

文章编号: 1004-0609(2003)06-1357-04

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^①

刘祖耀, 李世晨, 郑子樵, 陈大钦, 李 剑

(中南大学 材料科学与工程学院, 长沙 410083)

摘 要: 根据晶粒长大真实的物理过程提出了构建跃迁概率所必须满足的条件。在此基础上提出了正确考虑温度影响的跃迁概率, 并采用该概率对晶粒长大过程中温度和第二相粒子含量的作用进行了模拟。模拟结果可以更真实地反映晶粒长大的物理过程, 又能与已有的计算数据相容, 表现出较传统概率更好的优越性。

关键词: 跃迁概率; 晶粒长大; Monte Carlo 方法

中图分类号: TG 111.7; TP 391.9

文献标识码: A

近年来, 随着计算机技术的发展, 许多学者开始借助于各种唯象理论模型来模拟晶粒长大过程, 以深入研究各种因素对晶粒长大的影响。其中, 采用 Monte Carlo 方法来模拟再结晶及晶粒长大等微观组织演变过程已成为主要的模拟方法^[1~9], 而在模拟过程中采用合适的跃迁概率是使模拟结果更加合理有效的关键之一。为此, 本文作者根据晶粒长大过程的物理实质提出了构建合理跃迁概率准则, 并据此提出了新的跃迁概率。并在此基础上, 模拟了第二相粒子的形态、取向等因素对晶粒长大过程的影响(见本文(II)部分)。

1 现有的跃迁概率及其局限性

20 世纪 80 年代初, Exxon 小组最早开展了基于二维 Monte Carlo 方法的晶粒长大过程的模拟^[10], 其方法是将晶粒微观形貌离散微元化成多边形的 Potts 格点, 每一格点给定一个取向, 随机选取一格点并尝试改变其取向, 取向改变是否成功依据改变前后能量的变化来判断, 其跃迁概率式为

$$\omega = \begin{cases} 1 & (\Delta E < 0) \\ \exp\left[-\frac{\Delta E}{KT}\right] & (\Delta E \geq 0) \end{cases} \quad (1)$$

式中 ω 是取向改变成功的概率; ΔE 为取向改变前后的能量变化, kJ; K 是玻尔兹曼常数; T 为绝对温度, K。函数曲线如图 1(a) 中曲线 1 所示。

采用这种概率意味着向能量最小转变的过程不存在亚稳态, 是必然发生的过程, 即认为符合热力学条件的同时也满足动力学条件。然而, 按照公式(1), 这里存在着以下几个问题: 1) 温度问题, 只要在能量优势下, 晶粒的长大过程与温度无关(即 $\Delta E \leq 0$ 时, $\partial \omega / \partial T = 0$ 且 $\omega = 1$), 这与晶粒长大的物理过程强烈依赖于温度的事实明显相悖; 2) $\Delta E = 0$ 问题, 当 $\Delta E = 0$ 时, 晶粒长大的概率为 1, 即在平衡条件下, 晶粒依然长大。

为了解决模型概率中存在的上述问题, 有学者相继提出了 Symmetrical 概率^[11], 其表达式为

$$\omega = \exp\left[-\frac{\Delta E}{KT}\right] / \left| 1 + \exp\left[-\frac{\Delta E}{KT}\right] \right| \quad (2)$$

其函数曲线如图 1(a) 中曲线 2 所示。该式在一定程度上避免了 $\Delta E = 0$ 问题。但从图 1(b) 中可以发现: 当 $\Delta E \leq 0$ 时, $\partial \omega / \partial T \leq 0$, 这与晶粒长大的物理过程不符合。

2 跃迁概率必须满足的条件及新的跃迁概率

要使计算机模拟晶粒长大过程能够有助于精细控制材料微观组织结构目标的实现, 提出一个完全反映晶粒长大物理过程的跃迁概率至关重要。经过分析, 这样一个概率应该满足如下要求:

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: 2003-01-20; 修订日期: 2003-04-28

