

**МОДИФИКАЦИЯ
КИНЕТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ВИЛЬСОНА-ФРЕНКЕЛЯ
И АТОМИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
СКОРОСТИ ПЛАВЛЕНИЯ/КРИСТАЛЛИЗАЦИИ МЕТАЛЛОВ**

© 2023 г. *В.И. Мажукин, А.В. Шапранов, О.Н. Королева*,
А.В. Мажукин*

Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН
*koroleva.on@mail.ru

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, проект № 18-11-00318.

DOI: 10.20948/mm-2023-11-08

В рамках кинетико-атомистического подхода предложен новый подход к построению температурной зависимости стационарной скорости распространения межфазной границы «твёрдое тело–жидкость» в металлах (алюминий, медь и железо) с различной кристаллографической ориентацией. Рассматриваемый температурный диапазон включает область предельно допустимых значений перегрева / переохлаждения для каждого из металлов. Выполнена существенная модификация известной кинетической модели с диффузионным ограничением Вильсона-Френкеля, которая использовалась для построения функции отклика. Проведено атомистическое моделирование процессов плавления / кристаллизации алюминия, меди и железа в рассматриваемом температурном диапазоне с использованием трех потенциалов взаимодействия семейства потенциалов «погруженного атома». Из сопоставления результатов моделирования с данными модифицированной кинетической модели построена функция отклика скорости интерфейса в области предельно допустимых значений перегрева / переохлаждения в металлах с использованием критерия наименьших квадратов. Использование в расчётах модифицированной кинетической модели Вильсона-Френкеля существенно увеличивает точность функции отклика в рассматриваемом температурном диапазоне. Полученная температурная зависимость скорости движения межфазной границы является диффузионно-ограниченной и описывается одним и тем же уравнением для каждого металла в рассматриваемом температурном диапазоне.

Ключевые слова: кинетическая модель, атомистическое моделирование, межфазная граница твёрдое тело–жидкость, скорость движения межфазной границы, перегрев / переохлаждение.

**MODIFICATION OF THE WILSON-FRANKEL KINETIC MODEL
AND ATOMISTIC SIMULATION
OF THE RATE OF MELTING / CRYSTALLIZATION OF METALS***V.I. Mazhukin, A.V. Shapranov, O.N. Koroleva, A.V. Mazhukin*

Keldysh Institute of Applied Mathematics of RAS

Within the framework of the kinetic-atomistic approach, a new approach is proposed for constructing the temperature dependence of the stationary velocity of propagation of the solid-liquid interface in metals: aluminum, copper and iron with different crystallographic orientations. The considered temperature range includes the range of maximum allowable overheating/overcooling values for each of the metals. A significant modification of the well-known kinetic model with the Wilson-Frenkel diffusion constraint, which is used to construct the response function, has been made. An atomistic simulation of the processes of melting / crystallization of metals aluminum, copper and iron was carried out over the entire temperature range using three interaction potentials of the "embedded atom" family. By comparing the simulation results with the data of the modified kinetic model, the response function of the interface velocity in the range of maximum allowable overheating/overcooling values in metals is constructed using the least squares criterion. The use of the modified Wilson-Frenkel kinetic model in calculations significantly improves the accuracy of the response function over the considered temperature range. The resulting temperature dependence of the interface velocity is diffusion-limited and is described by the same equation for each metal over the considered temperature range.

Keywords: kinetic model, atomistic modeling, solid-liquid interface, velocity of the interface, overheating/overcooling.

1. Введение

Механизмы плавления твердого тела и затвердевания жидкости относятся к активно изучаемым [1] явлениям. В последние годы обширные экспериментальные [2–4] и теоретические исследования в сочетании с моделированием плавления/кристаллизации твердых тел [5–12] значительно расширили понимание природы этого явления. Известны два механизма плавления/кристаллизации твердых тел – жидкости: гетерогенный (поверхностный или фронтальный) и гомогенный (объемный). В первом случае, плавление твердых тел и затвердевание жидкости относятся к фазовым превращениям I-го рода, в которых в отличие от гомогенного механизма, явления гетерогенного плавления и затвердевания пространственно всегда неоднородны. Им соответствует движение сплошной среды с поверхностью сильного разрыва, на которой скачком изменяются механические, термодинамические, теплофизические и оптические характеристики вещества. Гомоген-

ные механизмы плавления/кристаллизации, характеризующиеся зарождением новой фазы (жидкости/кристалла) в некотором объеме перегретого кристалла или переохлажденного расплава, заслуживают отдельного рассмотрения. В данной статье будут рассматриваться механизмы гетерогенного плавления.

В рамках классической термодинамики [13] в гетерогенном плавлении/кристаллизации фазовое равновесие, достигается при определенной (равновесной) температуре T_m , которой на фазовом фронте соответствует равенство свободных энергий Гиббса твердого и жидкого состояний.

Отклонение температуры фронта T_{sl} от равновесного значения T_m в сторону увеличения $T_{sl} > T_m$ или уменьшения $T_{sl} < T_m$ вызывает перегрев/переохлаждение фронта и приводит к возникновению движения межфазной границы (межфазная граница «твердое тело-жидкость» - SLI). Скорость движения SLI представляет собой функцию отклика $v(T_{sl})$ интерфейса на перегрев твердой или переохлаждение жидкой фазы. Величины предельного перегрева и переохлаждения исходной фазы связаны со скоростью движения фазового фронта $v(T_{sl})$. Переохлажденные и перегретые состояния в исходной фазе в области фазового перехода плавление/кристаллизация находят проявление в явлении теплового гистерезиса, позволяющего получить оценки значений предельного перегрева и переохлаждения исходной фазы [7,8,14,15]. Скорость движения межфазной границы $v(T_{sl})$ является основополагающей величиной, описывающей процессы кристаллизации и плавления, и играет фундаментальную роль в материаловедении [5,6].

Значительная часть динамики плавления и роста кристаллов из расплава определяется переносом тепла от движущейся границы раздела. Однако имеются обстоятельства ограничивающего характера, при которых темпы роста регулируются не только макроскопическим потоком тепла. Одним из таких обстоятельств является возникновение быстрых фазовых переходов I-го рода, характерных для импульсного воздействия концентрированных потоков энергии на материалы, процессы которых имеют свою специфику [4,5]. Быстрые фазовые переходы сопровождаются появлением метастабильных сильно перегретых/переохлажденных состояний [7,8,14,15], приводящих к ряду неустойчивостей интерфейса.

