

# 晶粒棱长、尺寸与拓扑学特征之间关系的 Monte Carlo 仿真研究\*

王 浩<sup>1)</sup> 刘国权<sup>1)†</sup> 栾军华<sup>1)</sup> 岳景朝<sup>1)</sup> 秦湘阁<sup>3)</sup>

1) 北京科技大学材料科学与工程学院, 北京 100083)

2) 北京科技大学新金属材料国家重点实验室, 北京 100083)

3) 佳木斯大学材料科学与工程学院, 佳木斯 154007)

(2008 年 12 月 18 日收到, 2009 年 3 月 23 日收到修改稿)

采用 Potts 模型 Monte Carlo 方法研究了晶粒棱长、尺寸与拓扑学特征之间的统计关系. 结果表明, 晶粒棱长与晶粒面数之间呈线性统计关系, 并且平均  $N$  面体晶粒模型和 Poisson-Voronoi 组织均支持该结论. 不同时刻的晶粒长大仿真数据表明, 在准稳态晶粒长大阶段晶粒棱长的分布具有自相似性. 个体晶粒的平均棱长随晶粒面数(或晶粒尺寸)的增加而逐渐增大, 这说明一些理论模型中采用的“不同面数的晶粒平均棱长均相等”的假设具有局限性. 仿真数据和纯铁实验数据均表明, 晶粒尺寸与晶粒面数之间的统计关系表现为一条单调递增的凸曲线.

关键词: 晶粒棱长, 晶粒尺寸, 拓扑学, Monte Carlo 仿真

PACC: 6150C, 6170A

## 1. 引 言

充满空间的多晶体系统中, 三维(3D)个体晶粒具有不同的尺寸、形状和拓扑学特征<sup>[1,2]</sup>, 而正是它们直接决定了个体晶粒的长大过程. 许多晶粒长大速率模型采用晶粒尺寸<sup>[3]</sup>或晶粒面数<sup>[4-12]</sup>作为参量表征个体晶粒的长大速率. 除了晶粒尺寸和面数之外, 晶粒棱长是另一个重要参量, 在晶粒长大过程中起到重要的作用. 最新提出的关于个体晶粒长大准确速率的 3D von Neumann 方程<sup>[13]</sup>中, 晶粒棱长和晶粒平均宽度(mean width)就是两个决定性参量. 鉴于晶粒尺寸、面数和棱长这些参量在显微组织演变过程中的重要作用, 研究它们之间存在的内在关系具有重要意义. 然而, 相对于这些参量在晶粒长大方面的重要作用, 关于棱长、尺寸和面数之间关系的研究非常少<sup>[14]</sup>, 这与目前无法用实验测量个体晶粒的棱长有关.

一些模型中曾假设不同尺寸(或不同面数)晶粒的平均棱长均相等<sup>[1,9]</sup>. 这样的假设是否合理? 晶粒棱长与晶粒的尺寸和面数之间有何内在联系? 这些

都是亟待解决的问题. 计算机仿真技术为解决这些问题提供了新的方法. 本文采用一种改进的 Potts 模型 Monte Carlo 方法大尺度仿真了 3D 正常晶粒长大过程<sup>[15-17]</sup>, 通过测量仿真组织中 3D 个体晶粒的尺寸、面数和三晶棱长度, 研究了三者之间的内在联系.

## 2. 改进的 Potts 模型 Monte Carlo 方法

将 3D 仿真系统影射到简单立方点阵(仿真尺度为  $300 \times 300 \times 300$ ), 每个点阵单元依次被赋予 1— $M$  之间的一个整数, 代表对应的晶粒取向, 其中  $M$  为点阵格点总数. 3D 空间中相邻且取向相同的微单元群体构成同一晶粒, 取向不同的近邻单元之间构成晶界. 系统界面能由描述原子相互作用的 Hamilton 算子定义, 具体表示如下:

$$E = -J \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^{M_i} (\delta_{S_i S_j} - 1), \quad (1)$$

