

پیش‌بینی رشد دانه در آلومینیم خالص به روش مونت کارلو

سید مسعود حافظ حقیقت (دانشجوی کارشناسی ارشد)

علی کریمی طاهری (استاد)

دانشکده‌ی مهندسی و علم‌مواد، دانشگاه صنعتی شریف

با توسعه‌ی علوم رایانه‌یی، روش‌های عددی در شبیه‌سازی فرایندهای آزمایشگاهی و صنعتی مورد توجه قرار گرفته است. به‌عنوان مثال می‌توان به استفاده از روش‌های شبیه‌سازی در پیش‌بینی و بررسی ریزساختار مواد مختلف اشاره کرد. با توجه به تأثیر ریزساختارها بر خواص مکانیکی و فیزیکی مواد، پیش‌بینی آنها از اهمیت به‌سزایی برخوردار است. روش مونت کارلو که به‌عنوان یک روش فیزیکی-آماري محسوب می‌شود، در زمره‌ی روش‌هایی است که در دهه‌های اخیر به‌صورت موفقیت‌آمیزی در شبیه‌سازی ریزساختار مورد استفاده قرار گرفته است. در تحقیق حاضر از این روش به‌منظور بررسی رشد دانه‌ی نرمال استفاده شده است، به این ترتیب که از طریق کدنویسی رایانه‌یی ساختار ماده به‌صورت شبکه‌ی مثلثی 150×150 دویعدی تصویر شده و طبق الگوریتم مونت کارلو تغییرات ریزساختار بر حسب زمان به‌دست آمده است. نتایج نشان می‌دهد که توان رشد دانه‌ی به دست آمده از این روش مطابقت قابل قبولی با توان رشد دانه‌ی حاصل از مدل‌های تجربی برای فلزات دارد. همچنین با بررسی ریزساختار آلومینیم در دمای مشخص و استفاده از رابطه‌ی سهمی‌گون رشد دانه، تغییر مقدار Q به‌عنوان تعداد جهت‌گیری کریستالی شبکه‌ی مدل مذکور، مورد مطالعه قرار گرفته است.

مقدمه

پیش‌بینی و کنترل ریزساختار فلزات در حین فرایندهای ساخت و تولید صنعتی از اهمیت ویژه‌ی در علم مواد برخوردار است. در برخی از فرایندهای تولید صنعتی، مواد تحت عملیات حرارتی و کار مکانیکی قرار می‌گیرند. در اثر این عملیات بازیابی، تبلور مجدد و رشد دانه در فلز اتفاق افتاده و باعث تعویض ریزساختار و تغییر ویژگی‌های نهایی محصول می‌شود. بنابراین در شاخه‌ی مهندسی مواد، پیش‌بینی ریزساختار به‌صورت تابعی از زمان، دما و شرایط کار برای دست‌یابی به ویژگی‌های مطلوب در محصول نهایی از اهمیت فراوانی برخوردار است. اما به‌علت پیچیده بودن برهم‌کنش دانه‌ها، فرموله کردن عمومی این پدیده مشکل است. رشد دانه نیز به‌طور خاص روی خواص مکانیکی ماده اثر می‌گذارد. به‌طور مثال در مورد کاربردهای ساختاری، در دماهای پایین به‌منظور دست‌یابی به استحکام و چقرمگی بالاتر، اندازه دانه‌های ریزتری مورد نیاز می‌باشد، اما چنانچه بهبود مقاومت خزشی در دمای بالا مدنظر باشد دانه‌های درشت‌تری مورد نیاز است.

اساس مدل‌های نظری فرایند رشد دانه به حدود ۵۰ سال قبل برمی‌گردد که برای نخستین بار در سال‌های ۱۹۴۸ میلادی و سپس در سال ۱۹۵۲ میلادی ارائه شد. پس از آن در خلال ۳۰ سال، مدل‌های دیگری برپایه‌ی نتایج تجربی ارائه شدند. در سال ۱۹۸۴ میلادی اندرسون و همکارانش روش شبیه‌سازی رایانه‌یی را برای

پیش‌بینی رشد به کار بردند که تحولی بزرگ در توسعه‌ی مدل‌های رشد دانه محسوب شد. در سال ۱۹۹۲ میلادی نیز مدل‌هایی نظری با بررسی‌های تجربی ارائه شدند.^[۱] رشد دانه — افزایش اندازه‌ی دانه بعد از تکمیل تبلور مجدد استاتیکی در یک ماده‌ی پلی‌کریستال — بر دو نوع است: رشد دانه‌ی نرمال و رشد دانه‌ی غیرنرمال. رشد دانه‌ی نرمال با دو مشخصه از دیگر انواع رشد دانه تمیز داده می‌شود. اولین مشخصه، یکنواختی ریزساختار است به‌طوری‌که بزرگ‌ترین دانه $2/5$ تا 3 برابر اندازه دانه‌ی متوسط است و ویژگی دوم عدم وابستگی توزیع اندازه دانه نرمالیزه شده به زمان است.^[۲-۱۵]

گزارش شده است که در خلال رشد دانه‌ی نرمال، ریزساختار دارای ساختار یکنواختی است و محدوده‌ی توزیع شکل و اندازه‌ی دانه‌ها باریک‌تر است. همچنین توزیع اندازه دانه‌ها مستقل از زمان است (شکل ۱ الف). اما در حین رشد دانه‌ی غیرنرمال، برخی از دانه‌ها به‌صورت غیریکنواخت رشد می‌کنند و موجب حذف دانه‌های ریزتر می‌شوند و در نتیجه توزیع اندازه‌ی دانه‌ها به‌صورت غیریکنواخت صورت می‌گیرد (شکل ۱ ب). با وجود این، در برخی موارد نیز رشد دانه‌های درشت متوقف شده و دوباره رشد دانه به‌صورت عادی برمی‌گردد.^[۱]

عوامل اصلی مؤثر بر رشد دانه عبارت‌اند از: دما، عناصر محلول، ذرات فاز ثانویه، اندازه نمونه و بافت. در تحقیق انجام شده فرض بر

که این ویژگی باعث چشم پوشی از تأثیر متقابل دانه‌ها بر هم می‌شود.^[۲] اما در روشی که توسط اندرسون و سرولویتز و براساس مدل مونت کارلو، در دهه‌ی ۱۹۸۰ میلادی انجام گرفت برهم‌کنش متقابل دانه‌ها نیز در نظر گرفته شد.^[۱۱،۴،۳،۱] لازم به ذکر است که تحقیقات متعددی نیز در زمینه‌های انجماد، رشد فیلم‌های نازک، انتقال جرم در حالت جامد، رفتار مکانیکی جامدات سرامیکی چندکریستالی، شبیه‌سازی قطعات نیمه‌رسانای زیر میکرون، و شکست و گسیختگی مواد با استفاده از این روش انجام گرفته است.^[۱۳،۱۲،۴-۲]