В то же время широкое применение лазеров с ультракороткими (пикофемтосекундный диапазон излучения) импульсами для обработки различных материалов [12,16] стимулируют повышенный интерес к быстрым фазовым переходам I-го рода. Анализ процессов, вызванных импульсным лазерным воздействием, приводит к рассмотрению ряда важных проблем

фундаментального плана, к которым при высоких скоростях нагрева относятся особенности гомогенного и гетерогенного механизмов плавления / затвердевания и испарения, а также связанные с ними предельные перегревы и переохлаждения вещества. Понимание процессов плавления/затвердевания представляет также большой интерес для прикладных проблем фотоники [17], сверхбыстрой лазерной микрообработки материалов [16,18], генерации наночастиц и наноструктур [19,20] и др.

В теоретических исследованиях мобильности межфазного фронта твердое тело–жидкость и связанной с ней кинетики роста кристалла и расплава широкое применение находят кинетические модели [21–23] и атомистическое моделирование [24–26]. В большинстве кинетических моделей исследования температурной зависимости стационарной скорости $v(T_{sl})$ по-прежнему проводятся преимущественно в температурном диапазоне кристаллизации. Поэтому для ряда материалов актуальной проблемой остаётся определение температурной зависимости скорости перемещения SLI $v(T_{sl})$ во всём диапазоне перегрева: от минимального значения вблизи точки плавления T_m , до максимального вблизи спинодали.

Основным инструментом исследования кинетической скорости плавления/кристаллизации в области предельно допустимых значений перегрева/переохлаждения является атомистическое моделирование, результаты которого сопоставляются с данными кинетических моделей. Достижение приемлемого совпадения осуществляется введением в модели соответствующих параметров коррекции [24–27].

Основной целью представленной работы является построение модифицированной кинетической модели с диффузионным ограничением [28–30] с последующим её применением к металлам: алюминий (Al), медь (Cu), железо (Fe).

Разработанная модель ориентирована на описание мобильности границы твердое тело–жидкость в различных металлических кристаллах (Al, Cu – гранецентрированная кубическая решетка (ГЦК)) и (Fe – объемно-центрированная кубическая решетка (ОЦК)) в широком диапазоне температур, включающем области предельно допустимых значений перегрева/переохлаждения. Детальное исследование мобильности кинетических свойств SLI металлов с помощью атомистического моделирования с последующим сопоставлением полученных результатов с данными разработанной кинетической модели позволит построить для рассматриваемых металлов аналитические температурные зависимости стационарной скорости $v(T_{sl})$ в области предельно допустимых значений перегрева/переохлаждения.

2. Кинетическое описание мобильности SLI

Кинетические теории, отображающие температурные зависимости мобильности SLI $v_{sl}=v(T_{sl})$, основываются на различных физических явлениях. Наиболее известными являются классическая теория Вильсона – Френкеля (Wilson, Frenkel - WF) [28–30] с диффузионным механизмом контроля кинетики межфазной границы, кинетическая модель со столкновительно-тепловым механизмом (Broughton, Gilmer and Jackson - BGJ) [31,32] и кинетическая теория функционала плотности (density functional theory - DFT) [23,33], учитывающая влияние изменения плотности.

В основу кинетической теории WF [28–30] положена гипотеза о том, что плавление или затвердевание происходит через некоторое промежуточное, или переходное состояние, поэтому её часто называют теорией переходного состояния. В этой теории скорость SLI контролируется механизмом диффузионного ограничения, основанного на предположении о необходимости преодоления атомами (молекулами) диффузионного барьера при переходе из жидкости в твердую фазу. Переход сопровождается значительной структурной перестройкой интерфейса. Скорость процесса кристаллизации при этом полагается пропорциональной коэффициенту диффузии, который обычно представляют в форме уравнения Аррениуса

$$D = D_0 \exp\left(-Q^{WF} / (k_B T_{sl})\right), \quad (1)$$

где Q^{WF} – энергия активации для диффузионного движения в жидкости, k_B – постоянная Больцмана, $k_B T$ – средняя тепловая энергия для одного атома, D_0 – предэкспонента, имеющая размерность коэффициента диффузии [м²/сек].

Температурная зависимость скорости фронта кристаллизации/плавления $v(T_{sl})$ в модели с диффузионным ограничением в обобщённом виде с учетом (1) выражается уравнением:

$$\begin{aligned} v(T_{sl}) &= \frac{af_0}{\lambda^2} D \left[1 - \exp\left(-\frac{\Delta G}{k_B T_{sl}}\right) \right] = \\ &= \frac{a^2 f_0}{\lambda^2} \frac{D_0}{a} \exp\left(-\frac{Q^{WF}}{k_B T_{sl}}\right) \cdot \left[1 - \exp\left(-\frac{L_m}{k_B T_m} \frac{\Delta T}{T_{sl}}\right) \right] = \\ &= C_{\langle hkl \rangle}^{WF} \exp\left(-\frac{Q^{WF}}{k_B T_{sl}}\right) \cdot \left[1 - \exp\left(-\frac{L_m}{k_B T_m} \frac{\Delta T}{T_{sl}}\right) \right], \end{aligned} \quad (2)$$

где $C_{\langle hkl \rangle}^{WF} = [(a^2/\lambda^2)f_0] \cdot D_0/a$ [м/сек], a – межатомное расстояние, λ – средняя

длина свободного пробега атомов для этого процесса, предполагается, что она пропорциональна параметру решетки, a : $\lambda < a$, f_0 – коэффициент эффективности (константа порядка единицы $f_0 < 1$), характеризующий долю столкновений атомов жидкости с твердым веществом, приводящим к кристаллизации, $\langle hkl \rangle$ – индексы, характеризующие анизотропию коэффициента $C_{\langle hkl \rangle}^{WF}$. Величина $C_{\langle hkl \rangle}^{WF}$, зависящая от кристаллографической ориентации интерфейса [34], и энергия активации Q^{WF} не известны и подлежат определению.

Теория BGJ [31] использует в качестве ограничения скорости SLI частоту теплового столкновения атомов с межфазной границей [35]. Эта теория была представлена авторами как модификация более ранней теории WF. Мотивацией послужили результаты молекулярно-динамического (МД) моделирования [31], выполненного с неметаллоподобным потенциалом Леннарда–Джонса, показавшим, что рост кристаллов одноатомных систем может не во всех случаях ограничиваться диффузией. В частности, в области очень низких температур коэффициент диффузии стремится к нулю, но согласно результатам моделирования скорость SLI всё еще остаётся конечной и модель WF оказывается несправедливой. Следуя гипотезе [35] о том, что затвердевание одноатомных металлов ограничивается только частотой столкновений атомов расплава с поверхностью кристалла, авторы модели BGJ [31] заменили диффузионный член в (2) средней тепловой скоростью атомов $v_T = \sqrt{3k_B T_{sl} / m}$

$$\begin{aligned} v(T_{sl}) &= \frac{a}{\lambda} f_0 v_T \left[1 - \exp\left(-\frac{L_m}{k_B T_m} \frac{\Delta T}{T_{sl}}\right) \right] = \\ &= C_{\langle hkl \rangle}^{BGJ} \sqrt{\frac{3k_B T_{sl}}{m}} \left[1 - \exp\left(-\frac{L_m}{k_B T_m} \frac{\Delta T}{T_{sl}}\right) \right], \end{aligned} \quad (3)$$

где $C_{\langle hkl \rangle}^{BGJ} = (a/\lambda) f_0$ – безразмерный коэффициент, m – атомная масса.