式中,  $E$  为系统总的界面能,  $J$  为正的常数,  $S_i$  和  $S_j$  分别对应于单元  $i$  和  $j$  的取向;  $M_i$  为单元  $i$  的所有近邻格点总数, 此处  $M_i$  取 26, 即考虑单元的 6 个最

\* 国家自然科学基金(批准号 50671010, 50871017)和高等学校博士学科点专项科研基金(批准号 200800080003)资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: g.liu@ustb.edu.cn

近邻格点、12 个次近邻格点以及 8 个第三近邻格点  $\delta_{S_i S_j}$  是 Kronecker  $\delta$  函数, 当  $S_i = S_j$  时,  $\delta_{S_i S_j} = 1$ ; 当  $S_i \neq S_j$  时  $\delta_{S_i S_j} = 0$ . 点阵的所有单元同时进行再取向尝试, 每个单元随机地再取向为其  $M_i$  个邻域取向中的一个取向, 取向改变的概率定义如下:

$$W = \begin{cases} 1 & (\Delta E \leq 0), \\ \exp\left(-\frac{\Delta E}{k_B T}\right) & (\Delta E > 0), \end{cases} \quad (2)$$

式中  $\Delta E$  为单元  $i$  再取向与取向后的能量差,  $k_B$  为 Boltzmann 常量,  $T$  为仿真温度. 本文取  $k_B T = 0.5$ , 仿真温度的提高有助于减小点阵的各向异性. 晶界处格点成功再取向为其近邻取向, 对应着晶界的迁移. 仿真时间  $t$  以 Monte Carlo 步长 (Monte Carlo step) 为单位, 即所有单元同时进行完一次再取向尝试记为 1 个时间单位. 为了仿真封闭、完整的大体积系统, 使用周期性边界条件. 利用 C 语言实现上述仿真算法, 且已证明该算法具有较高的仿真效率.

本研究采用上述算法大尺度仿真了 3D 正常晶粒长大过程,  $t = 1000$  以后晶粒进入了准稳态晶粒长大阶段<sup>[17]</sup>. 对于准稳态晶粒长大阶段的 Monte Carlo 个体仿真晶粒, 其体积  $V$  由该晶粒所含格点数计量, 晶粒尺寸由晶粒等体积球半径  $R$  量度, 晶粒的面数  $f$  由其近邻晶粒数表示. 由于 Potts 模型本身的离散性, 难以测量晶粒的精确棱长  $L$ , 然而, 通过统计位于个体晶粒晶棱附近的格点数  $P$ , 可近似地表示晶棱的长度<sup>[18]</sup>. 本研究采用参量  $P/P$  描述晶粒的相对棱长  $L/L$ , 其中  $P$  为系统中所有晶粒晶棱处的格点数的平均值,  $L$  为系统中所有晶粒棱长的平均值.

### 3. 仿真结果及讨论

图 1(a) 为  $t = 5000$  时的仿真晶粒组织 (含有 653 个晶粒), 不同取向的晶粒被映射成不同的灰度. 从图 1(a) 可以看出, 仿真晶粒组织的特征与退火过程中的实际金属晶粒的二维截面特征相一致. 图 1(b) 示出了仿真晶粒组织中的某个具有 31 个界面的个体晶粒的 3D 形貌, 从中可以清楚地分辨出晶粒的界面、晶棱和顶点.

