

MacPherson-Srolovitz 晶粒长大 速率方程的仿真验证*

王 浩¹⁾ 刘国权^{1)†} 岳景朝¹⁾ 栾军华¹⁾ 秦湘阁³⁾

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)

2007 年 MacPherson 和 Srolovitz 联合推导出一个三维个体晶粒长大的准确速率方程, 但并未给出实验或计算机仿真的验证. 采用 Potts 模型 Monte Carlo 方法对该速率方程进行了大尺度仿真验证. 结果表明, 仿真数据与 MacPherson-Srolovitz 速率方程符合很好, 从而初步证实了该速率方程, 即三维晶粒长大速率是晶粒棱长和晶粒平均宽度的函数.

关键词: 三维晶粒长大, 速率方程, Monte Carlo 仿真

PACC: 6150C, 6170A

1. 引 言

三维(3D)晶粒长大规律是材料科学中的一个经典研究课题, 而关于个体晶粒长大速率方程的研究是该经典课题的一个重要内容^[1]. 半个多世纪以来, 众多材料学家、物理学家、工程专家和数学家进行了大量深入研究, 基于不同的模型相继提出了多种个体晶粒长大速率方程^[2-11]. 2007 年数学家 MacPherson 和材料学家 Srolovitz 合作取得了突破性的研究成果, 推导出一个 3D 个体晶粒长大的准确速率方程^[12], 该方程也被称为 3D von Neumann 方程, 在普适性、严谨性和准确性上均优于目前文献中已有的各种 3D 晶粒长大速率方程, 该研究成果重新引起人们对 3D 晶粒长大规律研究的广泛兴趣^[13-16].

MacPherson-Srolovitz 速率方程表明, 3D 晶粒的体积变化率 dV/dt 决定于晶粒的平均宽度 l 和晶棱长度 L , 即

$$\frac{dV}{dt} = -2\pi M\gamma \left(l - \frac{L}{6} \right), \quad (1)$$

式中, 晶粒平均宽度 l 是晶粒的一种线性尺寸, γ

为表面张力, M 为晶界迁移率. 目前在实验上无法测量到个体晶粒的棱长 L 及线性尺寸 l , 因此无法验证上述理论结果, 这限制了人们对个体晶粒长大动力学的研究. 计算机仿真技术为解决该问题提供了新的途径, 本文采用一种改进的 Potts 模型 Monte Carlo 方法^[1, 17] 大尺度仿真了 3D 正常晶粒长大过程, 通过测量仿真组织中 3D 个体晶粒的三晶棱长度和晶粒尺寸, 对 MacPherson-Srolovitz 速率方程进行了初步的仿真验证.

2. 改进的 Potts 模型 Monte Carlo 方法

将 3D 仿真系统映射到简单立方点阵(仿真尺度为 $300 \times 300 \times 300$), 每个点阵单元依次被赋予 1— N 之间的一个整数, 代表对应的晶粒取向, 其中 N 为点阵格点总数. 3D 空间中相邻且取向相同的微单元群构成同一晶粒, 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:

$$E = -J \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^{N_i} (\delta_{S_i S_j} - 1), \quad (2)$$

式中, E 为系统总的界面能; J 为正的常数; S_i 和 S_j

* 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

分别对应于单元 i 和 j 的取向; N_i 为单元 i 的所有近邻格点总数, 此处 N_i 取 26, 即考虑单元的 6 个最近邻格点、12 个次近邻格点以及 8 个第三近邻的格点; $\delta_{S_i S_j}$ 是 Kronecker δ 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 N_i 个邻域取向中的一个取向, 取向改变的概率定义如下:

$$W = \begin{cases} 1 & (\Delta E \leq 0), \\ \exp\left(-\frac{\Delta E}{k_B T}\right) & (\Delta E > 0), \end{cases} \quad (3)$$

式中 ΔE 为单元 i 再取向前和取向后的能量差, k_B 为 Boltzmann 常量, T 为仿真温度. 本文取 $k_B = 0.5$, 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, 对大尺度仿真具有重要意义.

3. 仿真结果及讨论

本研究以 $t = 1000$ 这一仿真时刻的晶粒组织 (由 5900 个晶粒组成) 为研究对象, 此时晶粒已进入准稳态长大阶段. 图 1 为 $t = 1000$ 时的仿真晶粒组织图, 不同取向的晶粒被映射成不同的灰度. 在二维 (2D) 截面上 3 个晶粒交点处棱线之间的夹角接近于 120° , 大多数晶粒的边界呈平滑弯曲状, 边数小于 5 的晶粒一般呈现凸出形状, 而边数大于 6 的晶粒边界具有内凹的特征, 这与退火过程中的实际金属晶粒的 2D 截面特征相一致.