Возможность использования рассматриваемых кинетических моделей WF, BGJ, DFT в области значений, близких к температуре плавления, для описания процесса кристаллизации рассматривалась в более поздних работах [26,35,37], в которых атомистическое моделирование показало результаты с приемлемой точностью.

С разработкой более точных многочастичных потенциалов для металлов был проведен ряд МД исследований роста кристаллов в чистых металлах в различных диапазонах температур переохлаждения. Атомистическое моделирование [36, 38] показало, что в области значений, близких к темпе-

ратуре плавления, процесс кристаллизации с приемлемой точностью может отображаться кинетическими моделями с диффузионным (2) и столкновительно-тепловым ограничениями (3), а также моделями DFT [23,33]. Для глубоких переохлаждений предпочтительно [36,38] использование кинетической модели со столкновительно-тепловым ограничением [31] и модели аррениусовского типа [38]. В области промежуточных переохлаждений на уровне $\sim 0.7T_m$ преимущество сохраняется за моделью переходного состояния с диффузионным ограничением WF. В работе [39] специально разработанный полуэмпирический потенциал был использован для моделирования фазового превращения в неупорядоченной однокомпонентной системе. Моделирование показало, что теория WF удовлетворительно описывает результаты МД моделирования миграции границы раздела в интервале температур от $0.55T_m$ до T_m , тогда как теория BGJ менее точна в описании температурной зависимости скорости SLI в том же интервале температур. Ниже $0.55T_m$ ни одна из существующих теорий не способна воспроизвести температурную зависимость скорости интерфейса.

Значительно меньшее число работ [27,40,49,50] посвящено анализу применения кинетических моделей (2), (3) для определения скорости перемещения межфазной границы $v(T_{sl})$ не только в области кристаллизации, но и плавления с учётом сильного перегрева твердой фазы.

Температурная зависимость стационарной скорости движения SLI в металлах при предельно допустимых значениях перегрева/переохлаждения, играет важнейшую роль в континуальных моделях, использующихся в исследованиях гетерогенных механизмов плавления и кристаллизации [18, 22].

2. Модифицированная кинетическая модель

В теории переходного состояния [41] предполагается, что кристаллизация и плавление протекают через неопределенное переходное состояние, для которого характерно наличие процессов с двумя скоростями: одна описывает скорость плавления $R_{s \rightarrow \ell}$, а другая – скорость затвердевания $R_{\ell \rightarrow s}$. Разница этих двух скоростей дает скорость межфазной границы твердое тело–жидкость

$$v_{sl} = R_{s \rightarrow \ell} - R_{\ell \rightarrow s}. \quad (4)$$

Промежуточное состояние (промежуточная фаза), через которое осуществляются прямой и обратный переход, обладает некоторой энергией Гиббса G^* . Движущей силой этих переходов является разность энергий Гиббса G^* и соответствующей фазы G_s , G_ℓ , стоящих в показателе аррениусовой экспоненты

$$R_{s \rightarrow \ell} = \chi_s \exp[-(G^* - G_s)/k_B T], \quad R_{\ell \rightarrow s} = \chi_\ell \exp[-(G^* - G_\ell)/k_B T]. \quad (5)$$

Здесь k_B – постоянная Больцмана, T – температура, χ_s , χ_ℓ – коэффициенты пропорциональности, которые в классической теории полагаются равными между собой $\chi_s = \chi_\ell = \chi$. Тогда скорость межфазной границы имеет вид

$$v_{s\ell} = \chi \exp\left[-\frac{G^* - G_\ell}{k_B T}\right] \left\{ \exp\left[\frac{G_s - G_\ell}{k_B T}\right] - 1 \right\}. \quad (6)$$

Величина энергетического барьера, стоящая в экспоненте перед фигурной скобкой, может быть интерпретирована как энергия активации процесса, ограничивающего скорость плавления/кристаллизации. В феноменологической теории Вильсона-Френкеля [28-30] этот ограничивающий процесс ассоциируется с диффузией атомов в жидкости, доставляющей атомы к фронту кристаллизации:

$$v_{s\ell} = \chi \exp\left[-\frac{Q}{k_B T}\right] \left\{ \exp\left[\frac{G_s - G_\ell}{k_B T}\right] - 1 \right\}. \quad (7)$$

После выполнения термодинамических преобразований разности энергий Гиббса твердой и жидкой фаз получается окончательное выражение, основной вывод теории переходного состояния применительно к процессам плавления/кристаллизации с диффузионным ограничением:

$$v(T_{s\ell}) = \chi \exp\left[-\frac{Q}{k_B T_{s\ell}}\right] \left\{ \exp\left[\frac{L_m(T_{s\ell} - T_m)}{T_{s\ell} T_m}\right] - 1 \right\}. \quad (8)$$

Здесь T_m – равновесная температура плавления, $T_{s\ell}$ – температура фронта плавления, L_m – скрытая теплота плавления при температуре T_m .

Уравнение (8) показало приемлемое совпадение скорости в области кристаллизации и плавления в небольшой окрестности равновесной температуры T_m с результатами МД моделирования и экспериментальными данными. Однако в широком температурном диапазоне, в котором процессы плавления/кристаллизации могут протекать с предельно допустимыми значениями перегрева/переохлаждения, приемлемого согласия получить не удалось, поскольку кинетика плавления/кристаллизации вдали от температуры T_m существенно отличается от кинетики в окрестности T_m .

