

Научная статья

1.3.8. Физика конденсированного состояния (физико-математические науки)

УДК 538.911

doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2022.01.006

**МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ
ИЗЫТОЧНОГО СВОБОДНОГО ОБЪЕМА НА СКОРОСТЬ ДВИЖЕНИЯ ФРОНТА
КРИСТАЛЛИЗАЦИИ В НИКЕЛЕ****Геннадий Михайлович Полетаев^{1†}, Ирина Владимировна Каракулова²,
Денис Игоревич Зюзин³, Екатерина Сергеевна Осипова⁴**^{1,2,3,4} Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова, пр. Ленина, 46, 656038, Барнаул, Россия¹ gmpoletaev@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-5252-2455>² mail_for_irina@inbox.ru, <https://orcid.org/0000-0003-2075-0557>³ denis.physic96@mail.ru⁴ katrinaos@mail.ru

Аннотация. Методом молекулярной динамики проведено исследование зависимости скорости движения фронта кристаллизации в никеле от избыточного свободного объема. Расчетные ячейки имели форму вытянутых параллелепипедов. На торцах параллелепипеда кристаллическая структура была зафиксирована, что имитировало стартовое положение фронта гетерогенной кристаллизации. Рассматривались три разные ориентации фронта относительно растущего кристалла: (100), (110) и (111). Для описания межатомных взаимодействий использовался многочастичный потенциал Клери-Росато, построенный в приближении сильной связи. Свободный объем вводился в модели на начальном этапе путем задания определенной концентрации вакансий. Концентрирование избыточного свободного объема и формирование вакансионных кластеров происходило преимущественно в последнюю очередь, на заключительной стадии кристаллизации. Введение избыточного свободного объема приводило к снижению скорости кристаллизации. С одной стороны, наличие избыточного свободного объема должно приводить к снижению энергии активации самодиффузии, но, с другой стороны, по всей видимости, формирование микропор и вакансионных кластеров происходило вблизи границы растущего кристалла, вследствие чего снижался доступ атомов со стороны жидкой фазы к границе кристалла. При высоких концентрациях, составляющих несколько процентов, формирование части кластеров происходило уже на ранних стадиях роста кристалла, но большая их часть, тем не менее, располагалась в месте встречи двух фронтов от разных торцов расчетной ячейки. Быстрее кристаллизация протекала при ориентации фронта (100), медленнее – при ориентациях (110) и (111). Анизотропия скорости кристаллизации связана с разностью свободных энергий атома вблизи границы в жидкой фазе и «встроенного» в границу растущего кристалла, которая зависит от ориентации границы и, в частности, коррелирует с энергией адатомов на соответствующей свободной поверхности кристалла.

Ключевые слова: молекулярная динамика, металл, кристаллизация, свободный объем.

Благодарности: Работа поддержана Министерством науки и высшего образования Российской Федерации (FZMM-2020-0002).

Для цитирования: Полетаев Г.М., Каракулова И.В., Зюзин Д.И., Осипова Е.С. Молекулярно-динамическое исследование влияния избыточного свободного объема на скорость движения фронта кристаллизации в никеле // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. 2022. Т. 19, № 1. С. 50–57. doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2022.01.006.

Original article

MOLECULAR DYNAMICS STUDY OF THE EFFECT OF EXCESS FREE VOLUME ON THE VELOCITY OF THE CRYSTALLIZATION FRONT MOVEMENT IN NICKEL

Gennady M. Poletaev^{1†}, Irina V. Karakulova², Denis I. Ziuzin³, Ekaterina S. Osipova⁴

^{1,2,3,4} I.I. Polzunov Altai State Technical University, Lenin Pr., 46, Barnaul, 656038, Russia