晶粒体积 V 由该晶粒所含格点数计量, 晶粒的面数 f 由其近邻晶粒表示. 从 $t = 1000$ 时刻开始, 测量了很短的时间间隔 ($\Delta t = 30$) 内个体晶粒的体积变化率 dV/dt .

MacPherson-Srolovitz 速率方程右端的两个参量分别为晶粒的棱长 L 及平均宽度 l . 平均宽度 l 定义为晶粒在所有方向上的欧拉宽度 D 的平均值 D 的 2 倍, 即 $l = 2D$, 欧拉宽度 D 表示晶粒在某方向上的投影长度. 对于凸形晶粒, D 即为晶粒的平均切直径^[16]. 注意到仿真晶粒在各个方向上的 D 值相差不大, 因此本研究采用晶粒在三个相互垂直方

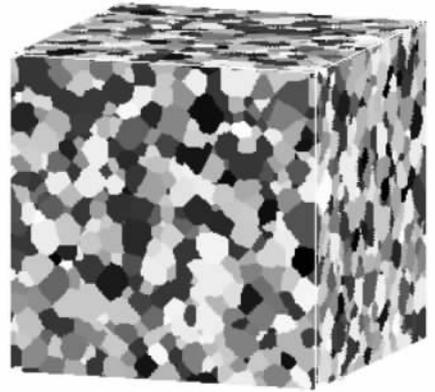


图 1 Monte Carlo 仿真晶粒组织 由 5900 个晶粒组成

向上欧拉宽度的平均值近似表达所有方向上的欧拉宽度的平均值 D . 统计位于个体晶粒晶棱附近的格点数 P , 对所有的个体晶粒, P 值定性地反映了不同晶粒棱长的相对大小. 采用 $L \approx (P/2.5 + f - 2) \times 1.416$ 来表示晶棱的长度 L ^[18].

图 2 列出了按尺寸分组的晶粒体积变化率 dV/dt 与 $(L/6 - l)$ 的关系, 并采用最小二乘法进行了线性拟合, 得到 $dV/dt = 0.87(L/6 - l)$, 线性相关系数为 0.986, 可见 dV/dt 与 $(L/6 - l)$ 呈较好的线性关系. 如图 2 所示, 当晶粒满足 $(L/6 - l) = 0$ 时, 对应于其体积变化率 $dV/dt = 0$, 即该部分晶粒既不大也不缩小, 处于一种临界状态. 当 $L/6 < l$ 时, $dV/dt < 0$, 晶粒体积将减小; 而当 $L/6 > l$ 时, $dV/dt > 0$, 晶粒长大. 因此本文的仿真结果初步证实了 MacPherson-Srolovitz 速率方程, 即 3D 晶粒长大速率是晶粒棱长 L 和晶粒线性尺寸 l 的函数.

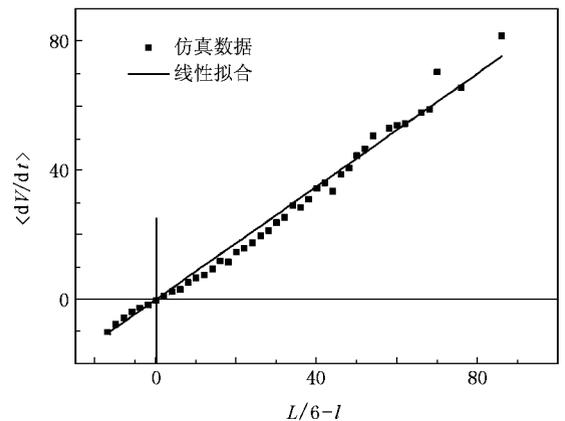


图 2 Monte Carlo 仿真晶粒的体积变化率 dV/dt 与尺寸 $(L/6 - l)$ 的统计关系

除了 MacPherson-Srolovitz 速率方程,目前还存在其他一些个体晶粒长大速率方程,主要分为两类,即 Hillert 速率方程^[2]和纯拓扑依赖的速率方程^[4-11]。Hillert 速率方程是以一般意义上的晶粒尺寸(等体积球半径) R 为唯一参量的速率方程,纯拓扑依赖的速率方程(例如 Glazier 速率方程^[4]、Hilgenfeldt 及其合作者的速率方程^[5,6]、Glicksman 速率方程^[7,8]、于海波-刘国权方程^[9-11]等)则是以晶粒面数 f 为唯一参量的速率方程。需要指出的是,Hillert 速率方程和纯拓扑依赖的速率方程均不适用于描述个体晶粒长大的准确速率,而可以较准确地描述晶粒尺寸分组内和拓扑分组内个体晶粒的平均长大速率,从而可以从统计平均角度较好地描述个体晶粒长大的一般规律。