图 2(a) 示出了不同仿真时刻面数为  $f$  的晶粒的相对棱长  $L_f/L$  与晶粒面数  $f$  之间的统计关系, 其中  $L_f$  是面数为  $f$  的所有晶粒棱长的平均值. 从图 2(a) 可以看出, 在各个仿真时刻, 晶粒面数越大, 其

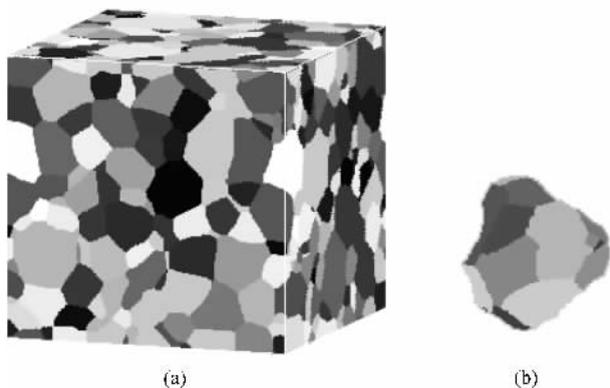


图 1 Monte Carlo 仿真晶粒组织 (a) 整体晶粒组织 (b) 个体晶粒

晶棱的总长度越大, 晶粒的相对棱长与晶粒面数均呈较好的线性关系. 这种线性关系在 Poisson-Voronoi 组织中也曾被发现过<sup>[14]</sup>, 该组织中晶粒面数  $f$  的范围为 8—30, 本文中晶粒面数范围较之更大一些, 为  $f = 5—45$ .

Glicksman<sup>[8,9]</sup> 提出了一种称为“平均  $N$  面体”的晶粒模型 (此处  $N$  为晶粒面数), 该模型中晶界面为球面, 晶粒的三晶棱、角隅处均满足张力平衡条件. 由于该模型有助于人们更好地理解拓扑分组内晶粒的平均性质、能量和动力学等行为, 我们对这种平均  $N$  面体模型进行了研究, 计算了平均  $N$  面体的棱长、体积、表面积等参量. 图 3(b) 为平均  $N$  面体晶粒棱长  $L$  与晶粒面数  $N$  之间的关系, 从中可以看到它们之间的线性关系非常好. 综合上述结果可知, Monte Carlo 仿真组织、平均  $N$  面体和 Poisson-Voronoi 组织均支持晶粒棱长与晶粒面数之间的统计线性关系, 因此该线性关系基本可以确认.

图 3(a) 示出了不同仿真时刻晶粒的相对棱长  $L_R/L$  与晶粒相对尺寸  $R/R$  之间的统计关系, 其中  $L_R$  是尺寸位于  $R/R$  尺寸组内的所有晶粒棱长的平均值. 从图 3(a) 可以看出, 晶粒棱长与晶粒尺寸之间的统计关系表现为一条单调递增的凹曲线. 晶粒尺寸与晶粒面数之间的统计关系表现为一条单调递增的凸曲线, 如图 3(b) 所示. 本研究还采用系列截面法实验制备了退火态工业纯铁组织的 794 个系列二维截面, 测量了晶粒面数和尺寸的 3D 实验数据. 结果示于图 3(b) 中, 从图 3(b) 可以看出, 仿真数据和实验数据非常接近, 均支持晶粒尺寸与晶粒面数之间的非线性统计关系. 事实上, 根据图 2(a) 和图 3(a) 中晶粒棱长分别与晶粒面数和尺寸之间

的关系,也可以近似推测出晶粒尺寸与晶粒面数之

间的非线性统计关系.

