

ISSN 1811-1416

**ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ  
ПРОБЛЕМЫ  
СОВРЕМЕННОГО  
МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ**

**Научный журнал**  
Издается с января 2004 г.

**Том 19**

**Сентябрь 2022 г.**

**№ 3**

Международный специализированный научный журнал  
Выходит ежеквартально  
Издается с января 2004 года

---

**Учредитель:**

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова»

**Соучредители:**

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Алтайский государственный педагогический университет»

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Сибирский государственный индустриальный университет»

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Томский государственный архитектурно-строительный университет»

---

**Издатель:**

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова»

**Адрес издателя:** 656038, Алтайский край, г. Барнаул, пр-т Ленина, д. 46

**Главный редактор:** д.ф.-м.н., профессор Старостенков М.Д.

Tel.: +7 (385) 229-08-52 Fax: +7 (385) 236-78-64

E-mail: genphys@mail.ru

**Зам. главного редактора (ответственный за выпуск):** д.т.н., профессор Гурьев А.М.

Tel.: +7 (385) 229-08-63 Fax: +7 (385) 236-78-64

E-mail: gurievam@mail.ru

**Зам. главного редактора (ответственный за online выпуск):** д.ф.-м.н., профессор Полетаев Г.М.

Tel.: +7 (385) 229-08-52 Fax: +7 (385) 236-78-64

E-mail: gmroletaev@mail.ru

**Технический редактор:** к.ф.-м.н., доцент Черных Е.В.

Tel.: +7 (385) 229-08-52 Fax: +7 (385) 236-78-64

E-mail: jane\_5@mail.ru

Журнал включен в Перечень ВАК ведущих российских рецензируемых научных журналов и изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание ученых степеней доктора и кандидата наук (редакция от 02.02.2016 г.).

Журнал включен в каталог периодических изданий Ульрих  от 18.02.2015 г., в перечень журналов, вошедших в ядро РИНЦ и в список 650 российских журналов, вошедших в Russian Science Citation Index (RSCI), представленный на платформе Web of Science.

Журнал зарегистрирован в Федеральной службе по надзору в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций.

**Свидетельство о регистрации средства массовой информации:** ПИ № ФС77-75026 от 01.02.2019 г.

**Информация о подписке:**

«Фундаментальные проблемы современного материаловедения» выходит раз в квартал. Индекс в каталоге ООО «Урал-Пресс» – 31038.

Цена годовой подписки через редакцию: 1200 руб. (300 руб. за номер).

**Адрес редакции:** 656038, Алтайский край, г. Барнаул, пр-т Ленина, д. 46

**Тел./факс** (3852) 29-08-52

**E-mail:** genphys@mail.ru

**Адрес в Internet:** [www.nsmds.ru/journal.html](http://www.nsmds.ru/journal.html)

**Редакционная коллегия:**

**Старостенков М.Д.** (д.ф.-м.н., профессор, зав. кафедрой физики АлтГТУ, г. Барнаул, Россия)

**Глезер А.М.** (д.ф.-м.н., профессор, главный научный сотрудник Национального исследовательского технологического университета «МИСиС», директор ИМФМ ЦНИИЧермет им. И.П. Бардина, член совета РАН по физике конденсированного состояния, главный редактор журнала «Деформация и разрушения», зам. главного редактора журнала «Материаловедение» ЦНИИЧермет, г. Москва, Россия)

**Громов В.Е.** (д.ф.-м.н., профессор, зав. кафедрой физики СибГИУ, г. Новокузнецк, Россия)

**Гурьев А.М.** (д.т.н., профессор, зав. кафедрой начертательной геометрии и графики АлтГТУ, г. Барнаул, Россия)

**Кащенко М.П.** (д.ф.-м.н., профессор, зав. кафедрой общей физики УГЛТУ, г. Екатеринбург, Россия)

**Кхаре А.** (профессор, Индийский институт науки образования и исследований, г. Пуна, Индия)

**Мулюков Р.Р.** (член корр. РАН, д.ф.-м.н., профессор, директор ИПСМ РАН, г. Уфа, Россия)

**Мэй Шунчи** (профессор, декан УТУ, г. Ухань, Китай)

**Козырев Н.А.** (д.т.н., профессор, проректор по научной и инновационной деятельности СибГИУ, г. Новокузнецк, Россия)

**Плотников В.А.** (д.ф.-м.н., профессор, зав. кафедрой общей и экспериментальной физики АлтГУ, г. Барнаул, Россия)

**Полетаев Г.М.** (д.ф.-м.н., профессор, зав. кафедрой высшей математики и математического моделирования АлтГТУ, г. Барнаул, Россия)

**Потекаев А.И.** (д.ф.-м.н., профессор, директор СФТИ, главный редактор журнала «Известия вузов. Физика», г. Томск, Россия)