در تحقیق حاضر سعی شده است مطابقت نتایج حاصل از روش مونت کارلو با مدل‌های نظری و تجربی به دست آمده برای رشد دانه مورد بررسی قرار گیرد. بدین منظور در مرحله‌ی اول توان رشد دانه به دست آمده از روش مونت کارلو با نتایج مدل‌های نظری و تجربی مقایسه می‌شود. سپس در مرحله‌ی دوم با در نظر گرفتن یک اندازه دانه‌ی اولیه‌ی متوسط برای آلومینیم، نتایج به دست آمده از روش مونت کارلو با نتایج حاصل از مدل رشد دانه‌ی سهمی‌گون مقایسه می‌شود.

مدل نظری رشد دانه

بورک و ترنبول^[۱] در سال‌های ۱۹۴۸ و ۱۹۵۲ میلادی سینتیک رشد دانه را با فرض اینکه فشار اعمالی به مرز دانه (P) تنها از انحناى مرز ناشی می‌شود ارائه کردند. اگر شعاع‌های انحناى اصلی یک مرز با انرژی γ_b برابر با R_1 و R_2 باشد، برای فشار اعمالی به مرز دانه داریم:

$$P = \gamma_b \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right) \quad (1)$$

اگر فرض کنیم مرز قسمتی از کره به شعاع R است، می‌توان نوشت:

$$R = R_1 = R_2$$

و در نتیجه:

$$P = \frac{2\gamma_b}{R} \quad (2)$$

برای ادامه‌ی محاسبات فرض می‌کنیم:

الف) γ_b برای همه‌ی مرزها یکسان است.

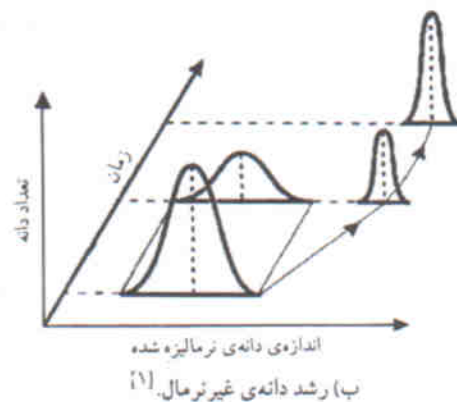
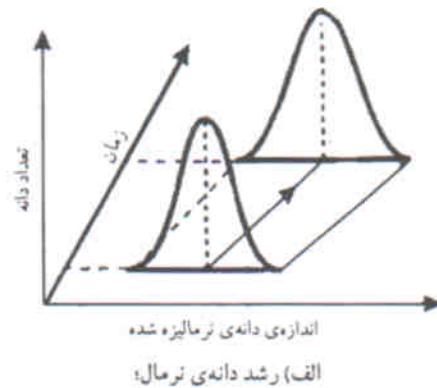
ب) شعاع انحنا (R) متناسب با شعاع متوسط یک دانه‌ی خاص است، بنابراین:

$$P = \frac{\alpha\gamma_b}{R} \quad (3)$$

که در آن α ثابت هندسی است.

ج) سرعت مرز متناسب با فشار اعمالی به مرز است، یعنی:

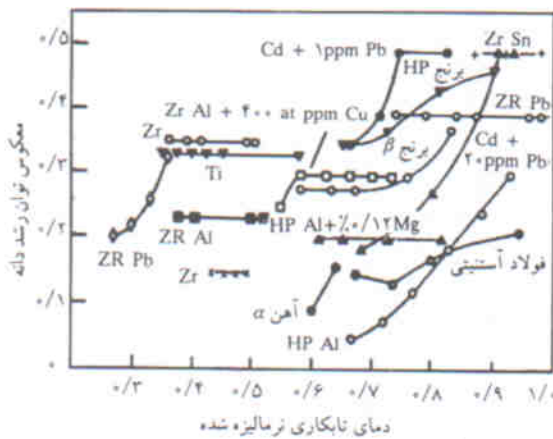
$$V = C.P \quad (4)$$



شکل ۱. تصویر شماتیک تغییر توزیع اندازه‌ی دانه در طول.

این است که فلز خالص بوده و هیچ‌گونه عنصر آلیاژی و فاز ثانویه در زمینه وجود ندارد. همچنین از اثرات اندازه‌ی نمونه و بافت نیز صرف نظر شده و فقط اثرات دمایی در تبدیلات مدل مونت کارلو وارد شده است.

با توجه به عوامل مذکور، از لحاظ تاریخی به‌کارگیری شبیه‌سازی رایانه‌ی برای ساختارهای پلی کریستالی در دو مسیر مختلف تکامل یافته است. در روش اول مرز دانه‌ها را به‌صورت یک مرز پیوسته در نظر می‌گیرند و حرکت آنها را تحت معادلات خاصی مدل می‌کنند. روش دوم براساس مدل مونت کارلو است که به‌طور خاص تحت عنوان مدل پاتس^۱ خوانده می‌شود. در این روش تک تک دانه‌ها به‌صورت ساختار مجزا (چیدمان بلوکی) در کنار هم قرار گرفته و در نهایت به‌صورت مجموع دانه‌ها شکل می‌گیرند. قوانین انرژی، مهاجرت مرز دانه‌ها را کنترل کرده و رفتار رشد آنها را به‌طور تک به تک به‌صورت تابعی از زمان پردازش می‌کند.^[۲] روش مونت کارلو به‌طور موفقیت‌آمیزی در شبیه‌سازی رشد دانه‌ی نرمال، غیرنرمال، رشد در حضور ذرات فاز ثانویه، تبلور مجدد استاتیکی و تبلور مجدد دینامیکی به‌کار گرفته شده است.^[۱۱-۹] در بیشتر مدل‌های قبلی دانه‌ها به‌صورت کروی مورد بررسی قرار گرفته است



شکل ۲. وابستگی دمایی توان رشد دانه‌ی (n) در حالت رشد دانه‌ی همدمای برای مواد مختلف.^[۱۱]

برخی فلزات و آلیاژها مقدار n کاهش نسبی می‌یابد. همچنین مشاهده می‌شود که مقدار $1/n$ برای فلزات مختلف به‌طور متوسط، حدود $0.4/1$ است. هدف این تحقیق بررسی مقدار $1/n$ به دست آمده از روش مونت کارلو با نتایج فوق است. همچنین سعی شده است میزان مطابقت رابطه‌ی 10° با نتایج حاصل از شبیه‌سازی به روش مونت کارلو مقایسه شود.

