

CRECIMIENTO DE GRANO TRIDIMENSIONAL USANDO MÉTODO DE MONTE CARLO.

Di Prinzio C. L., Bonzi E., Druetta E., Nasello O. B².

Facultad de Matemática Astronomía y Física (FaMAF) Medina Allende s/n ciudad Universitaria (5000) Córdoba.
CONICET.

e-mail: diprinzio@famaf.unc.edu.ar

En este trabajo se estudió el crecimiento de grano en 3 dimensiones (3D) mediante el método de Monte Carlo (MC). Las simulaciones fueron hechas sobre una muestra de 100x100x100 sitios y se registraron los tamaños de grano medio y su función distribución en cada paso de Monte Carlo. Las simulaciones con MC permitían estudiar el crecimiento de grano en muestras 3D con partículas de segunda fase y en muestras 3D libre de partículas. En este trabajo se estudió conjuntamente por primera vez el efecto de partículas inmóviles y móviles sobre las propiedades del crecimiento de grano.

Palabras Clave: Borde de grano, hielo, crecimiento de grano

The grain growth in 3 dimensions (3D) was studied using the Monte Carlo algorithm (MC). The simulations were done on a sample of 100x100x100 sites and the medium grain sizes and their distribution function in each Monte Carlo step (MCS). were recorded The MC simulations allowed the study the grain growth in 3D samples with and without second phase particles In this paper the effect on the grain growth properties of immobile and mobile particles has been studied for first time using the same algorithm .

Key Words: Grain Boundary, ice, grain growth

1. INTRODUCCIÓN:

El método de Monte Carlo (MC) fue aplicado para simular numéricamente el crecimiento de grano (CG) en muestras policristalinas bidimensionales (2D) ⁽¹⁻²⁾. Recientemente Yu Q. y Esche S. K. (2003) presentaron un análisis cinético y topológico del MC en CG en muestras policristalinas en tres dimensiones (3D) sin impurezas ⁽³⁾.

Con el mismo método se estudiaron efectos de las impurezas inmóviles ⁽⁴⁾ y móviles ⁽⁵⁾ sobre muestras 2D y efectos de las impurezas móviles sobre muestras policristalinas tridimensionales ⁽⁶⁾.

El CG con partículas de segunda fase dispersa es de interés en glaciología. El CG en muestras de hielo polar y su relación con los contaminantes se encuentra ligado al clima pasado y su investigación es actualmente relevante para conocer el comportamiento del clima. En los hielos polares se encuentran en general partículas que pueden moverse o no con el BG y el efecto de estas partículas en el CG todavía es tema de discusión. Las simulaciones numéricas pueden ayudar a entender este fenómeno. Sin embargo, es importante destacar que los resultados obtenidos con simulaciones de MC de CG en 2D y 3D con partículas no concuerdan en general entre sí. Por ejemplo, Srolovitz et.al ⁽²⁾ y Gao ⁽⁴⁾ encuentran diferentes relaciones entre el radio límite y la fracción de partículas inmóviles para muestras policristalinas en 2D, las cuales a su vez son distintas de las predichas teóricamente. En estos trabajos se ha usado diferentes tamaños de muestra, diferentes radios de grano medio inicial, diferentes tamaños de partículas, etc. que pueden ser la causa de las discrepancias observadas. Por otro lado Anderson et al ⁽⁶⁾ realizó simulaciones MC de CG

en policristales 3D con partículas móviles con el BG y sus resultados no pueden compararse con los anteriores.

Con el fin de conocer las diferencias existentes en el CG con partículas móviles e inmóviles, en el presente trabajo se estudió la influencia en el CG de ambos tipos de partículas usando el mismo método de cálculo.

II. ALGORITMO DE CÁLCULO

La simulación del CG con MC en muestras en 3D usa los mismos procedimientos que se emplean en muestras en 2D ⁽¹⁻⁶⁾:

1) Inicialmente se crea una red 3D con Q sitios ($N_x \times N_y \times N_z = Q$) donde cada sitio representa un grano con una orientación única $S_i > 0$. En este modelo el policristal inicial tiene todos los granos con $S_i = 1 \dots Q$ diferente.

