

文章编号: 1004-0609(2004)01-0122-05

正常晶粒长大的计算机模拟(II) ——第二相粒子形状及取向的影响^①

刘祖耀, 郑子樵, 陈大钦, 李世晨
(中南大学 材料科学与工程学院, 长沙 410083)

摘要: 采用改进的跃迁概率和 Monte Carlo 加速算法, 模拟了第二相粒子不同形状及其取向对基体晶粒长大的影响。模拟结果表明: 针状粒子钉轧晶界的效果好于球状粒子, 但随着第二相面积分数 f_A 的增加, 晶粒平均尺寸受第二相形状的影响逐渐减小, 而晶粒形态受到的影响逐渐增强; 取向对基体晶粒长大没有明显影响。

关键词: 第二相粒子; 晶粒长大; Monte Carlo 方法

中图分类号: TG111.7; TP391.9

文献标识码: A

Computer simulation of grain growth(II) —influence of shape and orientation of second-phase particles on grain growth

LIU Zuyao, ZHENG Ziqiao, CHEN Daqin, LI Shichen
(School of Materials Science and Engineering, Central South University, Changsha 410083, China)

Abstract: A modified Monte Carlo Method was applied to simulate the grain growth process with different shapes and orientations of particles. The results suggest that the figure and the mean size of grain are effected by different shape particles. With the increment of f_A , the particles' shape effect decreases, at the same time, the orientational effect enhances. And the orientations of particles have no distinct influence on the grain figure and mean size.

Key words: second-phase particle; grain growth; Monte Carlo method

在多相合金中, 基体晶粒的长大过程受到第二相粒子的力学性质、尺寸、含量、分布、形状以及取向的影响, 因此在晶粒长大的理论模型中, 针对第二相粒子的钉扎作用对晶粒长大过程的影响, 研究者曾提出了不少模型^[1~9], 这些模型主要集中于对第二相粒子的尺寸、含量与基体极限晶粒尺寸之间关系的研究, 其基本数学关系为

$$\frac{R_c}{r} = C_p f_s^{n_p} \quad (1)$$

式中 R_c 为极限晶粒尺寸, r 为粒子半径, C_p 和 n_p 为常数。为了精确调控材料的微观组织结构, 需全面研究第二相粒子对晶粒长大过程的影响。因此本文作者在对 Monte Carlo 方法采用新的跃迁概率

基础上^[10], 根据 Q-states potts 模型^[1, 11~13]进行了第二相粒子的取向和形态对基体晶粒长大过程影响的计算机模拟研究。

1 Monte Carlo 模拟晶粒长大算法的描述

1) 为了使第二相粒子的尺寸达到一定程度, 以便研究其形状的影响^[14], 采用 600×600 Potts (波茨) 格点。每一个格点都给定一个取向 Q (Q 的取值范围为 $1 \sim 64$), 与邻近取向不同的格点被认为是晶界, 相同则认为是晶粒内部。

2) 第二相粒子随机分布其中, 并给定一个固

① 基金项目: 国家自然科学基金资助项目(59971066); 高校博士点基金资助项目(2000053301)

收稿日期: 2003-01-22; 修订日期: 2003-04-28 作者简介: 刘祖耀(1976-), 男, 硕士研究生。

通讯作者: 刘祖耀, 硕士研究生; 电话: 0731-8830270; E-mail: zuyao-liu@163.com

定的取向 $Q = -8$ 。粒子的形状可以是针状或球状, 如图 1 所示。

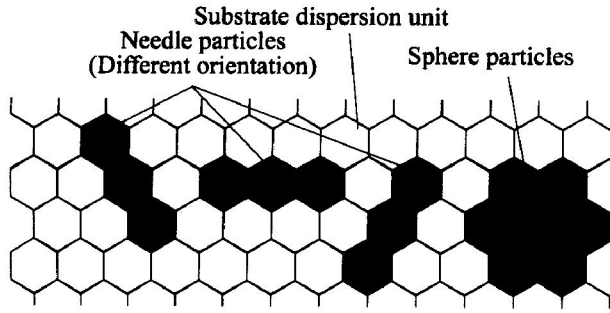


图 1 第二相粒子在基体中的形状及取向

Fig. 1 Shape and orientation of second phase particles in matrix

3) 依次取每一个格点作再取向尝试, 方向为邻近格点的方向。但如果该格点的取向是 -8 , 即该格点属于第二相粒子, 则不作再取向尝试, 以保证第二相不变。一个 Monte Carlo 步(MCS, 下同)定义为 $(N - N_{SP})$ 次尝试^[1], N 为总的格点数, N_{SP} 为第二相格点数。