Для преодоления данного затруднения возникла необходимость модификации кинетической модели Вильсона-Френкеля [28-30] с диффузионным ограничением (8). В основу предлагаемой модификации положено предположение об асимметричности процессов прямого и обратного переходов (5) в переходном состоянии. Простейшая форма асимметрии может быть пред-

ставлена в виде отсутствия равенства коэффициентов пропорциональности $\chi_s \neq \chi_\ell$, и отношения χ_s/χ_ℓ в виде функциональной зависимости от температуры $f(T_{sl})$. С учётом отношения χ_s/χ_ℓ выражение для скорости (6) можно представить в виде

$$v_{sl} = \chi_\ell \exp\left[-\frac{G^* - G_\ell}{k_B T}\right] \left\{ \frac{\chi_s}{\chi_\ell} \exp\left[\frac{G_s - G_\ell}{k_B T}\right] - 1 \right\}. \quad (9)$$

Или, повторив приведенные выше рассуждения,

$$v(T_{sl}) = \chi_\ell \exp\left[-\frac{Q}{k_B T_{sl}}\right] \left\{ \frac{\chi_s}{\chi_\ell} \exp\left[\frac{L_m(T_{sl} - T_m)}{k_B T_{sl} T_m}\right] - 1 \right\}. \quad (10)$$

При определении функциональной зависимости $\chi_s/\chi_\ell = f(T_{sl})$ воспользуемся следующими соображениями. Отношение χ_s/χ_ℓ в общем случае отлично от единицы. Но в состоянии равновесия, когда выполняются равенства $T_{sl} = T_m$ и соответственно $G_s = G_\ell$, выражения в фигурных скобках в (9), (10) должны обращаться в нуль. Это означает, что функциональная зависимость $\chi_s/\chi_\ell = f(T_{sl})$ должна в состоянии равновесия принимать значение, равное единице. В качестве такой зависимости, удовлетворяющей условию $\chi_s/\chi_\ell = 1$, можно воспользоваться соотношением

$$\frac{\chi_s}{\chi_\ell} = \exp\left[\alpha \frac{T_{sl} - T_m}{T_m}\right], \quad (11)$$

где α – безразмерный коэффициент, подлежащий определению.

С учётом выражения (11) модифицированная модель с диффузионным ограничением принимает окончательный вид:

$$v(T_{sl}) = \chi_\ell \exp\left[-\frac{Q}{k_B T_{sl}}\right] \left\{ \exp\left[\left(\frac{L_m}{k_B T_{sl}} + \alpha\right) \frac{T_{sl} - T_m}{T_m}\right] - 1 \right\}, \quad (12)$$

где χ_ℓ [м/сек] – размерная константа, зависящая от кристаллографической ориентации интерфейса, подлежащая определению.

Модифицированное уравнение (12) содержит 3 константы χ_ℓ , Q , α , значения которых определяются из сопоставления с результатами МД расчетов с последующим применением метода наименьших квадратов [42].

3. Постановка вычислительного эксперимента (ВЭ) и моделирование

Определение стационарной температурной зависимости кинетической скорости SLI в диапазоне предельно допустимых значений перегрева/переохлаждения осуществлялось с помощью постановки вычислительного эксперимента, состоящего из большой серии МД расчетов.

В моделировании были задействованы металлы двух типов: Al и Cu с ГЦК решеткой и Fe с ОЦК решеткой. Al рассматривался в двух кристаллографических плоскостях: $\langle 100 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$. В основу атомистических моделей положено модельное представление о многоатомной молекулярной системе, в которой все атомы представлены материальными точками, движение которых описывается в классическом случае уравнениями Ньютона. В итоге эволюция ансамбля из N точечных частиц определяется системой из $2N$ обыкновенных дифференциальных уравнений. Взаимодействие между частицами описывается различными многочастичными потенциалами «погруженного атома» (EAM): для алюминия [43], меди [44] и для железа [45] с параметризацией [46]. Для интегрирования этой системы уравнений для всех N частиц требуется знание координат и скоростей $(r_i, v_i)|_{t=0}$ в начальный момент времени $t=0$. Расчетная область задавалась в форме параллелепипеда с размерами $41 \times 5 \times 5$ нм, что соответствует $20 \times 10 \times 10$ элементарных ячеек, содержащая 57 600 частиц. На всех трех пространственных направлениях на границах расчетной области ставились периодические граничные условия, т.е. моделируемый объект представлял собой бесконечный монокристалл металла.

Начальное состояние расчетной области для моделирования процесса гетерогенного плавления металла представляет собой твердотельную структуру со слоем жидкости в средней части расчетной области, в которой кристаллическая и жидкая фазы разделены двумя плоскими интерфейсами. Для исследования процесса плавления жидкая фаза занимает примерно 18% объема расчетной области, для исследования процесса кристаллизации ~ 80%. В дальнейшем измерялась непосредственно скорость интерфейса в зависимости от его температуры.

В ходе расчетов с помощью термостата во всей расчетной области устанавливалось и поддерживалось фиксированное значение температуры в течение всего численного эксперимента. Одновременно баростатом удерживалось постоянное значение внешнего давления. Этим исключалось обратное влияние выделения/поглощения скрытой теплоты плавления на локальную температуру на фронтах. В результате процесс гетерогенного плавления/кристаллизации быстро выходит на стационарный режим, и изменение количества новой фазы происходит практически по линейному закону. Отслеживание положения фронтов плавления/кристаллизации осуществлялось с помощью параметра порядка.

Под предельно допустимыми значениями перегрева/переохлаждения подразумеваются значения температур, при которых в случае перегрева исходный кристалл ещё сохраняет механическую устойчивость, потеря кото-

рой связана с зарождением гомогенного плавления. Для стационарных условий воздействия значение предельного перегрева при $T_{st} \approx 1.25T_m$, что находится в хорошем соответствии с результатами работ [7,14,15]. При нестационарном воздействии предельная величина перегрева достигала значения $1.5T_m$ и более, что совпадает с оценками [47].

В случае переохлаждения предельной температурой является температура, при которой переохлажденный расплав всё ещё остается чистой жидкостью. Ограничение глубокого захода в метастабильную переохлажденную область связано с образованием промежуточной (интерстициальной) фазы, для которой параметр порядка оказывается существенно больше, чем у жидкости, но значительно меньше, чем у нормального кристалла. Появление интерстициальной фазы свидетельствует о начале процесса стеклования. Температура стеклования для большинства металлов находится в области $T_c \approx (0.3 \div 0.5)T_m$ [34]. Варианты расчетов, в которых появлялась заметная доля интерстициальной фазы, из рассмотрения исключались.

4. Результаты атомистического моделирования

В результате проведенного МД моделирования было получено дискретное множество значений скорости фазового фронта $v_{\langle hkl \rangle} = v_{\langle hkl \rangle, i}$ при значениях температур $T_{st} = T_i$ ($i=0 \div n$, n – количество дискретных значений, полученных из МД моделирования). Скорости фазового фронта $v_{\langle hkl \rangle, i}$ получены в зависимости от кристаллографической ориентации интерфейса: для Al – $v_{\langle 100 \rangle, i}$, $v_{\langle 111 \rangle, i}$, для Cu и Fe – $v_{\langle 100 \rangle, i}$ в диапазоне предельных значений перегрева/переохлаждения. Пары дискретных значений $\{v_{\langle hkl \rangle, i}, T_i\}$ на рис.1, 2 отмечены маркерами.

4.1. Построение аналитических зависимостей $v_{\langle hkl \rangle}(T_{st})$. Построение аналитических зависимостей осуществлялось при помощи метода наименьших квадратов.

