

金属 Ag 固化过程中的空位形成研究

张海燕^{1,2*}, 汪丽春²

¹扬州大学广陵学院, 江苏 扬州 225000;

²扬州大学物理科学与技术学院, 江苏 扬州 225002

摘要 采用分子动力学方法,研究了金属 Ag 固液界面在固化过程中的动力学过程及缺陷俘获。结果发现,金属 Ag 的界面温度存在某个特征值(T^*),生长速度在这个特征温度附近达到最大值。同时发现液体在产生晶体时缺陷以空位为主。计算结果表明,缺陷浓度与界面温度之间存在线性关系,缺陷浓度随着界面温度的降低而逐渐增大,在特征温度附近发生转变。同时发现缺陷浓度与生长速度相关,当界面温度高于特征温度($T > T^*$)时,二者存在近似线性关系且与方向无关,但当界面温度低于特征温度($T < T^*$)时,(100)方向和(110)方向存在着明显的各向异性,表明缺陷俘获与生长机制转变有关。

关键词 材料; 缺陷俘获; 空位; 固液界面; 界面温度; 生长机制

中图分类号 O469; O414.13

文献标识码 A

doi: 10.3788/LOP56.021603

Vacancy Formation During Solidification of Metal Ag

Zhang Haiyan^{1,2*}, Wang Lichun²

¹Guangling College of Yangzhou University, Yangzhou, Jiangsu 225000, China;

²Physical Science and Technology College, Yangzhou University, Yangzhou, Jiangsu 225002, China

Abstract The kinetics and defect trapping at the solid-liquid interface of simple metal Ag during the solidification process are investigated by molecular dynamics simulation. It is found that there exists a certain characteristic value (T^*) for the interfacial temperature of metal Ag at which the growth rate reaches a maximum value. Meanwhile, the vacancy defects are predominant in the solidification process of liquids. The calculation results show that there exists a linear relationship between defect concentration and interfacial temperature. The defect concentration gradually increases with the decrease of interfacial temperature, and a transition occurs near this characteristic temperature. In addition, the defect concentration is found to be dependent on growth velocity. Above the characteristic temperature ($T > T^*$), the defect concentration almost linearly depends on the growth velocity, and both are independent on orientations. In contrast, below the characteristic temperature ($T < T^*$), an obvious anisotropy occurs along the (100) and (110) orientations, indicating that the defect trapping is associated with the growth mechanism transition.

Key words materials; defect trapping; vacancy; solid-liquid interface; interfacial temperature; growth mechanism

OCIS codes 160.3900; 160.3710; 160.4236; 160.6990

1 引言

近年来,计算模拟^[1]已经被广泛应用于材料固化^[2-4],并取得了很多有价值的成果。材料固化的研究主要集中在两方面,一方面是对金属固化过程中动力学以及各向异性的研究^[5-8],另一方面是对固化

过程中微观结构的研究^[9-11]。其中,纯金属^[12-16]和少量二元合金体系^[17-20]的固化动力学也取得了重大进展,但是固化缺陷俘获和溶质俘获的研究仍然十分有限。目前仅有少量合金缺陷俘获可用计算模拟,例如 Zheng 等^[21]发现 NiAl 二元合金体系在结晶过程中有明显的空位和替位缺陷产生, Kramer

收稿日期: 2018-07-24; 修回日期: 2018-07-25; 录用日期: 2018-08-02

基金项目: 扬州大学广陵学院自然科学研究项目(ZKZD18002)、扬州大学科技创新培育基金(5009/135030009)

* E-mail: zhanghy@yzu.edu.cn

等^[22]也发现在 Zr_2Cu 固化过程中有缺陷产生, Yang 等^[23]发现 Lennard-Jones 模型合金体系中有溶质俘获现象。然而单质固化过程中缺陷俘获的相关研究还很少,这可能因为单质缺陷只有空位和填隙两种缺陷,常被忽视。事实上单质的缺陷俘获产生机理以及定量分析非常复杂,缺陷俘获与生长速度或者体系温度是否相关仍然不清楚,而且极有可能与界面动力学生长机制以及微观结构有密切关系。目前被普遍接受的生长机制主要有两种,一种是小过冷温度下基于碰撞的 BGJ (Broughton-Gilmer-Jackson)模型^[8],另外一种是深过冷温度下基于扩散的 W-F (Wilson-Frenkel)模型^[24-25],但是适用于所有温度的生长机制普适模型还有待于进一步探索。单质金属的缺陷俘获与这两种生长机制的转变是否相关需要进一步研究。待研究的议题包括缺陷浓度对固化结果的作用和缺陷俘获的定量分析。