**Пышнограй Г.В.** (д.ф.-м.н., профессор АлтГТУ, г. Барнаул, Россия)

**Рубаник В.В.** (д.т.н., член-корреспондент Национальной академии наук Беларуси, директор ГНУ "ИТА НАН Беларуси", г. Витебск, Беларусь)

**Старенченко В.А.** (д.ф.-м.н., профессор, декан общеобразовательного факультета ТГАСУ, г. Томск, Россия)

**Лыгденов Б.Д.** (д.т.н., профессор ВСГУТУ, г. Улан-Удэ, Россия)

**Дмитриев С.В.** (д.ф.-м.н., доцент, зав. лабораторией ИПСМ РАН, г. Уфа, Россия)

**Атучин В.В.** (к.ф.-м.н., доцент, руководитель лаборатории «Оптические материалы и структуры» ИФП СО РАН, г. Новосибирск, Россия)

## СОДЕРЖАНИЕ

### РАЗДЕЛ 1. ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

- В.А. Плотников, Д.Г. Богданов, А.С. Богданов, А.А. Чепуров,  
С.В. Макаров, В.Г. Винс, Е.И. Жимулев*  
Теплопроводящие свойства монокристаллических и термобарически спеченных алмазных материалов.....287
- У.И. Янковская, П.В. Захаров, М.Д. Старостенков, А.В. Маркидонов, Е.А. Корзникова*  
Поведение платины, армированной углеродной нанотрубкой, при сжимающей нагрузке.....295
- М.В. Логинова, А.В. Собачкин, А.А. Ситников, В.И. Яковлев, В.Ю. Филимонов,  
А.Ю. Мясников, А.В. Градобоев*  
Влияние гамма-облучения механокомпозитов Ti+Al на фазовый состав материалов при экстремальном термическом воздействии в проточном реакторе.....304
- С.Г. Мамылов, И.О. Ломовский, О.И. Ломовский*  
Термическое взаимодействие кварцетина и глюкозы. Влияние механохимического воздействия. Квантово-химический расчет маршрутов реакции.....315
- С.А. Невский, В.Д. Сарычев, С.В. Коновалов, Ю.Ф. Иванов,  
К.А. Осинцев, В.Е. Громов*  
Механизм формирования границы раздела «высокоэнтропийное покрытие/подложка» при холодном переносе металла.....326
- В.Г. Кульков*  
Зернограничный вклад в высокотемпературный фон внутреннего трения в металлах.....335
- Ю.Ф. Иванов, В.В. Шугуров, А.Д. Тересов, М.О. Ефимов, В.Е. Громов,  
С.В. Коновалов, И.А. Панченко, Ю.А. Шлярова*  
Влияние электронно-пучковой обработки на систему «пленка (B+Cr) – подложка (высокоэнтропийный сплав AlCrFeCoNi)».....343
- Г.М. Полетаев, И.В. Каракулова, В.В. Коваленко*  
Молекулярно-динамическое исследование влияния примесей углерода и кислорода на скорость движения фронта кристаллизации в никеле.....353

---

**РАЗДЕЛ 2. МЕТАЛЛОВЕДЕНИЕ И ТЕРМИЧЕСКАЯ ОБРАБОТКА  
МЕТАЛЛОВ И СПЛАВОВ**

<b>Ю.П. Бесшапошников, Б.А. Гринберг, М.С. Пушкин, А.В. Иноземцев, А.М. Пацелов</b> Оптимизация параметров сварки взрывом и структурные особенности композитов сталь – толстолистовой алюминий.....	362
<b>К.А. Осинцев, С.В. Коновалов, Ю.Ф. Иванов, С.В. Воронин, И.И. Левин, В.С. Данилушкин, В.Е. Громов, И.А. Панченко</b> Моделирование напряженно-деформированного состояния высокоэнтропийного сплава системы Al-Co-Cr-Fe-Ni, обработанного электронным пучком.....	376
<b>Ц. Чжэн, Ш. Мэй, С. Чжи, А.М. Гурьев, Ю. Фань, Б.Д. Лыгденов, М.А. Гурьев</b> Исследование влияния борирования с редкоземельными элементами на свойства штамповой стали H13.....	384
<b>Э.В. Галиева, А.А. Бикмухаметова, В.А. Валитов</b> Формирование твердофазного соединения из разноименных сплавов на основе никеля ЭК61 и ЭП975.....	394
<b>С.В. Панин, Д.Г. Буслович, Ц. Ло, Л.А. Корниенко, В.О. Алексенко</b> Трибологические характеристики трехкомпонентных твердосмазочных композитов на основе полиэфиримида в условиях точечного и линейного трибоконтактов.....	402
<b>Персоналия.....</b>	411