روش تحقیق

روش شبیه‌سازی

در این تحقیق برای بررسی رشد دانه نرمال از زبان برنامه‌نویسی MATLAB در مدل کردن به روش مونت کارلو استفاده شد. در این مدل فرض شد ماده از دمای ذوب (T_m) به دمای T سرد شود. سپس در آن دما به صورت بی‌شکل منجمد شده، و شکل‌گیری کریستالی و رشد دانه اتفاق افتد.^[۱۴، ۱۷] برای تصویر کردن ریزساختار در رایانه ابتدا نقشه‌یی از ساختار پیوسته‌ی دانه‌ها به شبکه‌یی گسسته تبدیل شد. برای این منظور از اجزاء سطحی کوچک در حالت دوبعدی استفاده شد و مرکز این المان‌ها به عنوان نقاط شبکه در نظر گرفته شدند. از یک شبکه‌ی مثلثی 150×150 دوبعدی برای مدل کردن ریزساختار استفاده شد. در این راستا، به منظور اعمال شرایط پیچیده مرز دانه در مدل، ریزساختار به صورت شبکه‌یی گسسته (مانند شکل ۳) در نظر گرفته شد و هر کدام از مکان‌های این شبکه با عددی بین ۱ تا Q مانند S مشخص شدند، که هر کدام از این اعداد نشان‌دهنده‌ی جهت‌گیری کریستالی^۵ یک مکان است. می‌توان گفت مرز دانه محلی است که در مجاور آن دو عدد غیر مساوی وجود دارد و سایر مکان‌ها که دارای اعداد یکسانی هستند به‌عنوان درون دانه محسوب می‌شوند. شبیه‌سازی در سه حالت $Q=32$ ، $Q=64$ و $Q=180$ انجام پذیرفت.

و از آنجا که سرعت مرز برابر است با:

$$V = \frac{d\bar{R}}{dt} \quad (5)$$

بنابراین خواهیم داشت:

$$\frac{d\bar{R}}{dt} = \frac{\alpha C \gamma_b}{\bar{R}} \quad (6)$$

پس:

$$\bar{R} d\bar{R} = \alpha C \gamma_b dt \quad (7)$$

با انتگرال‌گیری از رابطه‌ی فوق داریم:

$$\bar{R}^2 - \bar{R}_0^2 = 2\alpha C \gamma_b t \quad (8)$$

و با فرض:

$$B = 2\alpha C \gamma_b \quad (9)$$

خواهیم داشت:

$$\bar{R}^2 - \bar{R}_0^2 = Bt \quad (10)$$

که در رابطه‌ی 10° ، \bar{R} شعاع اندازه‌ی دانه‌ی متوسط در زمان t و \bar{R}_0 شعاع اندازه‌ی دانه‌ی متوسط اولیه و B مقدار ثابت است. قانون فوق که «قانون رشد سهمی‌گون^۲» خوانده می‌شود برای هر دو حالت ریزساختار دوبعدی و سه‌بعدی صادق است، اگر چه طبق رابطه‌ی 10° با تغییر شرایط، B تغییر خواهد کرد. در شرایط حدی که اندازه‌ی دانه خیلی کوچک‌تر از اندازه‌ی دانه‌ی متوسط در زمان t باشد، یعنی:

$$\bar{R}^2 \gg \bar{R}_0^2 \quad (11)$$

خواهیم داشت:

$$\bar{R}^2 = Bt \quad (12)$$

دو رابطه (۱۰) و (۱۲) را در حالت تعمیم یافته می‌توان به صورت زیر نوشت:

$$\begin{aligned} \bar{R}^n - \bar{R}_0^n &= Bt \\ \bar{R} &= B^{1/n} t^{1/n} \end{aligned} \quad (13)$$

در روابط ۱۳، n را «توان رشد دانه^۳» می‌خوانند که در محاسبات منتهی به رابطه‌ی ۱۲، $n=2$ (با $1/n=0.5$) به دست می‌آید.^[۱۷، ۱۸] مطابقت رابطه‌های 10° و 12° با نتایج تجربی برای اولین بار توسط بک^۴ و همکارانش در سال ۱۹۴۹ میلادی انجام پذیرفت. آنها نشان دادند که مقدار n به‌طور معمول بیشتر از ۲ است ($1/n < 0.5$) و با تغییرات دمایی و ترکیب ماده، مقدار n تغییر می‌کند. بررسی‌های تجربی دیگر نشان داد که توان رشد دانه در تعداد محدودی از مواد برابر با ۲ است که از طریق روابط 10° و 12° پیش‌بینی شده بود.^[۱۱] تغییرات مقدار $1/n$ با تغییرات دما برای فلزات و آلیاژهای مختلف در شکل ۲ نشان داده شده است. با توجه به این شکل، با افزایش دما در

مهاجرت آنها می شود. می توان گفت که هر تکه از مرز سرعت حرکتی متناسب با اختلاف پتانسیل شیمیایی موضعی به صورت زیر خواهد داشت:

$$V_i = C[1 - \exp(-\Delta G/kT)] \quad (16)$$

که در آن، ضریب C نشان دهنده ی تحرک مرز بوده و نشانگر تقارن در شبکه است. ΔG تابع احتمال استفاده شده در این شبیه سازی نیز با استفاده از فرمان rand موجود در توابع کتابخانه ی نرم افزار MATLAB در شبیه سازی اعمال شده است.

فاصله ی زمانی در این شبیه سازی تحت عنوان گام مونت کارلو (MCS) خوانده می شود که عبارت است از N دفعه بررسی الگوریتم فوق، در سیستم به صورت اتفاقی. [۱۳، ۱۰، ۸، ۷، ۲، ۱] در این تحقیق، برای تحلیل و اندازه گیری ریزساختار به دست آمده از شبیه سازی که به صورت فایل های تصویری اند از روش پردازش و تحلیل تصویری استفاده شد. روش پردازش و تحلیل تصویری با استفاده از ماتریسی کردن اشکال و ارزش دهی به هر پیکسل انجام گرفت و در نتیجه اطلاعات مربوط به ریزساختار در مقیاس ابعادی پیکسل قابل محاسبه بود.