2) Las reglas básicas que rigen un CG con MC son las siguientes:

a) la energía total del policristal W esta dada por:

$$W = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^Q \sum_{j=1}^V J(1 - \delta_{S_i S_j}) \quad (1)$$

Con S_i y S_j orientaciones de los sitios de la red i y j respectivamente, J energía de interacción entre sitios, Q número de sitios de red, V número de vecinos al sitio i y δ función delta de Kronecker. En este trabajo se tomó V=26 vecinos y la red de puntos fue de Q=100 x100x100

b) En forma aleatoria, se elige un sitio de la red denominado i con una orientación S_i .

Mediante la ec. (1) se calcula la energía alrededor del sitio i:

$$W_i^{in} = \sum_{j=1}^V J(1 - \delta_{S_i S_j}) \quad (2)$$

Donde el supra índice significa etapa inicial.

c) Luego se reemplaza la orientación de sitio i (S_i) por una orientación (S_j) del sitio j obtenido aleatoriamente de sus vecinos.

d) Se calcula nuevamente la energía del sitio i W_i^{fi} donde el supra índice significa final.

e) Luego se calcula la diferencia de energías

$$\Delta W_i = W_i^{fi} - W_i^{in} \quad (3)$$

f) Si la ec. (3) resulta negativa o nula el cambio se produce permanentemente y si es positiva se calcula una probabilidad P dada por:

$$P = e^{-\frac{\Delta W_i}{kT}} \quad (4)$$

donde k es la constante de Boltzman y T es la temperatura del policristal. Para permitir que el sistema produzca cambios por activación térmica, se elige un número aleatorio M entre 0 y 1 y se compara con P. Si P es más grande que M entonces se hace el cambio de S_i por el S_j , en caso contrario no. En todas las simulaciones se consideró $T \approx 0^0 K$.

Al igual que Anderson et al. (6) las partículas fueron representadas con la orientación S=0 y su concentración fue fija a lo largo de todos los pasos.

Las posiciones de las mismas fueron elegidas aleatoriamente en la red. Las partículas inmóviles fueron mantenidas fijas a lo largo de toda la simulación. En caso de las partículas móviles, para todos los sitios con $S \neq 0$ se usó la ec. (1) para el cálculo de la energía W, excepto que siempre se consideró nula la interacción (J) de una partícula con un sitio de red o con otra partícula.

III. RESULTADOS DE LAS SIMULACIONES:

Muestra policristalina sin partículas :

Se realizaron 600 pasos de simulación MC (comúnmente llamados por su sigla en inglés MCS) y se estudió la relación del radio medio de los granos (R_M) y la función distribución de R_M en función de MCS. Yu y Esche⁽³⁾ realizaron el mismo tipo de estudio en muestras 3D. El policristal generado luego de MCS=10 alcanzó un radio medio de grano $\langle R \rangle = 1,4$ pixel y este policristal fue usado posteriormente como condición inicial en cada uno de los experimento realizados con partículas de segunda fase

En la fig. 1 se presenta los R_M obtenidos en función de MCS. Como puede verse la relación entre ambas cantidades sigue la relación:

$$\langle R \rangle^n(t) = \langle R \rangle_0^n + kt \quad (6)$$

donde n=2..

Por otro lado en la fig. 2 se presenta la distribución de R_M normalizada para ciertos MCS. Podemos ver en general que las mismas no cambian y que el valor máximo de la distribución normalizada está en $R/\langle R \rangle \approx 1$ lo cual es propio de un CG normal^{(8) y (9)}.

Podemos así concluir que el CG en 3D con el modelo de MC implementado en el presente trabajo hasta MSC=600 sigue un comportamiento de CG normal al igual que el comportamiento observado por Yu Q. y Esche S. K. (2003)⁽³⁾ y por Wan et al. (2009)⁽⁷⁾. Para valores mayores de MCS el tamaño medio de los granos es del orden del tamaño de la muestra y el CG tiende a disminuir debido a la influencia del tamaño de la muestra.

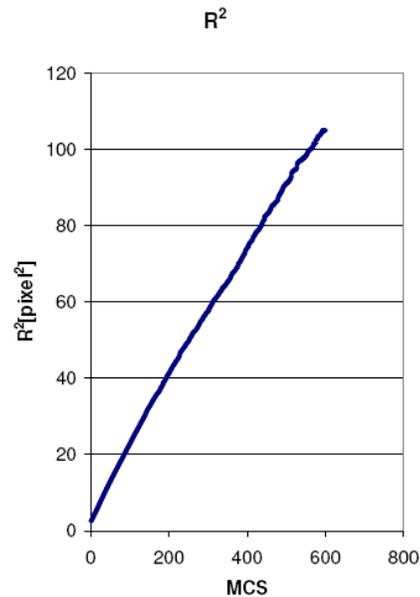


Figura 1: Radio medio de los granos en función de MCS

Muestra policristalina con partículas:

Con el mismo policristal inicial correspondiente a MCS=10 sin partículas se estudió el efecto de las partículas inmóviles y móviles sobre el CG.