Научная статья

1.3.8. Физика конденсированного состояния (физико-математические науки)

УДК 538.911

doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2022.03.008

## МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ПРИМЕСЕЙ УГЛЕРОДА И КИСЛОРОДА НА СКОРОСТЬ ДВИЖЕНИЯ ФРОНТА КРИСТАЛЛИЗАЦИИ В НИКЕЛЕ

Геннадий Михайлович Полетаев<sup>1†</sup>, Ирина Владимировна Каракулова<sup>2</sup>,  
Виктор Викторович Коваленко<sup>3</sup>

<sup>1,2</sup> Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова, пр. Ленина, 46, 656038, Барнаул, Россия

<sup>3</sup> Сибирский государственный индустриальный университет, ул. Кирова, 42, 654007, Новокузнецк, Россия

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

<sup>2</sup> mail\_for\_irina@inbox.ru, <https://orcid.org/0000-0003-2075-0557>

<sup>3</sup> vikt.kovalenko@yandex.ru, <https://orcid.org/0000-0003-1664-003X>

**Аннотация.** С помощью молекулярно-динамического моделирования проведено исследование влияния примесей углерода и кислорода на скорость движения фронта кристаллизации в никеле. Рассматривались три разные ориентации фронта относительно растущего кристалла: (100), (110) и (111). Примесные атомы вводились случайно по всему объему расчетной ячейки. Концентрация примесей варьировалась от 0 до 7 % (ат.). Было выяснено, что введение примесных атомов во всех случаях существенно снижает скорость кристаллизации, причем атомы кислорода тормозят фронт кристаллизации сильнее, чем атомы углерода. Механизм торможения кристаллизации примесными атомами связан с двумя факторами: торможением самодиффузии в жидком металле из-за образования сравнительно крепких связей между атомами металла и атомами примеси (для кислорода эта связь сильнее по сравнению с атомами углерода), и искажением кристаллической решетки вследствие дилатационного эффекта вокруг примесных атомов в растущем кристалле (этот эффект также выше в случае атомов кислорода). В случае примеси углерода при достаточно высоких концентрациях (порядка нескольких процентов) атомы углерода формировали агрегаты, которые представляли собой скопления нескольких десятков атомов углерода в матрице металла. Фронт кристаллизации задерживался на данных агрегатах. При кристаллизации в условиях наличия примесей кислорода агрегаты не наблюдались. Ориентация фронта кристаллизации оказывает влияние на скорость кристаллизации: быстрее кристаллизация протекала при ориентации (100), медленнее – при ориентации (111). Данная анизотропия скорости движения фронта кристаллизации обусловлена отличием свободных энергий атома металла в жидкой фазе и «встроенного» в границу растущего кристалла.

**Ключевые слова:** молекулярная динамика, металл, кристаллизация, углерод, кислород.

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

---

**Для цитирования:** Полетаев Г.М., Каракулова И.В., Коваленко В.В. Молекулярно-динамическое исследование влияния примесей углерода и кислорода на скорость движения фронта кристаллизации в никеле // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2022. Т. 19, № 3. С. 353–361. doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2022.03.008.

---

Original article

**MOLECULAR DYNAMICS STUDY OF THE EFFECT OF CARBON AND OXYGEN IMPURITIES ON THE VELOCITY OF THE CRYSTALLIZATION FRONT IN NICKEL****Gennady M. Poletaev<sup>1†</sup>, Irina V. Karakulova<sup>2</sup>, Viktor V. Kovalenko<sup>3</sup>**

I.I. Polzunov Altai State Technical University, Lenin Pr., 46, Barnaul, 656038, Russia

<sup>4, 5, 6, 7, 8</sup> Siberian State Industrial University, Kirova Str., 42, Novokuznetsk, 654007, Russia<sup>1</sup> gmpoletaev@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-5252-2455><sup>2</sup> mail\_for\_irina@inbox.ru, <https://orcid.org/0000-0003-2075-0557><sup>3</sup> vikt.kovalencko@yandex.ru, <https://orcid.org/0000-0003-1664-003X>

