

Zusammenfassung der Dissertation:

## Monte Carlo Potts Model Simulation and Statistical Mean-Field Theory of Normal Grain Growth

eingereicht von: Dana Zöllner (1. Staatsprüfung für das Lehramt an Gymnasien)

**Kornstrukturen** sind ein bedeutendes Merkmal polykristalliner Festkörper. Ihre Kontrolle ist ein Schlüssel zur Verbesserung von Materialeigenschaften. Es ist daher von großem Interesse, Kornstrukturen und ihre zeitliche Entwicklung durch Prozesse wie Rekristallisation und **Kornwachstum** vorher zu sagen.

Um Kornwachstum zu untersuchen, haben Smith<sup>1</sup> und Burke und Turnbull<sup>2</sup> die ersten **Kornwachstumsmodelle** entwickelt. Diese zeigten jedoch Diskrepanzen zu Experimenten. Um diese Probleme zu lösen, wurden seit den frühen 80er Jahren viele **Computermodelle** entwickelt. Besonders die in den letzten Jahren entwickelten 3D Simulationen bieten realistische Einblicke in die Topologie von Kornnetzwerken und in die Vorgänge während der Vergrößerung der Kornstruktur. Damit tragen sie zum Verständnis fundamentaler physikalischer Kornwachstumsprozesse bei.

### Monte Carlo Potts Modell Simulation

Für die Untersuchungen im Rahmen dieser Dissertation wurde die **Monte Carlo Potts Modell** Methode in zwei und in drei Dimensionen in einer objekt-orientierten Programmiersprache implementiert<sup>3</sup>. Die Methode basiert auf den Originalarbeiten der Arbeitsgruppe um Anderson<sup>4</sup>. Verbesserungen des Algorithmus wurden eingeführt, um unphysikalische Simulationsartefakte zu eliminieren und die Simulationszeit zu reduzieren.

Damit wurde ein Tool zur Verfügung gestellt, um komplexe Kornstrukturen zu simulieren und diese bezüglich zum Beispiel der Topologie zu analysieren. Desweiteren ergibt sich die Möglichkeit, **normales Kornwachstum** zu simulieren und damit eine Basis für Untersuchungen im Rahmen einer **statistischen Kornwachstumstheorie** zu schaffen.

### Normales Kornwachstum: Selbstähnlichkeit und Skalierung

Es wurde gezeigt, dass die simulierte Mikrostruktur nach einem anfänglichen Zeitraum dem bekannten **Wachstumsgesetz**<sup>5</sup>  $\langle R \rangle^{1/n} = b \cdot t + \langle R \rangle_0^{1/n}$  folgt.  $R$  ist dabei der Radius einer Kornvolumen-gleichen Kugel,  $\langle R \rangle$  die mittlere Korngröße und  $b$  ein Wachstumsfaktor. Der Wachstumsexponent  $n$  ist durch die Simulation mit  $n = 0.49943$  gegeben und stimmt damit sehr gut mit dem erwarteten Wert von  $n = 0.5$  überein, den man in

---

<sup>1</sup>C.S. Smith; Metal Interfaces, p.65, 1952

<sup>2</sup>J.E. Burke and D. Turnbull; Progress in Metal Physics 3, p.220, 1952

<sup>3</sup>D. Zöllner and P. Streitenberger; Materials Science Forum 467-470, p.1129, 2004

<sup>4</sup>e.g. M.P. Anderson, D.J. Srolovitz, G.S. Grest, and P.S. Sahni; Acta Metallurgica 32, p.784, 1984

<sup>5</sup>J.E. Burke and D. Turnbull; Progress in Metall Physics 3, p.220, 1952

allen drei Forschungsfeldern: Theorie, Simulation und Experiment finden kann. Der zugrunde liegende Vergrößerungsprozeß der Kornstruktur entwickelt sich hin zu einem **quasi-stationären Zustand**, der eine **statistische Selbstähnlichkeit** zeigt, die daran erkennbar ist, dass die Größenverteilungsfunktion  $F(R, t)$  durch eine **Skalierungsform**  $F(R, t) = g(t) \cdot f(x)$  beschrieben wird. Alle skalierten Verteilungen  $f(x)$  fallen zu einer einzelnen universellen, zeit-unabhängigen Verteilungsfunktion  $f_{\text{uni}}(x)$  zusammen. Der Parameter  $x$  ist dabei die skalierte Korngröße definiert als  $x = R/\langle R \rangle$ . Es konnte außerdem gezeigt werden, dass die simulierte universelle Verteilungsfunktion sehr gut mit verschiedenen Verteilungen aus Simulationen und aus Experimenten anderer Arbeitsgruppen übereinstimmt.

## Topologie-Korngrößen-Relation

Ein bedeutendes geometrisches Merkmal einer Kornstruktur ist der Zusammenhang zwischen der Anzahl der Seitenflächen eines Kornes und seiner Größe. Durch den Erholungs- und Vergrößerungsprozeß ändert sich dieser Zusammenhang im Laufe der Zeit. Aber es konnte gezeigt werden, dass die **mittlere Anzahl der Seitenflächen**  $s$  eines Kornes im quasi-stationären Vergrößerungszustand durch eine **selbstähnliche zeit-unabhängige Funktion** der relativen Korngröße  $x$  dargestellt werden kann. Dabei wurde herausgefunden, dass die Simulationsdaten von  $s(x)$  durch ein **quadratisches Polynom** approximiert werden können und dass es sich nicht um ein quadratisches Binom handelt. Dies ist ein wichtiger Punkt in Verbindung mit der Formulierung der Volumenänderungsrate. Der quadratisch polynomiale Zusammenhang stimmt mit simplen geometrischen Betrachtungen, experimentellen Beobachtungen und 3D Simulationen anderer Arbeitsgruppen überein.