作者简介: 刘祖耀(1976-), 男, 硕士研究生。

通讯联系人: 刘祖耀, 电话: 0731-8830270; E-mail: zuyao.liu@163.com

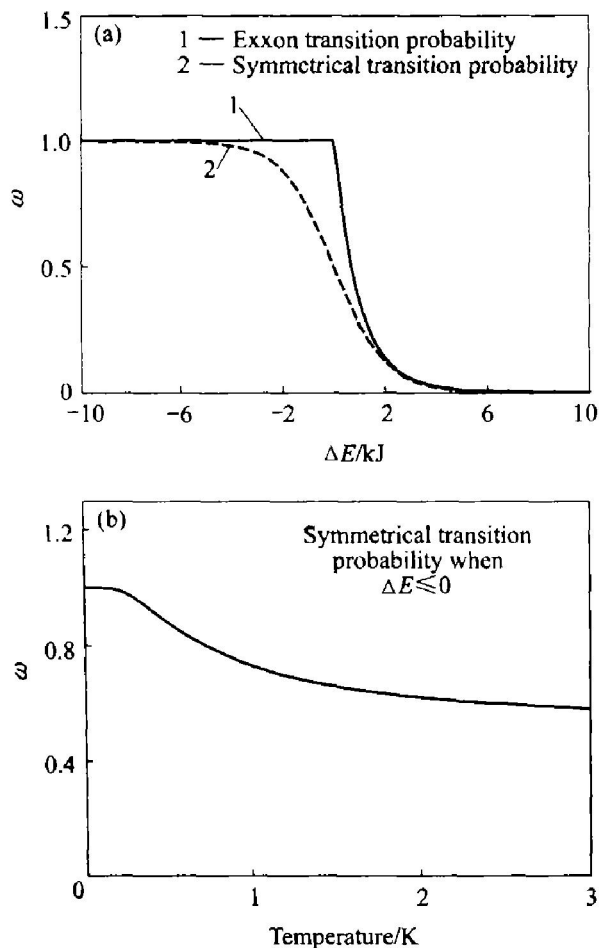


图 1 现有的跃迁概率曲线
Fig. 1 Curves of existing transition probability

- 1) 存在一个特定的 T_R , 当 $T \geq T_R$ 时, 使 $\omega(T, \Delta E = 0) = 0.5$;
- 2) $T \rightarrow 0 \text{ K}$ 时, $\forall \Delta E \in \mathbf{R}$ ($\mathbf{R}$ 为实空间), $\omega(T, \Delta E) \rightarrow 0$, 即温度很低时 ($T \ll T_R$), 晶粒不会发生长大;
- 3) $\Delta E \rightarrow +\infty$ 时, $\forall T \in [0, T_0)$, $\omega(T, \Delta E) \rightarrow 0$ (T_0 为材料的熔点);
- 4) $\frac{\partial \omega}{\partial T} \geq 0$;
- 5) $\frac{\partial \omega}{\partial \Delta E} \leq 0$.

为获得解析表达跃迁概率式, 可将条件 1) 放宽为如下表示:

1') 存在一个物性参量 T_R , 当 $T = T_R$ 时, 使 $\omega(T = T_R, \Delta E = 0) = 0.5$, 而当 $T > T_R$ 时, $\omega(T, \Delta E = 0) \approx 0.5$.

为满足以上分析所得到的条件, 通过拟合可得

$$\omega = \exp\left[\frac{-\Delta E}{KT_R}\right] / \left[1 + \exp\left[\frac{-\Delta E}{KT_R}\right] \times \left|1 + \exp\left[\frac{-a(T - T_R)}{T_R}\right]\right|\right] \quad (3)$$

式中 ΔE 为取向改变前后的能量变化, T_R 为具

体合金体系的再结晶温度, a 是拟合函数时的系数, 可以由条件 1') 得到。式 (3) 综合反映出热力学、动力学以及温度的关系。当 $T_R = 673 \text{ K}$, $a = 15$ 时, 其函数曲线如图 2 所示。