Дискретное множество значений $\{v_{\langle hkl \rangle, i}, T_i\}$, полученное из МД моделирования, сопоставлялось с результатами модифицированной кинетической модели (12). При сопоставлении учитывалось, что уравнение (12) содержит два теплофизических параметра – равновесную температуру плавления T_m и скрытую теплоту плавления L_m , значения которых в силу особенностей используемых потенциалов взаимодействия в МД расчетах могут несколько отличаться от справочных. Для корректного сравнения МД данных с кинетическими в уравнении (12) использовались значения T_m и L_m , определенные для всех рассматриваемых металлов Al, Cu, Fe из дополнительных МД расчетов, выполненных по методике из [48] с теми же потен-

циалами [43-46]. Результаты расчетов T_m и L_m для внешнего давления $P=0$ приведены в табл.1.

Таблица 1. Равновесная температура плавления T_m и скрытая теплота плавления L_m из МД расчетов.

Металл	T_m , [K]	L_m , [кДж/моль]
Al	949	8.9
Cu	1315	11.48
Fe	1775	15.57

Полное совмещение дискретного множества значений $\{v_{\langle hkl \rangle, i}, T_i\}$ с результатами уравнения (12) $v_{\langle hkl \rangle}(T_{sl})$ достигалось с помощью трехпараметрической χ_f , Q , α аппроксимации.

Таблица 2. Значения параметров χ_f , Q , α в трехпараметрической аппроксимации скорости фазового фронта $v_{\langle hkl \rangle}(T_{sl})$ и значения критерия наименьших квадратов σ .

Металл	Модифицированная модель				Работа [49]		$\sigma-\sigma^*$ / σ [%]
	χ_f , [м/сек]	Q , [эВ]	α	σ , [м/сек]	σ^* , [м/сек]		
Al _[100]	269.93	0.02510	3.6930	5.513	5.82	5.57	
Al _[111]	82.97	0.0	6.5076	7.105			
Cu	169.47	0.002317	4.585845	7.961	10.70	34.41	
Fe	558.706	0.1154158	3.6309	3.150	3.87	22.86	

Наилучшее согласование с погрешностью, не превышающей несколько процентов, во всем температурном диапазоне было достигнуто при значениях аппроксимирующих параметров χ_f , Q , α в (12), представленных в табл.2. Для их определения использовалась процедура, содержащая критерий наименьших квадратов σ [42], минимизирующий отклонение значений уравнения (12) $v_{\langle hkl \rangle}(T_i)$ с выбранными параметрами от результатов МД моделирования $\{v_{\langle hkl \rangle, i}, T_i\}$

$$\sigma = \sqrt{(1/n+1) \sum_{i=0}^n (v_{\langle hkl \rangle}(T_i) - v_{\langle hkl \rangle, i})^2} \rightarrow \min.$$

В табл.2 также приведены значения критерия наименьших квадратов σ и σ^* , вычисленные для каждого из потенциалов взаимодействия в настоящей работе и в [49]. В [49] для оригинальных моделей WF (2) [28-30] были получены аппроксимации скорости фазового фронта $v_{\langle hkl \rangle}(T_{sl})$ и значения критерия наименьших квадратов σ^* для металлов Al, Cu, Fe. Модификация модели WF (12) в настоящей работе позволила повысить точность получен-

ных результатов в соответствии с критерием наименьших квадратов [42] по сравнению с результатами [49], что особенно заметно для Cu и Fe. Средне-квадратичное отклонение σ в представляемых вычислениях уменьшилось на 34.41% для Cu и на 22.86% для Fe (табл.2) по сравнению со значениями среднеквадратичного отклонения σ^* в [49].

Предлагаемый подход применялся в [50] для модификации модели WF с целью получения температурной зависимости скорости SLI в кремнии (Si). Известно, что важнейшей проблемой в МД моделировании является проблема выбора потенциала взаимодействия частиц. Особенно остро эта проблема стоит для Si. В [50] расчеты проводились для потенциалов Стиллинджера-Вебера [51] и KINS (Kumagai, Izumi, Nara, Sakai - KINS) [52]. Моделирование показало, что модификация модели WF позволила получить практически полное совпадение температурной зависимости скорости интерфейса и результатов МД моделирования для обоих потенциалов. Результаты для металлов Al, Cu, Fe, полученные в данной работе, в сочетании с ранее полученными результатами для Si [50] позволили сформулировать единую модель для аппроксимации температурной зависимости скорости SLI (12) для металлов и полупроводников, что является важным шагом для обеспечения континуальных моделей кинетическими свойствами.

На рис.1 представлены зависимости скорости SLI $v_{(hkl)}(T_i)$ в кристаллографической плоскости $\langle 100 \rangle$ Al, Cu, Fe и зависимости скорости SLI $v_{(hkl)}(T_i)$ в кристаллографических плоскостях $\langle 100 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$ для Al (рис.2) при внешнем давлении $P = 0$.

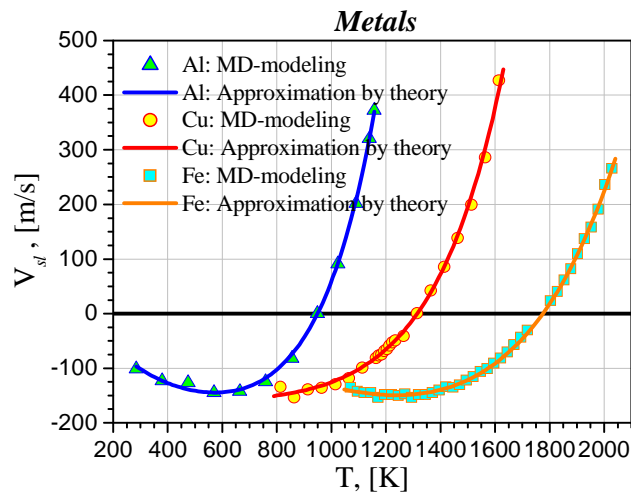


Рис.1. Зависимости стационарной скорости SLI для Al, Cu, Fe от температуры перегрева исходной фазы в кристаллографической плоскости $\langle 100 \rangle$.

Отметим, что при моделировании процесса кристаллизации алюминия в области значительного переохлаждения интерфейса с ориентацией $\langle 111 \rangle$ ощутимо возрастает вероятность появления дефектов упаковки. Их накопление приводит к искривлению исходной кристаллографической плоскости, и дальнейшее распространение фронта уже идет в направлении, отличающемся от $\langle 111 \rangle$. По этой причине в кристаллографическом направлении $\langle 111 \rangle$ не удалось зайти в область переохлаждения ниже $0.6T_m$.