## Kornwachstumsgesetz

Im quasi-stationären Vergrößerungszustand kann das Wachstum eines Kornes durch ein **mittleres selbstähnliches Kornwachstumsgesetz**<sup>6</sup>  $\frac{dR}{dt} = \dot{R} = \frac{k}{R} \cdot H(x)$  beschrieben werden, wobei  $k$  eine kinetische Konstante und  $H(x)$  eine zeit-unabhängige dimensionslose Funktion ist. Dieses Wachstumsgesetz ist direkt verbunden mit der Volumenänderungsrate  $R\dot{R}$ , die somit wiederum nur von der skalierten Korngröße  $x$  abhängt und damit — wie gezeigt werden konnte — zeit-unabhängig und selbstähnlich ist. Die klassische Standard-Theorie von Hillert<sup>7</sup> basiert auf der Annahme, dass  $H(x)$  eine lineare Funktion ist.

Eine **qualitative Erklärung** für ein nicht-lineares Verhalten von  $H(x)$  beziehungsweise  $R\dot{R}(x)$  basiert auf den Ergebnissen von Glicksman<sup>8</sup>, der die Volumenänderungsrate durch  $R\dot{R} = C_0 + C_1\sqrt{s(x)}$  approximiert hat. Diese Funktion repräsentiert in einem

<sup>6</sup>W.W. Mullins; Acta Materialia 46, p.6219, 1998

<sup>7</sup>M. Hillert; Acta Metallurgica 13, p.227, 1965

<sup>8</sup>M.E. Glicksman; Philosophical Magazine 85, p.3, 2005

statistischen Sinn das drei-dimensionale Analogon zum von Neumann<sup>9</sup>-Mullins<sup>10</sup> topologischen Gesetz in zwei Dimensionen.

Setzt man nun das quadratische Polynom  $s(x)$  in  $R\dot{R}(s)$  ein, so lässt sich schlussfolgern, dass  $R\dot{R}(x)$  und damit  $H(x)$  ein nicht-lineares Verhalten zeigen muss. Dies wurde durch die Simulation bestätigt, wobei sich insbesondere eine **quadratische Funktion**  $R\dot{R}(x)$  beziehungsweise  $H(x)$  als eine gute Approximation der Simulationsdaten ergibt.

## Statistische Mean-field-Theorie

Basierend auf einer quadratischen Relation zwischen  $R\dot{R}$  und  $x$  wurde eine Mean-field-Theorie entwickelt, die eine neue analytische Korngrößenverteilung liefert.

Im Gegensatz zum Standard **Lifshitz-Slyozov<sup>11</sup>-Wagner<sup>12</sup> (LSW) Ansatz**, der auf einer Doppelwurzel im skalierten Wachstumsgesetz  $U(x) = \frac{dx}{d\tau} = \dot{x} \frac{\langle R \rangle}{\langle R \rangle} = \frac{\Gamma}{k} \langle R \rangle \dot{R}(x) - x$ , basiert, kann für die in dieser Arbeit erhaltene quadratische Volumenänderungsrate  $R\dot{R}(x)$  die Bedingung der Volumenerhaltung auch erfüllt werden, wenn der Wertebereich der Funktion  $U(x)$  auf negative Werte (inklusive Null) beschränkt wird. Damit kann die Bedingung einer **Doppelwurzel eliminiert** werden, und man erhält einen **LSW-unabhängigen Ansatz<sup>13</sup>**.

Unter Nutzung der quadratischen Funktion  $R\dot{R}$  und der skalierten Verteilungsfunktion  $F(R, t) = g(t) \cdot f(x)$  ergibt sich nach Integration der Kontinuitätsgleichung,  $\partial F(R, t) / \partial t + \partial (\dot{R} \cdot F(R, t)) / \partial R = 0$ , eine **zwei-parametrische Klasse von skalierten und normalisierten Korngrößenverteilungsfunktionen**, die sich für einen **Grenzfall** auf eine ein-parametrische Verteilungsfunktion<sup>14</sup> reduzieren.

## Vergleich der analytischen Verteilungsfunktionen mit 3D Monte Carlo Simulationsergebnissen

Es wurde herausgefunden, dass die analytischen Korngrößenverteilungsfunktionen die Simulationsdaten sowohl **in einem direkten Fit** als auch in einem Fit mit den Parametern, wie sie aus den Anpassungen der Volumenänderungsrate  $R\dot{R}(x)$  resultieren, sehr gut repräsentieren.

Es wurde zusätzlich gefunden, dass die Benutzung eines kombinierten Ausdruckes — aus Glicksman's nicht-linearem Wachstumsgesetz  $R\dot{R} = C_0 + C_1 \sqrt{s(x)}$  und aus einem quadratischen least-squares Fit von  $s(x)$  — nach numerischer Integration ebenso eine Verteilungsfunktion liefert, die auch eine recht gute Repräsentation der simulierten Verteilung darstellt.

---

<sup>9</sup>J. von Neumann; Metal Interfaces, p.108, 1952

<sup>10</sup>W.W. Mullins; Journal of Applied Physics 27, p.900, 1956

<sup>11</sup>I.M. Lifshitz and V.V. Slyozov; Journal of Physics and Chemistry of Solids 19, p.35, 1961

<sup>12</sup>C. Wagner; Zeitung für Elektrochemie 65, p.581, 1961

<sup>13</sup>P. Streitenberger and D. Zöllner; Scripta Materialia (in press)

<sup>14</sup>D. Zöllner and P. Streitenberger; Scripta Materialia 54, p.1697, 2006