

Modelización de Propiedades y Procesos de Materiales

Simulación con Monte Carlo para el crecimiento de
granos utilizando el modelo de Q-Estados de Potts

Autor: Fernández, Santiago Ernesto

Resumen:

En este trabajo se simuló mediante Monte Carlo el modelo de Q-Estados de Potts el cual describe la interacción de los átomos con sus primeros vecinos para un sistema de $N \times N$ átomos bidimensional.

Introducción:

Generalidades:

El tamaño de grano es una característica muy importante a la hora de evaluar propiedades de los materiales, de hecho, uno de los mayores problemas en la metalurgia es el control de la microestructura.¹ Con el propósito de darle una solución a tal problema surgieron simulaciones computarizadas del crecimiento del grano.

Srolovitz et al.^{2,3} propusieron el método más conocido y empleado en modelado y simulación computacional del crecimiento de grano por el Método de Monte Carlo. La utilidad de este método para aplicarlo en resolver este problema se basa en procesos probabilísticos, los cuales son representados muy bien.

El concepto detrás del método en la simulación se basa en la termodinámica de las interacciones atómicas.

El algoritmo:

Como primer paso se representa al material mediante una matriz 2D (en este caso) donde cada elemento se corresponde con un elemento de superficie. El contenido de ese elemento representa una orientación cristalográfica, muy similar al modelo de Ising para el cual se poseían 2 estados posibles (orientación de los espines), en cambio, aquí se poseen Q estados posibles determinados por el usuario de la simulación.

Las regiones contiguas con el mismo número representan los granos tal como se ve en la Fig. 1. Las regiones del borde de grano en este modelo son superficies ficticias que separan volúmenes con diferentes orientaciones.

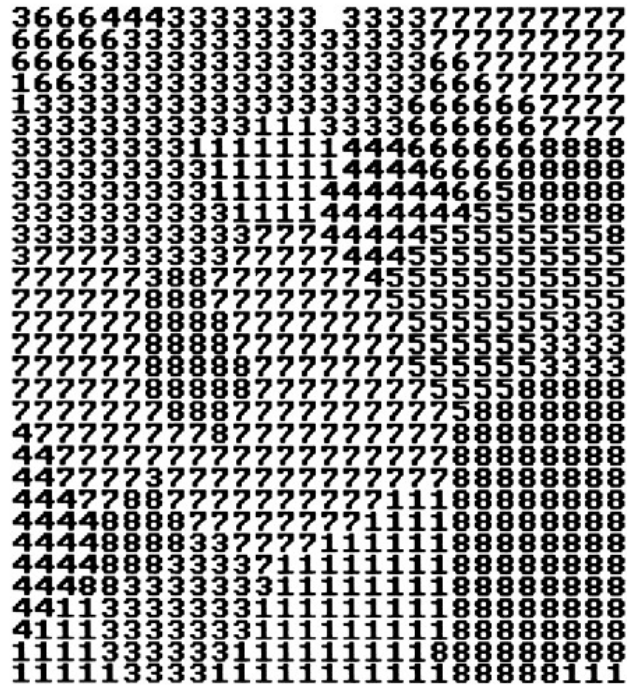


Fig. 1: Estructura del grano representada por una matriz cuadrada 2D.

Una vez elegida la matriz y completada con una serie de números random (respetando los Q-Estados posibles), la simulación comienza con 4 pasos principales⁴:

1. Cálculo de la energía libre (Gibbs) de un elemento de la matriz con la presente orientación cristalográfica (Q_i estado inicial) basándose en la de sus primeros vecinos (Fig. 2).
2. Se elige una nueva orientación para ese elemento (Q_f).
3. Se vuelve a calcular la energía libre para ese mismo elemento, pero con la nueva orientación (Fig. 3).
4. Se comparan los dos valores obtenidos y se optará por la orientación que minimice esa energía.