En esta figura podemos ver que las partículas en general frenan el CG, siendo el efecto mas marcado cuando las partículas son móviles (ver fig. 4). Las partículas móviles frenan más que las inmóviles debido a que, tal como se muestra en la fig. 5, la partículas móviles tienden a alojarse en los BG. Este resultado esta en concordancia con los obtenidos en muestras bicristalinas 3D por Choudhury y Jayaganthan (2007)⁽¹⁰⁾.

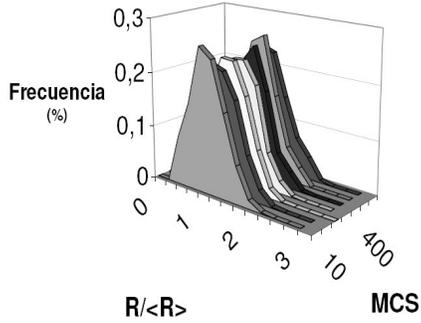
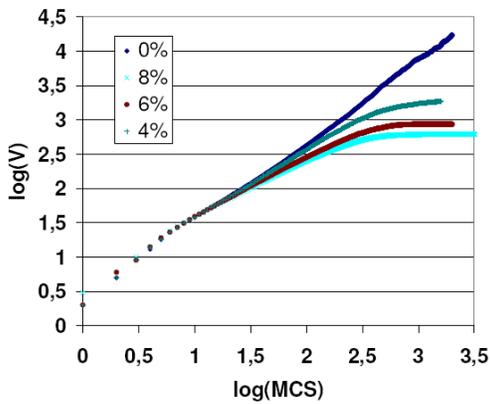
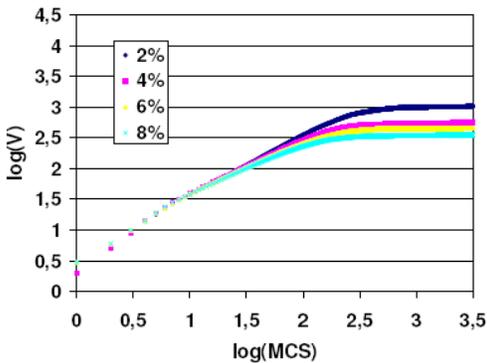


Figura 2: Distribución de los radios de los cristales normalizada para ciertos MCS.

En la fig. 3 se presenta la evolución del volumen medio de los granos V obtenidos con la simulación usando diferentes concentraciones de partículas .



(a)



(b)

Figura 3: Volumen medio de los granos V en función de MCS para una muestra policristalina bajo efecto de partículas inmóviles (a) y de partículas móviles (b) para diferentes concentraciones de partículas

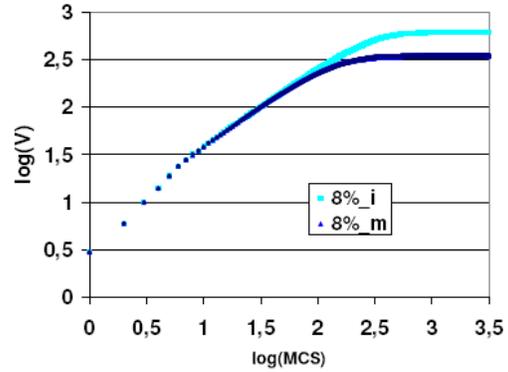
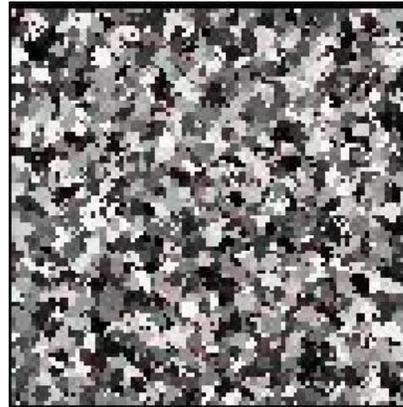
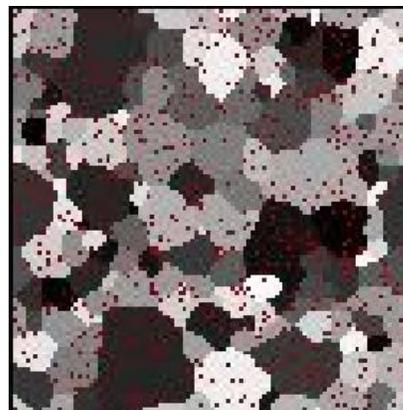


