

УДК 538.911

ВЛИЯНИЕ ПРИМЕСЕЙ ЛЕГКИХ ЭЛЕМЕНТОВ НА ПРОЦЕСС КРИСТАЛЛИЗАЦИИ НИКЕЛЯ В ОБЛАСТИ ТРОЙНОГО СТЫКА ГРАНИЦ ЗЕРЕН: МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Зоря И.В.¹, к.т.н., доцент, директор архитектурно-строительного института (zorya.i@mail.ru)

Полетаев Г.М.², д.ф.-м.н., профессор, заведующий кафедрой высшей математики
и математического моделирования (gmpoletaev@mail.ru)

Старостенков М.Д.², д.ф.-м.н., профессор, заведующий кафедрой физики (genphys@mail.ru)

Ракитин Р.Ю.³, к.ф.-м.н., доцент, директор колледжа (rakitinry@email.asu.ru)

Коханенко Д.В.⁴, к.ф.-м.н., доцент (DVKohanenko@fa.ru)

¹ Сибирский государственный индустриальный университет
(654007, Россия, Кемеровская обл., Новокузнецк, ул. Кирова, 42)

² Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова
(656038, Россия, Алтайский край, Барнаул, пр. Ленина, 46)

³ Алтайский государственный университет
(656049, Россия, Алтайский край, Барнаул, пр. Ленина, 61)

⁴ Финансовый университет при Правительстве РФ
(125993, Россия, Москва, пр. Ленинградский, 49)

Аннотация. Методом молекулярной динамики проведено исследование влияния примесей легких элементов (углерода, азота и кислорода) на процесс кристаллизации в области тройного стыка границ зерен в никеле. В качестве границ зерен рассматривались границы наклона с осью разориентации $\langle 111 \rangle$. Расчетная ячейка имела форму цилиндра, ось которого совпадала с линией тройного стыка и осью разориентации зерен. Вдоль оси цилиндра были наложены периодические граничные условия, атомы на боковой поверхности цилиндра были неподвижны. Для моделирования кристаллизации расчетная ячейка плавилась путем нагревания до температуры, значительно превышающей температуру плавления никеля. После того как моделируемый поликристалл становился жидким, включался термостат и проводилось выдерживание при постоянной температуре ниже температуры плавления. Жесткие граничные условия на боковой поверхности цилиндрической расчетной ячейки имитировали в данном случае фронты кристаллизации от трех центров кристаллизации. Область вблизи тройного стыка кристаллизовалась в последнюю очередь. В этой области концентрировались дефекты и свободный объем. Наличие примесей приводило к существенному замедлению скорости кристаллизации. При введении 10 % примесных атомов скорость движения фронта кристаллизации падала в несколько раз. Влияние примесей на скорость кристаллизации усиливалось в направлении C–N–O, что связано с отличием деформации кристаллической решетки, которую вызывают примесные атомы: чем больше эта деформация, тем сильнее примесные атомы тормозят фронт кристаллизации. Для примесных атомов углерода характерным было образование агрегатов при достаточно высоких концентрациях. Фронт кристаллизации задерживался на данных агрегатах. Атомы кислорода и азота не образовывали агрегатов, тем не менее вследствие вызываемых ими искажений кристаллической решетки также сильно тормозили фронт кристаллизации.

Ключевые слова: молекулярная динамика, металл, примесь, тройной стык, кристаллизация, свободный объем.

DOI: 10.17073/0368-0797-2020-5-357-363

ВВЕДЕНИЕ

Тройной стык зерен представляет собой линейный дефект, вдоль которого сопрягаются три различно ориентированных зерна или три зернограничные поверхности. Согласно экспериментальным данным диффузия в области тройного стыка границ зерен протекает значительно интенсивнее, чем вдоль самих границ [1 – 6]. Вклад тройных стыков в диффузию возрастает по мере уменьшения среднего размера зерен в материале [6 – 8]. Кроме того, тройные стыки играют важную роль в процессах, связанных с пластической деформацией, генерацией дислокаций, рекристаллиза-

цией [9]. Тройной стык зачастую характеризуется относительно более «рыхлой» структурой (даже с включениями аморфной фазы [10]), то есть с более высоким содержанием свободного объема по сравнению с образующими этот стык границами зерен [6, 11, 12].

Ранее в работе [13] показано, что тройные стыки, содержащие избыточный свободный объем, образуются преимущественно в процессе кристаллизации в результате «запирания» плотности жидкой фазы при встрече трех фронтов кристаллизации и, как следствие, концентрирования избыточного свободного объема в тройном стыке после затвердевания. Свободный объем в тройных стыках играет важную роль не только в процессе

диффузии [4, 6, 14], но и в процессах их миграции [15], деформации с их участием [16].

Взаимодействие примесных атомов легких элементов с металлами имеет большой научный и технологический интерес. Атомы углерода, азота, кислорода даже при небольших концентрациях существенно влияют на свойства металлов, что, в первую очередь, обусловлено их взаимодействием с дефектами кристаллической решетки [17, 18]. Несмотря на важность понимания механизмов и процессов, лежащих в основе влияния легирования примесями легких элементов на свойства металлов, в настоящее время остается много вопросов, касающихся поведения примесей на атомном уровне в металлической матрице.