**Abstract.** The effect of carbon and oxygen impurities on the velocity of the crystallization front in nickel was studied using molecular dynamics simulation. Three different orientations of the front relative to the growing crystal were considered: (100), (110), and (111). Impurity atoms were introduced randomly over the entire volume of the computational cell. The impurity concentration varied from 0 to 7 % (at.). It was found that the introduction of impurity atoms in all cases significantly reduces the crystallization velocity, wherein oxygen atoms slow down the crystallization front more strongly than carbon atoms. The mechanism of deceleration of crystallization by impurity atoms is associated with two factors: deceleration of self-diffusion in a liquid metal due to the formation of relatively strong bonds between metal atoms and impurity atoms (for oxygen, this bond is stronger compared to carbon atoms), and distortion of the crystal lattice due to the dilatation effect around impurity atoms in a growing crystal (this effect is also higher for oxygen atoms). In the case of carbon impurity at sufficiently high concentrations (on the order of several percent), carbon atoms formed aggregates, which were accumulations of several tens of carbon atoms in the metal matrix. The crystallization front lingered on these aggregates. During crystallization in the presence of oxygen impurities, aggregates were not observed. The orientation of the crystallization front affects the crystallization velocity: crystallization proceeded faster with the (100) orientation, and slower with the (111) orientation. This anisotropy of the velocity of the crystallization front is due to the difference in the free energies of the metal atom in the liquid phase and that “embedded” into the boundary of the growing crystal.

**Keywords:** molecular dynamics, metal, crystallization, carbon, oxygen.

**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. & Kovalenko, V. V. (2022). Molecular dynamics study of the effect of carbon and oxygen impurities on the velocity of the crystallization front in nickel. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 3(19), 353–361. (In Russ.). doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2022.03.008.

**Введение**

Кристаллизация металлов и сплавов играет важную роль в технологических операциях, ее течение определяет многие свойства материалов. Но, несмотря на интерес к данной проблеме и большую историю ее изучения, в настоящее время остаются открытые вопросы, относящиеся как к кинетике и особенностям гомогенного механизма кристаллизации [1-3], связанного с зарождением зародышей кристаллизации, так и сравнительно более простого гетерогенного механизма [4-], когда рассматривается движение фронта кристалл-расплав.

К настоящему времени, благодаря появлению технологии глубокого переохлаждения и компьютерному моделированию [7], стало известно, что по мере уменьшения температуры,

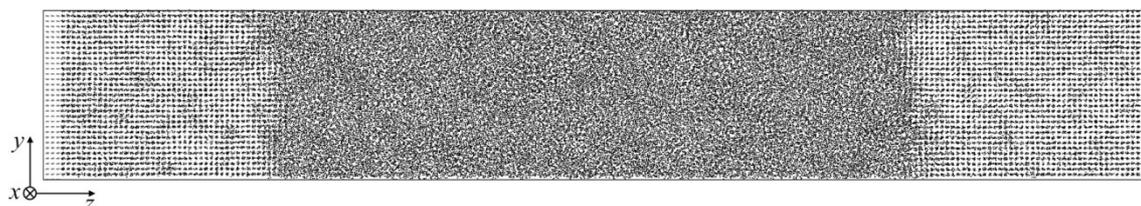
то есть увеличения переохлаждения, скорость движения фронта кристаллизации растет не все время, а только до температуры порядка  $0,6-0,8 \cdot T_{лн}$ , после чего начинает даже снижаться. Подобное поведение лучше описывает, так называемая, кинетическая модель с диффузионным ограничением (diffusion limited model), которая долгое время рассматривалась наряду с конкурирующей моделью с ограничением тепловых столкновений (collision limited model) [1, 4, 7]. Кроме этого, в основном благодаря компьютерному моделированию в последнее время [5, 9-12], выяснено, что скорость фронта кристаллизации зависит от ориентации относительно растущего кристалла. Показано, например, что в случае ГЦК кристаллов фронт кристаллизации быстрее всего движется при ориентации вдоль плоскости (100).

В предыдущей нашей работе [13], посвященной моделированию кристаллизации никеля и серебра в условиях наличия примесей углерода и кислорода, было выяснено, что указанные примеси легких элементов приводят к существенному замедлению кристаллизации. Было сделано заключение, что 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 продолжению данных исследований, но на примере только никеля. В отличие от работы [13], где рассматривались сравнительно небольшие модели, включающие около двадцати тысяч атомов, с единственной ориентацией фронта кристаллизации вдоль плоскости (111), в настоящей работе взяты модели, включающие гораздо большее количество атомов (около 110 тысяч), а также рассмотрены разные варианты

ориентации фронта кристаллизации: (100), (111), (110).

### Описание модели

Расчетная ячейка в молекулярно-динамической модели имела форму длинного параллелепипеда с квадратным сечением (рис.1). На боковых гранях, то есть вдоль осей X и Y, использовались периодические граничные условия. Для имитации начального положения фронта кристаллизации на торцах вдоль оси Z (на торцах слева и справа на рис.1) кристаллическая структура была зафиксирована – атомы, выделенные светло-серым цветом на рис.1 оставались неподвижными в течение моделирования. В работе рассматривались три расчетные ячейки с разной ориентацией плоскости XY, то есть фронта кристаллизации: (100), (110) и (111). Расчетные ячейки содержали более 110 тысяч атомов, не включая атомы примеси, и имели ширину и высоту примерно 5,8 нм, длину – около 37,5 нм.