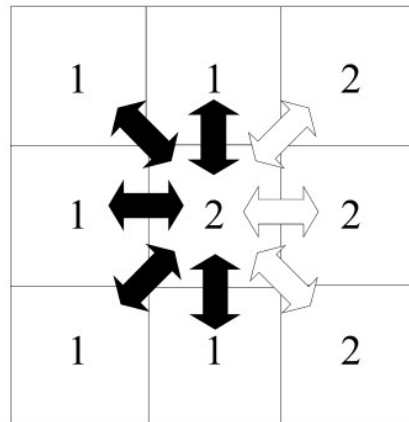


Fig. 2: Cálculo de la energía libre de Gibbs de un elemento de la matriz (donde $Q_i=2$). En este caso, $G_i=5$ (5 diferentes vecinos).

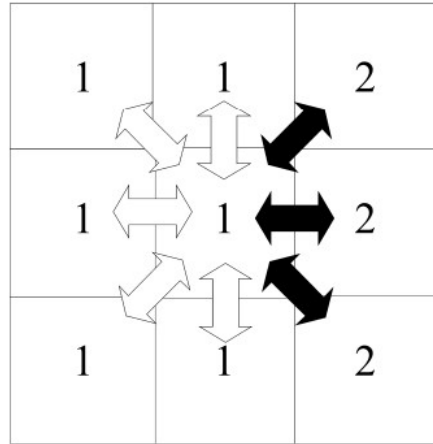


Fig. 3: Luego de un intento de reorientación hacia $Q_f = 1$, la energía libre es reducida a $G_f=3$, por lo que esta nueva orientación se conservará.

Esos pasos se repiten millones de veces en la matriz. El resultado final es una simulación microscópica del decaimiento de la energía libre del sistema, la cual es de hecho la principal fuerza impulsora del crecimiento de grano.

El Hamiltoniano que describe la interacción con los primeros vecinos, el cual representa la energía de grano se describe según:

$$H = -J \sum_{nn} (\delta_{s_i s_j} - 1)$$

Donde S_i es una de las Q posibles orientaciones en el i -ésimo elemento de la matriz y el delta que aparece es el de Kronecker (1 cuando ambos subíndices son idénticos, 0 en el caso contrario). Como resultado los átomos vecinos con **diferentes** orientaciones contribuyen con J a la energía del sistema.

En la siguiente ecuación se detalla la definición de la probabilidad de transición:

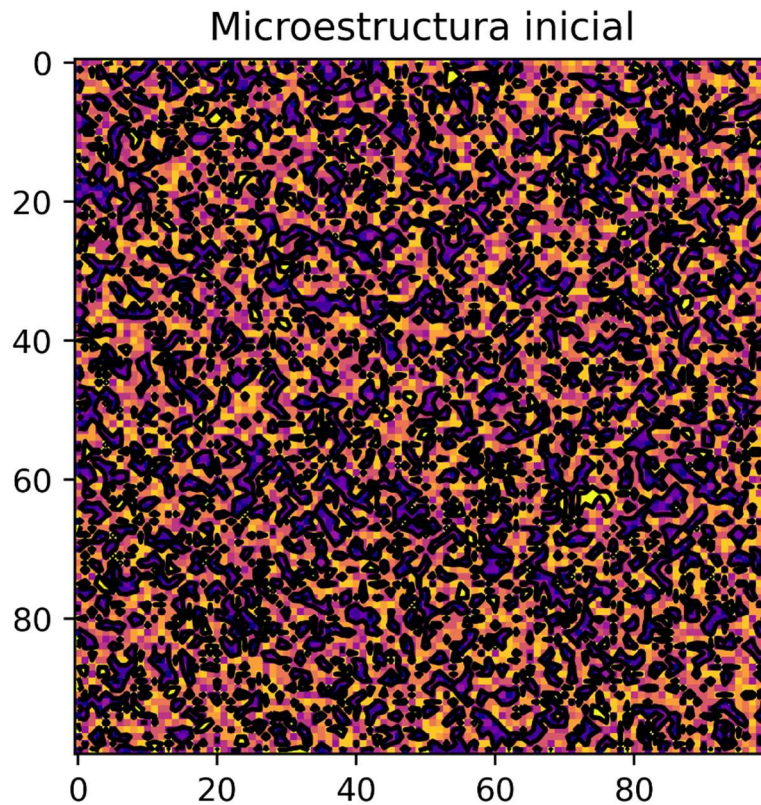
$$w = \begin{cases} \exp\left(\frac{-\Delta G}{k_b T}\right) \rightarrow \Delta G > 0 \\ 1 \rightarrow \Delta G \leq 0 \end{cases}$$