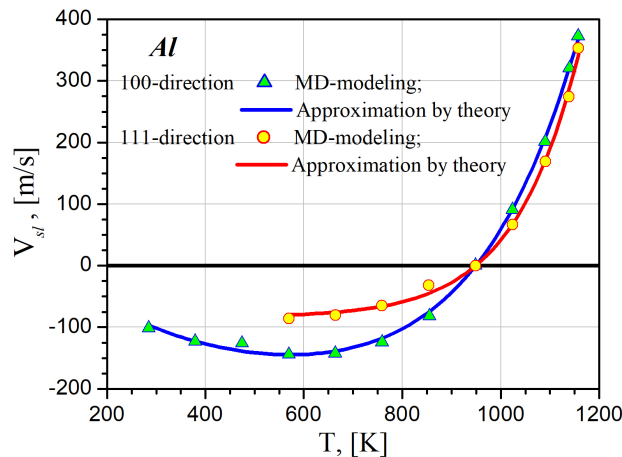


Рис.2. Зависимость скорости SLI для Al в кристаллографических плоскостях $\langle 100 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$ от температуры на фазовом фронте T_{sl} при $P=0$.

5. Краткий анализ полученных результатов

Полученные кривые $v_{\langle 100 \rangle}(T_{sl})$, характеризующие подвижность SLI для рассматриваемых ГЦК и ОЦК металлов в кристаллографической плоскости $\langle 100 \rangle$, имеют большую общность. Ветви плавления в диапазоне $T_m \leq T_{sl} \leq 1.25T_m$ имеют экспоненциальное поведение по мере нарастания перегрева, достигая максимальных значений $v_{\langle 100 \rangle}(T_{sl}) \sim 300\text{--}350$ м/сек. Процесс кристаллизации в области переохлаждения $0.5T_m \leq T_{sl} \leq T_m$ протекает более сложно. Скорость кристаллизации $v(T_{sl})$ на всех кривых рис.1,2 в районе $T_{sl} \sim 0.7T_m$ имеет хорошо заметный максимум $\sim 140 \div 160$ м/сек. Следует отметить, что максимальная скорость кристаллизации Fe совпадает с аналогичными данными, полученными в [41]. Появление максимума скорости кристаллизации связано с началом образования межузельной фазы, замедляющей скорость фазового фронта. В нашей рассматриваются только процессы кристаллизации в недостаточно охлажденной чистой жидкости. Процессы стеклования, происходящие вблизи и ниже температуры T_g , $0 < T_{sl} \leq T_g$ не включаются в рассмотрение, поскольку сложность и важность этого процесса, в частности, для технологических приложений, заслуживают отдельного рассмотрения.

Следует отметить большое влияние на подвижность SLI его кристаллографической ориентации. Например, для алюминия отношение максимальных скоростей кристаллизации достигает $v_{\langle 100 \rangle}(T_{sl})/v_{\langle 111 \rangle}(T_{sl}) \approx 2$, а скорости плавления в 1.2 раза (рис.2).

6. Заключение

Методом молекулярной динамики исследована кинетика плавления/кристаллизации ГЦК и ОЦК металлов Al, Cu, Fe в диапазоне предельных значений перегрева/переохлаждения. Предельный перегрев/переохлаждение для каждого из металлов определяется значениями температуры, при которых перегретый кристалл сохраняет свойства кристалла, а переохлажденный расплав остается жидким.

а) Выполнена радикальная модификация кинетической модели Вильсона-Френкеля [28-30], отражающая асимметрию процессов плавления и затвердевания. Применение модифицированной модели (12) позволило для металлов Al, Cu, Fe получить аналитические выражения скорости распространения межфазной границы «твердое тело-жидкость» в диапазоне предельного перегрева/переохлаждения с существенно более высокой точностью по сравнению с результатами, полученными в [49] для оригинальных моделей WF [28-30].

б) Дискретный набор значений скорости $\{v_{\langle hkl \rangle, i}, T_i\}$, полученных в результате атомистического моделирования, использовался для построения аналитических зависимостей стационарной скорости движения межфазной границы «твердое тело-жидкость» $v_{\langle hkl \rangle}(T_{sl})$ (12) во всем диапазоне предельных значений перегрева/переохлаждения.

в) Результаты моделирования показали, что для рассматриваемых металлов диапазон предельных значений перегрева/переохлаждения находится в пределах:

$$\begin{array}{ll} \text{для } Al_{\langle 100 \rangle} - T_{sl} \approx (0.3 \div 1.25)T_m, & \text{для } Al_{\langle 111 \rangle} - T_{sl} \approx (0.6 \div 1.2)T_m, \\ \text{для } Cu - T_{sl} \approx (0.6 \div 1.3)T_m, & \text{для } Fe - T_{sl} \approx (0.5 \div 1.18)T_m. \end{array}$$

г) Температурные зависимости скорости границы раздела «твердое тело-жидкость» для Al, Cu и Fe, определенные по результатам моделирования с использованием различных кристаллографических плоскостей, демонстрируют явную асимметрию относительно точки плавления T_m , что объясняется сильным различием между кинетикой плавления в сильно перегретом состоянии и кинетикой затвердевания в сильно переохлажденном состоянии.

д) Полученная температурная зависимость скорости движения межфазной границы является диффузионно-ограниченной и описывается одним и

тем же уравнением для каждого металла во всем температурном диапазоне. Для всех металлов изменение температурной зависимости скорости $v(T_{sl})$ при переходе через точку плавления T_m происходит плавно, без излома наклона.