4) 格点取向改变前后能量变化的算法为:

$$E = -J \sum_{nn} (\delta_{S_i S_j} - 1) \quad (2)$$

式中 $\delta_{S_i S_j}$ 为 Kronecker 函数, S_i 为中心格点的取向, S_j 为中心格点邻近格点的取向。 J 为常数, 其取值与界面能有关, 其值为:

$$J = \begin{cases} J_M & \text{基体之间} \\ J_{M-SP} & \text{基体与第二相之间} \end{cases} \quad (3)$$

式中 J_M 为基体相间的界面能, J_{M-SP} 为基体相与第二相粒子间的界面能。

5) 采用改进的式(4) 作为取向改变成功概率的计算公式, 把将 ω 值与系统产生的随机数 R 相比较, 如果 $\omega > R$, 则认为取向改变成功, 否则不改变。

$$\omega = \frac{\exp\left[\frac{-\Delta E}{KT_R}\right]}{1 + \exp\left[\frac{-\Delta E}{KT_R}\right] \times \left[1 + \exp\left[\frac{-\alpha \times (T - T_R)}{T_R}\right]\right]} \quad (4)$$

6) 引入周期性边界条件, 消除边界效应, 以便构成完整的连续体。

2 模拟结果与分析

2.1 不同形状第二相粒子的作用

为了保证对不同形状第二相粒子作用的模拟结果具有可比性, 在初始化过程中, 设置第二相形态时, 取 $S_{needle} = S_{sphere}$ (S 为粒子面积)。通过模拟, 不同形状的第二相粒子对基体晶粒长大组织形态的影响如图 2 所示, 可以看出: ①随着第二相粒子总面积分数的增加, 基体极限晶粒尺寸减小, 晶粒尺寸的分布也更加均匀; ②在相同的粒子含量和尺寸下, 针状第二相对晶界的钉扎比较稳定, 脱钉的趋势较弱, 细化晶粒的效果较球状粒子好。同时, 随

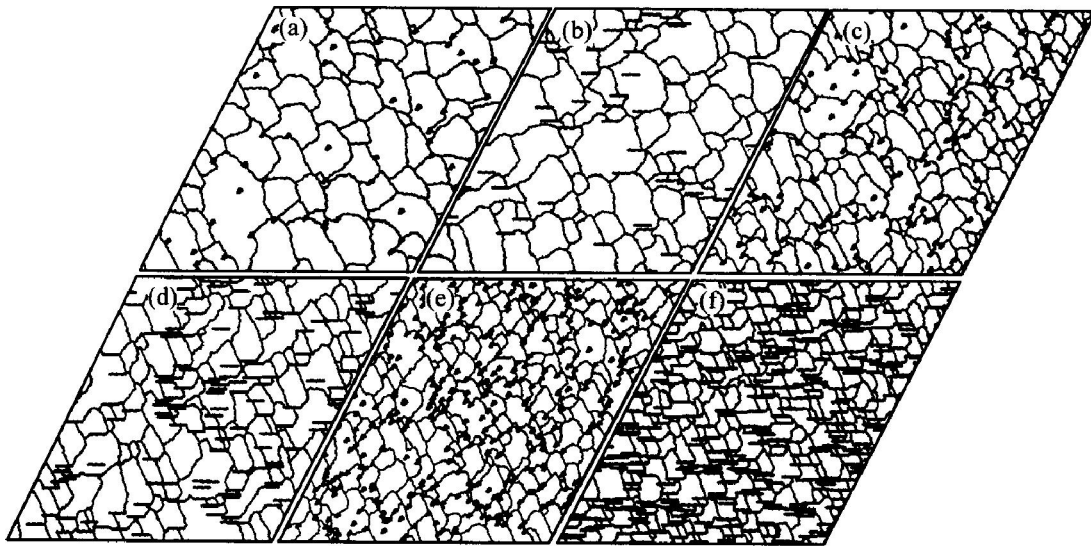


图 2 被不同含量粒子稳定钉扎的晶粒组织形态模拟图

Fig. 2 Microstructures of pinned grain for different volume fractions of second phase particles (f_A represent area fraction of second phase particles)