Настоящая работа посвящена исследованию влияния примесных атомов углерода, азота и кислорода на процесс кристаллизации в области тройных стыков границ наклона в ГЦК металлах на примере никеля.

ОПИСАНИЕ МОДЕЛИ

Тройной стык границ наклона создавали в центре расчетной ячейки путем сопряжения трех зерен, разориентированных относительно друг друга с помощью поворота вокруг оси $\langle 111 \rangle$, параллельной линии тройного стыка. Начальные углы между границами в стыке задавали 120° . В течение молекулярно-динамического эксперимента границы могли мигрировать и углы между границами в итоге могли отличаться от 120° . После

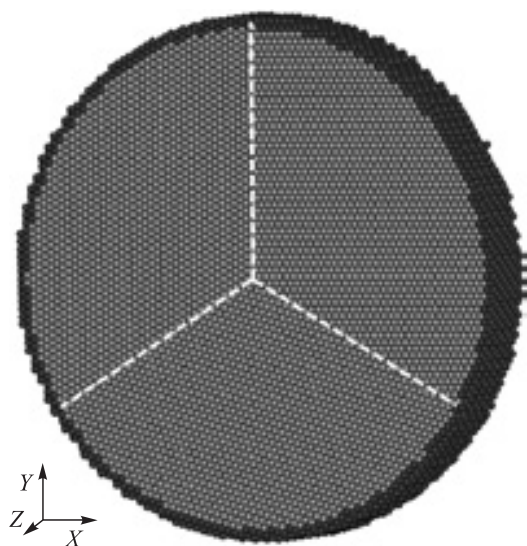


Рис. 1. Пример цилиндрической расчетной ячейки, содержащей тройной стык границ наклона $\langle 111 \rangle$ с углами разориентации 15, 15 и 30° (границы зерен обозначены белыми штриховыми линиями; темно-серые атомы в процессе моделирования оставались неподвижными (жесткие граничные условия))

Fig. 1. An example of cylindrical computational cell containing triple interface of tilt grain boundaries $\langle 111 \rangle$ with misorientation angles of 15, 15, and 30° (grain boundaries are indicated by white dashed lines; dark gray atoms remained steady during the simulation (hard boundary constrains))

вырезания сегментов (рис. 1) проводили сопряжение зерен, при котором удаляли атомы, находящиеся от соседнего атома на расстоянии менее $0,05$ нм. Заключительным этапом являлось вырезание конечной расчетной ячейки в форме цилиндра. На границы расчетной ячейки вдоль оси наклона всех зерен (то есть вдоль линии тройного стыка) налагали периодические граничные условия (имитировалось бесконечное повторение цилиндрической расчетной ячейки вдоль оси Z). На боковую поверхность цилиндра были наложены жесткие условия: атомы вблизи боковой поверхности в процессе компьютерного эксперимента оставались неподвижными (на рис. 1 жестко закрепленные атомы показаны темно-серым цветом). Размер расчетной ячейки подбирали достаточно большим, чтобы избежать влияния жестких граничных условий на краю ячейки. Радиус цилиндрической ячейки был равен $17,5$ нм, длина – $2,5$ нм. Количество атомов составляло примерно $55\,000$.

Взаимодействия атомов никеля друг с другом описывались многочастичным потенциалом Клери-Розато [19], построенным в рамках модели сильной связи. Потенциальная энергия i -го атома в этом случае находится по выражению

$$U_i = \sum_j A \exp \left[-p \left(\frac{r_{ij}}{r_0} - 1 \right) \right] - \sqrt{\sum_j \xi^2 \exp \left[-2q \left(\frac{r_{ij}}{r_0} - 1 \right) \right]}, \quad (1)$$

где A, p, q, ξ, r_0 – параметры потенциала; r_{ij} – расстояние между i -м и j -м атомами.

Параметры потенциалов Клери-Розато были взяты из работы [19].

Для описания взаимодействий атомов примесей легких элементов с атомами никеля и атомов примесей друг с другом использовали парные потенциалы Морзе [20]:

$$\varphi(r_{ij}) = D\beta e^{-\alpha r_{ij}} \left(\beta e^{-\alpha r_{ij}} - 2 \right), \quad (2)$$

где α, β, D – параметры потенциала.