е) Кристаллографическая ориентация металла, а не тип его кристаллической решетки, оказывает наибольшее влияние на подвижность межфазной границы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Handbook of Materials Modeling. V.1, 2 / Ed. Yip Sidney. – Berlin: Springer, Dordrecht, New York: Heidelberg, 2005.
2. A.L. Pirozerski, O.I. Smirnova, A.I. Nedbai, O.L. Pirozerskaya, N.A. Grunina, V.M. Mikushev. Peculiarities of melting and crystallization of n-decane in a porous glass // Phys. Let. A, 2019, №383, p.125872. Doi: 10.1016/j.physleta.2019.125872
3. J.F. Van der Veen. Melting and freezing at surfaces // Surf. Sci., 1999, v.433–435, p.1–11. Doi:10.1016/S0039-6028(99)00084-9
4. B.J. Siwick, J.R. Dwyer, R.E. Jordan, R.J.D. Miller. An Atomic-Level View of Melting Using Femtosecond Electron Diffraction // Science, 2003, v.302, № 5649, p.1382–1385. Doi: 10.1126/science.1090052
5. V.I. Mazhukin. Kinetics and dynamics of phase transformations in metals under action of ultra-short high-power laser pulses. Chapter 8 / Ed. I. Peshko. – Laser pulses – theory, technology, and applications, – InTech, Croatia, 2012, p.219 -276.
6. M. Li, S. Ozawa, K. Kuribayashi. On determining the phase-selection principle in solidification from undercooled melts-competitive nucleation or competitive growth? // Philos. Mag. Let., 2004, v.84, №8, p.483–493. Doi:10.1080/0950083042000271090
7. Q.S. Mei, K. Lu. Melting and superheating of crystalline solids: From bulk to nanocrystals // Prog. Mater. Sci., 2007, v.52, №8, p.1175–1262. Doi: 10.1016/J.PMATSCI.2007.01.001
8. A.B. Belonoshko, N.V. Skorodumova, A. Rosengren, B. Johansson. Melting and critical superheating // Phys. Rev. B., 2006, v.73, №012201(1-3). Doi: 10.1103/PhysRevB.73.012201
9. N.A. Berjeza, S.P. Velikevitch, V.I. Mazhukin, I. Smurov, G. Flamant. Influence of temperature gradient to solidification velocity ratio on the structure transformation in pulsed- and CW-laser surface treatment // Appl. Surf. Sci., 1995, v.86, №1-4, p.303–309. Doi:10.1016/0169-4332(94)00446-3
10. M. Asta, C. Beckermann, A. Karma, W. Kurz, R. Napolitano, M. Plappf, G. Purdy, M. Rappaz, R. Trivedi. Solidification microstructures and solid-state parallels: Recent developments, future directions. Overview № 146 // Acta Materialia, 2009, v.57, № 4, p.941–971. Doi: 10.1016/j.actamat.2008.10.020
11. P.K. Galenko, D.V. Alexandrov. From atomistic interfaces to dendritic patterns // Phil. Trans. R. Soc. A., 2018, v. 376, № 20170210, pp. 1-9. Doi: 10.1098/rsta.2017.0210
12. M.V. Shugaev, M. He, S.A. Lizunov, Y. Levy, T.J.-Y. Derrien, V.P. Zhukov, N.M. Bulgakova, S.A. Lizunov, L.V. Zhigilei. Insights into Laser-Materials Interaction Through Modeling on Atomic and Macroscopic Scales / Ed. P. M. Ossi. – Springer Series in Materials Science, 2018, p.107–148. Doi:10.1007/978-3-319-96845-2_5

13. Д.В. Сивухин. Общий курс физики. Т.2. Термодинамика и молекулярная физика. Уч. пособ. для вузов в 5 т. – М.: Физматлит, Изд-во МФТИ, 2005.
D.V. Sivukhin. Obshchii kurs fiziki. T.2. Termodinamika i molekuliarnaia fizika. Uch. posob. dlia vuzov v 5 t. – M.: Fizmatlit, Izd-vo MFTI, 2005.
14. V.I. Mazhukin, O.N. Koroleva, A.V. Shapranov, A.A. Aleksashkina, M.M. Demin. Modeling of non-equilibrium of the melting-crystallization phase transition on the basis of thermal hysteresis of gold and copper // *Math. Montis.*, 2022, v.53, p.90-99. Doi: 10.20948/math montis-2022-53-8
15. V.I. Mazhukin, O.N. Koroleva, A.V. Shapranov, M.M. Demin, A.A. Aleksashkina. Determination of Thermal Properties of Gold in the Region of Melting–Crystallization Phase Transition: Molecular Dynamics Approach // *Math. Models Comput. Simul.*, 2022, v.14, №4, p.662–676. Doi: 10.1134/S2070048222040068
16. J. Cheng, Ch. Liu, Sh. Shang, D. Liu, W. Perrie, G. Dearden, K. Watkins. A review of ultra-fast laser materials micromachining // *Optics & Laser Technology*, 2013, v.46, p.88-102. Doi: 10.1016/j.optlastec.2012.06.037
17. J. Yan, P. Liu, Z. Lin, H. Wang, H. Chen, C. Wang, G. Yang. Directional Fano Resonance in a Silicon Nanosphere Dimer // *ACS Nano*, 2015, v.9, №3, p.2968-2980. Doi: 10.1021/nn507148z
18. V.I. Mazhukin, M.M. Demin, A.V. Shapranov. High-speed laser ablation of metal with pico- and subpicosecond pulses // *Appl. Surf. Sci.*, 2014, v.302, p.6-10. Doi: 10.1016/j.apsusc.2014.01.111
19. M. Cesaria, A.P. Caricato, M. Beccaria, A. Perrone, M. Martino, A. Taurino, M. Catalano, V. Resta, A. Klini, F. Gontad. Physical insight in the fluence-dependent distributions of Au nanoparticles produced by sub-picosecond UV pulsed laser ablation of a solid target in vacuum environment // *Appl. Surf. Sci.*, 2019, v.480, p.330-340. Doi: 10.1016/j.apsusc.2019. 02.022
20. A. Mene'ndez-Manjo'n, S. Barcikowski, G.A. Shafeev, V.I. Mazhukin, B.N. Chichkov. Influence of beam intensity profile on the aerodynamic particle size distributions generated by femto-second laser ablation // *Laser Part. Beams*, 2010, v.28, p.45-52. Doi:10.1017/S0263034609990553
21. J.H. Perepezko, G. Wilde. Melt undercooling and nucleation kinetics // *Curr. Opin. Solid State Mater Sci.*, 2016, v.20, № 1, p.3-12. Doi: 10.1016/j.cossms.2015.07.001
22. V.I. Mazhukin, A.V. Shapranov, A.V. Mazhukin, O.N. Koroleva. Mathematical formulation of a kinetic version of Stefan problem for heterogeneous melting/crystallization of metals // *Math. Montis.*, 2016, v.36, p.58-77.
23. Chen Yu Shen, D.W. Oxtoby. Density functional theory of crystal growth: Lennard-Jones fluids // *J. Chem. Phys.*, 1996, v.104, №11, p.4233 - 4242. Doi: 10.1063/1.471234
24. M.I. Mendeleev, M.J. Rahman, J.J. Hoyt, M. Asta. Molecular-dynamics study of solid–liquid interface migration in fcc metals // *Modeling Simul. Mater. Sci. Eng.*, 2010, v.18, p.074002(1-18). Doi:10.1088/0965-0393/18/7/074002
25. V.I. Mazhukin, A.V. Shapranov, M.M. Demin, N.A. Kozlovskaya. Temperature dependence of the kinetics rate of the melting and crystallization of aluminum // *Bull. Lebedev Phys. Inst.*, 2016, v.43, № 9, p.283-286.
26. V.I. Mazhukin, A.V. Shapranov, V.E. Perezhigin, O.N. Koroleva, A.V. Mazhukin. Kinetic melting and crystallization stages of strongly superheated and supercooled metals // *Math. Models Comput. Simul.*, 2017, v. 9, № 4, p.448-456.
27. C.J. Tyszczak, J.R. Ray. Asymmetric Crystallization and Melting Kinetics in Sodium: A