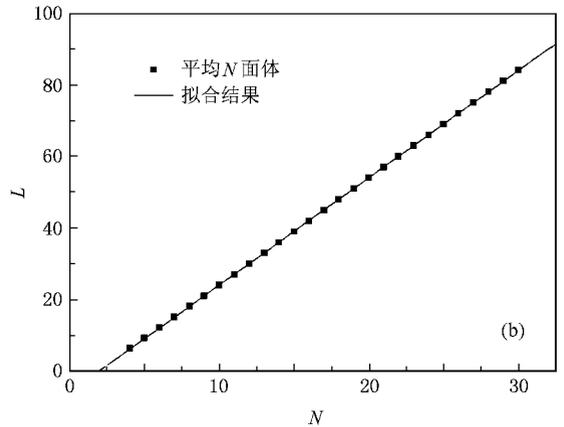
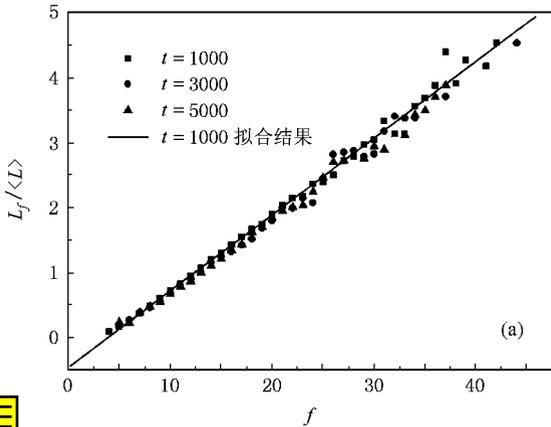


图 2 晶粒棱长与面数的统计关系 (a)不同时刻的 Monte Carlo 仿真晶粒的棱长与面数的统计关系 (b)平均  $N$  面体模型中晶粒的棱长与面数的统计关系

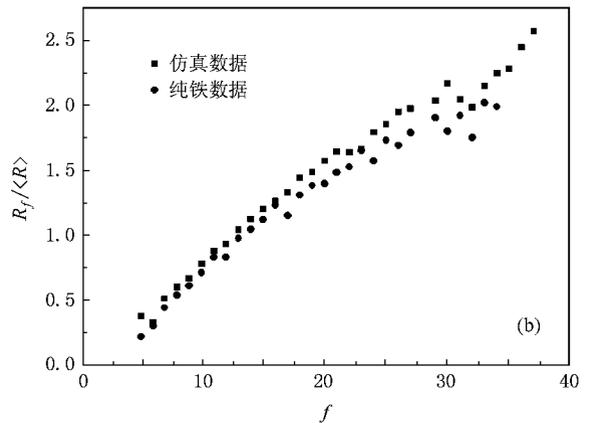
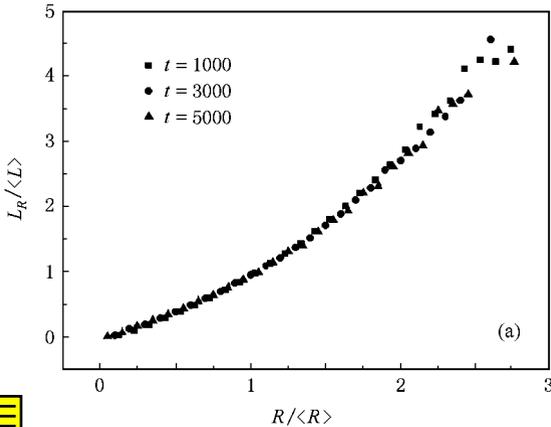


图 3 晶粒棱长、面数与尺寸之间的统计关系 (a)晶粒棱长与尺寸的统计关系 (b)晶粒面数与尺寸的统计关系

不同的晶粒具有不同的棱长,因此对于整个晶粒组织,存在一个晶粒棱长的分布问题.本工作考察了不同时刻仿真组织中晶粒棱长的分布情况,如图 4(a)所示,Lognormal 函数、Weibull 函数和  $\Gamma$  函数均可以用来较好地描述晶粒棱长的分布情况,拟合优度相当,并且不同时刻的棱长分布基本不变,具有较好的自相似性.我们知道,晶粒的尺寸分布和面数分布的自相似性是准稳态晶粒长大阶段的特征<sup>[16]</sup>,而本研究观察到的晶粒棱长分布的这种自相似性可能也是准稳态晶粒长大阶段的另一特征.面数为  $f$  的所有晶粒的棱长分布情况示于图 4(b),从图 4(b)可以看出,随着面数  $f$  的增大,曲线的峰值逐渐右移,这与晶粒面数  $f$  越大棱长  $L$  也越大的规律(图 2(a))一致.