本文研究了单质金属 Ag 固液界面在固化过程中的缺陷俘获。结果发现, Ag 固液界面固化过程中只有空位这一种点缺陷。另外发现,缺陷浓度与界面生长速度有关,二者在小过冷温度下与方向无关,但在深过冷温度下存在着明显的各向异性(过冷温度是指熔点温度与界面温度差 $\Delta T = T_m - T$, 实验上认为 $\Delta T < 0.6T_m$ 为小过冷温度,理论认为 $\Delta T < 0.9T_m$ 为小过冷温度,反之为深过冷温度)。

2 研究方法

2.1 分子动力学模拟细节

所有分子动力学模拟都采用大尺度原子/分子的大规模并行计算(LAMMPS)程序包计算,时间步长取为 1 fs^[26]。体系的温度和压强由 Nose-Hoover 热浴^[27-28]和 Parrinello-Rahman 压浴^[29-30]控制,体系压强固定在 100 kPa。金属 Ag 固液界面模拟采用了 Foils 等^[31]的多体嵌入原子势(简称 EAM 势),这种势已被广泛应用于材料固化的研究^[32-35]。

为建立合适的模拟晶胞,首先要计算不同温度对应的晶格常数,并在固液共存体系中估测熔点温度,得到 Ag 的两相平衡熔点温度为 $T_m = 1170$ K,与 Ashkenazy 等^[36]结果一致。选取 Ag 面心立方(FCC) (100)和(110)这两个低指数生长方向建立固液平衡体系, z 坐标轴方向垂直于固液界面,两个相互垂直的 x 和 y 坐标轴平行于固液界面,3 个坐标轴方向都采用周期性边界条件(PBC)。为保证模拟结果的可靠性,体系截面尺寸($A = L_x \times L_y$)和 z 方向长度 L_z 都足够大。同时为保证结果具有可比性,应使建立的两种体系原

子数相同且尺寸大小相近,故(100)方向都取 PBC 超胞层数为 $12 \times 12 \times 76$,体系原子数为 80640,(110)方向 PBC 超胞层数为 $8 \times 12 \times 84$,原子数为 75264。

金属 Ag(100)和(110)方向的两个模拟体系建立后,在 NVE 系综(即微正则系综)作长时间热力学平衡。当模拟体系温度低于固液平衡温度 T_m 时,体系就会偏离固液两相平衡条件,在热力学驱动下发生非平衡固化。再选择3个独立的平衡固液初始构型,允许所有原子运动,将体系在 $T < T_m$ 的各个温度进行 NPzAT 系综(即等温等压系综)模拟,最终得到稳定的固液共存体系。所谓 NPzAT 系综即在等温等压系综下使平行于界面的 x 和 y 方向周期长度保持不变,垂直于界面的 z 方向周期长度动力学变化^[13]。

2.2 缺陷浓度计算方法

所谓缺陷浓度是指体系中原子空位数所占百分比。为了计算缺陷浓度,采用 Zheng 等^[21]所用的方法,在固化结束后,利用最速下降(SD)方法将生长出的晶体快速退火到零开尔文,使原子稳定到最近的局部最小值。经过退火后的原子弛豫到各自理想的晶体晶格点位置,运用退火是为了避免计算缺陷浓度时由于热力学波动而引起不确定性。然后分别累加每个平行于固液界面的晶体平面层理想原子数与实际原子数,将二者差值与理想原子数作比,得到每个温度下的缺陷浓度,即

$$\rho_d = \frac{N_i - N_r}{N_i} \times 100\%, \quad (1)$$

式中: N_i 是理想晶格原子数; N_r 是相同层上实际原子数; ρ_d 是缺陷浓度。

2.3 界面温度的计算

本研究的对象是固液界面的非平衡固化过程,在生长模拟过程中,使用 Nose-Hoover 热浴法进行温度控制,通常认为体系的温度即为热浴温度。但是在固化过程的非平衡模拟过程中发现^[33,37],由于界面附近受到潜热的影响,尽管整个体系在设定的温度下平衡,但在界面附近仍然存在很大的梯度。由于界面处的温度才是生长的真实驱动力,因此必须知道界面处的温度。界面温度 $T(z)$ 都是通过计算界面附近原子的平均动能 $K_e(z)$ 和密度获得的,可表示为

$$T(z) = \frac{K_e(z)}{\rho(z)} = \frac{m}{3k_B} \frac{1}{L_x L_y \Delta z \rho(z)} \left\langle \sum_{i=1}^{N_z} v_i^2 \right\rangle, \quad (2)$$