¹ gmpoletaev@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-5252-2455>

² mail_for_irina@inbox.ru, <https://orcid.org/0000-0003-2075-0557>

³ denis.physic96@mail.ru

⁴ katrinaos@mail.ru

Abstract. The method of molecular dynamics was used to study the dependence of the velocity of the crystallization front in nickel on the excess free volume. The computational cells had the shape of elongated parallelepipeds. At the ends of the parallelepiped, the crystal structure was fixed, which imitated the starting position of the heterogeneous crystallization front. Three different orientations of the front relative to the growing crystal were considered: (100), (110), and (111). To describe interatomic interactions, many-particle tight-binding Cleri-Rosato potential was used. The free volume was introduced into the model at the initial stage by setting a certain concentration of vacancies. The concentration of the excess free volume and the formation of vacancy clusters occurred mainly last, at the final stage of crystallization. The introduction of excess free volume led to a decrease in the crystallization rate. On the one hand, the presence of an excess free volume should lead to a decrease in the activation energy of self-diffusion, but, on the other hand, it seems that the formation of micropores and vacancy clusters occurred near the growing crystal boundary, which reduced the access of atoms from the liquid phase to the crystal boundary. At high concentrations of several percent, the formation of some clusters occurred already at the early stages of crystal growth, but most of them, nevertheless, were located at the meeting point of two fronts from different ends of the computational cell. Crystallization proceeded faster at the (100) front orientation, slower at the (110) and (111) orientations. The anisotropy of the crystallization rate is related to the difference between the free energies of an atom near the boundary in the liquid phase and a growing crystal "embedded" into the boundary, which depends on the orientation of the boundary and, in particular, correlates with the energy of the adatom on the corresponding free surface of the crystal.

Keywords: molecular dynamics, metal, crystallization, free volume.

Acknowledgements: The study was supported by Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (FZMM-2020-0002).

For citation: Poletaev, G. M., Karakulova, I. V., Ziuzin, D. I. & Osipova, E. S. (2022). Molecular dynamics study of the effect of excess free volume on the velocity of the crystallization front movement in nickel. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 1(19), 50–57. (In Russ.). doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2022.01.006.

Введение

Кристаллизация металлов и сплавов относится к технологически распространенным и важным процессам. Несмотря на большое внимание к процессу кристаллизации и продолжительное его исследование, до сих пор остаются нерешенные вопросы даже для однокомпонентных материалов, причем это относится не только к кинетике относительно более сложного гомогенного механизма кристаллизации [1–3], связанного с зарождением кристаллических зародышей, но и гетерогенного [4–8], когда процесс сопровождается движением фронта кристаллизации. В настоящее время, с помощью компьютерного моделирования и с появ-

лением возможности глубокого переохлаждения [7], стало известно, что по мере уменьшения температуры, скорость кристаллизации сначала растет, но затем прекращается примерно при $0,6-0,8 \cdot T_{nl}$ и с последующим понижением температуры скорость немного даже снижается, что можно объяснить затруднением диффузии вблизи границы жидкость-кристалл [8]. Другой важной особенностью кинетики фронта кристаллизации является анизотропия его скорости движения. В работах [5, 9–12] с помощью компьютерного моделирования было выяснено, что скорость миграции границы жидкость-кристалл зависит от ориентации границы относительно кристалла. В частности, в упомянутых работах было показано, что быстрее остальных

в ГЦК металлах движутся границы, ориентированные вдоль плоскости (100).

В работе [13] нами ранее было показано, что наличие примесей легких элементов (углерода, кислорода) приводит к существенному замедлению скорости движения фронта кристаллизации в никеле и серебре. Торможение примесными атомами фронта кристаллизации связано с локальной деформацией кристаллической решетки, которую вызывают примеси, и, как правило, чем больше эта деформация, тем сильнее примесные атомы тормозят фронт кристаллизации.

Настоящая работа посвящена исследованию с помощью метода молекулярной динамики влияния на скорость движения фронта кристаллизации в никеле избыточного свободного объема, который может образоваться в расплаве, например, в результате кристаллизации от разных центров [14, 15]. Никель был выбран как типичный ГЦК металл, для которого собран

достаточно большой набор экспериментальных данных, и имеются хорошо апробированные потенциалы межатомного взаимодействия.

Описание модели

Моделирование проводилось с использованием расчетной ячейки в форме вытянутого параллелепипеда с квадратным сечением (рис.1). Вдоль осей X и Y были наложены периодические граничные условия, но на торцах параллелепипеда (темно-серые атомы на рис.1) кристаллическая структура была зафиксирована, что имитировало стартовое положение фронта кристаллизации. Использовались три расчетные ячейки с тремя разными ориентациями кристаллической структуры на торцах: (100), (110) и (111). Ячейки имели ширину и высоту примерно 5,8 нм, длину 37,5 нм и содержали около 110 тысячи атомов.