**Рис.1.** Пример расчетной ячейки с ориентацией XY (100) после моделирования кристаллизации в течение 75 пс при температуре 1500 К

**Fig.1.** An example of a computational cell with the XY (100) orientation after simulation of crystallization for 75 ps at a temperature of 1500 K

Взаимодействия атомов никеля друг с другом описывались в модели с помощью многочастичного потенциала Клери и Росато [14], созданного с использованием модели сильной связи. Взаимодействия атомов углерода и кислорода с атомами никеля и друг с другом рассчитывались с помощью потенциалов Морзе, разработанных в работе [15]. Данные потенциалы успешно использовались при решении различных задач и достаточно хорошо описывают различные свойства никеля и примесей углерода и кислорода [15-20].

Перед проведением основных компьютерных экспериментов, расчетные ячейки, после их создания, плавилась путем задания температуры, значительно превышающей температуру плавления и выдерживания в течение времени, достаточного для полного плавления структуры

ячейки. Разрушение кристаллической структуры и ее плавление достаточно просто регистрировалась не только визуально, но и с помощью диаграммы радиального распределения (парной корреляционной диаграммы). После получения расплавленных расчетных ячеек с тремя разными ориентациями зафиксированной на левом и правом торцах кристаллической структурой вводились примесные атомы углерода или кислорода. Примесные атомы вводились случайно по всему объему ячейки. Концентрация примесей варьировалась от 0 до 7 % (ат.).

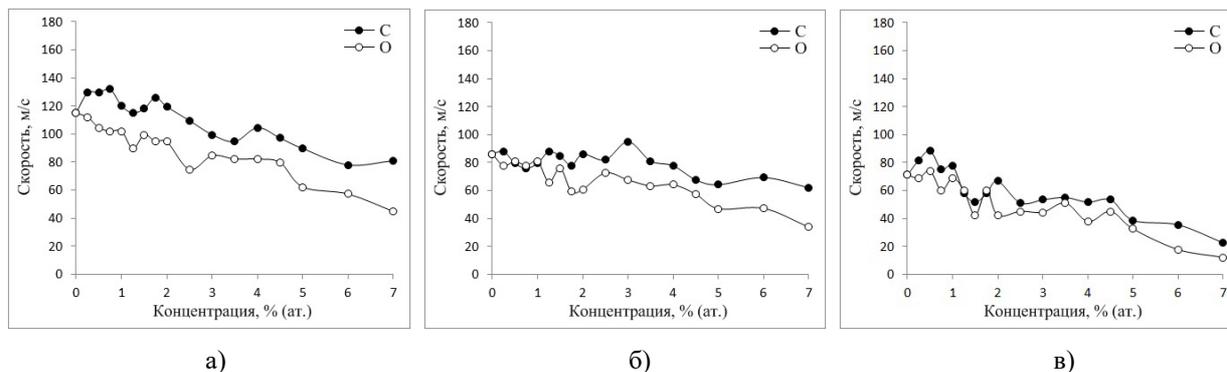
Моделирование кристаллизации проводилось при удержании постоянной температуры с помощью термостата Нозе-Гувера. Основные результаты получены для температур 1500 и 1200 К. При задании той или иной температуры размеры расчетной ячейки изменялись с учетом

коэффициента теплового расширения. Но в течение моделирования кристаллизации при постоянной температуре ее объем оставался постоянным. Шаг пересчета по времени в методе молекулярной динамики был варьируемым, но в большинстве случаев был равен 5 фс.

### Результаты и обсуждение

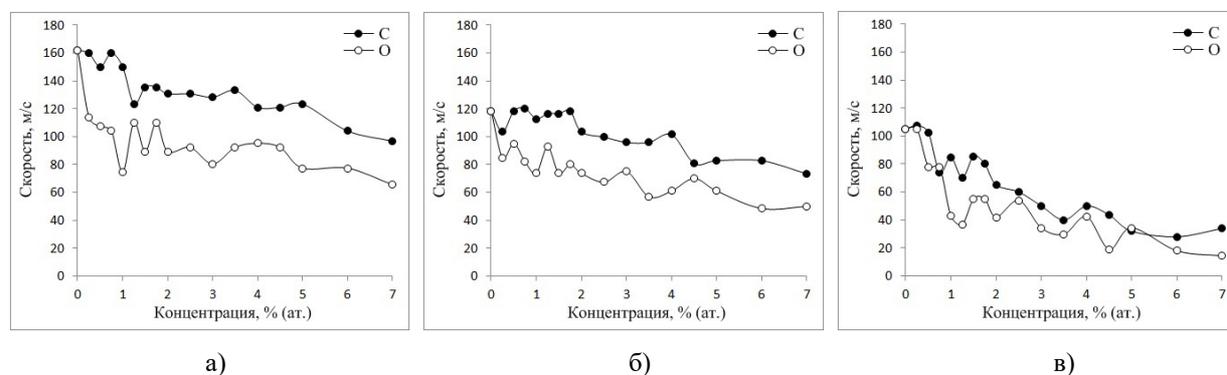
В процессе компьютерного эксперимента фронт кристаллизации, как можно видеть на рис.1, двигался от левого и правого торцов к центру расчетной ячейки. Положение фронта в большинстве случаев было хорошо видно визуально (особенно после резкого охлаждения, при котором не успевала произойти кристаллизация аморфной части, но кристаллические плоскости становились видны более четко). Ранее в [8] нами было показано, что скорость движения