For sphere particles: (a) $f_A = 0.01$, MCS= 600; (c) $f_A = 0.05$, MCS= 350; (e) $f_A = 0.08$, MCS= 300;

For needle particles: (b) $f_A = 0.01$, MCS= 600; (d) $f_A = 0.05$, MCS= 350; (f) $f_A = 0.08$, MCS= 300

着第二相含量的增大,不同形态的第二相对基体极限晶粒形态的影响也增大,针状第二相使得基体晶粒呈现出较强的方向性,晶粒形态也规则得多。从晶粒长大的拓扑几何学角度分析针状第二相粒子对基体极限晶粒尺寸、晶粒形态的影响认为:当针状第二相粒子的含量比较少时,晶界与第二相粒子间的接触方式以点接触方式为主,第二相对晶粒长大过程的影响与球状粒子的作用相当,因此,长大过程中基体晶粒的形态与存在球状相第二相粒子时一致;在第二相面积含量较大时,晶界与针状第二相粒子之间的接触几乎全为线接触,晶粒沿垂直于第二相方向的长大过程受到抑制,为基体晶粒呈现取向性。

图 3 所示为两种形状粒子钉扎下的晶粒长大曲线图,其定量分析结果表明:在相同条件下,粒子含量较小时,针状粒子钉扎下的极限晶粒尺寸要小于球状粒子。但随着第二相粒子总面积分数的进一步加大,第二相粒子形状对基体晶粒尺寸的影响逐步减弱,在 $f_A = 0.08$ 时,基体的晶粒极限尺寸基本一致。