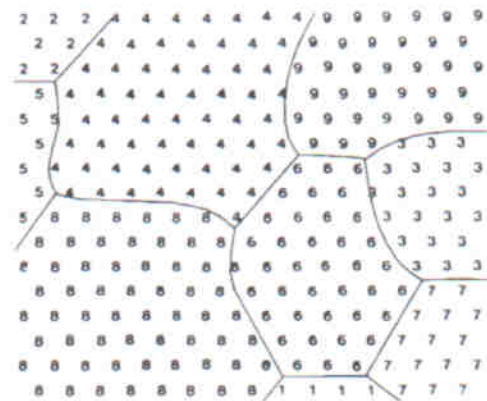
تبدیل زمان MCS به زمان واقعی

در بررسی های انجام گرفته از روش مونت کارلو زمان برحسب گام مونت کارلو (MCS) است. هر چند بررسی برخی پارامترها از جمله اندازه دانه نرمالیزه شده به دلیل عدم وابستگی این پارامتر به زمان قابل قبول است، ولی در صورتی که بخواهیم نتایج به دست آمده از شبیه سازی را با نتایج تجربی و نظری مقایسه کنیم نیاز به تبدیل MCS به زمان واقعی داریم.

نخستین کار برای تبدیل گام مونت کارلو (MCS) به ثانیه توسط لینگ و اندرسون [۱۶ و ۸، ۲] با استفاده از روش تجربی و مقایسه ی سینتیک رشد به صورت زیر انجام گرفت:

$$t_{min} = 20.44 + 0.22 t_{MCS} \quad (17)$$

که در آن t_{min} زمان برحسب دقیقه و t_{MCS} زمان برحسب گام مونت کارلو است. این رابطه تا حدودی می توانست پاسخ گوی نیاز باشد ولی با توجه به اینکه تبدیل زمان شبیه سازی به زمان واقعی به ثابت شبکه ی مدل مونت کارلو و دمای سیستم بستگی داشت، با تغییر شرایط نمی توانست صحت داشته باشد. بدین منظور رابطه ی تبدیل زمان MCS به زمان واقعی باید شامل عوامل ترمودینامیکی می شد. [۱۶، ۸] سایتو و اینوموتو [۱۶ و ۸] در سال ۱۹۹۲ میلادی براساس سازوکار نفوذی رشد دانه، نظریه ی به منظور تبدیل زمان



شکل ۳. ریزساختار شبیه سازی شده که در آن اعداد نشان دهنده ی جهت گیری کریستالی، و خطوط نشان دهنده ی مرز دانه ها هستند. [۱۳]

انتخاب اعداد فوق بر این اساس است که طبق تحقیقات انجام گرفته Q می بایست بزرگ تر از ۳۲ باشد تا مقدار توان رشد دانه واقعی به دست آید. [۱۴-۱۰-۷، ۴-۱]

انرژی کل سیستم حاصل از سطح مرز دانه طبق مدل پاتس [۱۵]، برابر است با:

$$E = \frac{J}{V} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^{nn} (1 - \delta_{s_i, s_j}) \quad (14)$$

که در آن J ثابتی است متناظر با انرژی مرز دانه، زیگمای اول مجموع کل N مکان در سیستم، زیگمای دوم مجموع کل nn همسایه مکان i ام در فاصله ی مشخص و δ_{s_i, s_j} دلتای کرونگر است. [۱۵، ۲] الگوریتم شبیه سازی سینتیک مهاجرت مرز دانه به صورت زیر است:

۱. ابتدا یک مکان از نقاط شبکه به صورت اتفاقی انتخاب می شود.
۲. سپس جهت کریستالی آن نقطه به صورت اتفاقی به یکی از دیگر جهات کریستالی (غیر از جهت کریستالی نقطه ی انتخاب شده) تبدیل می شود.
۳. در این تبدیل اگر تغییر انرژی حاصل (ΔE) کم تر یا مساوی صفر باشد، تبدیل جهت کریستالی پذیرفته شده است.
۴. در صورتی که تغییر انرژی بزرگ تر از صفر باشد، تغییر جهت کریستالی از طریق احتمال بولتزمن که به صورت زیر است مورد پذیرش قرار می گیرد: [۱۸، ۲]

$$w = \exp(-\Delta E/kT) \quad (15)$$

که در آن k ثابت بولتزمن و T دما برحسب درجه ی کلون است. ۵. مراحل ۱ تا ۵ به تعداد نقاط شبکه (N) تکرار می شود. بنابراین تغییر جهت گیری در داخل دانه تقریباً هرگز اتفاق نمی افتد، چرا که انرژی اعمالی به سیستم در این حالت بیشتر می شود. در صورتی که در مرز دانه ها این تغییر اتفاق افتد باعث رشد و

جدول ۱. تبدیلات انجام گرفته در این تحقیق.

| | | |
|--|---|------------------------------------|
| زمان برحسب گام مونت کارلو (MCS) | ← | زمان برحسب ثانیه (s) |
| طول و سطح برحسب کوچکترین واحد تصویر (pixel) | ← | طول برحسب میکرون (μm) |

جدول ۲. کمیت‌های فیزیکی، ثابت‌های آلومینیم و مدل، که در این شبیه‌سازی استفاده شده‌اند.

| | |
|---------------------------------------|--------------------|
| γ (J/m ²) | ۰/۸ |
| V (m ³ /mol) | 7×10^{-6} |
| d' (Å) | ۳/۴۶ |
| R _g (J/mol ³ k) | ۸/۳ |
| T (°k) | ۱۲۷۳ |
| d (μm) | ۱۰ |
| Q | ۳۲، ۶۴، ۱۸۰ |

۲. مقادیر مربوط به کمیت‌های فیزیکی: دما (T)، زمان (t)، و ثابت گازها (R_g).

۳. مقادیر مربوط به مدل: تعداد حالات شبکه‌ی مدل (Q)، ثابت شبکه‌ی مدل (d)، و اندازه دانه‌ی متوسط اولیه (\bar{A}_0).

در این تحقیق کمیت‌های مربوط به ماده برای آلومینیم خالص در رابطه‌ها قرار داده شد. همچنین کمیت‌های فیزیکی و مقادیر مربوط به مدل به صورت جدول ۲ به عنوان مقادیر اولیه در شبیه‌سازی استفاده شدند.