Figura 4: Volumen medio de los granos V en función de MCS para una muestra policristalina bajo efecto de partículas inmóviles (a) y de partículas móviles (b) a concentración de 8%.

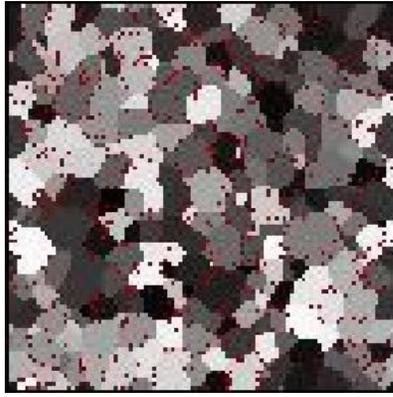
En la fig. 3 podemos ver que en todos los casos el volumen medio de los granos alcanza un valor límite V_L ($V_L = 4\pi/3 R_L^3$ donde R_L es el radio medio límite de los granos) y que V_L es inversamente proporcional a f . En la fig. 6 se muestra la relación entre V_L y f para las partículas inmóviles y móviles.



(a)



(b)



(c)

Figura 3: Secuencia de CG en una de las caras de una muestra 3D (100x100x100) con partículas (representadas por puntos rojos) con concentración $f=8\%$. a) muestra inicial, b) 10000MCS con partículas inmóviles c) 10000MCS con partículas móviles.

Del ajuste de V_L con f podemos encontrar que las relaciones del radio límite R_L con la concentración f para partículas móviles e inmóviles son:

$$\left[\frac{R_L}{r} \right] = (4.2 \pm 0.1) [f]^{(-0.29 \pm 0.02)} \quad (7)$$

y la partículas móviles:

$$\left[\frac{R_L}{r} \right] = (3.5 \pm 0.1) [f]^{(-0.29 \pm 0.02)} \quad (8)$$

Donde r es el radio de la partícula. (En este trabajo el volumen de cada partícula es 1 pixel^3 entonces el radio de las mismas es $r = (3/4\pi)^{1/3}$)

Podemos ver que la relación de R_L/r con f es igual dentro de los errores de la simulación con los obtenidos por Anderson et al (6) para partículas inmóviles en muestras 3D. La relación de R_L/r con f para partículas móviles tiene el mismo exponente que la obtenida para las partículas inmóviles pero el factor pre-potencial es menor. Esto esta asociado como antes mencionamos a que el frenado es más importante en el CG con partículas móviles ya que las mismas pueden ubicarse en los BG.

En muestras 2D se encuentra también que la relación entre R_L/r y f tiene un exponente aproximadamente de $1/2 = 0.5$ para los casos de partícula inmóvil y partícula móvil pero los factores pre-potenciales son distintos ⁽⁴⁾⁽⁵⁾. En estos casos la diferencia podría estar asociada a que los autores usaron diferentes condiciones iniciales ya que las muestras iniciales de Gao et al ⁽⁴⁾ eran de 500×500 sitios de red y con simetría cuadrada mientras que Hassold ⁽⁵⁾ usó un arreglo de sitios de 200×200 y con simetría triangular. Otro ejemplo donde se puede asociar a las condiciones iniciales es los datos obtenidos por Srolovitz et. al ⁽²⁾, y Gao ⁽⁴⁾. Los autores encuentran diferentes relaciones entre el radio límite R_L y la fracción de partículas inmóviles para muestras 2D.

IV CONCLUSIONES:

En este trabajo se estudió el CG mediante el método de MC. A diferencia de otros trabajos, se estudiaron el efecto de partículas inmóviles y móviles sobre el CG, utilizando las mismas condiciones iniciales y la misma simetría en la muestra 3D De las simulaciones con ambos tipos de partículas se puede concluir que las partículas móviles frenan más que las inmóviles y que en ambos casos la relación de R_L/r con f tiene un exponente igual a 0,3.