- Molecular-Dynamics Study. Phys. Rev. Lett., 1990, v.64 (11), p.1278-1281. DOI: 10.1103/PhysRevLett.64.1278
28. *H.A. Wilson*. On the velocity of solidification and viscosity of supercooled liquids // Philos. Mag., 1900, v.50, p.238-250.
 29. *Ja.I. Frenkel*. Note on the relation between the speed of crystallization and viscosity // Phys. Z. Sowjet Union, 1932, v.1, p.498-499.
 30. *J. Frenkel*. Kinetic Theory of Solids. – N.Y.: Oxford University Press, 1946.
 31. *J.Q. Broughton, G.H. Gilmer, K.A. Jackson*. Crystallization Rates of a Lennard-Jones Liquid // Phys. Rev. Lett., 1982, v.49, p.1496-1500.
 32. *K.A. Jackson*. The Interface Kinetics of Crystal Growth Processes // Interface Sci., 2002, v.10, № 2/3, p.159–169.
 33. *L.V. Mikheev, A.A. Chernov*. Mobility of a diffuse simple crystal–melt interface // J. Crystal Growth, 1991, v.112, № 2-3, p. 91–596. Doi: 10.1016/0022-0248(91)90340-b.
 34. *Y. Ashkenazy, R.S. Averbach*. Kinetic stages in the crystallization of deeply undercooled body-centered-cubic and face-centered-cubic metals // Acta Materialia, 2010, v.58, p. 524–530.
 35. *D. Turnbull*. On the relation between crystallization rate and liquid structure // J. Phys. Chem., 1962, v.62, № 4, p.609–613.
 36. *Y. Ashkenazy, R.S. Averbach*. Atomic mechanisms controlling crystallization behaviour in metals at deep undercoolings // Europhysics Letters (EPL), 2007, v.79, №2, p.26005(1-6). Doi: 10.1209/0295-5075/79/26005
 37. *C.A. MacDonald, A.M. Malvezzi, F. Spaepen*. Picosecond time-resolved measurements of crystallization in noble metals // JAP, 1989, v.65, №1, p.129–136. Doi:10.1063/1.342586
 38. *W.L. Chan, R.S. Averbach, D.G. Cahill, Y. Ashkenazy*. Solidification velocities in deeply undercooled silver // Phys. Rev. Lett., 2009, v.102, №9, p.095701(1-4). Doi: 10.1103/PhysRevLett.102.095701
 39. *M.I. Mendeleev*. Molecular dynamics simulation of solidification and devitrification in a one-component system // Modelling Simul. Mater. Sci. Eng., 2012, v.20, №4, p.045014(1-17). Doi: 10.1088/0965-0393/20/4/045014
 40. *M.D. Kluge, J.R. Ray*. Velocity versus temperature relation for solidification and melting of silicon: A molecular-dynamics study // Phys. Rev. B, 1989, v.39, №3, p.1738 -1746. Doi: 10.1103/physrevb.39.1738.
 41. *K.A. Jackson, B. Chalmers*. Kinetics of solidification // Can. J. Phys., 1956, v.34, p.473–490.
 42. *A.A. Самарский, А.В. Гулин*. Численные методы. – М.: Физматлит, 1989.
A.A. Samarskii, A.V. Gulin. Chislennyye metody. – М.: Fizmatlit, 1989.
 43. *V.V. Zhakhovskii, N.A. Inogamov, Yu.V. Petrov, S.I. Ashitkov, K. Nishihara*. Molecular dynamics simulation of femtosecond ablation and spallation with different interatomic potentials // Appl. Surf. Sci., 2009, v.255, №24, p.9592-9596.
 44. *S.M. Foiles, M.I. Baskes, M.S. Daw*. Embedded-Atom-Method Functions for the Fcc Metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt and their alloys // Phys. Rev. B, 1986, v. 33, pp. 7983 -7991.
 45. *M.I. Mendeleev, S. Han, D.J. Srolovitz, G.J. Ackland, D.Y. Sun, M. Asta*. Development of new interatomic potentials appropriate for crystalline and liquid iron // Philos. Mag., 2003, v.83, №35, p.3977–3994. Doi: 10.1080/14786430310001613264
 46. *G.J. Ackland, M.I. Mendeleev, D.J. Srolovitz, S. Han, A.V. Barashev*. Development of an interatomic potential for phosphorus impurities in α -iron // J. Phys. Condens. Matter, 2004,

- v.16, p. 2629 (1-14). Doi: 10.1088/0953-8984/16/27/003
47. *B. Rethfeld, K. Sokolowski-Tinten, D. von der Linde, S.I. Anisimov.* Ultrafast thermal melting of laser-excited solids by homogeneous nucleation // *Phys. Rev. B*, 2002, v.65, p.092103(1-4). Doi: 10.1103/PhysRevB.65.092103
 48. *В.И. Мажукин, А.В. Шапранов, В.Е. Пережигин.* Математическое моделирование теплофизических свойств, процессов нагрева и плавления металлов методом молекулярной динамики // *Math. Montis.*, 2012, v.24, p.47 – 66.
V.I. Mazhukin, A.V. Shapranov, V.E. Perezhigin. Matematicheskoe modelirovanie teplofizicheskikh svoystv, processov nagreva i plavleniya metallov metodom molekulyarnoj dinamiki // *Math. Montis.*, 2012, v.24, p.47–66.
 49. *V.I. Mazhukin, A.V. Shapranov, O.N. Koroleva.* Atomistic modeling of crystal-melt interface mobility of fcc (Al, Cu) and bcc (Fe) metals in strong superheating/undercooling states // *Math. Montis.*, 2020, v.48, p.70-85. Doi: 10.20948/mathmontis-2020-48-7
 50. *V.I. Mazhukin, A.V. Shapranov, A.V. Mazhukin, P.V. Breslavsky.* Atomistic modeling of the dynamics of the solid/liquid interface of Si melting and crystallization taking into account deeply superheated/supercooled states // *Math. Montis.*, 2020, v.47, p.87-99. Doi: 10.20948/mathmontis-2020-47-8
 51. *F.H. Stillinger, T.A. Weber.* Computer simulation of local order in condensed phases of silicon // *Phys. Rev. B*, 1985, v.31, № 8, p. 5262-5271.
 52. *T. Kumagai, S. Izumi, S. Hara, S. Sakai.* Development of bond-order potentials that can reproduce the elastic constants and melting point of silicon for classical molecular dynamics simulation // *Comp. Mater. Sci.*, 2007, v. 39, № 2, p. 457-464.

Поступила в редакцию 05.12.2022

После доработки 19.06.2023

Принята к публикации 03.07.2023