نتایج و بحث

محاسبه‌ی توان رشد دانه

چنان که در شکل ۴ مشاهده می‌شود، با گذشت زمان درشت شدن تدریجی دانه‌ها مشهود است. از طرفی باتوجه به این که با گذشت زمان، دانه‌ها به صورت محوری باقی مانده‌اند و اندازه‌ی بزرگ‌ترین دانه تقریباً ۳-۲/۵ برابر اندازه دانه‌ی متوسط (\bar{R}) است، می‌توان نتیجه گرفت که رشد دانه از نوع نرمال است. [۴۵، ۳۰، ۲] تحلیل‌های دیگر براساس رسم هیستوگرام‌های تعداد دانه برحسب اندازه دانه‌ی نرمالیزه شده در شکل ۵ بررسی‌های فوق را تأیید می‌کنند. همان‌طور که از اشکال ۵ الف تا ۵ د مشاهده می‌شود در هر کدام از این اشکال که به ترتیب در زمان‌های MCS ۳۰۰، MCS ۵۰۰، MCS ۷۰۰ و MCS ۹۰۰ به دست آمده اندازه‌ی دانه‌ها، توزیع نرمال خود را از دست نمی‌دهد و شرایط توزیع دانه همانند شکل ۱ الف است. یعنی اندازه

شبیه‌سازی روش مونت کارلو به زمان واقعی ارائه کردند. ضریب نفوذ مرز دانه، D، در شبکه‌ی دوبعدی مثلثی تابعی از فرکانس پرش افقی، v، و ثابت شبکه‌ی مدل مثلثی، d، به صورت زیر است:

$$D = vd^2/6 \quad (18)$$

در مدل پاتس با تعداد حالات جهت‌گیری کریستالی شبکه، Q، مقدار MCS با زمان پرش متوسط ۱/۷ متناسب است، بنابراین زمان MCS ۱ برابر است با:

$$1 \text{ (MCS)} = d^2/6DQ \text{ (s)} \quad (19)$$

همان‌طور که از رابطه‌ی ۱۰ مشاهده می‌شود، ثابت B تابعی از انرژی مرز دانه است، به طوری که می‌توان ارتباط این ثابت را با سایر عوامل ترمودینامیکی به صورت زیر نشان داد: [۱۰]

$$B = \gamma VD/d'R_gT \quad (20)$$

که در آن γ ، v، d'، R_g، T به ترتیب انرژی مرز دانه، حجم مولی فلز مورد نظر، ثابت شبکه‌ی فلز، ثابت گازها و دما برحسب درجه‌ی رشد کلون است. بنابراین با ترکیب روابط ۱۰، ۱۹، ۲۰ رابطه‌ی رشد دانه‌ی سهمی‌گون را به صورت زیر می‌توان نوشت:

$$\bar{R}_{\mu\text{m}} = Bt_s + \bar{R}_{\mu\text{m}} \quad (21)$$

$$\bar{R}_{\mu\text{m}} = \frac{\gamma VD}{d'R_gT} \times \frac{d^2}{6DQ} t_{\text{MCS}} + \bar{R}_{\mu\text{m}}$$

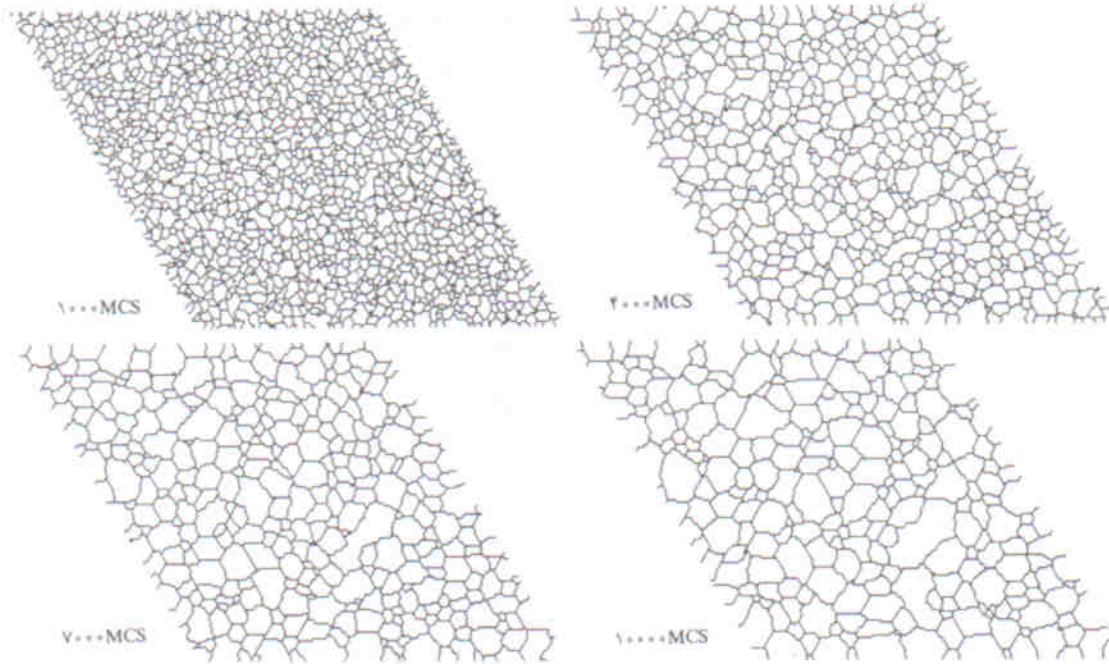
همچنین با تبدیل مقیاس تصاویر مورد آنالیز از پیکسل به میکرون خواهیم داشت:

$$\bar{R}_{\mu\text{m}} = \sqrt{\frac{\gamma VD^2}{6d'R_gTQ} t_{\text{MCS}} + \left(\frac{15 \cdot d}{1158}\right)^2 \frac{\bar{A}_0 \cdot \text{pixel}}{\pi}} \quad (22)$$