Оба потенциала хорошо зарекомендовали себя в ряде расчетов, выполненных методом молекулярной динамики [21, 22]. Параметры потенциалов для описания взаимодействий примесных атомов углерода, азота и кислорода с атомами никеля были взяты из работы [20], где они были найдены с учетом эмпирических зависимостей и известных характеристик, таких как температура плавления или разложения соответствующего химического соединения металла с легким элементом, энергия активации диффузии примесного атома в кристаллической решетке металла. Для описания взаимодействий атомов примеси друг с другом в металлах в работе [20] за основу были взяты потенциалы,

предложенные другими авторами. Для связи С–С парный потенциал из работы [23] был трансформирован в потенциал Морзе. Для связей N–N и O–O были взяты потенциалы из работ [24, 25]. Радиус действия всех потенциалов ограничивался пятью координационными сферами. Параметры потенциалов Морзе для описания взаимодействий атомов углерода и кислорода с атомами металла и друг с другом [20] приведены ниже:

Связь	$\alpha, \text{\AA}^{-1}$	β	$D, \text{эВ}$
Ni–C	2,63598	200	0,200
Ni–N	3,03257	370	0,300
Ni–O	2,71735	170	0,600
C–C	2,62351	190	0,650
N–N	1,55580	700	0,001
O–O	1,26829	500	0,001

Шаг интегрирования по времени в методе молекулярной динамики составлял 1 фс. Температуру в модели задавали через начальные скорости атомов согласно распределению Максвелла, при этом учитывали тепловое расширение металла. Для сохранения температуры постоянной в процессе моделирования использовали термостат Нозе-Гувера.

Для моделирования кристаллизации расчетная ячейка плавилась путем нагревания до температуры, значительно превышающей температуру плавления никеля. После того, как моделируемый поликристалл становился жидким, включали термостат и выдерживали при постоянной температуре ниже температуры плав-

ления, как правило, при $0,7T_{\text{пл}}$ (где $T_{\text{пл}}$ – температура плавления). Жесткие граничные условия (т.е. жестко закрепленные атомы на боковой поверхности цилиндрической расчетной ячейки – темно-серые на рис. 1) имитировали в этом случае фронты кристаллизации от трех центров кристаллизации.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Скорость движения фронта кристаллизации на порядок ниже скорости звука, в связи с чем большинство дефектов формируется при кристаллизации в последнюю очередь – в местах сопряжения кристаллов с разной ориентацией, то есть на границах зерен и тройных стыках. На рис. 2 представлены изображения расчетной ячейки никеля в процессе кристаллизации в разные моменты времени. Как можно видеть, область вблизи тройного стыка кристаллизуется в последнюю очередь. В этой области происходит концентрирование дефектов и свободного объема [13].

Примесные атомы легких элементов вводили на этапе жидкого состояния расчетной ячейки. На рис. 3 изображены примеры распределения примесных атомов углерода и кислорода в области тройного стыка границ наклона $\langle 111 \rangle$ 15, 15 и 30° в никеле после моделирования кристаллизации при температуре 1200 К. Введение примесей приводило к существенному замедлению скорости кристаллизации. Примесные атомы углерода формируют в процессе кристаллизации агрегаты (рис. 3, а), некоторые из которых закрепляются на границах зерен и являются стопорами для

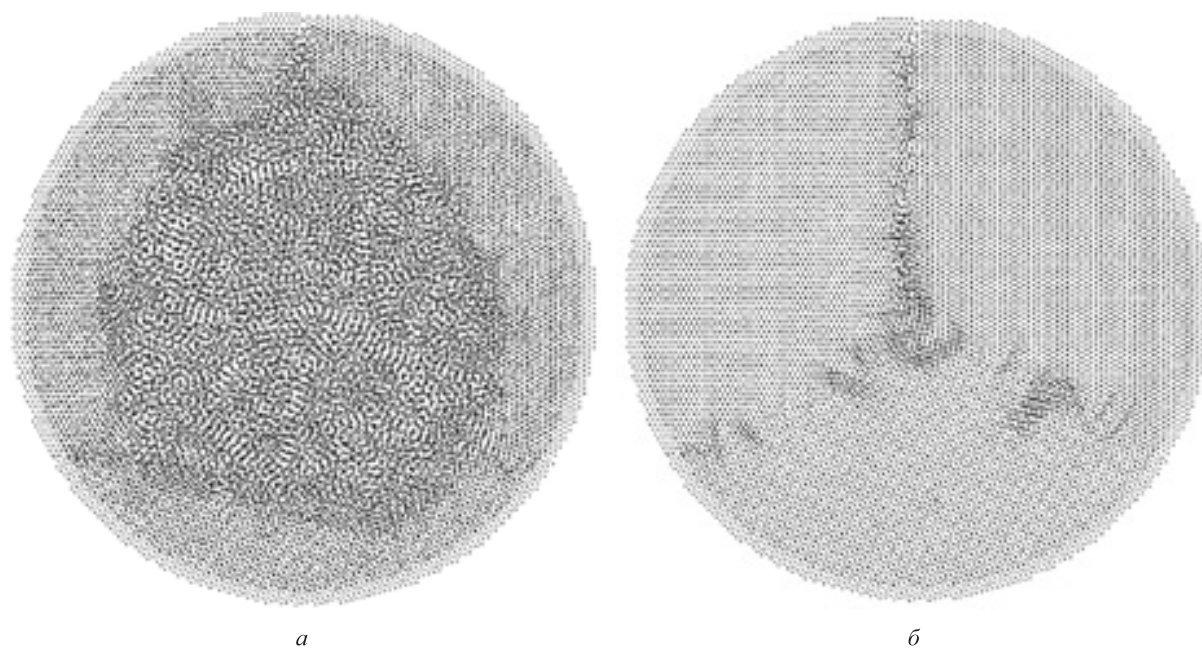


Рис. 2. Кристаллизация чистого никеля в области тройного стыка границ наклона $\langle 111 \rangle$ 15, 15 и 30° при температуре 1200 К после 10 пс (а) и после 40 пс и последующего охлаждения (б)