除了晶粒的总长度以外,本文还考察了晶粒单

个晶粒的平均长度.定义  $e$  为某单个晶粒的晶棱数,棱长为  $L$ ,则晶粒单个晶粒的平均长度可表示为

$$l = L/e. \quad (3)$$

晶粒面数  $f$ 、棱数  $e$  和角隅数  $C$  之间存在定量关系.根据欧拉方程<sup>[19]</sup>可以得出

$$f - e + C = 2, \quad (4)$$

$$2e = 3C, \quad (5)$$

从而有

$$e = 3(f - 2). \quad (6)$$

由(3)(6)式可得

$$l = L/3(f - 2). \quad (7)$$

本文根据(7)式计算了晶粒单个晶粒的平均长度  $l$ ,所得结果示于图 5(a),其中  $l_f$  是面数为  $f$  的晶粒晶粒的平均长度  $l$  的平均值,  $l$  是系统中所有晶粒晶粒平均长度  $l$  的平均值.从图 5(a)可以看出,  $l_f$

随晶粒面数  $f$  的变化而变化,  $l_f/l$  随  $f$  的变化曲线(单调递增的凸曲线)大体可以分为三段. 当  $f < 13$  时, 单个晶棱的平均长度随晶粒面数  $f$  的增加而迅速增大; 当  $13 < f < 25$  时, 单个晶棱的平均长度随晶粒面数  $f$  的增加而缓慢增大; 当  $f > 25$  时, 单个晶棱的平均长度值则较为稳定, 在某一个数值上下波动, 不再随晶粒面数  $f$  的增加而增大. 这种情况下可以近似认为晶粒的单个晶棱平均棱长相等. 文献 [19] 中曾假设所有晶粒的单个晶棱的平均棱长相等<sup>[19]</sup>,

显然本文的仿真结果表明这种假设具有局限性, 只有当晶粒面数很大时这种假设才成立, 在大部分情况下不同晶粒的单个晶棱具有不同的平均长度  $l$ .

图 5(b) 示出了按尺寸进行分组的晶粒单个晶棱平均长度  $l_R$  与晶粒相对尺寸  $R/R$  之间的统计关系, 即晶粒单个晶棱平均长度与晶粒尺寸之间表现为一条单调递增的凸曲线关系. 结合晶粒尺寸与晶粒面数之间的统计关系(图 3(b))可知, 该结果与图 5(a) 的结果一致.