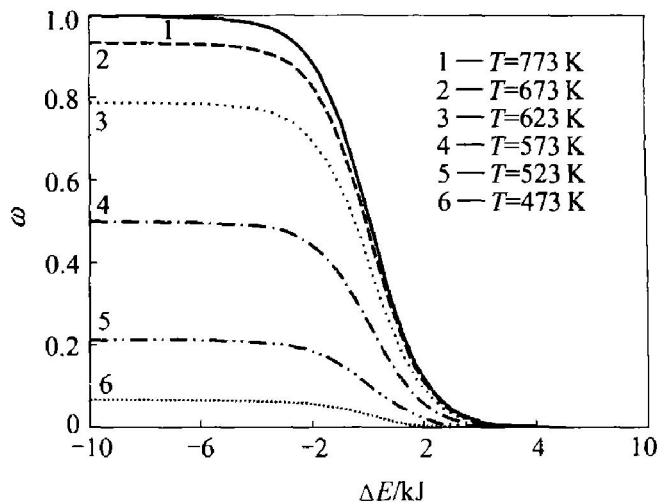


图 2 改进后的跃迁概率曲线
Fig. 2 Curves of modified transition probability

3 模拟结果比较及分析

采用上述新的跃迁概率的关键在于是否会得到合理的结果, 是否能与已知的结果相一致。为此, 本研究采用新提出的概率对含第二相粒子的晶粒长大过程进行了模拟, 并将模拟结果及分析讨论如下。

3.1 温度对晶粒长大过程的影响

温度是金属和合金的再结晶及晶粒长大的重要影响因素。采用新的跃迁概率模拟得到如图 3(a) 所示的结果 (图中 MCS 为 Monte Carlo 步数, 相当于晶粒长大时间; Grain size 为晶粒尺寸, 以一个晶粒中所包含的 potts 模型的格点数表示。下同)。该图反映温度对晶粒长大过程的影响。可以看出: 在 273 K 温度下晶粒尺寸几乎不变, 随着温度的升高, 晶粒平均尺寸也随着增大; 当温度高于 673 K 时, 温度对晶粒长大过程的影响趋于一致, 晶粒的平均尺寸相近, 趋于恒值。可见采用新的跃迁概率, 模拟结果与理论分析和实际过程都符合得很好。图 3(b) 是采用现有概率模拟得到的结果。从中可以看出, 采用现有的模拟概率无法正确反映出温度对晶粒长大过程的影响: 晶粒在 $T = 273 \text{ K}$ 和 $T = 673 \text{ K}$ 时的长大过程基本一致, 这显然与已知的实验结论相违背。

图 4 所示为在不同温度下经过 600 MCS 后得

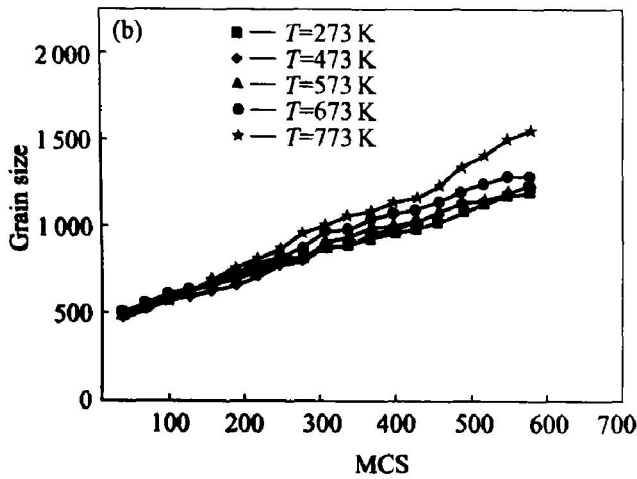
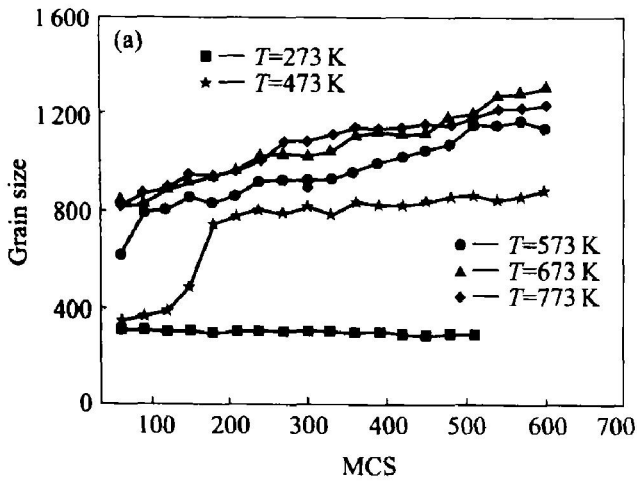


图 3 温度对晶粒长大动力学的影响

Fig. 3 Grain growth kinetic curves at different temperatures

(a) —Simulated by modified transition probability;
(b) —Simulated by existing transition probability

