10^{-3} s), 其界面厚度設定為 45 奈米, 然而我們模擬的真實系統所需達穩態的時間都需要幾個小時真實時間, 且溫度梯度低, 拉速低, 參雜少, 這意味著模擬的區域約是此文獻的幾千倍, 在時間和空間的壓迫之下, 使得要克服這個問題非常困難。

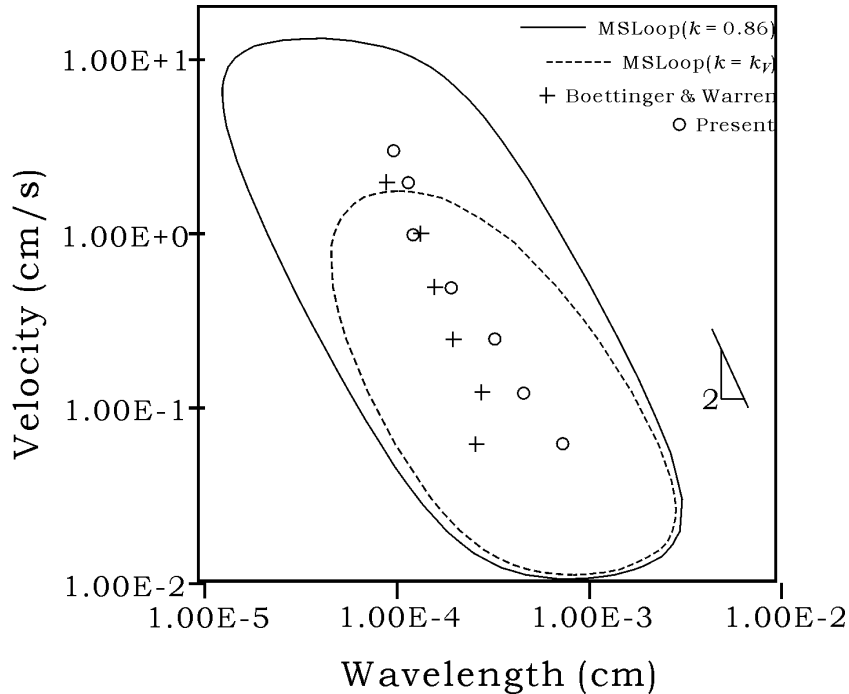
本實驗室開發的適應性有限體積的網格架構是克服這個問題的第一步, 因為唯有有效率的分配網格才能使電腦資源消耗減到最低, 如此一來才能模擬大區域以及長時間的問題。首先我們要作的利用適應性網格來重現 Warren 和 Boettinger 的結果, 以驗證我們所寫的程式是否有問題, 比較結果如圖四以及圖五。



圖四 Ni/Cu系統在高溫度梯度、高拉速、高參雜的濃度分布（此濃度是以 $c_0=0.4083$ 來無因次化）

由於有了適應性網格，解決此問題都非常簡單，計算時間都只約在幾個小時左右，且根據圖五，發現我們的結果與 Warren 等人的結果非常相近，間接證明我們所寫的程式正確，且我們所使用的界面厚度和 Warren 的相同(45 奈米)，然而根據圖三的左上 $V=0.0625$ 的結果，我們發現計算區域只裝得下三根 cells，所以把計算區域擴大是模擬更低拉速的唯一方法，於是在三大難題：低溫度梯度、低拉速、低參雜