相对于上述以晶粒尺寸 R 或晶粒面数 f 作为唯一参量的个体晶粒长大平均速率方程,MacPherson-Srolovitz 速率方程则给出了个体晶粒长大的准确速

率方程,该速率方程表明个体晶粒的长大速率仅与晶粒本身的几何特征(平均宽度 l 和棱长 L)有关,而不是单纯地决定于晶粒面数 f 或一般意义上的晶粒尺寸 R 。本文对 MacPherson-Srolovitz 速率方程的仿真研究初步证实了该速率方程,即 3D 晶粒长大速率是晶粒棱长和晶粒平均宽度的函数。

4. 结 论

采用 Potts 模型 Monte Carlo 方法大尺度仿真了 3D 晶粒长大过程,通过测量 3D 个体晶粒的三晶棱总长度和晶粒尺寸参量,对最新提出的 MacPherson-Srolovitz 个体晶粒长大速率方程进行了仿真验证,结果表明 Monte Carlo 仿真数据与 MacPherson-Srolovitz 速率方程符合很好,从而初步证实了该速率方程,即 3D 晶粒长大速率是晶粒棱长和晶粒平均宽度的函数。

-
- [1] Wang H, Liu G Q 2008 *Appl. Phys. Lett.* **93** 131902
- [2] Hillert M 1965 *Acta Metall.* **13** 227
- [3] Rivier N 1983 *Phil. Mag.* **B 47** 1A5
- [4] Glazier J A 1993 *Phys. Rev. Lett.* **70** 2170
- [5] Hilgenfeldt S, Kraynik A M, Koehler S A, Stone H A 2001 *Phys. Rev. Lett.* **86** 2685
- [6] Hilgenfeldt S, Kraynik A M, Reinelt D A, Sullivan J M 2004 *Europhys. Lett.* **67** 484
- [7] Glicksman M E 2004 *Mater. Sci. Forum* **467** 1025
- [8] Glicksman M E 2005 *Philos. Mag.* **85** 3
- [9] 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]
- [10] 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]
- [11] Liu G Q, Yu H B, Song X Y, Qin X G 2001 *Mater. Des.* **22** 33
- [12] MacPherson R D, Srolovitz D J 2007 *Nature* **446** 1053
- [13] Barrales Mora L A, Mohles V, Shvindlerman L S, Gottstein G 2008 *Acta Mater.* **56** 1151
- [14] 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]
- [15] Wang H, Liu G Q 2008 *Acta Metall. Sin.* **44** 769 (in Chinese)
[王 浩、刘国权 2008 金属学报 **44** 769]
- [16] Wang H, Liu G Q 2008 *Acta Metall. Sin.* **44** 1332 (in Chinese)
[王 浩、刘国权 2008 金属学报 **44** 1332]
- [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]

Study on MacPherson-Srolovitz 's grain growth rate equation with Monte Carlo simulation *

Wang Hao¹⁾ Liu Guo-Quan^{1,2)†} Yue Jing-Chao¹⁾ Luan Jun-Hua¹⁾ Qin Xiang-Ge³⁾

1) *School of Materials Science and Engineering , University of Science and Technology Beijing , Beijing 100083 , China)*

2) *State Key Laboratory for Advanced Metals and Materials , University of Science and Technology Beijing , Beijing 100083 , China)*

3) *School of Materials Science and Engineering , Jiamusi University , Jiamusi 154007 , China)*

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

Abstract

MacPherson-Srolovitz 's three-dimensional grain growth rate equation proposed recently by MacPherson and Srolovitz indicates that the change rate of grain volume depends on the mean width of grains and the total length of the triple lines. This rate equation is studied by large-scale Potts model-Monte Carlo simulation in this paper. The result shows that the data of averaged grain growth rate fit the MacPherson-Srolovitz 's three-dimensional grain growth rate equation very well , thereby this rate equation is preliminary verified.

Keywords : three-dimensional grain growth , rate equation , Monte Carlo simulation

PACC : 6150C , 6170A

* 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).

† Corresponding author. E-mail : g.liu@ustb.edu.cn