式中: m 是原子质量; k_B 是玻尔兹曼常数; Δz 是沿着 z 轴方向把体系分成平行于固液界面的薄层厚度, v_i 是 t 时刻位于 $(z - \Delta z/2)$ 和 $(z + \Delta z/2)$ 之间

的原子速度; $\rho(z)$ 是界面附近原子密度; L_x 和 L_y 分别是固液界面 x 和 y 方向的长度。以下所有温度都是通过(2)式计算得到的界面真实温度, 而非热浴温度或者其他温度。

3 计算结果与讨论

图 1 是经过 NVE 热力学平衡后的固液两相平衡态结构快照, 以此作为后续 MD (Molecular Dynamics Simulation) 模拟固化的初始结构, 图中仅给出固液界面附近部分原子坐标快照。

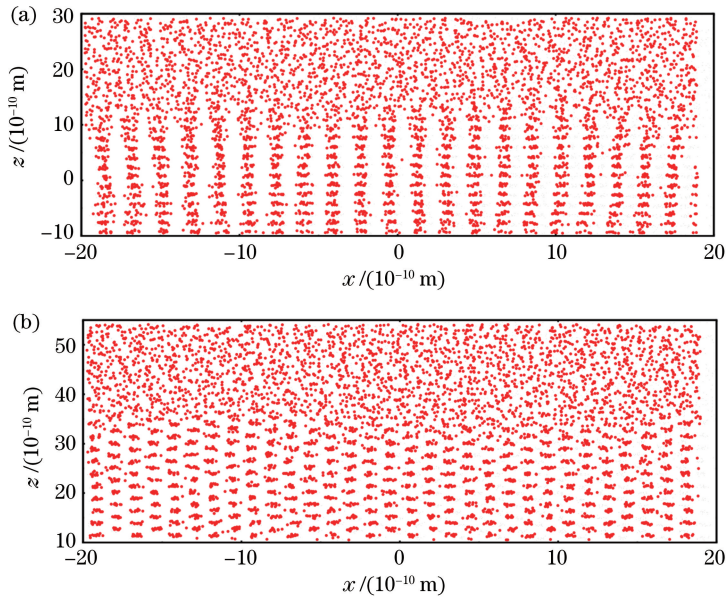


图 1 Ag 固液共存体系界面附近投影到二维平面的坐标原子快照。(a) (100)方向;(b) (110)方向

Fig. 1 Atomic coordinate snapshot of Ag solid-liquid coexisting system projected onto a two-dimensional plane.

(a) (100) orientation; (b) (110) orientation

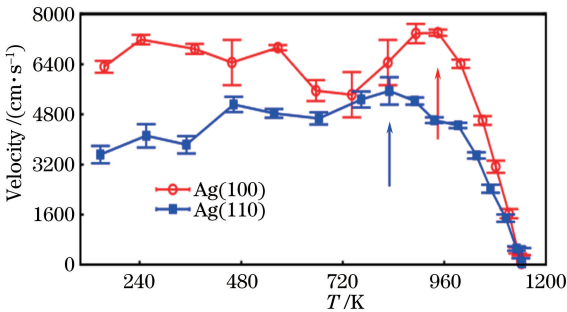


图 2 Ag(100)方向和(110)方向界面生长速度与界面温度关系

Fig. 2 Crystal-melt interfacial growth velocity versus interfacial temperature along Ag(100) and (110) orientations

从图 2 发现, 在界面温度低于 T^* ($T < T^*$) 和高于 T^* ($T > T^*$) 时生长速度表现出了完全不同的特征。在 $T > T^*$ 时, 无论(100)还是(110)方向, 生长速度都随着界面温度的降低单调递增, 在 $T < T^*$ 时, 生

图 2 是不同界面温度下 Ag(100) 方向和(110) 方向的界面生长速度。图中红色曲线是(100)方向界面生长速度与界面温度关系; 蓝色曲线是(110)方向界面生长速度随界面温度的变化关系。图 2 表明, 在小过冷温度下界面速度与界面温度近似呈线性关系, 随着界面温度不断降低, 生长速度逐渐增加到最大值, 此时对应的界面温度定义为特征温度 T^* , 图中箭头对应特征温度 T^* 。图 2 中 Ag(100) 方向和 (110) 方向特征温度分别约为 945 K 和 830 K。