Fig. 2. Crystallization of pure nickel in the area of triple interface of the tilt grain boundaries $\langle 111 \rangle$ of 15, 15, and 30° at a temperature of 1200 K after 10 ps (a) and after 40 ps and subsequent cooling (b)

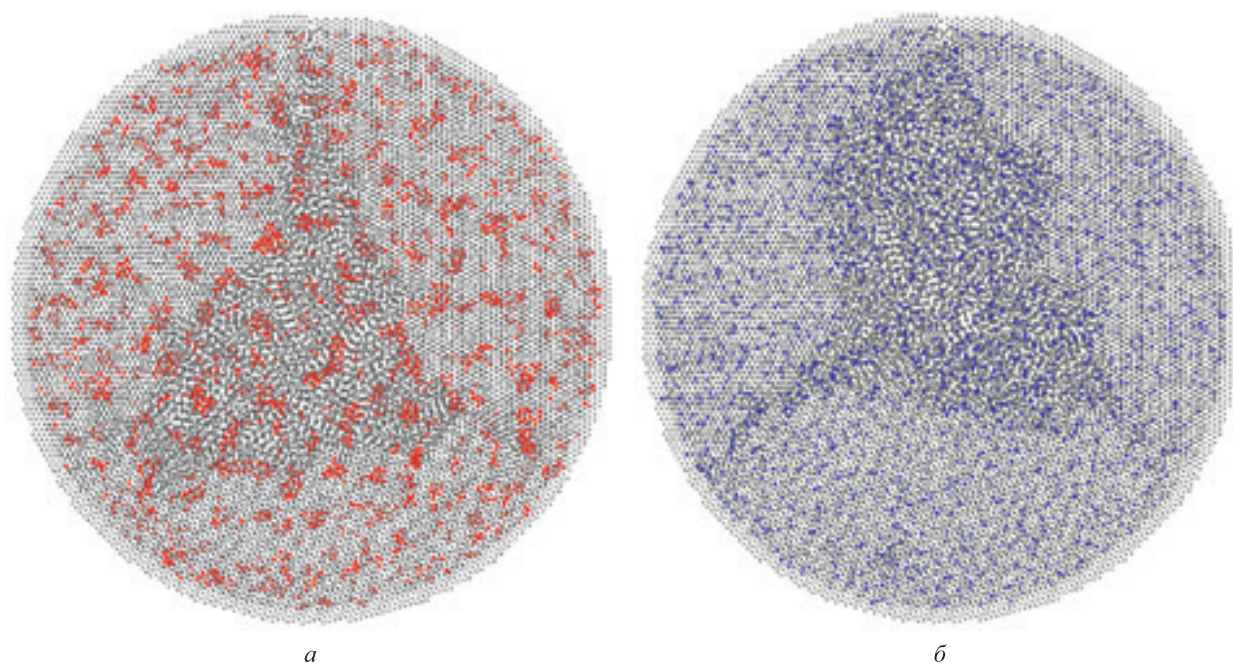


Рис. 3. Распределение примесных атомов углерода (красные атомы) (а) и кислорода (синие атомы) (б) при концентрации 10 % в области тройного стыка в никеле после моделирования кристаллизации при температуре 1200 К в течение 75 пс (а) и 200 пс (б)

Fig. 3. Distribution of carbon (red atoms) (a) and oxygen impurity atoms (blue atoms) (b) at concentration of 10 % in the area of triple interface in nickel after crystallization modeling at temperature of 1200 K for 75 ps (a) and 200 ps (b)

границ, определяя структуру тройного стыка. В случае примеси кислорода область тройного стыка остается аморфной даже после моделирования в течение 200 пс (рис. 3, б), что в несколько раз больше обычного времени кристаллизации всей расчетной ячейки в отсутствии примесей.

Следует отметить особенности кристаллизации при содержании в металлах различных примесей. Для углерода характерным было образование агрегатов при достаточно высоких концентрациях примесных атомов. Фронт кристаллизации задерживался на данных агрегатах (рис. 3, а). Атомы кислорода и азота не образовывали агрегатов, тем не менее, вследствие вызываемых ими искажений кристаллической решетки также сильно тормозили фронт кристаллизации.

На рис. 4 изображены зависимости средней скорости v движения фронта кристаллизации в рассматриваемой модели при температуре 1200 К от концентрации примесных атомов. Как видно, введение примесных атомов существенно снижает скорость кристаллизации, при введении 10 % атомов углерода и кислорода скорость движения фронта кристаллизации падает в несколько раз: в три раза для углерода и в 9 – 10 раз для кислорода.