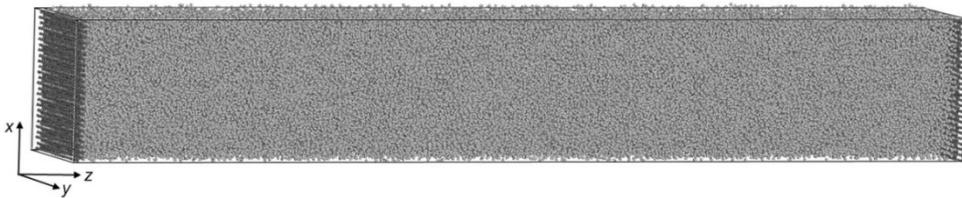


Рис.1. Расчетная ячейка для моделирования кристаллизации (темно-серые атомы на торцах ячейки оставались неподвижными в процессе моделирования)

Fig.1. Computational cell for modeling crystallization (dark gray atoms at the ends of the cell remained motionless during the simulation)

Для описания межатомных взаимодействий использовался многочастичный потенциал Клери-Росато [16], построенный в приближении сильной связи. Потенциалы данного типа неоднократно использовались в молекулярно-динамических моделях и прошли успешную апробацию по большому числу характеристик [17-23]. Опыт их применения показывает, что с их помощью удастся описать разнообразные свойства металлов и сплавов. Шаг интегрирования по времени в методе молекулярной динамики был равен 5 фс. Температура в модели задавалась через начальные скорости атомов согласно распределению Максвелла, при этом учитывалось тепловое расширение расчетных ячеек. Для сохранения температуры постоянной в процессе моделирования использовался термостат Нозе-Гувера.

На первом этапе расчетная ячейка плавилась путем выдерживания при температуре,

значительно превышающей температуру плавления (на рис.1 изображена расплавленная ячейка). Затем включался термостат, и проводилось выдерживание при заданной постоянной температуре. В течение молекулярно-динамического эксперимента фронт кристаллизации двигался от торцов расчетной ячейки к ее центру.

Свободный объем вводился в модели на начальном этапе путем задания определенной концентрации вакансий. В основных компьютерных экспериментах объем расчетной ячейки после задания температуры оставался постоянным, что позволяло четко оценивать величину свободного объема в ячейке. Концентрация вводимых вакансий в расчетную ячейку на начальном этапе моделирования варьировалась в широком диапазоне от 0 до 7 %. Последнее значение более чем на два порядка превышает равновесную концентрацию вакансий, но, вместе с тем, это позволяет рассмотреть влияние

вакансионных кластеров, возникающих, например, при радиационном повреждении, наличии пор, на процесс кристаллизации.

Результаты и обсуждение

Скорость движения фронта кристаллизации определялась как средняя скорость фронтов, движущихся от правого и левого торцов (рис.2):

$$v = \frac{\Delta l_1 + \Delta l_2}{2\Delta t}, \quad (1)$$

где Δl_1 и Δl_2 – расстояния, пройденные фронтами кристаллизации от левого и правого торцов за время Δt . В большинстве случаев, как видно из рис.2, положение фронта было ясно видно визуально. Погрешность определения не превышала, как правило, две атомные плоскости.

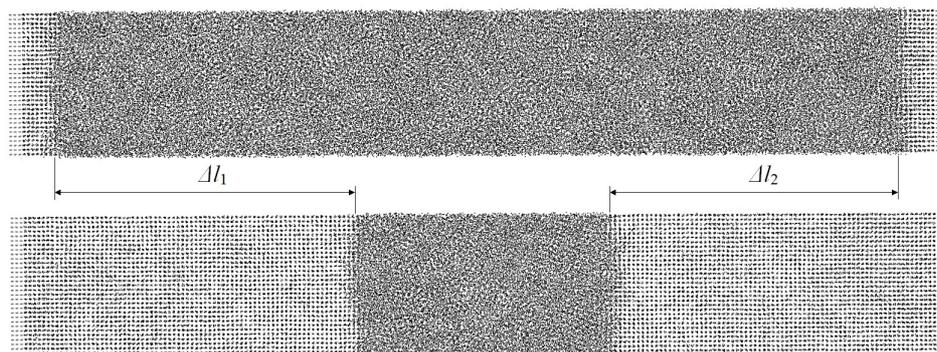


Рис.2. К методу расчета скорости движения фронта кристаллизации

Fig.2. To the method for calculating the speed of the crystallization front

На рис.3 представлены полученные в настоящей работе зависимости скорости кристаллизации от концентрации введенных на начальном этапе вакансий при температуре термостата 1500 К (что составляет $0,87 \cdot T_{nl}$) для трех ориентаций фронта: (100), (110) и (111). Полученные в нашей работе максимальные