中，我們先選擇低拉速來克服，我們模擬出幾個更低的拉速，所需的計算時間和達到穩態的時間就急速的上升（在相同的界面厚度下），其結果如圖六。

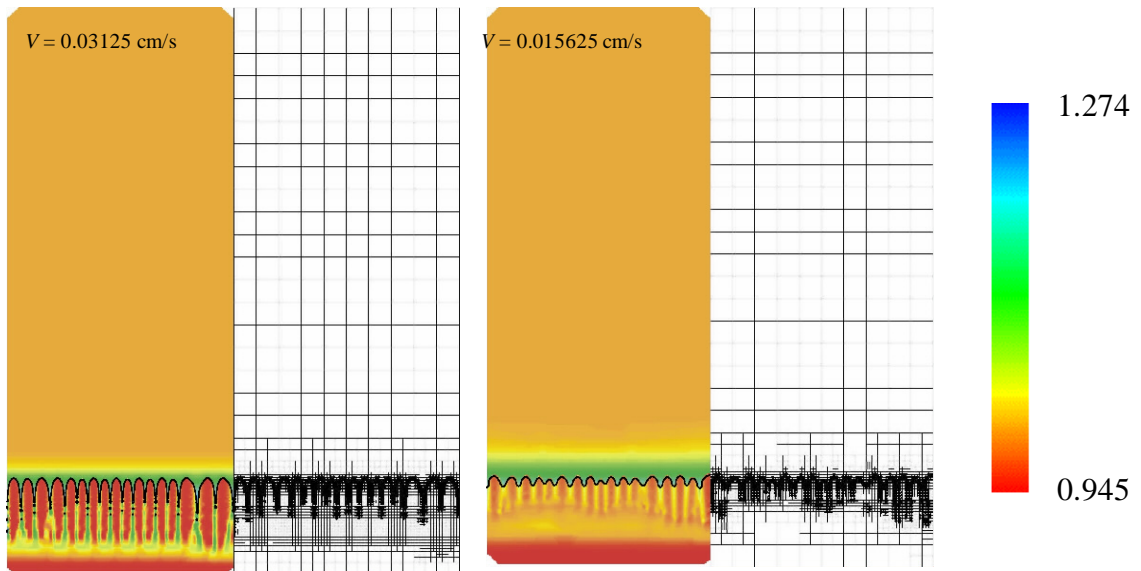


圖五 我們利用適應性網格所模擬出來的結果與 Warren 等人所作的
在 M-S 不穩定環上的比較

圖六的網格數大約在 60000 個左右，跑到穩態的計算時間隨著拉速而急速增加，其真實時間約和拉速的平方成反比，計算時間約和網格數目的平方成正比，和真實時間成正比，讓我們來簡單推測一下計算時間就可以得知作這個問題的困難之處，例如我們在模擬 $V=4\text{cm/s}$ 所需的計算時間為一小時，所需網格為 000 個，那我們要模擬

$V=0.015625\text{cm/s}$ 的計算時間就可以大略估計如下：

$$1 \times \left(\frac{4}{0.015625}\right)^2 \times \left(\frac{60000}{5000}\right)^2 = 9.4 \times 10^6 (\text{hr}) = 3.9 \times 10^5 (\text{day})$$



圖六 利用適應性網格來模擬 Ni/Cu 的更低拉速系統，左邊是溶質分布圖，右邊是網格圖

雖然這個數字可以藉由增 time step 來改善，但模擬 $V=0.015625\text{cm/s}$ 的圖形仍然花了我們的電腦三個月之久的計算時間，更不要說我們要模擬的是比這個還要更低的拉速了，這是我們所面臨的難題之一。

另外我們所模擬的區域除了要裝得下數目足夠的 cells，以避免數值上所產生的邊界效應以及物理上的不合理，另外還要特別注意的是溫度以及濃度的邊界層大小，因為數值上的原因，Dirichlet 邊界條件