图 4 所示是晶粒尺寸分布的模拟结果,可以看出:当粒子面积分数增大时,对于两种形状粒子

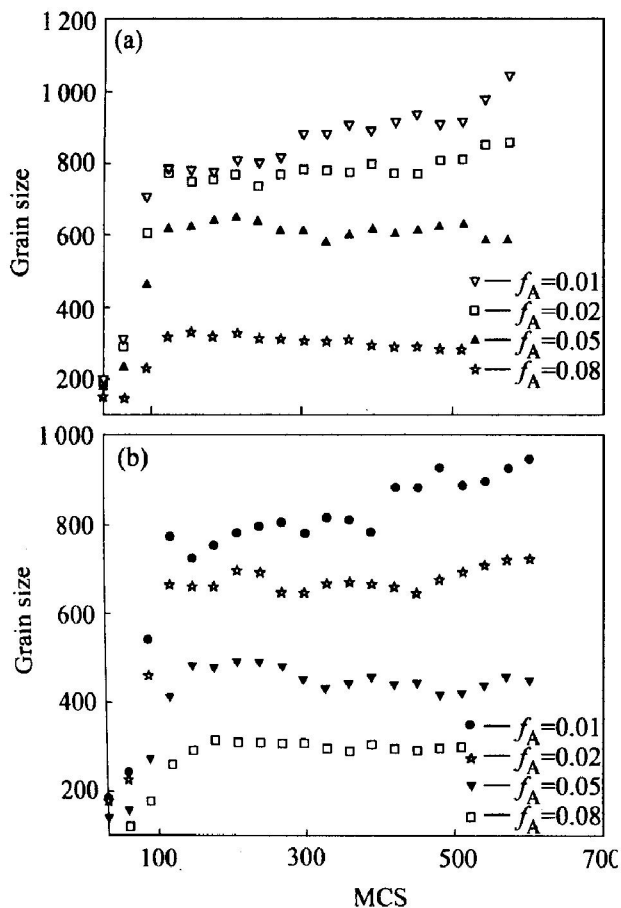


图 3 不同粒子含量时晶粒尺寸随时间的变化

Fig. 3 Grain growth kinetic curves for different f_A

(a) —Sphere particles; (b) —Needle particles

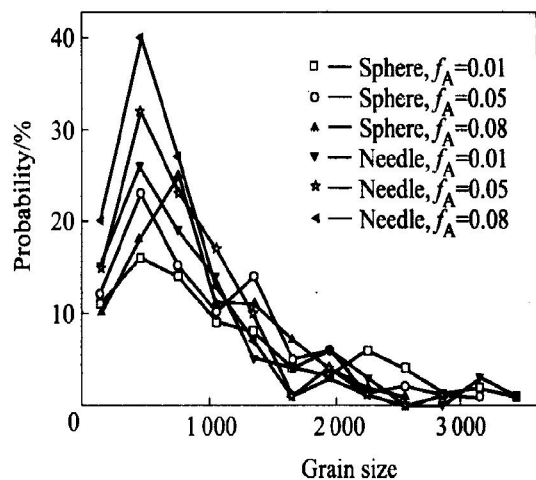


图 4 第二相粒子含量不同时的晶粒尺寸分布

Fig. 4 Grain size distributions at grain growth stagnation for different f_A

而言,晶粒尺寸在逐渐减小,峰值增高,这说明弥散细小的粒子强烈阻碍晶界的移动,使得大晶粒长大,小晶粒被吞并的趋势减弱,从而使晶粒大小相差不多,尺寸分布更均匀。对比两种形状粒子可看出:针状粒子情况下基体晶粒尺寸分布集中,峰值高,峰值宽度窄,说明晶粒尺寸细小均匀,而球状粒子细化的效果相对较差。

图 5 所示为利用模拟所得数据作出的极限晶粒尺寸与第二相粒子面积分数间的双对数拟合曲线,采用最小二乘法,获得如下关系式:

$$\lg(\bar{R}_{\text{lim}}/r) = 0.7 - 0.31 \lg f_A^{\text{sphere}} \quad (5)$$

$$\lg(\bar{R}_{\text{lim}}/r) = 0.5 - 0.26 \lg f_A^{\text{needle}} \quad (6)$$

即对球状相粒子:

$$\bar{R}_{\text{lim}}/r = 2.01 f_A^{-0.31} \quad (7)$$

对针状相粒子:

$$\bar{R}_{\text{lim}}/r = 1.65 f_A^{-0.26} \quad (8)$$

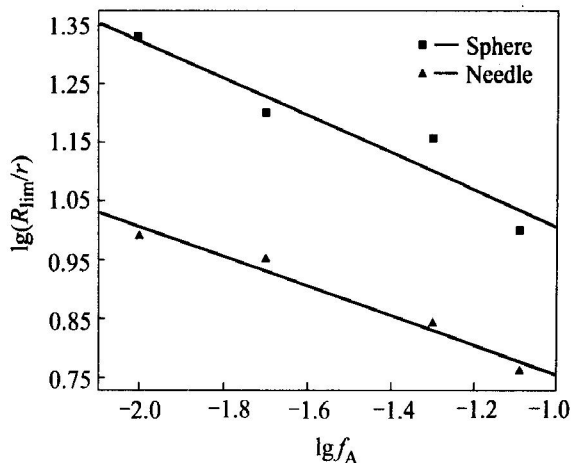


图 5 $\lg(\bar{R}_{\text{lim}}/r)$ 与 $\lg f_A$ 的关系

Fig. 5 Relationship between $\lg(\bar{R}_{\text{lim}}/r)$ and $\lg f_A$

由式(1)、(7)、(8)可得到: $n_p^{\text{sphere}} = -0.31$, $n_p^{\text{needle}} = -0.26$, 这说明晶粒的极限尺寸受针状粒子面积分数的影响大于球状粒子。

2.2 不同取向的第二相粒子对晶粒长大的影响

针状粒子是非等轴粒子, 所以在基体中就会有一定的取向。第二相的取向以针状粒子方向与初始变形组织宏观方向之间的夹角来定义, 这样可以消除针状相在等轴晶粒中分布带来的方向歧义性, 如图 6(a) 所示。图 6(b), (c), (d) 是通过模拟得到的

稳定钉扎时晶粒的组织形貌, 可知第二相粒子的取向对基体晶粒的形貌影响不大。图 7、8 表明: 粒子取向的不同对基体晶粒平均尺寸, 以及晶粒尺寸分布影响差别不大, 可以认为粒子取向的不同对基体极限平均晶粒尺寸没有影响。从正常晶粒长大的几何拓扑结构的演变分析: 当晶粒长大到等轴晶粒时, 针状相在等轴晶中分布的方向发生歧义性, 第二相在晶粒中的不同的宏观取向在微观条件下变得无法分辨。为此, 不同取向的第二相粒子对晶粒长大过程中晶粒形态及其平均尺寸的分布没有影响。