Механизм торможения кристаллизации примесными атомами заключается во внесении ими разупорядочивающего эффекта при образовании атомной структуры. Положение примесных атомов в кристаллической решетке металла не является идеальным и согласующимся с положениями соседних потенциальных

ям в кристалле, которые занимают атомы. Напротив, примесные атомы вызывают локальную деформацию, искажение кристаллической решетки. Введение примесного атома в кристалл металла приводит к смещению соседних атомов. При этом наибольшие смещения атомов никеля вблизи примеси, находящейся в октаэдрической поре ГЦК решетки металла, в работе [20] наблюдали как раз для атомов кислорода.

В работе [26] предложена формула для расчета скорости движения фронта кристаллизации в металле:

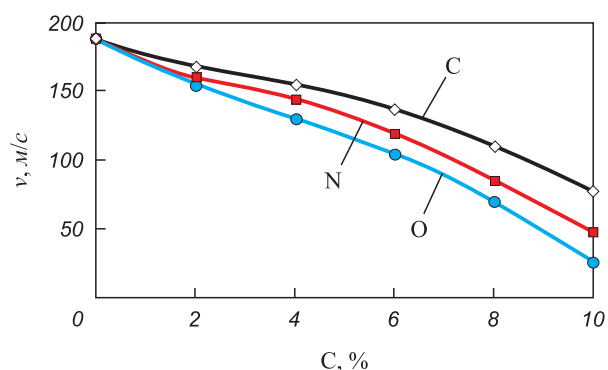


Рис. 4. Зависимости средней скорости движения фронта кристаллизации при кристаллизации в области тройного стыка в никеле при температуре 1200 К от концентрации примесных атомов углерода (С), азота (N) и кислорода (O)

Fig. 4. Dependence of average velocity of crystallization front during crystallization in the area of triple interface in nickel at temperature of 1200 K on concentration of impurity atoms of carbon (C), nitrogen (N), and oxygen (O)

$$v(T) = A \exp\left(-\frac{E}{kT}\right) \left[1 - \exp\left(-\frac{\Delta\mu}{kT}\right)\right], \quad (3)$$

где A – предэкспоненциальный множитель; E – энергия активации миграции атома в жидкой фазе; k – постоянная Больцмана; T – температура; m – масса атома; $\Delta\mu$ – разность свободной энергии металла, находящегося в жидком и кристаллическом состояниях, приходящейся на один атом.

С ростом концентрации примесных атомов в металле средние значения E и $\Delta\mu$, очевидно, будут изменяться: энергия активации E из-за относительно крепких связей примесных атомов с атомами металла будет повышаться, а величина $\Delta\mu$ из-за разупорядочивающего эффекта примесей – снижаться. И то, и другое приводит, согласно формуле (3), к снижению скорости движения фронта кристаллизации.

Выводы

Методом молекулярной динамики проведено исследование процесса кристаллизации в области тройного стыка границ зерен наклона в никеле в условиях наличия примесных атомов углерода, азота и кислорода. Область вблизи тройного стыка кристаллизуется в последнюю очередь. В этой области происходит концентрирование дефектов и свободного объема. Показано, что наличие примесей приводит к существенному замедлению скорости кристаллизации. При введении 10 % примесных атомов скорость движения фронта кристаллизации падает в несколько раз. Влияние примесей на скорость кристаллизации усиливается в направлении C–N–O, что связано с отличием деформации кристаллической решетки, которую вызывают примесные атомы: чем больше эта деформация, тем сильнее примесные атомы тормозят фронт кристаллизации. Для примесных атомов углерода характерным является образование агрегатов при достаточно высоких концентрациях. Фронт кристаллизации задерживается на этих агрегатах. Атомы кислорода и азота не образовывали агрегатов, тем не менее, вследствие вызываемых ими искажений кристаллической решетки также сильно тормозят фронт кристаллизации.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