到的晶粒尺寸分布。可以看出: 在较低温度时晶粒尺寸很小, 尺寸分布比较集中; 随着温度的上升, 大角度晶界移动速度增大, 大的晶粒逐渐长大, 较小的晶粒被吞并, 晶粒平均尺寸增大, 尺寸分布不再集中, 峰值下降并趋于平坦; 当温度上升到 673 K 以上时, 温度的影响不再显著, 只是峰值稍稍右移, 这与实际情况相一致。由此可见, 采用新的跃迁概率能得到合理的结果。

3.2 模拟结果对新跃迁概率的验证

图 5 所示是采用新跃迁概率得出的含不同面积分数的第二相粒子对基体晶粒长大影响的模拟结果。不难看出, 当粒子面积分数增大时, 晶粒尺寸逐渐减小。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, 从而使晶粒尺寸分布更均匀。这与复相体系中大量弥散细小的第二相粒子可以细化晶粒的事实相

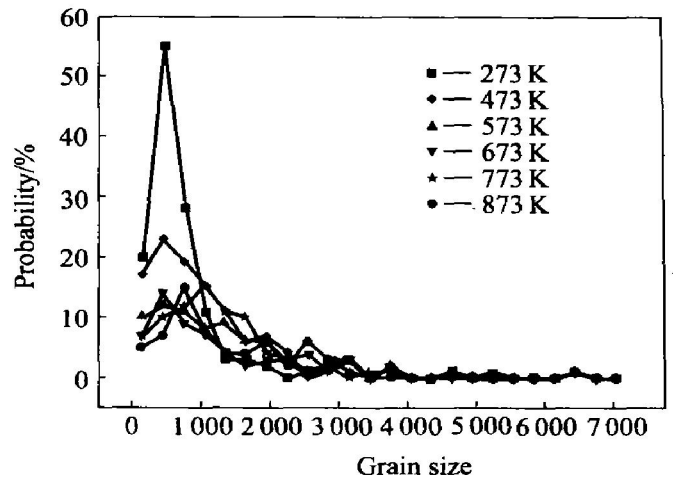


图 4 温度对晶粒尺寸分布的影响

Fig. 4 Grain size distributions at different temperatures

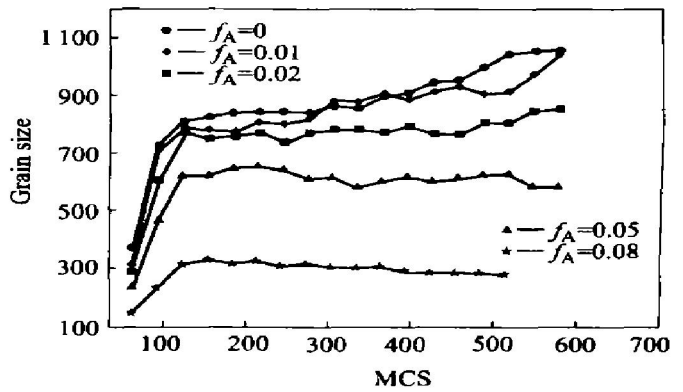


图 5 不同粒子含量时晶粒尺寸随时间的变化

Fig. 5 Grain growth kinetic curves for different f_A

一致。

目前, 关于第二相粒子对晶粒长大过程的影响的定量研究工作主要集中在第二相粒子的尺寸、含量与基体极限晶粒尺寸之间关系上, 其基本的数学关系为^[13]

$$\frac{R_{\lim}}{r} = C_P (f_A)^{n_p} \quad (9)$$

式中 $R_{\lim}$ 为极限晶粒尺寸, r 为粒子半径, f_A 为第二相粒子的面积分数, C_P 和 n_p 为常数, 指数 n_p 的确定是各种模拟模型最关心的问题。根据图 5 中给出的稳定晶粒尺寸数据, 作 $\lg(R_{\lim}/r) - \lg f_A$ 曲线如图 6 所示。