长速度不再随着界面温度的降低继续增加, 而是随着界面温度降低在某个值附近保持震荡, 而且(100)方向生长速度总是大于(110)方向。该结果与文献[36]中关于这种金属的固化生长速度计算结果一致。

以上结果表明, 在 $T < T^*$ 和 $T > T^*$ 时 Ag 的生长速度表现出了明显差异, 表明在特征温度 T^* 附近, 生长机制可能发生了改变。导致这一结果的原因可能有很多, 固化中的缺陷俘获也可能是原因之一, 故需对该金属的缺陷俘获进行研究。

通过研究金属 Ag 在低于熔点的不同温度下的点缺陷, 发现缺陷只有空位而没有填隙原子。图 3 给出了产生晶体层结构快照, 图中第 1 行红色和第 2 行蓝色图分别代表 800 K 时(100)方向和 750 K 时(110)方向晶体快照。图中可以看出只有空位缺陷, 且大部分是单个空位缺陷, 2 个空位相连或者 2 个以上空位的缺陷极少, 如图 3 中(c)和(e),

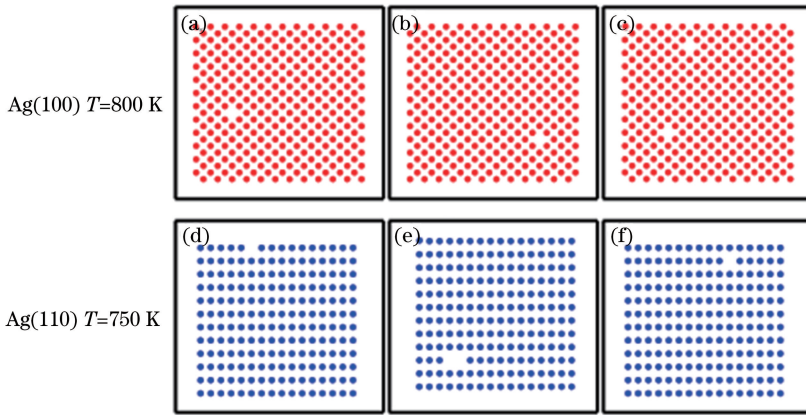


图3 Ag(100)方向和(110)方向固化后部分晶体层结构快照

Fig. 3 Structural snapshots of partial crystals after solidification along Ag(100) and (110) orientations

这种成对空位缺陷出现的几率很小,3个及以上的空位团簇几乎没有发现。

同时还计算了缺陷浓度 ρ_d 随界面温度变化关系,如图4所示。图中红色曲线为Ag(100)方向缺陷浓度与界面温度关系,蓝色曲线为(110)方向缺陷浓度与界面温度关系。可以得到以下几点结论:1)与生长速度不同,缺陷浓度随着界面温度降低而增加;2)(100)方向和(110)方向表现出明显的各向异性,即(100)方向缺陷浓度总是大于(110)方向;3)在特征温度 T^* 两端,缺陷浓度随温度变化的斜率不同, $T > T^*$ 温度范围内直线斜率略大于 $T < T^*$ 斜率。正如之前所说,在 T^* 附近生长机制可能发生了改变,当前结果也表明生长机制可能影响了缺陷俘获,反之,缺陷俘获也可能影响了生长机制。尽管生长对空位产生的影响目前尚不清楚,反之,空位对生长的影响也不明了,但至少知道,随着晶体中空位浓度的增加,固相和液相的自由能差会减小,从而驱动了固化的产生。

从热力学角度分析,点缺陷总是存在于零开尔

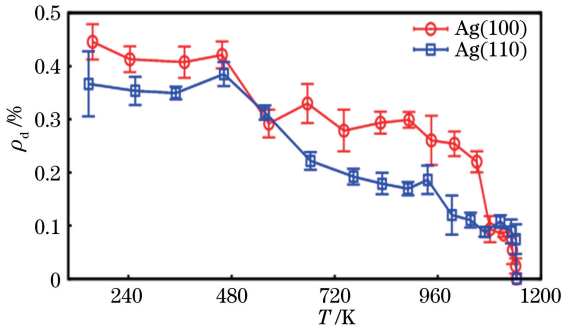


图4 Ag(100)和(110)方向缺陷浓度与界面温度关系

Fig. 4 Vacancy concentration versus interfacial temperature along Ag(100) and (110) orientations