- Palumbo G., Aust K.T. A coincident axial direction (CAD) approach to the structure of triple junctions in polycrystalline materials // *Scripta Metallurgica et Materialia*. 1990. Vol. 24. No. 9. P. 1771 – 1776.
- Bokstein B., Ivanov V., Oreshina O., Peteline A., Peteline S. Direct experimental observation of accelerated Zn diffusion along triple junctions in Al // *Materials Science and Engineering: A*. 2001. Vol. 302. No. 1. P. 151 – 153.
- Bokstein B.S., Rodin A.O., Straumal B.B. Diffusion controlled grain triple junctions wetting in metals // *Defect and Diffusion Forum*. 2011. Vol. 309-310. P. 231 – 238.
- Wegner M., Leuthold J., Peterlechner M., Song X., Divinski S.V., Wilde G. Grain boundary and triple junction diffusion in nanocrystalline copper // *Journal of Applied Physics*. 2014. Vol. 116. P. 093514-1 – 093514-7.
- Beke D.L., Lakatos A., Erdelyi G., Makovecz A., Langer G.A., Daroczi L., Vad K., Csik A. Investigation of grain boundary diffusion in thin films by SNMS technique // *Defect and Diffusion Forum*. 2011. Vol. 312-315. P. 1208 – 1215.
- Fedorov A.A., Gutkin M.Yu., Ovid'ko I.A. Triple junction diffusion and plastic flow in fine-grained materials // *Scripta Materialia*. 2002. Vol. 47. P. 51 – 55.
- Гусев А.И. Эффекты нанокристаллического состояния в компактных металлах и соединениях // *Успехи физических наук*. 1998. Т. 168. № 1. С. 55 – 83.
- Li M., Xu T. Topological and atomic scale characterization of grain boundary networks in polycrystalline and nanocrystalline materials // *Progress in Materials Science*. 2011. Vol. 56. No. 6. P. 864 – 899.
- Гуткин М.Ю., Овидько И.А. Предел текучести и пластическая деформация нанокристаллических материалов // *Успехи механики*. 2003. № 1. С. 68 – 125.
- Rodriguez P., Sundararaman D., Divakar R., Raghunathan V.S. Structure of grain boundaries in nanocrystalline and quasicrystalline materials // *Chemistry for Sustainable Development*. 2000. Vol. 8. P. 69 – 72.
- Schaefer H.-E., Wurschum R., Birringer R., Gleiter H. Structure of nanometer-sized polycrystalline iron investigated by positron lifetime spectroscopy // *Physical Review B*. 1988. Vol. 38. No. 14-15. Article 9545.
- Muktepavela F., Bakradze G., Sursaeva V. Micromechanical properties of grain boundaries and triple junctions in polycrystalline metal exhibiting grain-boundary sliding at 293 K // *Journal of Materials Science*. 2008. Vol. 43. P. 3848 – 3854.
- Poletaev G.M., Novoselova D.V., Zorya I.V., Starostenkov M.D. Formation of the excess free volume in triple junctions during nickel crystallization // *Physics of the Solid State*. 2018. Vol. 60. No. 5. P. 847 – 851.
- Psakhie S.G., Zolnikov K.P., Kryzhevich D.S., Korchuganov A.V. Key role of excess atomic volume in structural rearrangements at the front of moving partial dislocations in copper nanocrystals // *Scientific Reports*. 2019. Vol. 9. P. 3867-1 – 3867-6.
- Poletaev G., Zorya I., Rakitin R. Molecular dynamics study of migration mechanism of triple junctions of tilt boundaries in FCC metals // *Computational Materials Science*. 2018. Vol. 148. P. 184 – 189.
- Козлов Э.В., Конева Н.А., Попова Н.А. Зеренная структура, геометрически необходимые дислокации и частицы вторых фаз в поликристаллах микро- и мезоуровня // *Физическая мезомеханика*. 2009. Т. 12. № 4. С. 93 – 106.
- Гольдшмидт Х.Дж. Сплавы внедрения. – М.: Мир, 1971. – 424 с.
- Toth L.E. Transition metal carbides and nitrides. – New York: Academic Press, 1971. – 276 p.
- Cleri F., Rosato V. Tight-binding potentials for transition metals and alloys // *Physical Review B*. 1993. Vol. 48. No. 1. P. 22 – 33.
- Poletaev G.M., Zorya I.V., Rakitin R.Y., Iliina M.A. Interatomic potentials for describing impurity atoms of light elements in FCC metals // *Materials Physics and Mechanics*. 2019. Vol. 42. No. 4. P. 380 – 388.
- Poletaev G.M., Zorya I.V., Novoselova D.V., Starostenkov M.D. Molecular dynamics simulation of hydrogen atom diffusion in crystal lattice of fcc metals // *International Journal of Materials Research*. 2017. Vol. 108. No. 10. P. 785 – 790.
- Poletaev G.M., Zorya I.V., Starostenkov M.D., Rakitin R.Yu., Tabakov P.Ya. Molecular dynamics simulation of the migration of tilt grain boundaries in Ni and Ni3Al // *Journal of Experimental and Theoretical Physics*. 2019. Vol. 128. No. 1. P. 88 – 93.
- Ruda M., Farkas D., Garcia G. Atomistic simulations in the Fe–C system // *Computational Materials Science*. 2009. Vol. 45. No. 2. P. 550 – 560.

24. Vashishta P., Kalia R.K., Nakano A., Rino J.P. Interaction potentials for alumina and molecular dynamics simulations of amorphous and liquid alumina // *Journal of Applied Physics*. 2008. Vol. 103. No. 8. P. 083504.
25. San Miguel M.A., Sanz J.F. Molecular-dynamics simulations of liquid aluminum oxide // *Physical Review B*. 1998. Vol. 58. P. 2369 – 2371.
26. Chan W.-L., Averbach R.S., Cahill D.G., Ashkenazy Y. Solidification velocities in deeply undercooled silver // *Physical Review Letters*. 2009. Vol. 102. No. 9. Article 095701.