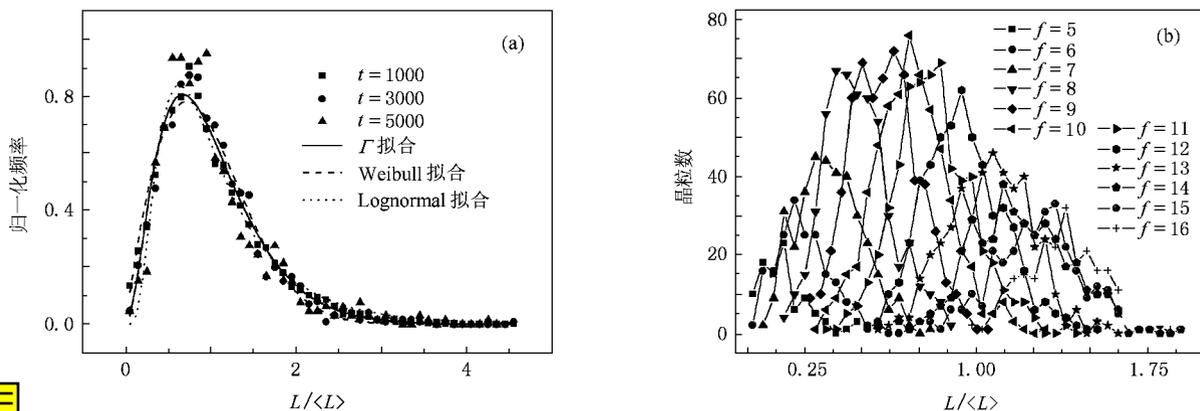


图 4 晶粒棱长分布 (a) 不同时刻的晶粒棱长分布 (b) 同一面数晶粒的棱长分布

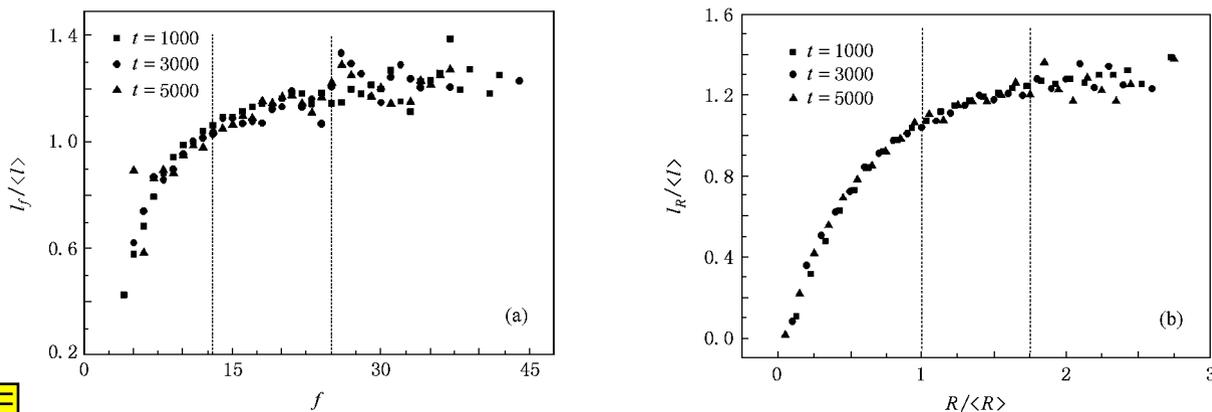


图 5 晶粒单个晶棱平均长度分别与晶粒面数、尺寸之间的统计关系 (a) 晶棱平均长度与面数之间的统计关系 (b) 晶棱平均长度与尺寸之间的统计关系

### 4. 结 论

采用 Potts 模型 Monte Carlo 方法大尺度仿真了 3D 晶粒的长大过程, 通过测量仿真组织中 3D 个体晶粒的尺寸、面数和棱长, 研究了三者之间的内在联系.

研究表明, 晶粒棱长与晶粒面数之间呈线性统

计关系, 仿真晶粒、平均  $N$  面体晶粒模型和 Poisson-Voronoi 组织均支持该结论.

不同时刻的晶粒长大仿真数据表明, 晶粒棱长分布具有自相似性. 仿真数据和纯铁实验数据均表明, 晶粒尺寸与晶粒面数之间的统计关系表现为一条单调递增的凸曲线.

晶粒单个晶棱的平均长度随晶粒面数(或晶粒尺寸)的增加而逐渐增大, 仅当晶粒面数  $f > 25$  时,

其平均棱长随面数的变化不大,该结果表明许多理论模型中采用的不同晶粒的平均棱长均相等的假设具有局限性.

