

Dipl.-Ing. Frank Robert Reher, Siegen

**Simulation der  
Rekristallisation auf  
der Basis orientierter  
Keimbildung und  
orientierten  
Keimwachstums mittels  
modifizierter zellulärer  
Automaten**

**- Morphologie, Textur, Kinetik -**

Reihe **5**: Grund- und Werkstoffe Nr. **523**

# INHALTSVERZEICHNIS

<b>1</b>	<b>Einleitung.....</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Historische Vorbemerkung zur Verformung und Rekristallisation.....</b>	<b>6</b>
<b>3</b>	<b>Kritische Darstellung verschiedener Ansätze zur Simulation der primären, statischen Rekristallisation .....</b>	<b>10</b>
3.1	Analytische, statistische Ansätze zur Rekristallisationssimulation .....	10
3.1.1	KJMA .....	11
3.1.1.1	Experimentelle Überprüfung der KJMA-Gleichung.....	14
3.1.1.2	Gründe für die Unterschiede zwischen Realkristall und KJMA-Annahmen .....	14
3.1.1.3	Technische Anwendung der KJMA-Gleichung .....	16
3.1.2	Trondheimer Avrami Maschine und Komponentenmodell.....	17
3.2	Gefügeentwicklung in dünnen Filmen .....	22
3.3	Kontinuumsmodelle zur Rekristallisationssimulation .....	24
3.3.1	Netzwerkmodell.....	24
3.4	Diskrete Modelle zur Rekristallisationssimulation .....	27
3.4.1	Monte-Carlo-Simulation.....	27
3.4.1.1	Grundprinzip der Monte-Carlo-Simulationen.....	27
3.4.1.2	Metropolis-Algorithmus.....	29
3.4.1.3	Potts-Modelle .....	31
3.4.1.4	Anwendung der Monte-Carlo-Methode auf die Rekristallisationssimulation .....	32
3.4.1.5	Anmerkungen zum MC-Modell.....	41
3.4.2	Zellularer Automat .....	42
3.4.2.1	Grundprinzip des zellularen Automaten .....	43
3.4.2.2	Anwendungsbeispiele des zellularen Automaten .....	49
3.4.2.3	Anwendung des zellularen Automaten auf die Rekristallisationssimulation.....	54
3.5	Vergleichende Zusammenfassung der Rekristallisationsmodelle.....	57
<b>4</b>	<b>Auswertemethoden .....</b>	<b>61</b>
4.1	Darstellung der Texturen.....	61
4.2	Ausgleichsfunktionen.....	62
4.2.1	Statistische Grundgrößen.....	63
4.2.2	Berechnungsprinzip .....	64
4.2.2.1	Lineare Regression.....	65
4.2.2.2	Nicht-Lineare Regression.....	66
4.2.3	Anwendung auf Rekristallisationsdaten.....	67