Поступила в редакцию 15 декабря 2019 г.
После доработки 27 января 2020 г.
Принята к публикации 28 января 2020 г.

IZVESTIYA VUZOV. CHERNAYA METALLURGIYA = IZVESTIYA. FERROUS METALLURGY. 2020. VOL. 63. NO. 5, pp. 357–363.

EFFECT OF LIGHT ELEMENTS IMPURITY ON PROCESS OF NICKEL CRYSTALLIZATION NEAR THE TRIPLE INTERFACE OF GRAIN BOUNDARIES: A MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION

I.V. Zorya¹, G.M. Poletaev², M.D. Starostenkov², R.Yu. Rakin³, D.V. Kokhanenko⁴

¹Siberian State Industrial University, Novokuznetsk, Kemerovo Region, Russia

²Altai State Technical University named after I.I. Polzunov, Barnaul, Altai Territory, Russia

³Altai State University, Barnaul, Altai Territory, Russia

⁴Financial University under the Government of the Russian Federation, Moscow, Russia

Abstract. Molecular dynamics method was used to study the effect of impurities of light elements of carbon, nitrogen and oxygen on crystallization process near the triple interface of grain boundaries in nickel. Tilt boundaries with misorientation axis $\langle 111 \rangle$ were considered as the grain boundaries. Interactions of nickel atoms with each other were described by many-particle Clery-Rosato potential constructed within the framework of the tight binding model. To describe interactions of atoms of light elements impurities with nickel atoms and atoms of impurities with each other, Morse pair potentials were used. Calculation cell had a shape of cylinder, axis of which coincided with the line of triple interface and the axis of grain misorientation. Periodic boundary conditions were imposed along the cylinder axis, and the atoms on side surface of cylinder were motionless. To simulate crystallization, calculation cell was melted by heating to a temperature well above the melting temperature of nickel. After the simulated polycrystal become liquid, the thermostat was turned on and held at a constant temperature below the melting temperature. Rigid boundary conditions on the lateral surface of cylindrical calculation cell in this case simulated crystallization fronts from three crystallization centers. The area near the triple interface had crystallized the last. In this area, defects and free volume were concentrated. Presence of impurities led to a significant slowdown in the rate of crystallization. With introduction of 10 % of impurity atoms, the rate of motion of crystallization front decreased several times. The effect of impurities on crystallization rate was enhanced in C–N–O direction, which is due to difference in crystal lattice deformation caused by impurity atoms. The greater this deformation was, the stronger was impurity atoms inhibit crystallization front. Formation of aggregates at fairly high concentrations was typical for impurity carbon atoms. Crystallization front had impeded on these aggregates. The oxygen and nitrogen atoms did not form aggregates. However, due to distortions of crystal lattice caused by them, they also strongly slowed down the crystallization front.

Keywords: molecular dynamics, metal, impurity, triple interface, crystallization, free volume.

DOI: 10.17073/0368-0797-2020-5-357-363

REFERENCES

- Palumbo G., Aust K.T. A coincident axial direction (CAD) approach to the structure of triple junctions in polycrystalline materials. *Scripta Metallurgica et Materialia*. 1990, vol. 24, no. 9, pp. 1771–1776.
- Bokstein B., Ivanov V., Oreshina O., Peteline A., Peteline S. Direct experimental observation of accelerated Zn diffusion along triple junctions in Al. *Materials Science and Engineering: A*. 2001, vol. 302, no. 1, pp. 151–153.
- Bokstein B.S., Rodin A.O., Straumal B.B. Diffusion controlled grain triple junctions wetting in metals. *Defect and Diffusion Forum*. 2011, vol. 309-310, pp. 231–238.
- Wegner M., Leuthold J., Peterlechner M., Song X., Divinski S.V., Wilde G. Grain boundary and triple junction diffusion in nanocrystalline copper. *Journal of Applied Physics*. 2014, vol. 116, pp. 093514-1–093514-7.
- Beke D.L., Lakatos A., Erdelyi G., Makovecz A., Langer G.A., Daroczi L., Vad K., Csik A. Investigation of grain boundary diffusion in thin films by SNMS technique. *Defect and Diffusion Forum*. 2011, vol. 312-315, pp. 1208–1215.
- Fedorov A.A., Gutkin M.Yu., Ovid'ko I.A. Triple junction diffusion and plastic flow in fine-grained materials. *Scripta Materialia*. 2002, vol. 47, pp. 51–55.
- Gusev A.I. Effects of the nanocrystalline state in solids. *Physico-Uspokhi*. 1998, vol. 41, no. 1, pp. 49–76.
- Li M., Xu T. Topological and atomic scale characterization of grain boundary networks in polycrystalline and nanocrystalline materials. *Progress in Materials Science*. 2011, vol. 56, no. 6, pp. 864–899.
- Gutkin M.Yu., Ovid'ko I.A. Yield strength and plastic deformation of nanocrystalline materials. *Uspokhi mekhaniki*. 2003, no. 1, pp. 68–125. (In Russ.).
- Rodriguez P., Sundararaman D., Divakar R., Raghunathan V.S. Structure of grain boundaries in nanocrystalline and quasicrystalline materials. *Chemistry for Sustainable Development*. 2000, vol. 8, pp. 69–72.
- Schaefer H.-E., Wurschum R., Birringer R., Gleiter H. Structure of nanometer-sized polycrystalline iron investigated by positron lifetime spectroscopy. *Physical Review B*. 1988, vol. 38, no. 14-15, article 9545.
- Muktepavela F., Bakradze G., Sursaeva V. Micromechanical properties of grain boundaries and triple junctions in polycrystalline metal exhibiting grain-boundary sliding at 293 K. *Journal of Materials Science*. 2008, vol. 43, pp. 3848–3854.
- Poletaev G.M., Novoselova D.V., Zorya I.V., Starostenkov M.D. Formation of the excess free volume in triple junctions during nickel crystallization. *Physics of the Solid State*. 2018, vol. 60, no. 5, pp. 847–851.
- Psakhie S.G., Zolnikov K.P., Kryzhevich D.S., Korchuganov A.V. Key role of excess atomic volume in structural rearrangements at the front of moving partial dislocations in copper nanocrystals. *Scientific Reports*. 2019, vol. 9, pp. 3867-1–3867-6.
- Poletaev G., Zorya I., Rakin R. Molecular dynamics study of migration mechanism of triple junctions of tilt boundaries in FCC metals. *Computational Materials Science*. 2018, vol. 148, pp. 184–189.
- Kozlov E.V., Koneva N.A., Popova N.A. Grain structure, geometrically necessary dislocations and second-phase particles in polycrystals of micro- and mesolevels. *Physical Mesomechanics*. 2009, vol. 12, no. 5-6, pp. 280-292.