- [ 1 ] DeHoff R T , Liu G Q 1985 *Metall. Trans. A* **16** 2007
- [ 2 ] Thorvaldsen A 1993 *J. Appl. Phys.* **73** 7831
- [ 3 ] Hillert M 1965 *Acta Metall.* **13** 227
- [ 4 ] Rivier N 1983 *Phil. Mag.* **B 47** 145
- [ 5 ] Glazier J A 1993 *Phys. Rev. Lett.* **70** 2170
- [ 6 ] Hilgenfeldt S , Kraynik A M , Koehler S A , Stone H A 2001 *Phys. Rev. Lett.* **86** 2685
- [ 7 ] Hilgenfeldt S , Kraynik A M , Reinelt D A , Sulliwán J M 2004 *Europhys. Lett.* **67** 484
- [ 8 ] Glicksman M E 2004 *Mater. Sci. Forum* **467** 1025
- [ 9 ] Glicksman M E 2005 *Philos. Mag.* **85** 3
- [ 10 ] Yu H B , Liu G Q 1996 *Chin. Sci. Bull.* **41** 2000 ( in Chinese )  
[ 于海波、刘国权 1996 科学通报 **41** 2000 ]
- [ 11 ] Liu G Q , Song X Y , Yu H B , Gu N J 1999 *Acta Metall. Sin.* **35** 245 ( in Chinese ) [ 刘国权、宋晓艳、于海波、谷南驹 1999 金属学报 **35** 245 ]
- [ 12 ] Liu G Q , Yu H B , Song X Y , Qin X G 2001 *Mater. Des.* **22** 33
- [ 13 ] MacPherson R D , Srolovitz D J 2007 *Nature* **446** 1053
- [ 14 ] Kumar S , Kurtz S K 1995 *Mater. Charact.* **34** 15
- [ 15 ] Wang H , Liu G Q 2008 *Appl. Phys. Lett.* **93** 131902
- [ 16 ] Wang H , Liu G Q , Qin X G 2008 *Acta Metall. Sin.* **44** 13 ( in Chinese ) [ 王 浩、刘国权、秦湘阁 2008 金属学报 **44** 13 ]
- [ 17 ] Wang H , Liu G Q , Qin X G 2008 *J. Univ. Sci. Technol. Beijing* **30** 848 ( in Chinese ) [ 王 浩、刘国权、秦湘阁 2008 北京科技大学学报 **30** 848 ]
- [ 18 ] Wang H , Liu G Q , Qin X G 2008 *Chin. J. Ster. Image Anal.* **13** 200 ( in Chinese ) [ 王 浩、刘国权、秦湘阁 2008 中国体视学与图像分析 **13** 200 ]
- [ 19 ] Smith C S 1964 *Met. Rev.* **33** 1

## Study on the relation among grain edge length , grain size and topology with Monte Carlo simulation <sup>\*</sup>

Wang Hao<sup>1)</sup> Liu Guo-Quan<sup>1)†</sup> Luan Jun-Hua<sup>1)</sup> Yue Jing-Chao<sup>1)</sup> Qin Xiang-Ge<sup>3)</sup>

<sup>1)</sup> School of Materials Science and Engineering , University of Science and Technology Beijing , Beijing 100083 , China )

<sup>2)</sup> State Key Laboratory for Advanced Metals and Materials , University of Science and Technology Beijing , Beijing 100083 , China )

<sup>3)</sup> School of Materials Science and Engineering , Jiamusi University , Jiamusi 154007 , China )

( Received 18 December 2008 ; revised manuscript received 23 March 2009 )

### Abstract

The relation among grain edge length , grain size and topology is studied by large-scale Potts model-Monte Carlo simulation. The results show that the grain edge length is related to the number of grain faces by a linear relation , which is also observed to hold in Poisson-Voronoi structure and average  $N$ -hedra. The distribution of the grain edge lengths maintains self-similarity in the period of quasi-stationary grain growth. The average length of an edge segment in individual grains varies with grain size ( or the number of grain faces ) , thereby indicating that assuming the lengths of edge segments in all individual grains to be equal averagely as does in some models is subject to some limitations. The data of Monte Carlo simulated grains and pure iron show that the grain size is related to the face number by a curve convex upward.

**Keywords :** grain edge length , grain size , topology , Monte Carlo simulation

**PACC :** 6150C , 6170A

<sup>\*</sup> Project supported by the National Natural Science Foundation of China ( Grant Nos. 50671010 , 50871017 ) and the Doctoral Program Foundation of Institution of Higher Education , China ( Grant No. 200800080003 ).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail : g.liu@ustb.edu.cn