фронта кристаллизации большую часть своего пути движется примерно с одной скоростью. Поэтому его скорость рассчитывалась как отношение смещений фронта кристаллизации от левого и правого торцов к продолжительности моделирования. На рис.2 приведены графики зависимости скорости движения фронта кристаллизации от концентрации примесных атомов углерода и кислорода при температуре 1500 К ( $0,87 \cdot T_{nl}$ ) для трех рассматриваемых ориентаций фронта. На рис.3 – при температуре 1200 К ( $0,70 \cdot T_{nl}$ ). Следует заметить, что полученные в нашей работе максимальные значения скорости кристаллизации совпадают со значениями, полученными в работе [9] для никеля с помощью компьютерного моделирования с использованием другого потенциала: 150 м/с для ориентации (100) и 100 м/с – для (110).



**Рис.2.** Зависимости скорости движения фронта кристаллизации от концентрации примесных атомов углерода и кислорода при температуре термостата 1500 К: а) при ориентации фронта вдоль плоскости (100); б) (110); в) (111)

**Fig.2.** Dependences of the speed of the crystallization front on the concentration of impurity carbon and oxygen atoms at a thermostat temperature of 1500 K: a) when the front is oriented along the (100) plane; b) (110); c) (111)



**Рис.3.** Зависимости скорости движения фронта кристаллизации от концентрации примесных атомов углерода и кислорода при температуре термостата 1200 К: а) при ориентации фронта вдоль плоскости (100); б) (110); в) (111)

**Fig.3.** Dependences of the velocity of the crystallization front on the concentration of impurity carbon and oxygen atoms at a thermostat temperature of 1200 K: a) when the front is oriented along the (100) plane; b) (110); c) (111)

Как видно из рисунков 2 и 3, введение примесных атомов во всех случаях существенно снижало скорость кристаллизации. Причем, согласно полученным данным, атомы кислорода тормозят фронт кристаллизации сильнее, чем атомы углерода. На всех полученных зависимостях характер влияния примесей примерно схожий.

Кинетическая модель Вильсона-Френкеля с диффузионным ограничением, описывающая кинетику фронта гетерогенной кристаллизации, задается выражением [1, 4, 6, 7]

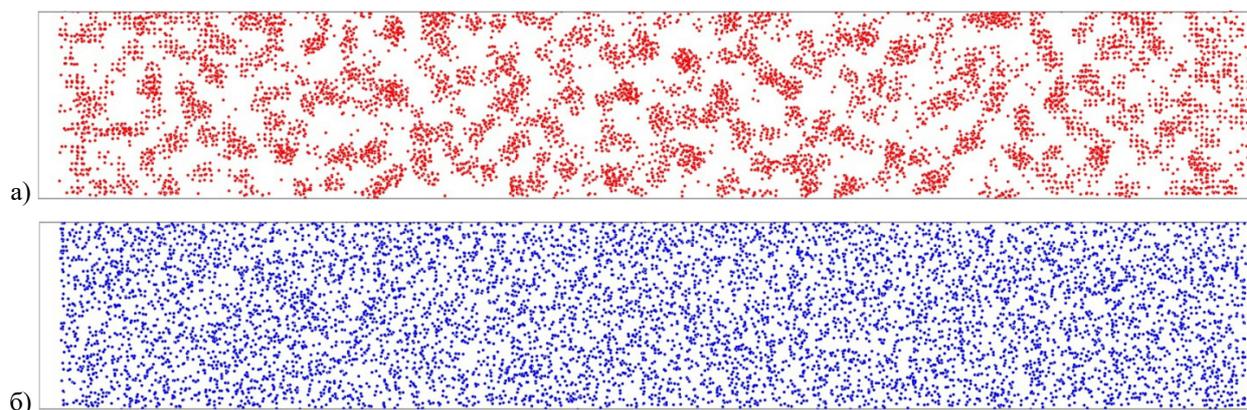
$$v(T) = A \exp\left(-\frac{E}{kT}\right) \left[1 - \exp\left(-\frac{\Delta\mu}{kT}\right)\right], \quad (1)$$