通过线性拟合得到的关系式为

$$\lg(R_{\lim}/r) = 0.7 - 0.31 \lg f_A \quad (10)$$

即

$$R_{\lim}/r = 2.01 f_A^{-0.31} \quad (11)$$

由此可得出 f_A 的指数 (n_p) 为 -0.31。从该结

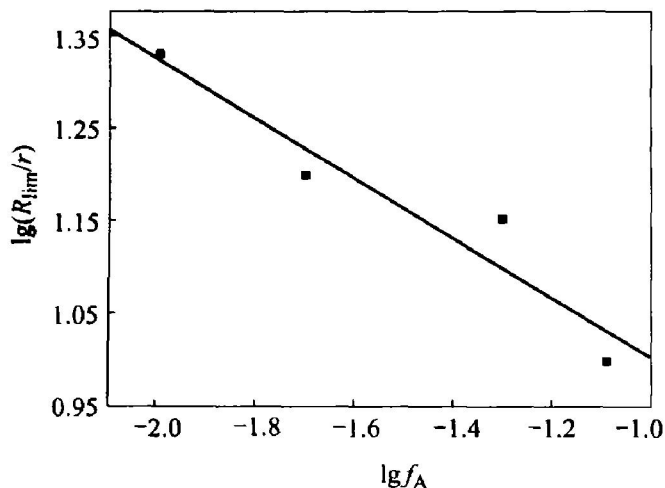


图 6 $\lg(R_{\text{lim}}/r)$ 与 $\lg f_A$ 关系

Fig. 6 Relationship between $\lg(R_{\text{lim}}/r)$ and $\lg f_A$

果可以看出, 对于球状粒子而言, 作者的模拟结果和 Anderson ($n_p = -0.33$)^[13], 以及宋晓艳 ($n_p = -0.31$) 等^[12] 模拟的结果基本相符。因此, 采用本研究所提出的新的跃迁概率既可真实地反映物理过程本质, 又能保持与已有结果一致。

REFERENCES

- [1] GAO Jir-hua, Thompson R G, Patterson B R. Computer simulation of grain growth with second phase particle pinning[J]. Acta Metall, 1997, 145(9): 3653 - 3658.
- [2] Rollett A D, Srolovitz D J, Anderson M P. Simulation and theory of abnormal grain growth anisotropic grain boundary energies and mobilities[J]. Acta Metall, 1989, 37(4): 1227 - 1240.
- [3] Srolovitz D J, Grest G S, Anderson M P. Computer simulation of grain growth V—abnormal grain growth[J]. Acta Metall, 1985, 33(12): 2233 - 2247.
- [4] Saito Y, Enomoto M. Monte Carlo simulation of grain growth[J]. ISIJ(The Iron and Steel Institute of Japan) International, 1992, 32(3): 267 - 274.
- [5] Grest G S, Srolovitz D J, Anderson M P. Computer simulation of grain growth—IV anisotropic grain boundary energies[J]. Acta Metall, 1985, 33(3): 509 - 520.
- [6] Toshiya S, Hideaki T, Shigenori H. Monte carlo simulation for the behavior of low mobility grain boundaries in grain growth[J]. Materials Transactions JIM, 1991, 32(1): 25 - 31.
- [7] Srolovitz D J, Anderson M P, Grest G S, et al. Grain growth in two dimension[J]. Scripta Metall, 1983, 17(2): 241 - 246.
- [8] Atkinson H V. Theories of normal grain growth in pure single phase systems[J]. Acta Metall, 1988, 36(3): 469 - 491.
- [9] 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.
- [10] 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.
- [11] Binder K. Methods in Statistical Physics[M]. Berlin Heidelberg, Springer, 1986.
- [12] 宋晓艳, 谷南驹, 刘国权. 第二相粒子含量对基体晶粒长大影响的计算机仿真研究[J]. 金属学报, 2000, 36(6): 592 - 596.
SONG Xiaoyan, GU Nanju, LIU Guoquan, et al. Computer simulation of the influence of second phase particle quantity on matrix grain growth[J]. Acta Metall Sin, 2000, 36(6): 592 - 596.
- [13] 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]. Scripta Metall, 1989, 32(5): 753 - 758.

Computer simulation of grain growth(I) —Modified transition probability

LIU Zu-yao, LI Shi-chen, ZHENG Zi-qiao, CHEN Da-qin, LI Jian

(College of Materials Science and Engineering, Central South University, Changsha 410083, China)

Abstract: A series of principles on transition probability was supplied for real grain growth. And in accord with these principles, a modified transition probability considering the influence of temperature was put forward to simulate the grain growth relying on temperature and second phase particles. The results successfully agree with the real physical grain growth and coincide with the original data. It is suggested that the modified transition probability is better than the traditional one.

Key words: transition probability; grain growth; Monte Carlo method

(编辑 袁赛前)