遠較 Neumann 邊界條件來得好，所以我們模擬的區域大小一定要超過溶質以及溫場的邊界層以避免誤差，濃度和溫度的邊界層厚度可以簡單建立如下：

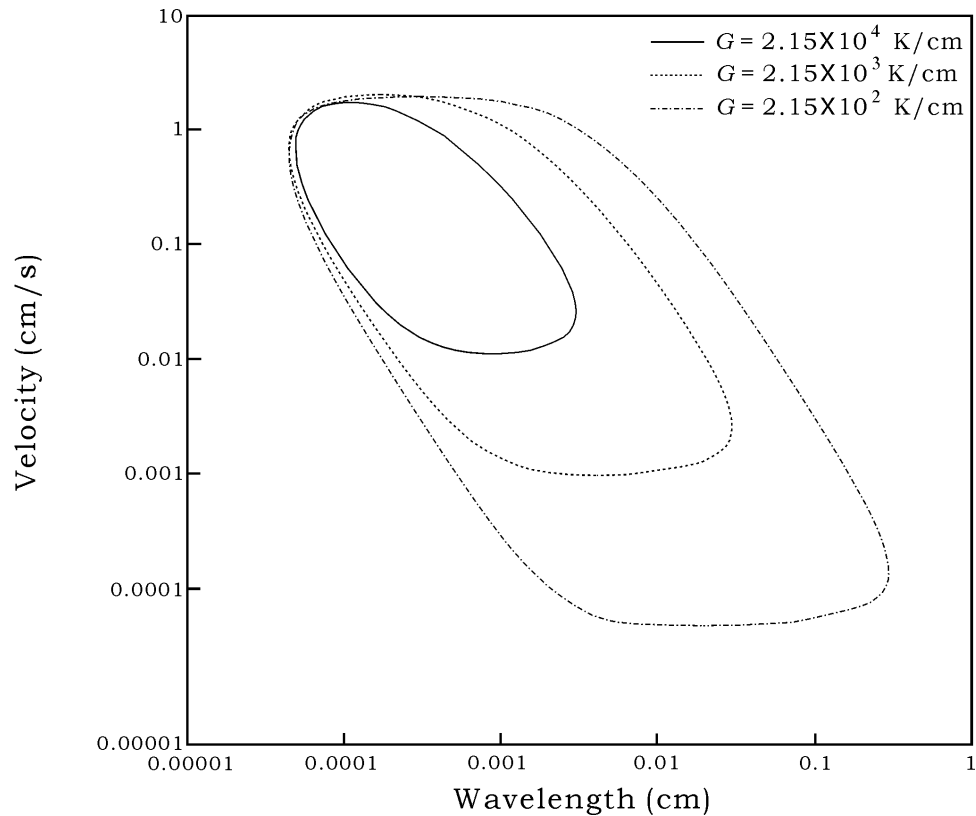
$$\delta_c \approx \frac{D_L}{V}; \delta_T \approx \frac{\alpha}{V}$$

由上式可知此兩個邊界層大小都與拉速成反比，這意味著當拉速越小，溶質和溫場的邊界層會越來越大，另外由圖六可知質傳和熱傳都是朝 y 方向傳遞，所以不但 x 方向要隨著拉速減小而變大（因為要裝得下足夠的 cells 數目）； y 方向也要隨著拉速減小而變大，這以數值的角度來看是相當困難。

另外一個問題就是低溫度梯度，根據最早由 Tiller [1] 推導出來的組成過冷的發生公式，可以知道：

$$V_C = \frac{GD_L k}{mc_0(1-k)}$$

V_C 指的是臨界拉速，也就是當拉速超過此臨界拉速時，界面就會崩潰，產生剛剛所看到的細胞狀或樹枝狀界面，由此公式可以發現，當溫度梯度 G 越小，臨界拉速就越小，而我們實驗以及理論有興趣的地方都在拉速接近於 V_C 的地方，這意味著我們所模擬的拉速隨著溫度梯度的變小而變小，在上一段我們已經提到了拉速降低對數值計算上的影響是相當巨大的，從圖七我們也可以發現當溫度梯度越低，不穩定環的範圍就越大，所模擬的拉速也要更小。



圖七 在各種不同溫度梯度下 Ni/Cu 系統的 M-S Loop

從圖七我們還可以看到我們所模擬的溫度梯度 G 是 $2.15 \times 10^4 \text{ k/cm}$ ，而我們實驗的系統大概在 30 k/cm 左右，雖然模擬的系統不一樣（我們想要模擬的是 SCN/Acetone 系統），但是數量及應該不會差太多，這也說明了我們的目標遠較目前世界上的進展來的困難很多。