значения скорости кристаллизации близки со значениями, приведенными в работе [9] других авторов для никеля, где они были получены путем моделирования при использовании другого потенциала: 150 м/с для ориентации (100) и 100 м/с – для (110).

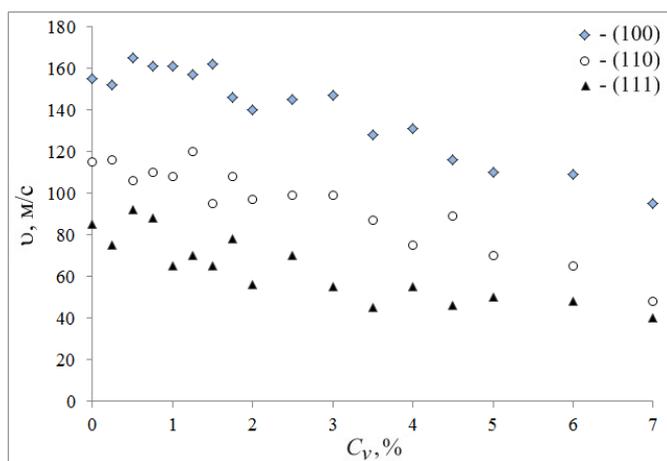


Рис.3. Зависимости скорости движения фронта кристаллизации от концентрации введенных на начальном этапе вакансий при температуре 1500 К для трех рассматриваемых ориентаций фронта: (100), (110) и (111)

Fig.3. Dependences of the velocity of the crystallization front on the concentration of vacancies introduced at the initial stage at a temperature of 1500 K for the three considered front orientations: (100), (110), and (111)

Следует заметить, что ориентация фронта, действительно, как отмечалось в [5, 9-12], су-

щественно влияет на скорость его движения. Подобное поведение можно объяснить моде-

лю Вильсона-Френкеля с диффузионным ограничением [1, 4, 6, 7]:

$$v(T) = A \exp\left(-\frac{E}{kT}\right) \left[1 - \exp\left(-\frac{\Delta\mu}{kT}\right)\right]. \quad (2)$$

Здесь A – предэкспоненциальный множитель, E – энергия активации миграции атома в жидкой фазе, k – постоянная Больцмана, T – температура, $\Delta\mu$ – разность свободных энергий жидкого и кристаллического состояний.

Для объяснения анизотропии скорости кристаллизации следует, очевидно, обратить внимание на второй множитель в формуле (2) и величину $\Delta\mu$, которая обычно определяется как разность свободных энергий жидкого и кристаллического состояний. Но вблизи самой границы раздела жидкость-кристалл большее значение имеет не разность энергий внутри объемов кристалла и жидкости, а отличие свободных энергий атома вблизи границы в жидкой фазе и «встроенного» в границу растущего кристалла. Если величину $\Delta\mu$ определять таким образом, она перестает быть постоянной, и становится зависящей от ориентации границы жидкость-кристалл. Действительно, эту энергию тогда можно сравнить с энергией адатома на соответствующей свободной поверхности кристалла, или с энергией активации его миграции по данной поверхности. Например, в [24] с помощью компьютерного моделирования для никеля получены значения энергии активации поверхностной самодиффузии: 0,33 эВ по свободной поверхности (111) и 0,63 эВ по поверхности (100).

Введение избыточного свободного объема, как видно из рис.3, снижает скорость кристаллизации. Это неочевидный результат, так как энергия активации самодиффузии E с ростом концентрации вакансий, введенных на начальном этапе, в этом случае должна снижаться, и, согласно модели Вильсона-Френкеля (2), скорость движения фронта, следовательно, должна увеличиваться. Но наблюдается противоположный результат. По всей видимости, данный феномен можно объяснить формированием вблизи границы растущего кристалла микропор и вакансионных кластеров, которые в целом снижают доступ атомов со стороны жидкой фазы к границе кристалла.