文以上的晶体。根据图4结果,空位的产生由于液体的快速固化而导致非热力学平衡效应。原因如下:1)空位浓度是随着界面温度的降低而增加,如果空位浓度是由热力学平衡效应引起,则它应该随着界面温度的降低而降低;2)缺陷浓度明显的各向异性表明了非热力学平衡特征,如果是热力学平衡,缺陷浓度应该与生长方向无关。

基于以上分析,其中包含的很多信息仅凭图2和图4很难看出,因此图5给出了Ag的缺陷浓度与界面生长速度关系图。图中水平虚线对应生长速度达到最大值时的特征温度,虚线上(下)方对应深(小)过冷温区 $T < T^*$ ($T > T^*$)。由图5可以看出一个明显特征,缺陷浓度并不是界面生长速度的单值函数,在特征温度 T^* 上下分为两部分,即图5虚线位置。在 $T > T^*$ 温度范围内(即小过冷温区),缺陷浓度随着界面生长速度的增加而增加,此时在(100)方向和(110)方向并未表现出明显的各向异性。但是在 $T < T^*$ 范围内(即深过冷区域)情况却相反,各向异性变得越来越重要。可见缺陷浓度对生长速度有着意想不到的依赖关系,这也意味着,除了生长速度,可能还有其它重要因素影响着空位的产生。

尽管单质金属缺陷俘获的机理目前并不完全清楚,但根据以上结果仍然可得以下讨论。缺陷俘获是动力学而非热力学起主导作用。从动力学效应分析,晶体生长和原子扩散是响应空位产生的主要过程。一方面,结晶过程使固液界面附近无序的液体固化成有序晶体,这一过程可以消除界面上的液体原子。另一方面,扩散过程将液体原子带入界面。因此,扩散与生长的竞争可能影响了空位的产生。

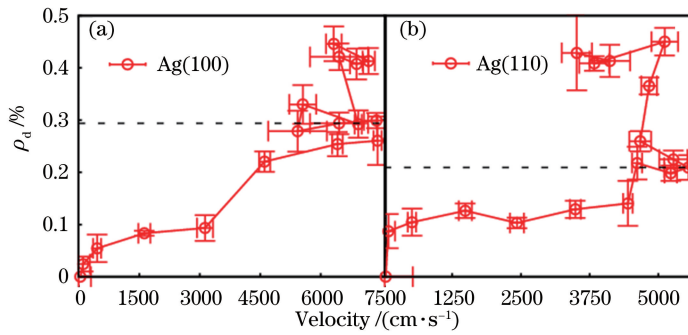


图 5 Ag 缺陷浓度与界面生长速度关系。(a) (100)方向;(b) (110)方向

Fig. 5 Defect concentration versus interfacial growth velocity. (a) (100) orientation; (b) (110) orientation

如果扩散占优势则空位将会减少,如果扩散不占优势则会产生更多的空位。但是特征温度的存在表明,在小过冷温区和深过冷温区生长机制确实发生了改变,未来对固化过程的理解可能还需要对缺陷俘获和生长机制进一步研究。

4 结 论

运用分子动力学方法,对金属 Ag(100)方向和(110)方向固液界面进行了固化模拟,通过计算界面缺陷浓度、生长速度以及界面温度关系,得到以下结论:Ag 的界面温度存在某个特征值 T^* ,特征温度对应生长速度的最大值。金属固化过程中有明显的空位缺陷产生。缺陷浓度随着界面温度降低而增加,且表现出明显的各向异性,(100)方向总是大于(110)方向。在特征温度 T^* 两端缺陷浓度随温度变化的斜率不同,说明生长机制可能发生了改变。在 $T > T^*$ 的小过冷温度下,缺陷浓度与生长速度有明显的依赖关系,而与界面生长方向没有太大的关系。在 $T < T^*$ 的深过冷温度下,缺陷浓度不仅取决于生长速度,而且表现出明显的各向异性。以上结果表明,在小过冷温区与深过冷温区,产生空位的机制可能发生了改变。以上结果表明缺陷俘获在固化过程中可能起着不可忽视的作用,后续可以通过研究其他金属的缺陷俘获行为,以期找到单质金属在固化过程中缺陷形成的普适特性。

致谢 感谢扬州大学物理科学与技术学院张秀云副教授提供计算集群资源。

参 考 文 献

[1] Chen B, Zhu W H, Chen P, *et al.* Mechanism of femtosecond laser ablating CuZr amorphous alloy[J].