Este trabajo permitió además tener una rutina eficiente y útil para poder estudiar efectos de contaminantes en muestras de hielo polar, cuyo estudio ya se ha iniciado.

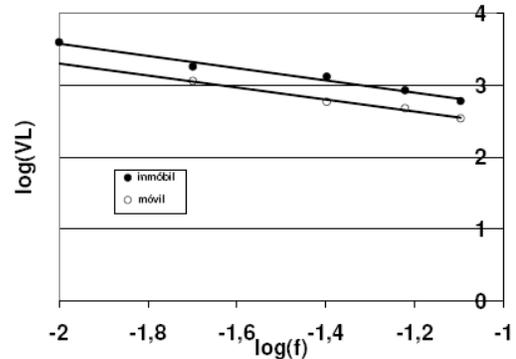


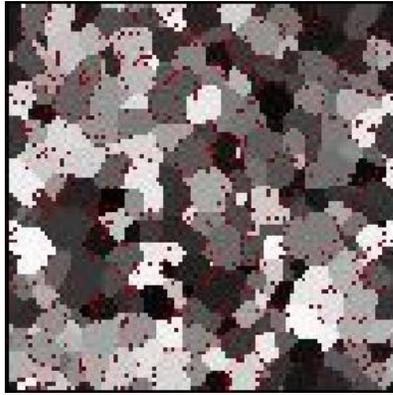
Figura 6: V_L en función de f para las partículas inmóviles y móviles.

Referencias:

- 1- M.P. Anderson, D. J. Srolovitz, G.S. Grest and P.S. Sahni, Acta Metallurgica 32, 783-791 (1984).
- 2- D. J. Srolovitz, M.P. Anderson, P.S. Sahni and G.S. Grest, Acta Metallurgica, 32, 793-802 (1984).
- 3- Q. Yu and S.K. Esche, Materials Letters, 57, 4622-4626 (2003).
- 4- J. Gao, R.G Thompson and R. Patterson, Acta Metallurgica, 45, 3653-3658 (1997).
- 5- G.N Hassold. and D. J. Srolovitz, Acta Metallurgica, Scripta Metallurgica, 32, 1541-1547 (1995)
- 6- M.P. Anderson, G.S. Grest, R.D. Doherty, L. Kang and D. J. Srolovitz, Scripta Metallurgica, 23, 753-758 (1989).
- 7- Wan H., Liu G., X. Qin, International Journal of Minerals, Metallurgy and Materials, 16, 1, 37-42 (2009)
- 8- Hillert M. Acta Metall., 13(3): 227~238.(1965)
- 9- Louat, N. P. Acta Metall. 22, 721-724 (1974)
- 10- Choudhury y Jayaganthan Materials Chemistry and Physics 325, 333 (2008).
- 11- G. Durand, J. Weiss, V. Lipenkov, J.M. Barnola, G. Krinner, F. Parrenin, B. Delmonte, C. Ritz, P. Duval, R. Röthlisberger and M. Bigler. 111, FO1015, Journal of Geophysical Research.,(2006)

Agradecimientos.

Los autores agradecen la colaboración del Dr. Eldo E. Avila por la facilitación de capacidad de cálculo y del Sr. Jose Barcelona por el apoyo Técnico. Este trabajo fue hecho con fondos de la SeCyT-UNC.



(c)

Figura 3: Secuencia de CG en una de las caras de una muestra 3D (100x100x100) con partículas (representadas por puntos rojos) con concentración $f=8\%$. a) muestra inicial, b) 10000MCS con partículas inmóviles c) 10000MCS con partículas móviles.

Del ajuste de V_L con f podemos encontrar que las relaciones del radio límite R_L con la concentración f para partículas móviles e inmóviles son:

$$\left[\frac{R_L}{r} \right] = (4.2 \pm 0.1) [f]^{(-0.29 \pm 0.02)} \quad (7)$$

y la partículas móviles:

$$\left[\frac{R_L}{r} \right] = (3.5 \pm 0.1) [f]^{(-0.29 \pm 0.02)} \quad (8)$$

Donde r es el radio de la partícula. (En este trabajo el volumen de cada partícula es 1 pixel^3 entonces el radio de las mismas es $r = (3/4\pi)^{1/3}$)

Podemos ver que la relación de R_L/r con f es igual dentro de los errores de la simulación con los obtenidos por Anderson et al (6) para partículas inmóviles en muestras 3D. La relación de R_L/r con f para partículas móviles tiene el mismo exponente que la obtenida para las partículas inmóviles pero el factor pre-potencial es menor. Esto esta asociado como antes mencionamos a que el frenado es más importante en el CG con partículas móviles ya que las mismas pueden ubicarse en los BG.