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

Судя по приведенной формуле, наличие примесных атомов, очевидно, оказывает влияние на обе величины  $E$  и  $\Delta\mu$ . Энергия миграции атомов в расплаве  $E$ , в результате образования сравнительно крепких связей между атомами металла и примеси и торможения вследствие этого диффузии в жидком металле, будет с ростом концентрации примесей повышаться, а величина  $\Delta\mu$ , из-за искажения, в результате присутствия примесей, кристаллической решетки строящегося кристалла – снижаться. И то и

другое приводит, как видно по формуле (1), к уменьшению скорости кристаллизации. Более крепкая связь между атомом никеля и атомом примеси характерна для кислорода [15], кроме того атом кислорода в решетке никеля приводит к большим, по сравнению с атомом углерода, смещениям соседних атомов никеля и деформации окружающей примесь кристаллической решетки [21]. Оба этих фактора являются причиной большего влияния на скорость кристаллизации примеси кислорода по сравнению с углеродом.

На рис.4 изображены примеры распределения примесных атомов углерода и кислорода при концентрации 7 % в расчетной ячейке с ориентацией фронта (100) после моделирования кристаллизации в течение 75 пс при температуре 1500 К. В случае примеси углерода при достаточно высоких концентрациях, как видно на рис.4а, атомы углерода формировали агрегаты, которые представляли собой скопления нескольких десятков атомов углерода в матрице металла. Фронт кристаллизации задерживался на данных агрегатах. При кристаллизации в условиях наличия примесей кислорода агрегаты не наблюдались (рис.4б), однако торможение фронта кристаллизации происходило сильнее при тех же значениях концентрации по сравнению с примесью углерода.



**Рис.4.** Примеры распределения примесных атомов углерода (а) и кислорода (б) при концентрации 7 % (ат.) в расчетной ячейке при ориентации фронта (100) при температуре 1500 К

**Fig.4.** Examples of the distribution of impurity atoms of carbon (a) and oxygen (b) at a concentration of 7 % (at.) in the computational cell with a (100) front orientation at a temperature of 1500 K

Аналогичное поведение примесей наблюдалось нами при исследовании их влияния на скорость миграции границ наклонного типа с осями разориентации  $\langle 100 \rangle$  и  $\langle 111 \rangle$  в Ni, Ag и

Al [22]. Введение 5 % (ат.) примесей приводило к значительному снижению скорости миграции границ зерен почти на порядок. Атомы углерода тоже формировали скопления, которые эф-

фективно тормозили миграцию границы, закрепляясь на ней. Примесные атомы кислорода, как и в настоящем исследовании, агрегатов не образовывали, но из-за высокого значения энергии связи с границей зерен вследствие дилатационного эффекта, тоже замедляли миграцию границ.

Из графиков на рис.2 и 3 видно, что ориентация фронта кристаллизации оказывает влияние на скорость кристаллизации: быстрее кристаллизация протекала при ориентации (100), медленнее – при ориентации (111). На это, как упоминалось во введении, указывают также результаты работ [5, 9-12], выполненных с помощью метода молекулярной динамики. Анизотропия скорости кристаллизации, по всей видимости, в большей степени обусловлена зависимостью величины  $\Delta\mu$  от ориентации фронта. Данная величина обычно определяется просто как разность свободных энергий атома в расплаве и кристаллической решетке. Однако, как мы считаем, что в данном случае 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 с данной точки зрения, она, очевидно, начинает зависеть от ориентации фронта кристаллизации относительно растущего кристалла. Для подтверждения этого мы специально нашли значения потенциальной энергии адатома Ni на поверхностях (111) и (100) кристалла никеля: -2,67 и -2,85 эВ соответственно. То есть, как и ожидалось, присоединение атома из расплава к поверхности (100) энергетически более выгодно, чем к поверхности (111). Помимо наших расчетов, можно обратить внимание на разницу энергии активации миграции адатомов по поверхностям (100) и (111), которые, согласно результатам компьютерного моделирования в работе [23], составляют соответственно 0,63 и 0,33 эВ.

Еще одной интересной закономерностью является нетривиальная зависимость скорости движения фронта кристаллизации от температуры. Как можно видеть, скорости на рис.3 при температуре 1200 К выше, чем при температуре 1500 К. Ранее [8], нами уже рассматривалось отдельно влияние температуры на скорость гетерогенной кристаллизации. Скорость движения фронта кристаллизации по мере уменьшения температуры сначала растет, достигая мак-

симума примерно при  $0,7 \cdot T_{пл}$  (то есть как раз при 1200 К), после чего плавно снижается. Снижение скорости кристаллизации при дальнейшем переохлаждении, согласно модели Вильсона-Френкеля с диффузионным ограничением, объясняется замедлением самодиффузии в расплаве при понижении температуры.