Концентрирование избыточного свободного объема и формирование вакансионных кластеров происходило преимущественно в последнюю очередь, на заключительной стадии кристаллизации. При сравнительно невысоких концентрациях введенных на начальном этапе вакансий, растущий кристалл не содержал дефектов, вакансионные кластеры формировались, как правило, в самом конце, при встрече правого и левого фронтов (рис.4а). С повышением концентрации энергетически выгодным иногда оказывалось не образование вакансионных кластеров, а образование границ зерен, как, например, на рис.4б. Однако при высоких концентрациях, составляющих несколько процентов, формирование части кластеров происходило уже на ранних стадиях роста кристалла (рис.4в), но большая их часть, тем не менее, располагалась в месте встречи двух фронтов от разных торцов расчетной ячейки.

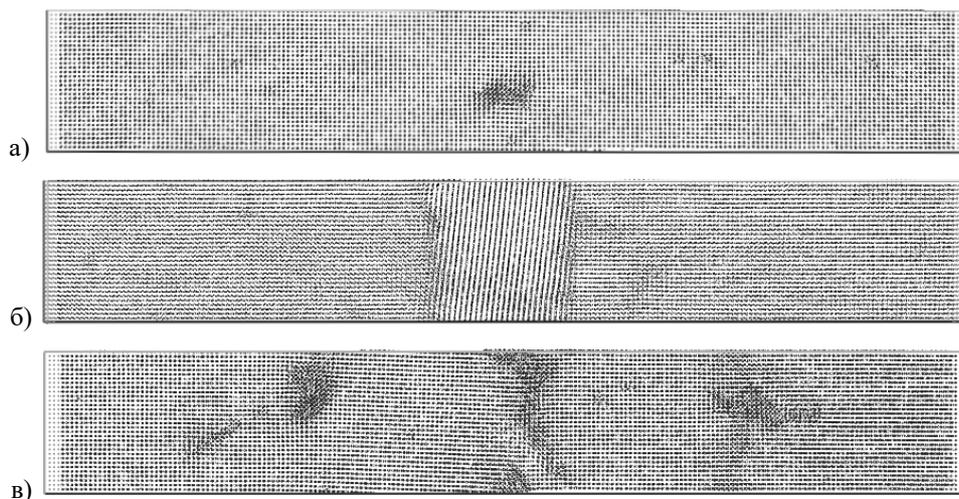


Рис.4. Концентрирование избыточного свободного объема в процессе кристаллизации при ориентации фронта (100) при концентрации введенных на начальном этапе вакансий: а) 1,25 %; б) 4,5 %; в) 6 %

Fig.4. Concentration of excess free volume during crystallization at front orientation (100) at concentration of vacancies introduced at the initial stage: а) 1.25 %; б) 4.5 % с) 6 %

Заключение

Методом молекулярной динамики проведено исследование зависимости скорости движения фронта кристаллизации в никеле от избыточного свободного объема. Рассматривались три разные ориентации фронта относительно растущего кристалла: (100), (110) и (111). Полученные значения скоростей кристаллизации оказались близки к значениям, рассчитанным с помощью компьютерного моделирования другими авторами.

Концентрирование избыточного свободного объема и формирование вакансионных кластеров происходило преимущественно в последнюю очередь, на заключительной стадии кристаллизации. Введение избыточного свободного объема приводило к снижению скорости кристаллизации. С одной стороны, наличие избыточного свободного объема должно приводить к снижению энергии активации самодиффузии, но, по всей видимости, формирование микропор и вакансионных кластеров происходило вблизи границы растущего кристалла, вследствие чего снижался доступ атомов со стороны жидкой фазы к границе кристалла. При высоких концентрациях, составляющих несколько процентов, формирование части кластеров происходило уже на ранних стадиях роста кристалла, но большая их часть, тем не менее, располагалась в месте встречи двух фронтов от разных торцов расчетной ячейки.