<b>5</b>	<b>Programmbeschreibung des modifizierten zellularen Automaten .....</b>	<b>71</b>
5.1	Zielsetzung und prinzipieller Aufbau .....	71
5.2	Daten- und Programmstruktur .....	77
5.2.1	Datenstrukturen, Problem: Speicherplatz .....	78
5.2.2	Erholung .....	81
5.2.3	Keimbildung .....	82
5.2.4	Keimwachstum und Ableitung der Realzeit und -länge .....	84
5.2.5	Ein- und Ausgabedateiformate .....	87
5.2.5.1	WALZTEX .....	89
5.2.5.2	NETDAT .....	90
5.2.5.3	INPUT .....	90
5.2.5.4	RXTAB .....	94
5.2.5.5	KEIMLISTE .....	95
5.2.5.6	OUTTEX .....	95
5.2.5.7	GRAINS .....	96
5.2.5.8	GRAIN .....	97
<b>6</b>	<b>Parameter der durchgeführten Simulationsläufe .....</b>	<b>98</b>
6.1	Programmstart und automatische Auswertung .....	98
6.2	Übersicht der durchgeführten Simulationen .....	98
6.2.1	Homogener, einkristalliner Eingangszustand .....	102
6.2.1.1	Site saturation, 2D Rechnungen .....	102
6.2.1.2	Site saturation, 3D Rechnungen .....	103
6.2.1.3	Kontinuierliche Keimbildung, 2D Rechnungen .....	104
6.2.1.4	Kontinuierliche Keimbildung, 3D Rechnungen .....	105
6.2.1.5	Inhomogene Keimbildung, 3D Rechnungen .....	106
6.2.1.6	Anisotrope Keimwachstumsgeschwindigkeit, 3D Rechnungen .....	108
6.2.2	Polykristalliner Eingangszustand .....	108
<b>7</b>	<b>Ergebnisse der Simulationsrechnungen .....</b>	<b>114</b>
7.1	Homogenes Ausgangsgefüge .....	114
7.1.1	Site saturation, zweidimensionales Wachstum .....	114
7.1.1.1	Morphologie .....	114
7.1.1.2	Kinetik .....	117
7.1.2	Site saturation, dreidimensionales Wachstum .....	122
7.1.2.1	Einfluß des Keimradius .....	122
7.1.2.1.1	Morphologie .....	122
7.1.2.1.2	Kinetik .....	126
7.1.2.2	Einfluß der Wachstumslänge .....	129
7.1.2.2.1	Morphologie .....	129
7.1.2.2.2	Kinetik .....	132
7.1.2.3	Einfluß der Netzgröße .....	134

7.1.2.3.1	Morphologie .....	134
7.1.2.3.2	Kinetik .....	140
7.1.2.4	Einfluß der Keimdichte .....	145
7.1.2.4.1	Morphologie .....	145
7.1.2.4.2	Kinetik .....	150
7.1.2.5	Einfluß des Keimortes .....	154
7.1.2.5.1	Morphologie .....	154
7.1.2.5.2	Kinetik .....	156
7.1.3	Kontinuierliche Keimbildung, zweidimensionales Wachstum .....	162
7.1.3.1	Morphologie .....	162
7.1.3.2	Kinetik .....	163
7.1.4	Kontinuierliche Keimbildung, dreidimensionales Wachstum .....	163
7.1.4.1	Morphologie .....	163
7.1.4.2	Kinetik .....	165
7.1.5	Inhomogene Keimbildungsbedingungen .....	171
7.1.5.1	Morphologie .....	171
7.1.5.2	Kinetik .....	179
7.1.6	Anisotrope Wachstumsgeschwindigkeit .....	180
7.1.6.1	Morphologie .....	180
7.1.6.2	Kinetik .....	183
7.2	Anisotropes Eingangsgefüge mit Textur .....	186
7.2.1	Wachstumsschema anhand eines Bikristalls .....	186
7.2.2	Simulationen mit polykristallinem Eingangsgefüge .....	186
7.2.2.1	Morphologie .....	186
7.2.2.2	Kinetik .....	195
7.2.2.3	Textur .....	198
<b>8</b>	<b>Diskussion .....</b>	<b>207</b>
8.1	Aufbau des modifizierten zellularen Automaten .....	207
8.2	Genauigkeit der Simulationen .....	209
8.2.1	Wirkung der Eingabeparameter .....	209
8.2.2	Ungenauigkeiten, die zur Laufzeit der Simulation entstehen .....	212
8.2.3	Auswertung .....	213
8.2.3.1	Morphologie .....	214
8.2.3.2	Kinetik .....	214
8.2.3.3	Textur .....	216
8.3	Übertragung der Simulationsresultate auf das Realmetall .....	217
<b>9</b>	<b>Zusammenfassung .....</b>	<b>221</b>
<b>Anhang A:</b>	<b>Definition einiger Fachbegriffe .....</b>	<b>223</b>
<b>Anhang B:</b>	<b>Literaturverzeichnis .....</b>	<b>225</b>