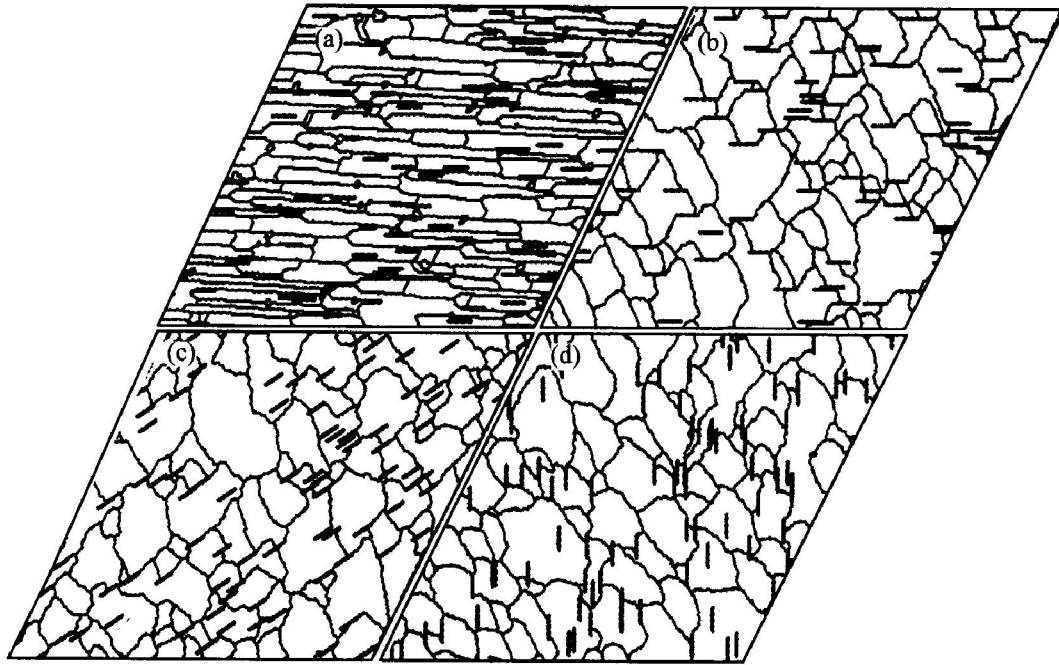


图 6 不同粒子取向对晶粒形貌的影响

Fig. 6 Influence of different orientations of second particles on grain shape

(a) —Initial microstructure of matrix and second phase particles

(b), (c), (d) —Microstructures of pinned grain for different orientation of needle particles(MCS= 600)