Быстрее кристаллизация протекала при ориентации фронта (100), медленнее – при ориентациях (110) и (111). Анизотропия скорости кристаллизации связана с разностью свободных энергий атома вблизи границы в жидкой фазе и «встроенного» в границу растущего кристалла, которая зависит от ориентации границы и, в частности, коррелирует с энергией адатома на соответствующей свободной поверхности кристалла.

Список литературы

1. Galenko P.K., Ankudinov V., Reuther K., Rettenmayr M., Salhoumi A., Kharanzhevskiy E.V. Thermodynamics of rapid solidification and crystal growth kinetics in glass-forming alloys // *Phil. Trans. R. Soc. A*. 2019. V.377. 20180205.
2. Jha S.K., Karthika S., Radhakrishnan T.K. Modelling and control of crystallization process // *Resource-Efficient Technologies*. 2017. 3. P. 94–100.
3. Стеценко В.Ю. Механизмы процесса кристаллизации металлов и сплавов // *Литье и металлургия*. 2013. Т. 69, № 1. С. 48–54.
4. Мажукин В.И., Шапранов А.В., Пережигин В.Е., Королева О.Н., Мажукин А.В. Кинетические стадии плавления и кристаллизации сильно перегретых и переохлажденных металлов // *Математическое моделирование*. 2016. Т. 28, № 12. С. 83–94.
5. Mendeleev M.I., Zhang F., Song H., Sun Y., Wang C.Z., Ho K.M. Molecular dynamics simulation of the solid-liquid interface migration in terbium // *The journal of chemical physics*. 2018. V. 148. 214705.
6. Sun G., Xu J., Harrowell P. The mechanism of the ultrafast crystal growth of pure metals from their melts // *Nature Materials*. 2018. 17. P. 881–886.
7. Chan W.-L., Averback R.S., Cahill D.G., Ashkenazy Y. Solidification velocities in deeply undercooled silver // *Physical Review Letters*. 2009. V. 102. 095701.
8. Полетаев Г.М., Каракулова И.В., Подорова Д.К. Молекулярно-динамическое исследование влияния температуры переохлаждения на скорость движения фронта кристаллизации в серебре // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. 2021. Т. 18, № 3. С. 297–303.
9. Zhang H.Y., Liu F., Yang Y., Sun D.Y. The Molecular Dynamics Study of Vacancy Formation During Solidification of Pure Metals // *Scientific Reports*. 2017. V. 7. 10241.
10. Mendeleev M.I., Rahman M.J., Hoyt J.J., Asta M. Molecular-dynamics study of solid-liquid interface migration in fcc metals // *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*. 2010. V. 18. 074002.
11. Hoyt J.J., Asta M., Karma A. Atomistic simulation methods for computing the kinetic coefficient in solid-liquid systems // *Interface science*. 2002. V. 10. P. 181–189.
12. Sun D.Y., Asta M., Hoyt J.J. Kinetic coefficient of Ni solid-liquid interfaces from molecular-dynamics simulations // *Physical Review B*. 2004. V. 69. 024108.
13. Полетаев Г.М., Зоря И.В. Влияние примесей легких элементов на скорость движения фронта кристаллизации в Ni и Ag: молекулярно-динамическое моделирование // *Письма в ЖТФ*. 2020. Т. 46, № 12. С. 6–9.
14. Poletaev G.M., Novoselova D.V., Rakitin R.Y., Semenov A.S. Modeling the formation of

free volume at grain boundaries and triple junctions during nickel crystallization // *Letters on Materials*. 2020. V. 10, N 3. P. 299–302.

15. Полетаев Г.М., Новоселова Д.В., Кайгородова В.М., Старостенков М.Д. Особенности образования свободного объема в тройных стыках границ наклона $\langle 111 \rangle$ и $\langle 100 \rangle$ в Ni при кристаллизации // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. 2015. Т. 12, № 2. С. 253–258.

16. Cleri F., Rosato V. Tight-binding potentials for transition metals and alloys // *Physical Review B*. 1993. V. 48, N 1. P. 22–33.

17. Poletaev G.M., Zorya I.V., Rakitin R.Y., Piina M.A. Interatomic potentials for describing impurity atoms of light elements in fcc metals // *Materials Physics and Mechanics*. 2019. V. 42, N 4. P. 380–388.