### Заключение

С помощью молекулярно-динамического моделирования проведено исследование влияния примесей углерода и кислорода на скорость движения фронта кристаллизации в никеле. Было выяснено, что введение примесных атомов во всех случаях существенно снижает скорость кристаллизации, причем атомы кислорода тормозят фронт кристаллизации сильнее, чем атомы углерода. Механизм торможения кристаллизации примесными атомами связан с двумя факторами: торможением самодиффузии в жидком металле из-за образования сравнительно крепких связей между атомами металла и атомами примеси (для кислорода эта связь сильнее по сравнению с атомами углерода), и искажением кристаллической решетки вследствие дилатационного эффекта вокруг примесных атомов в растущем кристалле (этот эффект также выше в случае атомов кислорода).

В случае примеси углерода при достаточно высоких концентрациях (порядка нескольких процентов) атомы углерода формировали агрегаты, которые представляли собой скопления нескольких десятков атомов углерода в матрице металла. Фронт кристаллизации задерживался на данных агрегатах. При кристаллизации в условиях наличия примесей кислорода агрегаты не наблюдались.

Ориентация фронта кристаллизации оказывает влияние на скорость кристаллизации: быстрее кристаллизация протекала при ориентации (100), медленнее – при ориентации (111). Данная анизотропия скорости движения фронта кристаллизации обусловлена отличием свободных энергий атома металла в жидкой фазе и «встроенного» в границу растущего 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 // Philosophical Transactions of the Royal Society

- A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences. 2019. V. 377. 0180205.
2. Jha S.K., Karthika S., Radhakrishnan T.K. Modelling and control of crystallization process // Resource-Efficient Technologies. 2017. V. 3. P. 94–100.
3. Стеценко В.Ю. Механизмы процесса кристаллизации металлов и сплавов // Литье и металлургия. 2013. Т. 69, № 1. P. 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. P. 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. V. 17. P. 881–886.
7. Chan W.-L., Averbach 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. Cleri F., Rosato V. Tight-binding potentials for transition metals and alloys // Physical Review B. 1993. V. 48, N 1. P. 22–33.
15. 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, № 4. P. 380–388.
16. 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.
17. 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.
18. 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.
19. 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.
20. 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.
21. Зоря И.В., Полетаев Г.М., Старостенков М.Д. Примесные атомы легких элементов в кристаллах металлов: молекулярно-динамическое моделирование // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2018. Т. 15, № 4. С. 526–532.
22. Poletaev G.M., Zorya I.V., Rakitin R.Y., Piina M.A., Starostenkov M.D. Effect of carbon and oxygen impurity atoms on the migration rate of tilt boundaries in fcc metals: a molecular dynamics simulation // Letters on Materials. 2019. V. 9, N 4. P. 391–394.

23. 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. Поletaев – 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.

В. В. Коваленко – доктор физико-математических наук, профессор, Сибирского государственного индустриального университета.

### 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. (In Russ.).
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 materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 18(3), 297–303. (In Russ.).
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. Mendeleev, 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. (In Russ.).
14. Cleri, F. & Rosato, V. (1993). Tight-binding potentials for transition metals and alloys. *Physical Review B*, 48, 22–33.
15. 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.
16. 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 materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 11(2), 235–240. (In Russ.).
17. 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 materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 11(1), 99–104. (In Russ.).
18. Chen, C., Zhang, F., Xu, H., Yang, Z. & Poletaev, G. M. (2022). Molecular dynamics simulations of dislocation-coherent twin boundary in-

teraction in face-centered cubic metals. *Journal of Materials Science*, 57, 1833–1849.

19. 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. (In Russ.).

20. 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. (In Russ.).

21. Zorya, I. V., Poletaev, G. M. & Starostenkov, M. D. (2018). Impurity atoms of light elements in metal crystals: a molecular dynamics simulation. *Fundamental'nye problemy sovremenogo materialovedeniya*, 15(4), 526–532. (In Russ.).

22. Poletaev, G. M., Zorya, I. V., Rakitin, R. Y., Iliina, M. A. & Starostenkov, M. D. (2019). Effect of carbon and oxygen impurity atoms on the migration rate of tilt boundaries in fcc metals: a

molecular dynamics simulation. *Letters on Materials*, 9(4), 391–394.

23. 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.

V. V. Kovalenko – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Siberian State Industrial University.

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

Статья поступила в редакцию 12.08.2022; одобрена после рецензирования 19.08.2022; принята к публикации 24.08.2022.

The article was received by the editorial board on 12 Aug. 22; approved after reviewing on 19 Aug. 22; accepted for publication on 24 Aug. 22.