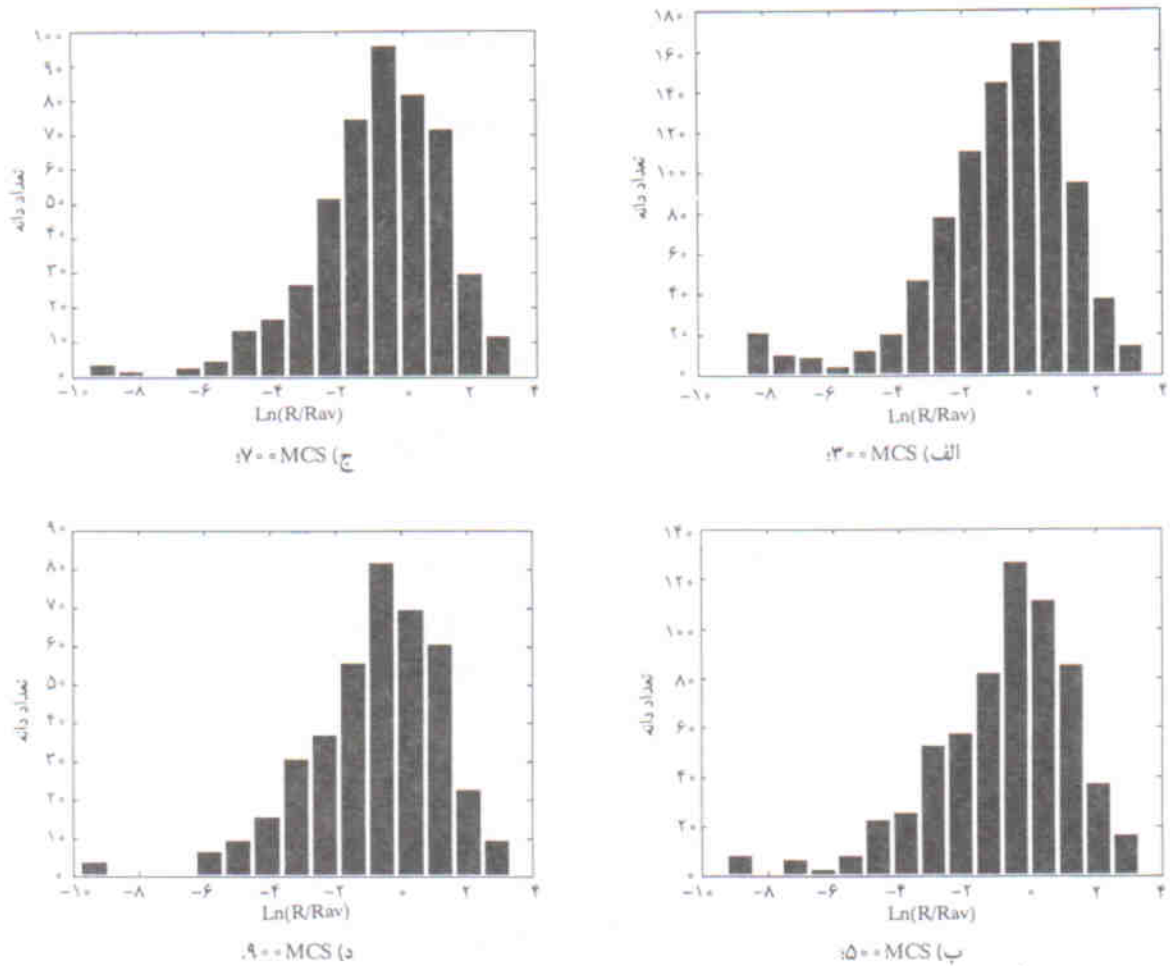
در رابطه‌ی ۲۱ و ۲۲، $\bar{R}_{\mu\text{m}}$ ، $\bar{R}_{\mu\text{m}}$ ، t_s و $\bar{A}_0 \cdot \text{pixel}$ به ترتیب زمان برحسب ثانیه، شعاع متوسط دانه‌ها در زمان MCS برحسب میکرون، شعاع متوسط اولیه دانه‌ها برحسب میکرون، و اندازه‌ی دانه‌ی متوسط اولیه برحسب پیکسل‌اند. همان‌طور که ملاحظه می‌شود در رابطه‌ی ۲۲ تبدیلات زمانی و ابعادی به صورت جدول ۱ انجام گرفته است، به گونه‌ی که می‌توان با قراردادن اندازه‌ی دانه‌ی متوسط اولیه برحسب پیکسل و زمان برحسب MCS در طرف راست رابطه، شعاع متوسط دانه را برحسب میکرون (μm) از طرف چپ رابطه به دست آورد.

با توجه به نکات فوق‌الذکر به طور کلی پارامترهای اعمالی در روابط و مدل را می‌توان به سه دسته تقسیم کرد:

۱. مقادیر مربوط به نوع ماده: انرژی مرز دانه (γ)، حجم مولی ماده (V)، و ثابت شبکه‌ی کریستالی فلز (d').



شکل ۴. پیش‌بینی رشد دانه بدون حضور رسوبات در حالت شبکه‌ی مثلثی و $Q = 180$.

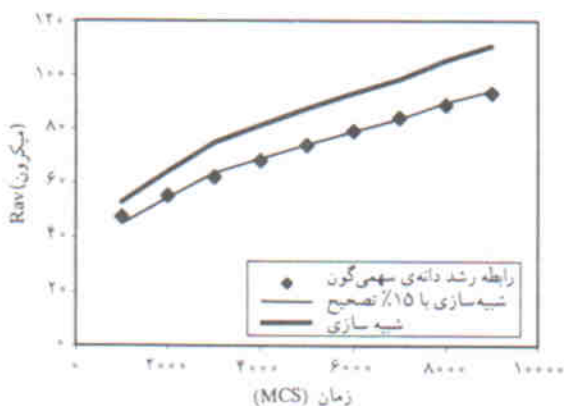


شکل ۵. هیستوگرام‌های اندازه‌ی دانه‌ی نرمالیزه شده برحسب تعداد دانه در زمان‌های فوق که نشان‌دهنده‌ی توزیع نرمال دانه‌ها در این زمان‌هاست.

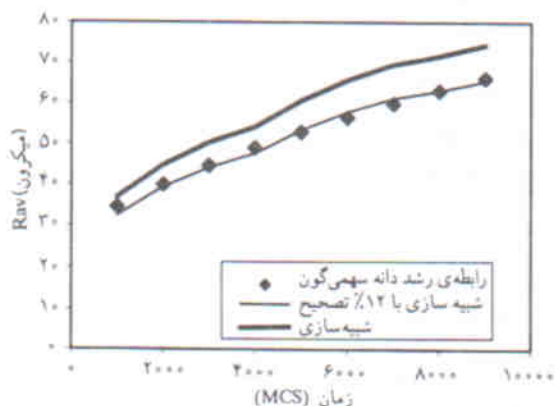
بررسی رشد دانه‌ی آلومینیم

به منظور بررسی میزان مطابقت نتایج حاصل از روش مونت کارلو با رابطه‌ی نظری رشد دانه‌ی سهمی‌گون، شبیه‌سازی در سه مقدار Q برابر با ۱۸۰، ۶۴، ۲۲ در زمان MCS ۱۰۰۰۰ انجام پذیرفت. اندازه دانه‌ی متوسط اولیه (\bar{A}_0) در زمان MCS ۱۰۰۰ به عنوان مبنا در رابطه‌ی رشد دانه (رابطه‌ی ۲۲) قرار داده شد. سپس با استفاده از رابطه‌ی ۲۲، اندازه‌ی شعاع متوسط در زمان‌های ۱۰۰۰ تا ۹۰۰۰ MCS بعد از MCS ۱۰۰۰ اولیه به دست آمد. از طرفی اندازه‌ی شعاع متوسط دانه‌ها در زمان‌های ذکر شده از طریق مدل شبیه‌سازی شده توسط روش مونت کارلو به دست آمد که نتایج به صورت اشکال ۷ تا ۹ به ترتیب برای Q های ۱۸۰، ۶۴ و ۲۲ است.