18. Кулабухова Н.А., Полетаев Г.М., Старостенков М.Д. Молекулярно-динамическое исследование взаимодействия водорода с наночастицами Pd и Ni // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. 2014. Т. 11, № 2. С. 235–240.

19. Кулабухова Н.А., Полетаев Г.М., Старостенков М.Д. Взаимодействие атома водорода с краевой дислокацией в Pd и Ni // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. 2014. Т. 11, № 1. С. 99–104.

20. Chen C., Zhang F., Xu H., Yang Z., Poletaev G.M. Molecular dynamics simulations of dislocation-coherent twin boundary interaction in face-centered cubic metals // *Journal of Materials Science*. 2022. V. 57. P. 1833–1849.

21. Полетаев Г.М. Самодиффузия в жидких и твердых сплавах системы Ti-Al: молекулярно-динамическое моделирование // *Журнал экспериментальной и теоретической физики*. 2021. Т. 160, № 4(10). С. 527–533.

22. Полетаев Г.М., Зоря И.В. Исследование влияния примесей легких элементов на скольжение краевой дислокации в никеле и серебре: молекулярно-динамическое моделирование // *Журнал экспериментальной и теоретической физики*. 2020. Т. 158, № 3. С. 485–491.

23. Полетаев Г.М., Ракитин Р.Ю. Влияние ориентации межфазной границы Ti-Al на скорость взаимной диффузии при твердом и жидком состояниях алюминия: молекулярно-динамическое моделирование // *Физика твердого тела*. 2022. Т. 64, № 4. С. 412–417.

24. Liu C.L., Cohen J.M., Adams J.B., Voter A.F. EAM study of surface self-diffusion of single adatoms of fcc metals Ni, Cu, Al, Ag, Au, Pd, and Pt // *Surface Science*. 1991. V. 253. P. 334–344.

Информация об авторах

Г. М. Полетаев – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой Алтайского государственного технического университета им. И.И. Ползунова.

И. В. Каракулова – старший преподаватель Алтайского государственного технического университета им. И.И. Ползунова.

Д. И. Зюзин – студент Алтайского государственного технического университета им. И.И. Ползунова.

Е. С. Осипова – студент Алтайского государственного технического университета им. И.И. Ползунова.

References

1. Galenko, P. K., Ankudinov, V., Reuther, K., Rettenmayr, M., Salhoumi, A. & Kharanzhevskiy, E. V. (2019). Thermodynamics of rapid solidification and crystal growth kinetics in glass-forming alloys. *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 377, 20180205.

2. Jha, S. K., Karthika, S. & Radhakrishnan, T. K. (2017). Modelling and control of crystallization process. *Resource-Efficient Technologies*, 3, 94–100.

3. Stetsenko, V. Y. (2013). Mechanisms of the crystallization process of metals and alloys. *Lityo I metallurgiya*, 69, 48–54 (In Russ.).

4. Mazhukin, V. I., Shapranov, A. V., Perezhigin, V. E., Koroleva, O. N. & Mazhukin, A. V. (2017). Kinetic melting and crystallization stages of strongly superheated and supercooled metals. *Mathematical Models and Computer Simulations*, 9, 448–456.

5. Mendeleev, M. I., Zhang, F., Song, H., Sun, Y., Wang, C. Z. & Ho, K. M. (2018). Molecular dynamics simulation of the solid-liquid interface migration in terbium. *The Journal of Chemical Physics*, 148, 214705.

6. Sun, G., Xu, J. & Harrowell, P. (2018). The mechanism of the ultrafast crystal growth of pure metals from their melts. *Nature Materials*, 17, 881–886.

7. Chan, W.-L., Averbach, R. S., Cahill, D. G. & Ashkenazy, Y. (2009). Solidification velocities in deeply undercooled silver. *Physical Review Letters*, 102, 095701.