17. Goldschmidt H.J. *Interstitial alloys*. London: Butterworth-Heinemann, 1967, 640 p. (Russ. ed.: Goldschmidt H.J. *Spilavy vnedreniya*. Moscow: Mir, 1971, 424 p.).
18. Toth L.E. *Transition metal carbides and nitrides*. New York: Academic Press, 1971, 276 p.
19. Cleri F., Rosato V. Tight-binding potentials for transition metals and alloys. *Physical Review B*. 1993, vol. 48, no. 1, pp. 22–33.
20. Poletaev G.M., Zorya I.V., Rakitin R.Y., Iliina M.A. Interatomic potentials for describing impurity atoms of light elements in FCC metals. *Materials Physics and Mechanics*. 2019, vol. 42, no. 4, pp. 380–388.
21. Poletaev G.M., Zorya I.V., Novoselova D.V., Starostenkov M.D. Molecular dynamics simulation of hydrogen atom diffusion in crystal lattice of fcc metals. *International Journal of Materials Research*. 2017, vol. 108, no. 10, pp. 785–790.
22. Poletaev G.M., Zorya I.V., Starostenkov M.D., Rakitin R.Yu., Tabakov P.Ya. Molecular dynamics simulation of the migration of tilt grain boundaries in Ni and Ni3Al. *Journal of Experimental and Theoretical Physics*. 2019, vol. 128, no. 1, pp. 88–93.
23. Ruda M., Farkas D., Garcia G. Atomistic simulations in the Fe–C system. *Computational Materials Science*. 2009, vol. 45, no. 2, pp. 550–560.
24. Vashishta P., Kalia R.K., Nakano A., Rino J.P. Interaction potentials for alumina and molecular dynamics simulations of amorphous and liquid alumina. *Journal of Applied Physics*. 2008, vol. 103, no. 8, pp. 083504.
25. San Miguel M.A., Sanz J.F. Molecular-dynamics simulations of liquid aluminum oxide. *Physical Review B*. 1998, vol. 58, pp. 2369–2371.
26. Chan W.-L., Averback R.S., Cahill D.G., Ashkenazy Y. Solidification velocities in deeply undercooled silver. *Physical Review Letters*. 2009, vol. 102, no. 9, article 095701.

Information about the authors:

I.V. Zorya, *Cand. Sci. (Eng.), Assist. Professor, Director the Institute of Architecture and Construction* (zorya.i@mail.ru)

G.M. Poletaev, *Dr. Sci. (Phys.-math.), Professor, Head of the Chair of Advanced Mathematics and Mathematical Modeling* (gmpoletaev@mail.ru)

M.D. Starostenkov, *Dr. Sci. (Phys.-math.), Professor, Head of the Chair of Physics* (genphys@mail.ru)

R.Yu. Rakitin, *Cand. Sci. (Phys.-math.), Assist. Professor, Director of College* (rakitinry@email.asu.ru)

D.V. Kokhanenko, *Cand. Sci. (Phys.-math.), Assist. Professor* (DVKokhanenko@fa.ru)

Received December 15, 2019

Revised January 27, 2020

Accepted January 28, 2020