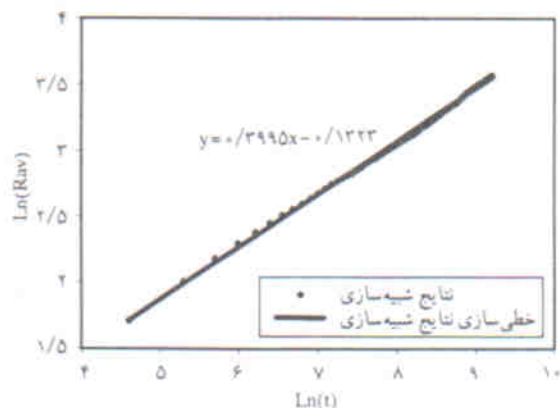
همان‌طور که مشاهده می‌شود، هر کدام از این اشکال دارای ۳ مجموعه داده هستند. منحنی‌هایی که به صورت ضخیم رسم شده‌اند، نشان‌دهنده‌ی نتایج حاصل از مدل مونت کارلو هستند. داده‌های به صورت علامت مربعی (چهارگوش)، نتایج حاصل از رابطه‌ی نظری



شکل ۷. تغییرات اندازه‌ی شعاع متوسط دانه‌ی آلومینیم با زمان به روش مونت کارلو و محاسبات نظری در $Q=32$ که نشان‌دهنده‌ی ۱۵٪ خطاست.



شکل ۸. تغییرات اندازه‌ی شعاع متوسط دانه‌ی آلومینیم با زمان به روش مونت کارلو و محاسبات نظری در $Q=64$ که نشان‌دهنده‌ی ۱۲٪ خطاست.



شکل ۹. تغییرات لگاریتمی شعاع دانه با زمان، در شبکه‌ی مثلثی با $Q=180$.

دانه‌ی نرمالیزه شده R/\bar{R} تابع دما نیست، پس می‌توان نتیجه گرفت که رشد دانه از نوع نرمال است.^[۱۱]

منحنی لگاریتمی اندازه دانه‌ی متوسط (\bar{R}) برحسب زمان برای ریزساختار به دست آمده به صورت شکل ۶ به دست می‌آید. این شکل نتایج محاسبه‌ی توان رشد دانه شبیه‌سازی در دمای $T \sim 0^\circ K$ و تا زمان MCS ۱۰۰۰۰ طبق الگوریتم مونت کارلو را نشان می‌دهد. وارد کردن دمای صفر درجه کلویین به معنی رشد در آن دما نیست، بلکه نتایج به دست آمده نشان‌دهنده‌ی یک الگوی کلی برای رشد است.

برای اعمال شرایط واقعی رشد، زمان برحسب MCS، به زمان برحسب ثانیه تبدیل می‌شود ولی از آنجا که در محاسبه‌ی توان رشد دانه هدف به دست آوردن شیب خط لگاریتمی است، نیازی به تبدیل زمانی نیست. شیب این خط نشان‌دهنده‌ی صحت رابطه‌ی رشد دانه در شبیه‌سازی انجام گرفته است. به طوری که با فرض $m=1/n$ در رابطه‌ی ۱۲ داریم:

$$\bar{R} = B' t^m \quad (23)$$

$$\ln(\bar{R}) = B'' + m \cdot \ln(t) \quad (24)$$

یعنی شیب خط مزبور نشان‌دهنده‌ی معکوس توان رشد دانه (n) است. همان‌گونه که از این شکل مشاهده می‌شود، شیب خط در زمان‌های طولانی‌تر به مقدار 0.40 میل می‌کند.

طبق شکل ۲، این مقدار برابر متوسط معکوس توان رشد تجربی برای فلزات است.^[۱۳] بنابراین می‌توان گفت توان محاسبه شده برای رشد دانه با استفاده از روش مونت کارلو مطابقت خوبی با توان رشد دانه فلزات به دست آمده از مدل‌های تجربی را نشان می‌دهد و می‌توان از این روش برای شبیه‌سازی رشد دانه نرمال در فلزات، با دقت مناسبی، استفاده کرد.

توضیح است. همان‌گونه که از اشکال ۷ تا ۹ مشاهده می‌شود افزایش Q باعث کاهش سینتیک رشد می‌شود به طوری که در شکل ۷ برای $Q=32$ اندازه شعاع متوسط دانه‌ها در زمان MCS 9000 ، برابر با $115\mu m$ است که با توجه به شکل ۹ در $Q=180$ ، اندازه شعاع متوسط دانه‌ها برای زمان MCS 9000 به $46\mu m$ کاهش می‌یابد.

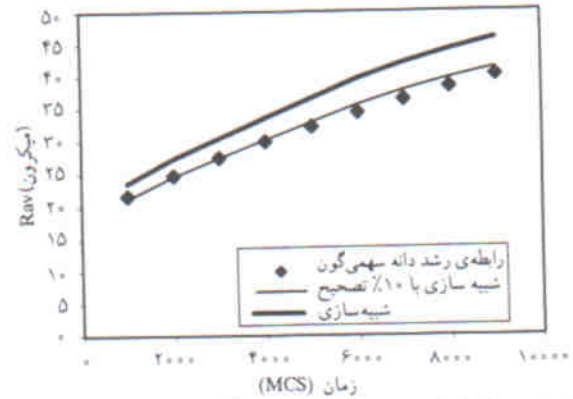
نتیجه‌گیری

به علت اهمیت ریزساختار در تعیین ویژگی‌های مواد مهندسی پیش‌بینی ساختار نهایی در فرایندهای صنعتی و آزمایشگاهی از اهمیت زیادی برخوردار است. در تحقیق حاضر از روش مونت کارلو به منظور بررسی رشد دانه‌ی نرمال در مورد آلومینیم استفاده می‌شود. نتایج به دست آمده در این تحقیق مبین مناسب بودن روش مونت کارلو برای شبیه‌سازی ریزساختار فلزات است. این نتایج نشان‌دهنده‌ی آن است که:

۱. استفاده از روش مونت کارلو برای تعیین رشد دانه مقدار دقیقی را برای توان رشد دانه‌ی متوسط فلزات (n)، مخصوصاً در زمان‌های بالا ارائه می‌دهد.
۲. با تغییرات دمایی در فلزات مختلف، تناسب بین زمان MCS و زمان واقعی فرق می‌کند و باید بر طبق رابطه‌ی که در این تحقیق به دست آمد این تناسب را در هر دما به دست آورد.
۳. در شبیه‌سازی انجام گرفته برای رشد دانه‌ی نرمال در مورد آلومینیم، نتایج مدل مونت کارلو اختلاف 10% تا 15% را نسبت به نتایج به دست آمده از رابطه‌ی رشد دانه سهمی‌گون نشان می‌دهد. به این ترتیب که با افزایش Q به‌عنوان کمیتی از مدل، اختلاف با رابطه رشد دانه سهمی‌گون به حداقل می‌رسد.
۴. نتایج به دست آمده مبین آن است که، Q به‌عنوان تنها پارامتر در افزایش دقت محاسبات مؤثر است و تغییرات ثابت شبکه مدل (d) تأثیری در افزایش دقت ندارد.
۵. همچنین نتایج به دست آمده در Q های مختلف نشان‌دهنده‌ی آن است که با افزایش Q سینتیک رشد دانه کاهش یافته و برای بررسی اندازه دانه‌ی مشخص در Q های بزرگ‌تر به زمان طولانی‌تری نیاز است.

پانویس

1. Potts model
2. Parabolic growth law
3. Grain growth exponent
4. Beck
5. Orientation
6. Monte Carlo Step



شکل ۹. تغییرات اندازه‌ی شعاع متوسط دانه‌ی آلومینیم با زمان به روش مونت کارلو و محاسبات نظری در $Q=180$ که نشان‌دهنده‌ی 10% خطاست.

رشد دانه‌ی سهمی‌گون (رابطه ۲۲) هستند. این نتایج نشان می‌دهند که مدل پاتس در تمامی این اشکال شعاع دانه را مقداری بیشتر از رابطه‌ی سهمی‌گون رشد دانه، پیش‌بینی می‌کند. همچنین با افزایش Q از ۳۲ تا ۱۸۰ اشکال ۷ تا ۹ اختلاف بین نتایج شبیه‌سازی و نظری کاهش پیدا می‌کند. بدین صورت که دو منحنی اشاره شده به هم نزدیک می‌شوند. داده‌های سری سوم در این اشکال با اعمال 10% تا 15% درصد تصحیح به نتایج حاصل از مدل مونت کارلو رسم شده است که به صورت خط باریک پیوسته است.

این نتایج مطابقت بسیار خوبی با نتایج حاصل از رابطه‌ی سهمی‌گون رشد دانه نشان می‌دهد. همان‌طور که در این اشکال مشاهده می‌شود، مقدار تصحیح برای Q های ۳۲، ۶۴ و ۱۸۰ به ترتیب 15% ، 12% و 10% اعمال شده‌اند، یعنی با افزایش مقدار Q اختلاف از رابطه رشد دانه سهمی‌گون کاهش می‌یابد به طوری که پیش‌بینی می‌شود با میل کردن Q به سمت بی‌نهایت، این اختلاف به سمت صفر میل کند.

بررسی‌های انجام گرفته در این تحقیق نشان می‌دهد که تغییر کمیت d به‌عنوان ثابت شبکه‌ی مدل تأثیری در دقت محاسبات انجام شده ندارد. با توجه به اینکه پارامترهای دیگری که وارد مدل و روابط محاسباتی شده‌اند در حقیقت کمیت‌های ترمودینامیکی ماده تحت بررسی بوده‌اند و غیرقابل تغییرند، می‌توان گفت تنها پارامتر مدل است که با افزایش آن دقت محاسبات افزایش می‌یابد. البته لازم به

منابع

1. Humphreys, F. J., Hatherly, M. Recrystallization and Related Annealing Phenomena. Britain: Pergamon, (1995).
2. Ling, S., Anderson, M.P. "Monte carlo simulation of grain growth and recrystallization in polycrystalline materials". JOM, pp 30, (sept. 1992).
3. Anderson, M.P., Srolovitz, D.J. "Computer simulation of grain

- growth-I.kinetics". *Acta Metall*, **32** (5), pp 783 (1984).
4. Srolovitz, D.J., Anderson, M.P. "Grain growth in two dimension", *Scripta Metallurgica*, **17**, pp 241 (1983).
 5. Hillert, M. "On the theory of normal and abnormal grain growth", *Acta Metall*, **13**, pp 227 (1965).
 6. Rollett, A.D. "Overview of modeling and simulation of recrystallization", *Progress in Materials Science*, **42**, pp 79 (1997).
 7. حافظ حقیقت، سید مسعود و کریمی طاهری، علی. «شبه‌سازی رشد دانه‌ی نرمال و تأثیر دما بر آن به روش مونت کارلو». مجموعه مقالات هفتمین کنفرانس انجمن مهندسی متالورژی ایران، تهران: دانشگاه صنعتی شریف (۱۳۸۲).
 8. Saito, Y. "Monte Carlo simulation of grain growth in three-dimensions", *ISIJ International*, **38** (6), pp 559 (1998).
 9. Lee, H.N., Ryoo, H.S. "Monte Carlo simulation of microstructure evolution based on grain boundary character distribution", *Materials Science and Engineering A*, **281**, pp 176 (2000).
 10. Saito, Y., Enomoto, M. "Monte carlo simulation of grain growth", *ISIJ International*, **32**, pp 267 (1992).
 11. Srolovitz, D.J., Anderson, M.P. "Computer simulation of grain growth-3. influence of a particle dispersion", *Acta Metall*, **32**(9), pp 1429 (1984).
 12. Krajcinovic, D. *Damage Mechanics*. Netherlands: Elsevier (1996).
 13. Tomizawa, K. "Numerical simulation of submicron semiconductor devices", London: Artech House (1993).
 14. Sahni, p.S., Grest, G.S. "Kinetics of the Q-State potts model in two dimensions", *Physical Review Letters*, **50** (4), pp 263 (1983).
 15. Jain, S. "Monte Carlo simulation of disordered systems". Singapore: World Scientific (1992).
 16. Saito. Y. "The Monte Carlo simulation of microstructural evolution in metals", *Materials Science and Engineering A*, **223**, pp 114-124 (1997).