8. Poletaev, G. M., Karakulova, I. V. & Podorova D. K. (2021). Molecular dynamics study of the effect of undercooling temperature on the velocity of the crystallization front movement in silver. *Fundamental'nye problemy sovremennogo*

- materialovedenia (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 18(3), 297–303.
9. Zhang, H. Y., Liu, F., Yang, Y. & Sun, D. Y. (2017). The molecular dynamics study of vacancy formation during solidification of pure metals. *Scientific Reports*, 7, 10241.
10. Mendelev, M. I., Rahman, M. J., Hoyt, J. J. & Asta, M. (2010). Molecular-dynamics study of solid-liquid interface migration in fcc metals. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 18, 074002.
11. Hoyt, J. J., Asta, M. & Karma, A. (2002). Atomistic simulation methods for computing the kinetic coefficient in solid-liquid systems. *Interface science*, 10, 181–189.
12. Sun, D. Y., Asta, M. & Hoyt, J. J. (2004). Kinetic coefficient of Ni solid-liquid interfaces from molecular-dynamics simulations. *Physical Review B*, 69, 024108.
13. Poletaev, G. M. & Zorya, I. V. (2020). Influence of light impurities on the crystal-melt interface velocity in Ni and Ag. Molecular dynamics simulation. *Technical Physics Letters*, 46(6), 575–578.
14. Poletaev, G. M., Novoselova, D. V., Rakitin, R. Y. & Semenov, A. S. (2020). Modeling the formation of free volume at grain boundaries and triple junctions during nickel crystallization. *Letters on Materials*, 10(3), 299–302.
15. Poletaev, G. M., Novoselova, D. V., Kaygorodova, V. M. & Starostenkov, M. D. (2015). The peculiarities of the free volume formation in the triple junctions of $\langle 111 \rangle$ and $\langle 100 \rangle$ tilt boundaries in Ni during crystallization. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedenia (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 12(2), 253–258.
16. Cleri, F. & Rosato, V. (1993). Tight-binding potentials for transition metals and alloys. *Physical Review B*, 48, 22–33.
17. Poletaev, G. M., Zorya, I. V., Rakitin, R. Y. & Iliina, M. A. (2019). Interatomic potentials for describing impurity atoms of light elements in fcc metals. *Materials Physics and Mechanics*, 42(4), 380–388.
18. Kulabukhova, N. A., Poletaev, G. M. & Starostenkov, M. D. (2014). Molecular dynamics investigation of hydrogen interaction with Pd and Ni nanoparticles. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedenia (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 11(2), 235–240.
19. Kulabukhova, N. A., Poletaev, G. M. & Starostenkov, M. D. (2014). Interaction of hydrogen atom with the edge dislocation in Pd and Ni. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedenia (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 11(1), 99–104.
20. Chen, C., Zhang, F., Xu, H., Yang, Z. & Poletaev, G. M. (2022). Molecular dynamics simulations of dislocation-coherent twin boundary interaction in face-centered cubic metals. *Journal of Materials Science*, 57, 1833–1849.
21. Poletaev, G. M. (2021). Self-diffusion in liquid and solid alloys of the Ti–Al system: molecular-dynamics simulation. *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, 133(4), 455–460.
22. Poletaev, G. M. & Zorya, I. V. (2020). Effect of light element impurities on the edge dislocation glide in nickel and silver: molecular dynamics simulation. *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, 131(3), 432–436.
23. Poletaev, G. M. & Rakitin, R. Y. (2022). Influence of the orientation of Ti–Al interphase boundary on the mutual diffusion rate at the solid and liquid states of aluminium: molecular dynamics simulation. *Fizika tverdogo tela*, 64(4), 412–417.
24. Liu, C. L., Cohen, J. M., Adams, J. B. & Voter, A. F. (1991). EAM study of surface self-diffusion of single adatoms of fcc metals Ni, Cu, Al, Ag, Au, Pd, and Pt. *Surface Science*, 253, 334–344.

Information about the authors

G. M. Poletaev – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Head of department, I.I. Polzunov Altai State Technical University.

I. V. Karakulova – Senior Lecturer, I.I. Polzunov Altai State Technical University.

D. I. Ziuzin – Student, I.I. Polzunov Altai State Technical University.

E. S. Osipova – Student, I.I. Polzunov Altai State Technical University.

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.
The authors declare that there is no conflict of interest.

Статья поступила в редакцию 14.02.2022; одобрена после рецензирования 21.02.2022; принята к публикации 28.02.2022.

The article was received by the editorial board on 14 Feb. 22; approved after reviewing 21 Feb. 22; accepted for publication 28 Feb. 22.