En muestras 2D se encuentra también que la relación entre R_L/r y f tiene un exponente aproximadamente de $1/2 = 0.5$ para los casos de partícula inmóvil y partícula móvil pero los factores pre-potenciales son distintos ⁽⁴⁾⁽⁵⁾. En estos casos la diferencia podría estar asociada a que los autores usaron diferentes condiciones iniciales ya que las muestras iniciales de Gao et al ⁽⁴⁾ eran de 500×500 sitios de red y con simetría cuadrada mientras que Hassold ⁽⁵⁾ usó un arreglo de sitios de 200×200 y con simetría triangular. Otro ejemplo donde se puede asociar a las condiciones iniciales es los datos obtenidos por Srolovitz et. al ⁽²⁾, y Gao ⁽⁴⁾. Los autores encuentran diferentes relaciones entre el radio límite R_L y la fracción de partículas inmóviles para muestras 2D.

IV CONCLUSIONES:

En este trabajo se estudió el CG mediante el método de MC. A diferencia de otros trabajos, se estudiaron el efecto de partículas inmóviles y móviles sobre el CG, utilizando las mismas condiciones iniciales y la misma simetría en la muestra 3D De las simulaciones con ambos tipos de partículas se puede concluir que las partículas móviles frenan más que las inmóviles y que en ambos casos la relación de R_L/r con f tiene un exponente igual a 0,3.

Este trabajo permitió además tener una rutina eficiente y útil para poder estudiar efectos de contaminantes en muestras de hielo polar, cuyo estudio ya se ha iniciado.

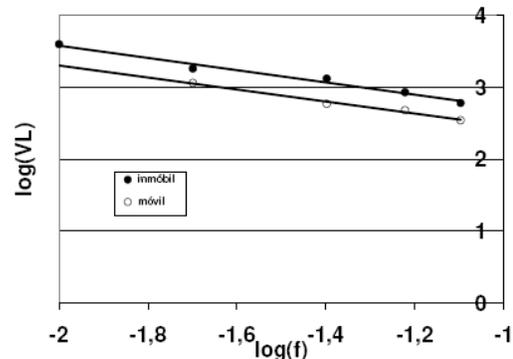


Figura 6: V_L en función de f para las partículas inmóviles y móviles.

Referencias:

- 1- M.P. Anderson, D. J. Srolovitz, G.S. Grest and P.S. Sahni, Acta Metallurgica 32, 783-791 (1984).
- 2- D. J. Srolovitz, M.P. Anderson, P.S. Sahni and G.S. Grest, Acta Metallurgica, 32, 793-802 (1984).
- 3- Q. Yu and S.K. Esche, Materials Letters, 57, 4622-4626 (2003).
- 4- J. Gao, R.G Thompson and R. Patterson, Acta Metallurgica, 45, 3653-3658 (1997).
- 5- G.N Hassold. and D. J. Srolovitz, Acta Metallurgica, Scripta Metallurgica, 32, 1541-1547 (1995)
- 6- M.P. Anderson, G.S. Grest, R.D. Doherty, L. Kang and D. J. Srolovitz, Scripta Metallurgica, 23, 753-758 (1989).
- 7- Wan H., Liu G., X. Qin, International Journal of Minerals, Metallurgy and Materials, 16, 1, 37-42 (2009)
- 8- Hillert M. Acta Metall., 13(3): 227~238.(1965)
- 9- Louat, N. P. Acta Metall. 22, 721-724 (1974)
- 10- Choudhury y Jayaganthan Materials Chemistry and Physics 325, 333 (2008).
- 11- G. Durand, J. Weiss, V. Lipenkov, J.M. Barnola, G. Krinner, F. Parrenin, B. Delmonte, C. Ritz, P. Duval, R. Röthlisberger and M. Bigler. 111, F01015, Journal of Geophysical Research.,(2006)

Agradecimientos.

Los autores agradecen la colaboración del Dr. Eldo E. Avila por la facilitación de capacidad de cálculo y del Sr. Jose Barcelona por el apoyo Técnico. Este trabajo fue hecho con fondos de la SeCyT-UNC.