Donde ΔG es el cambio en la energía libre debido a la reorientación, k_b es la constante de Boltzmann y T es la temperatura.

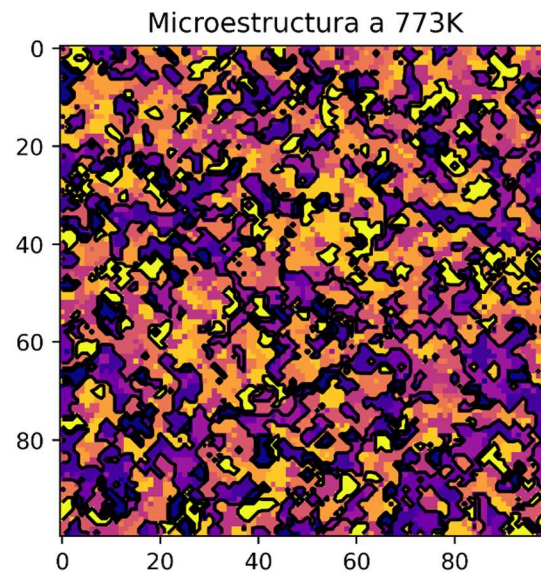
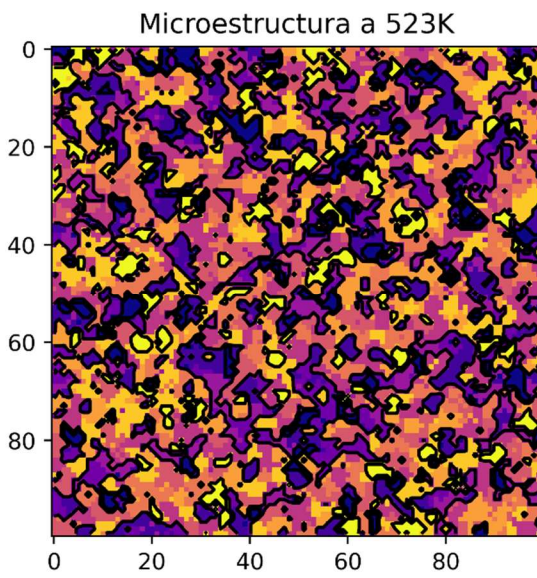
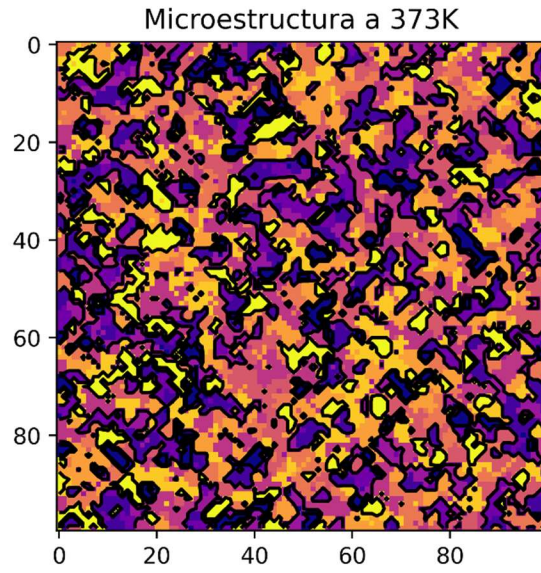
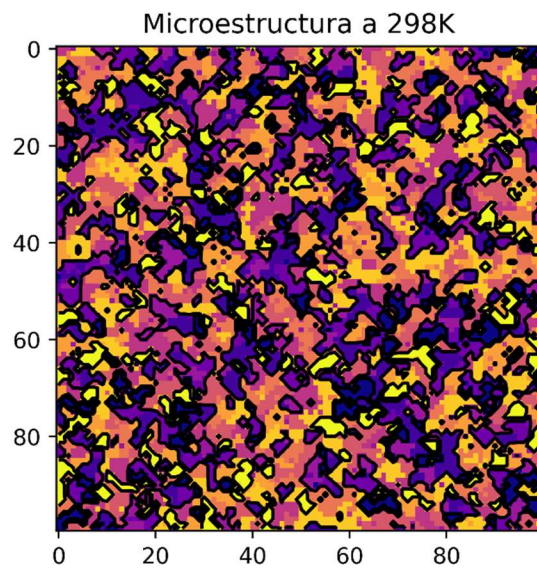
Resultados:

Se obtuvieron las siguientes imágenes al correr el programa con diferentes parámetros (temperatura) para 10 estados posibles en una matriz cuadrada de 100*100 átomos:

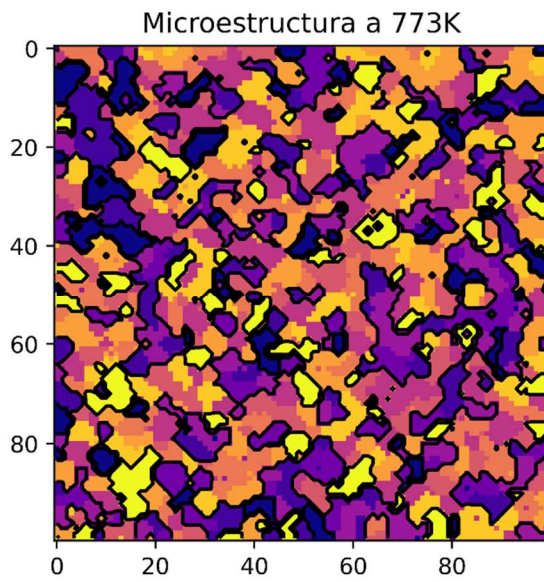
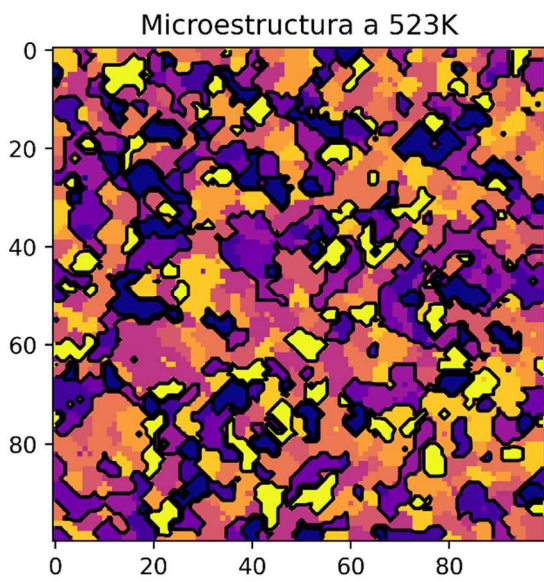
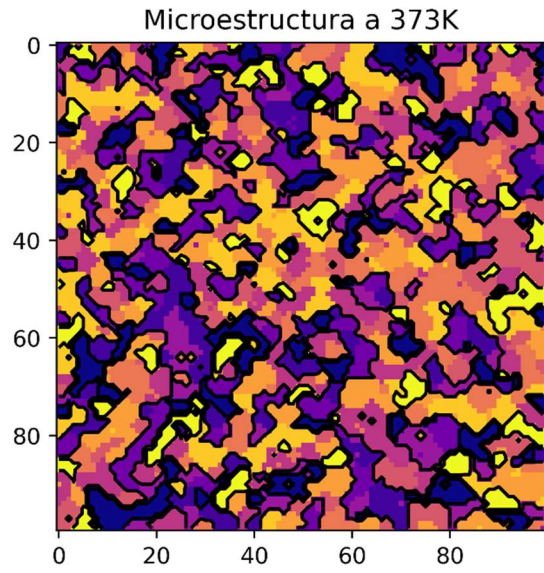
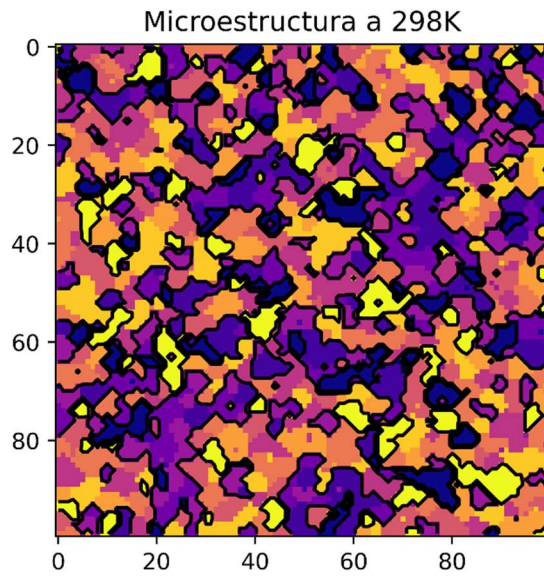
Microestructura inicial:



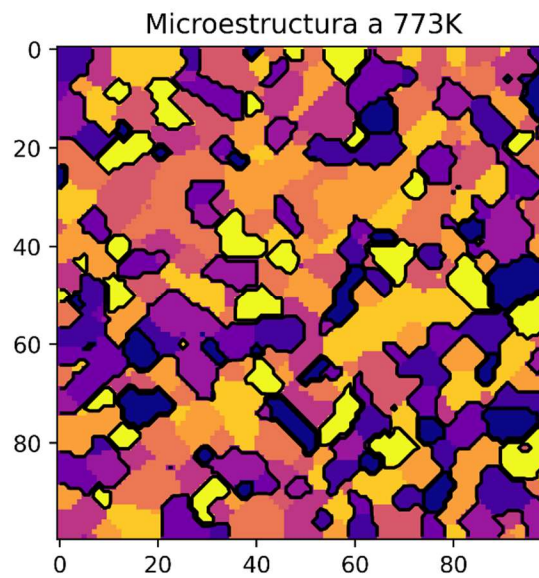
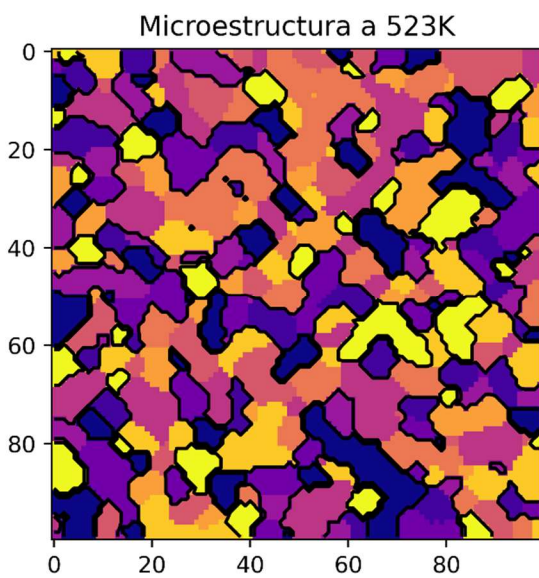
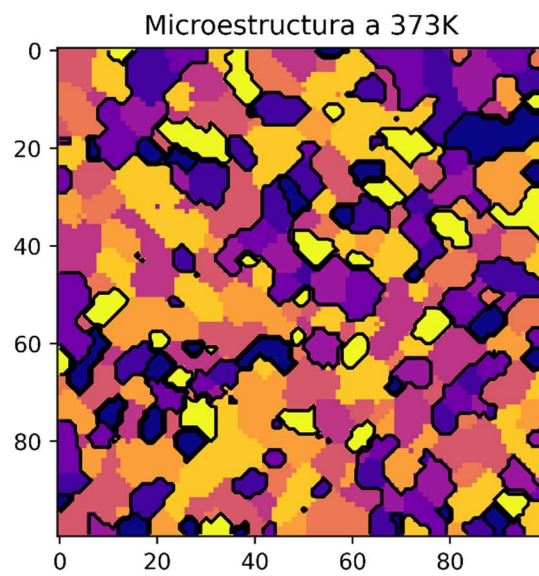
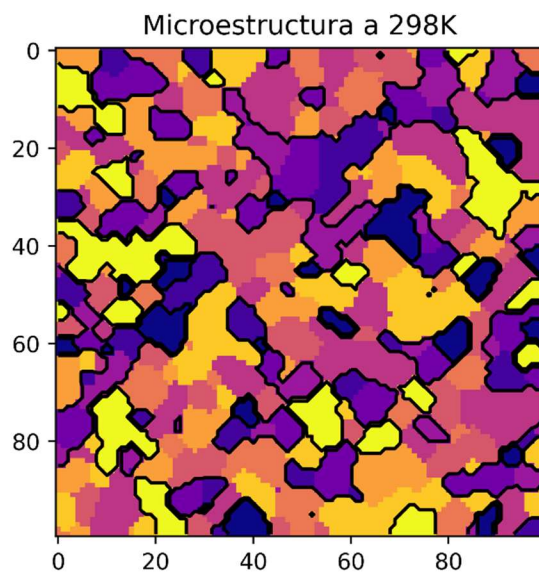
Con 10 barridos:



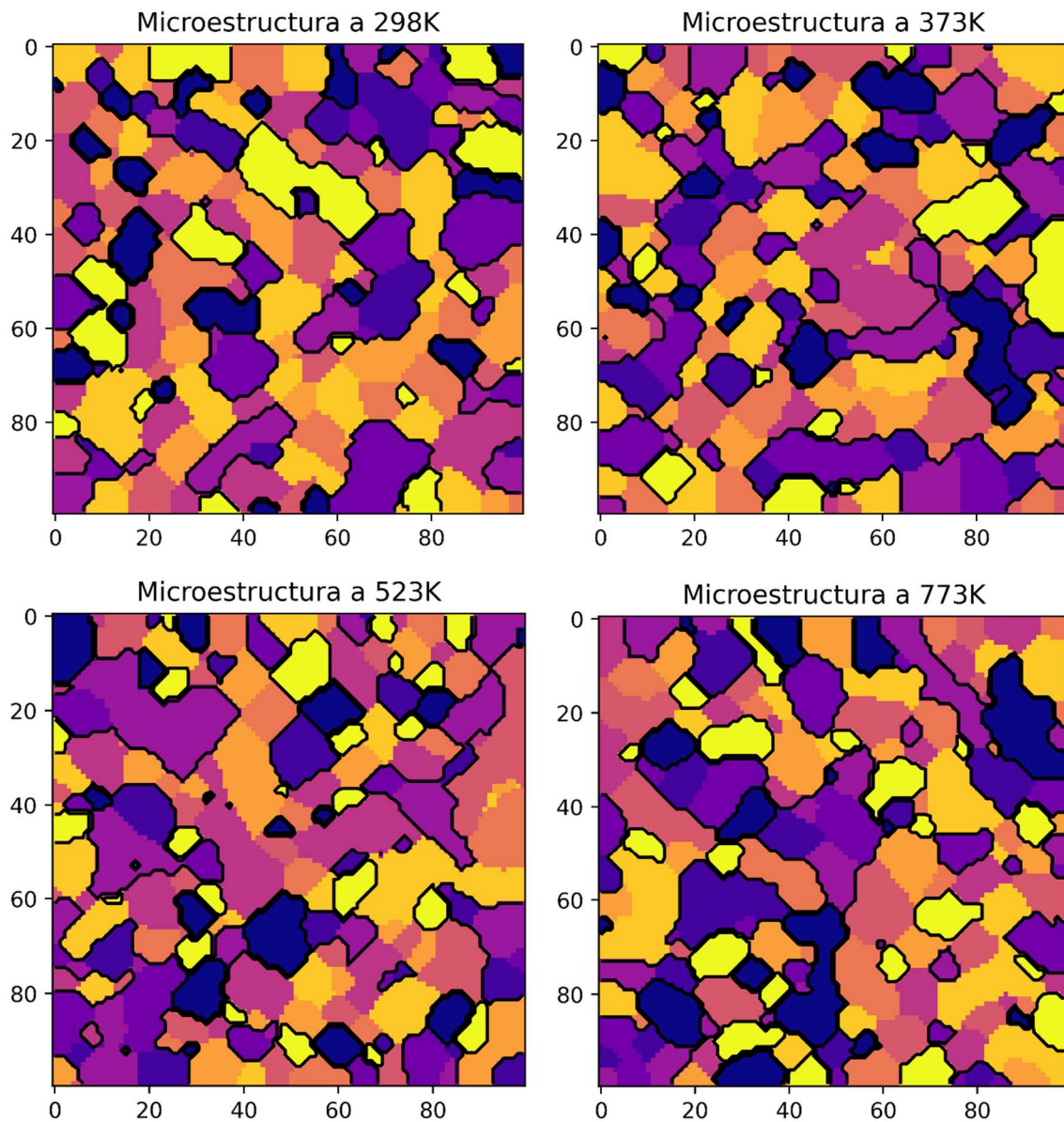
Con 25 barridos:



Con 75 barridos:



Con 150 barridos:



Conclusiones:

No existe una diferencia marcada entre las microestructuras a diferentes temperaturas debido a que J (representación de la energía de borde de grano) no se encuentra ajustada al valor real.

Se obtiene el crecimiento de grano mediante un barrido y no una selección aleatoria.

Si bien se logró la finalidad del programa en sí, todavía requiere de muchos ajustes para que éste sea de utilidad real a la hora de simular el crecimiento de granos. Estos ajustes se detallarán en la siguiente sección.

Mejoras a futuro:

- Que el programa muestre una progresión del crecimiento de grano mediante una cinemática (gif o muchas imágenes compiladas).
- Describir dependencias con las curvaturas de los bordes de grano para granos chicos complementando la descripción de “paseo al azar” simulada.
- Obtener parámetros físicos de experiencias reales para mejorar la simulación como el material a analizar y el rango de validez (temperatura, tiempo, etc.).
- Definir la energía de borde de grano en función de la temperatura.
- Introducir parámetros que midan el descenso de energía para caracterizar algún tipo de curva.
- Realizar un modelo tridimensional.
- Analizar el tamaño promedio de grano a distintas temperaturas y la velocidad de crecimiento del mismo.
- Analizar la influencia de precipitados y segundas fases en la energía de borde de grano y el retraso del crecimiento de los mismos en función de su tamaño.
- Mejorar la selección de los elementos incluso siendo aleatorios, una de las fallas del modelo de Potts.

Referencias:

1. Liu, Y.; Baudin, T.; Penelle P. “Simulation of normal grain growth by cellular automata”. *Scripta Materialia*, v. 32, n. 11, p. 1679-1683, 1996.
2. Anderson, M.P.; Srolovitz, D.J.; Grest, G.S.; Sahni P.S. “Computer simulation of grain growth” – I. Kinetics”, *Acta Metallurgica*, n. 32, p. 783-792, 1984.
3. Anderson, M.P.; Srolovitz, D.J.; Grest, G.S.; Sahni, P.S. “Computer simulation of grain growth - II. Grain size distribution, topology and local dynamics”, *Acta Metallurgica* n. 32, p. 793-801, 1984.
4. Blikstein, P.; Tschiptschin, A. “Monte Carlo simulation of grain growth” *Materials Research*, Vol. 2, No. 3, 133-137, 1999.