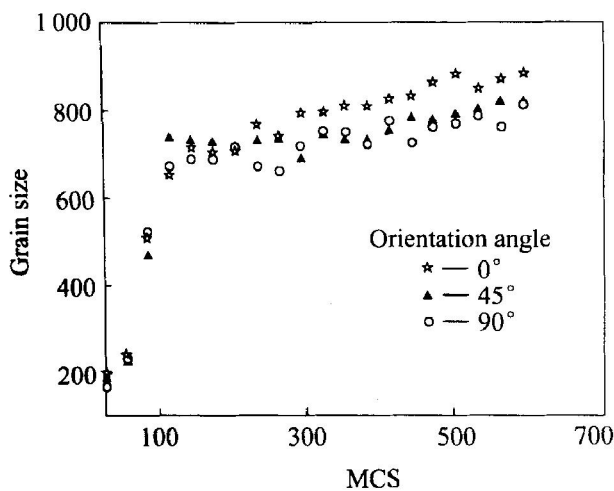


图 7 针状粒子的不同取向对晶粒长大的影响

Fig. 7 Grain growth kinetic curves of different orientations of needle particles

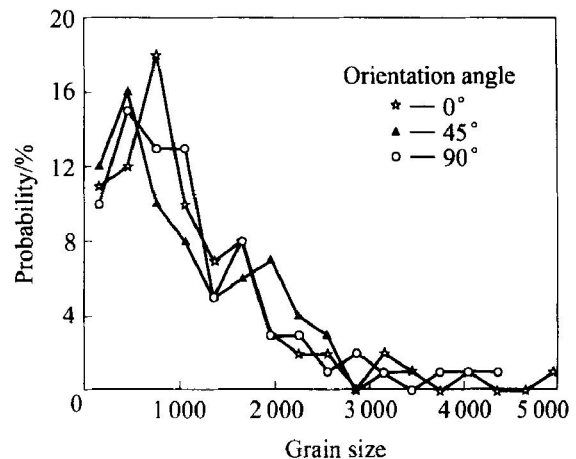


图 8 针状第二相粒子取向不同时的晶粒尺寸分布

Fig. 8 Grain size distributions for different orientations of needle particles

3 结论

1) 基体晶粒的极限尺寸与第二相面积分数有如下关系式: 对球状粒子: $\bar{R}_{\text{lim}}/r = 2.01f_A^{-0.31}$; 对于针状粒子: $\bar{R}_{\text{lim}}/r = 1.65f_A^{-0.26}$ 。

2) 当第二相粒子含量较小时, 针状相细化晶粒的效果明显好于球状相, 随着第二相粒子含量的增加, 第二相的形态差异对基体极限平均晶粒尺寸的影响逐渐减小至无差别, 而对基体相晶粒形态的影响逐渐增大。

3) 第二相粒子为针状相时, 基体晶粒尺寸分布较球状相为均匀; 针状第二相粒子的不同取向对晶粒长大过程的形态演变没有影响。

REFERENCES

- [1] Srolovitz D J, Anderson M P, Grest G S, et al. Computer simulation of grain growth(III) —Influence of a Particle dispersion[J]. Acta Metall, 1984, 32(9): 1429 - 1438.
- [2] Soucail M, Messina R, Cosnuau A, et al. Monte Carlo simulation of zener pinning in two dimensions[J]. Mater Sci Eng A, 1999, A271(1 - 2): 1 - 7.
- [3] Rios P R. A theory for grain boundary pinning by particles[J]. Acta Metall, 1987, 35(12): 2805 - 2814.
- [4] Hazzledine P M, Oldershaw R D J. Computer simulation of zener pinning[J]. Philo Mag A, 1990, 61A(4): 579 - 589.
- [5] Gao Jin-hua, Raymond G, Thompson Burton R P. Computer simulation of grain growth with second phase particle pinning[J]. Acta Metall, 1997, 45(9): 3653 - 3658.
- [6] Anderson M P, Grest G S, Doherty R D, et al. Inhibition of grain growth by second phase particles: three dimensional Monte Carlo computer simulation[J]. Script Metall, 1989, 32(5): 753 - 758.
- [7] Brechet Y, Weygand D, Lepinoux J. Zener pinning and grain growth: a two-dimensional vertex computer simulation[J]. Acta Mater, 1999, 47(3): 961 - 970.
- [8] Tweed C J, Ralph B, Hansen N. The pinning by particles of low- and high-angle grain boundaries during grain growth[J]. Acta Metall, 1984, 32(9): 1407 - 1414.
- [9] Kim B N. Modeling grain growth behavior inhibited by dispersed particles[J]. Acta Mater, 2001, 49(3): 543 - 552.
- [10] 刘祖耀, 李世畏, 郑子樵. 正常晶粒长大的计算机模拟(I) ——晶粒长大动力学跃迁概率的改进[J]. 中国有色金属学报, 2003, 13(6): 1357 - 1360.
LIU Zuyao, LI Shiwei, ZHENG Ziqiao. Computer simulation of grain growth(I) —Modified transition probability[J]. The Chinese Journal of Nonferrous Metals, 2003, 13(6): 1357 - 1360.
- [11] Anderson M P, Srolovitz D J, Grest G S, et al. Computer simulation of grain growth(I) —kinetics[J]. Acta Metall, 1984, 32(5): 783 - 791.
- [12] Srolovitz D J, Anderson M P, Sahni P S, et al. Computer simulation of grain growth- II grain size distribution, topology and local dynamics[J]. Acta Metall, 1984, 32(5): 793 - 802.
- [13] Frost H J, Thompson C V, Walton D T. Simulation of thin film grain structures- I grain growth stagnation[J]. Acta Metall Mater, 1990, 38(8): 1455 - 1462.
- [14] Bimal K K, Peter M H. Monte Carlo simulation of grain growth and zener pinning[J]. Materials Science and Engineering A, 1997, 238A: 70 - 77.

(编辑 龙怀中)