另外 Ni/Cu 系統是合金系統，熱傳導很快，所以考不考慮溫場方程式對整個系統不會有太大的影響 [15]，所以我們可以不考慮溫場方程式，然而對 SCN/Acetone 系統，因為其溫度梯度小，熱傳係數小，

溫場會有很大的影響，這也代表了我們一定要多解一條方程式。

目前利用適應性網格，我們已經可以做到較低的拉速，然而要克服低溫度梯度，就算有適應性網格也無法計算，所以只有從相場模式以及固化問題物理來重新檢視這個問題，我們才有突破的機會，這也是我們日後工作的目標。

未來工作展望

在實驗部分，如何站在已知的基礎上和別人的結果相比較，是一個重要的步驟，一般在小尺度的實驗中，因為熔區太短，為了要防止因為溶質的排出造成實驗的不準性，所以都模擬較高的拉速（比較不受溶質影響）、較高的溫度梯度、以及高參雜（達到穩態時間短、臨界拉速高），而使用大尺度實驗則可以有效避免這些問題，讓我們可以做到較難的部分，以驗證非線性解析的理論。所以先模擬一個較高的參雜先與別人比較是相當必要的，等到與別人比較後，再利用我們大尺度的設備來完成困難度高的實驗，才能推出領先世界的結果。

模擬上，因為物理與數值的矛盾，目前世界上還沒有想到一個理想的方法，目前我們的想法包括增加界面厚度、引入人為過冷、適應性時間間隔調整等都還有很多嚐試的空間，且我們在模擬上已經有一個有力的適應性網格工具了，我相信基於這一點，我們也有機會可以一舉超前世界上其他的競爭者。

參考文獻

- [1] W. A. Tiller, K. A. Jackson, J. W. Rutter and B. Chalmers, *Acta Metal.* 1 (1953) 428
- [2] W. W. Mullins and R. F. Sekerka, *J. Appl. Phys.* 35 (2)(1964)444
- [3] S. R. Coriel, R. F. Boisvert, R. G. Rehm and R. F. Serkerka, *J. Crystal Growth* 49 (1980) 13
- [4] S. R. Coriel and R. F. Sekerka *PCH physiochemical Hydrodynamic* 2(4)(1981)281
- [5] S. R. Coriel and G. B. Mcfaffen, *J. Crystal Growth* 94 (1984)513
- [6] E. Rubinstein, M. E. Glicksman, B. W. Mangum, Q. T. Fang and N. B. Singh, *J. Crystal Growth* 89 (1998) 101
- [7] Y. W. Lee, R. Anauth and W. N. Gill, *Chem. Eng. Comm.*152 (1996) (41)
- [8] J. T. C. Lee and R. A. Brown, *Physical Review B*, (47)4937
- [9] J. T. C. Lee, K. Tsiveriotis and R. A. Brown, *J. Crystal Growth* (121) (1992) 536-542
- [10] N. A. Ahmad, A. A. Wheeler, W. J. Boettinger, and G. B. McFadden, *Phys. Rev. E* 58, 3436 (1998)
- [11] R. F. Amgren, *SIAM J. Appl. Math.* 59, 2086 (1999)
- [12] C.W. Lan, C.C. Liu, and C.M. Hsu, *J. Comp. Phys.* 178, 464 (200)
- [13] C.W. Lan, C.M. Hsu, Y.C. Chang, *Phys. Rev. E* 65, #61601 (2002)
- [14] C.W. Lan, Y.C. Chang, C.J. Shih, *Acta mater.*, **51**, 1857 (2003).
- [15] C.W. Lan, Y.C. Chang, *J. Cryst. Growth* 250, 525 (2003)
- [16] W.J. Boettinger, J.A. Warren, *J. Cryst. Growth* 200, 583 (1999)