Laser & Optoelectronics Progress, 2015, 52(4): 041406.

陈冰, 朱卫华, 陈鹏, 等. 分子动力学模拟飞秒激光烧蚀 CuZr 非晶合金的机理[J]. 激光与光电子学进展, 2015, 52(4): 041406.

- [2] Asta M, Beckermann C, Karma A, *et al.* Solidification microstructures and solid-state parallels: recent developments, future directions[J]. Acta Materialia, 2009, 57(4): 941-971.
- [3] Chernov A A. Notes on interface growth kinetics 50 years after Burton, Cabrera and Frank[J]. Journal of Crystal Growth, 2004, 264(4): 499-518.
- [4] Zhu C Y, Lü Z W, He W M, *et al.* Solid SBS media and entirely solidification of the SBS Phase-conjugation mirrors [J]. Laser & Optoelectronics Progress, 2006, 43(3): 65-68.
朱成禹, 吕志伟, 何伟明, 等. 固体 SBS 介质与 SBS 相位共轭镜的全固化 [J], 激光与光电子学进展, 2006, 43(3): 65-68.
- [5] Buta D, Asta M, Hoyt J J. Kinetic coefficient of steps at the Si (111) crystal-melt interface from molecular dynamics simulations[J]. The Journal of Chemical Physics, 2007, 127(7): 074703.
- [6] Maltsev I, Mirzoev A, Danilov D, *et al.* Atomistic and mesoscale simulations of free solidification in comparison [J]. Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, 2009, 17(5): 055006.
- [7] Gulam Razul M S, Hendry J G, Kusalik P G. Mechanisms of heterogeneous crystal growth in atomic systems: insights from computer simulations [J]. The Journal of Chemical Physics, 2005, 123(20): 204722.
- [8] Broughton J Q, Gilmer G H, Jackson K A. Crystallization rates of a Lennard-Jones liquid [J]. Physical Review Letters, 1982, 49(20): 1496-1500.
- [9] Geysersmans P, Gorse D, Pontikis V. Molecular

- dynamics study of the solid-liquid interface[J]. *The Journal of Chemical Physics*, 2000, 113(15): 6382-6389.
- [10] Yang Y, Olmsted D L, Asta M, *et al.* Atomistic characterization of the chemically heterogeneous Al-Pb solid-liquid interface[J]. *Acta Materialia*, 2012, 60(12): 4960-4971.
- [11] Yang G Q, Li J F, Shi Q W, *et al.* Structural and dynamical properties of heterogeneous solid-liquid Ta-Cu interfaces: a molecular dynamics study [J]. *Computational Materials Science*, 2014, 86: 64-72.
- [12] Hoyt J J, Asta M. Atomistic computation of liquid diffusivity, solid-liquid interfacial free energy, and kinetic coefficient in Au and Ag[J]. *Physical Review B*, 2002, 65(21): 214106.
- [13] Sun D Y, Asta M, Hoyt J J. Crystal-melt interfacial free energies and mobilities in FCC and BCC Fe[J]. *Physical Review B*, 2004, 69(17): 174103.
- [14] Ashkenazy Y, Averbach R S. Atomic mechanisms controlling crystallization behaviour in metals at deep under coolings [J]. *Europhysics Letters*, 2007, 79(2): 26005.
- [15] Buta D, Asta M, Hoyt J J. Atomistic simulation study of the structure and dynamics of a faceted crystal-melt interface[J]. *Physical Review E*, 2008, 78(3): 031605.
- [16] Piaggi P M, Parrinello M. Entropy based fingerprint for local crystalline order [J]. *Journal of Chemical Physics*, 2017, 147(11): 114112.
- [17] Beckera C A, Asta M, Hoyt J J, *et al.* Equilibrium adsorption at crystal-melt interfaces in Lennard-Jones alloys[J]. *The Journal of Chemical Physics*, 2006, 124(16): 164708.
- [18] Kerrache A, Horbach J, Binder K. Molecular-dynamics computer simulation of crystal growth and melting in $Al_{50}Ni_{50}$ [J]. *Europhysics Letters*, 2008, 81(5): 58001.
- [19] Qi C, Li J F, Xu B, *et al.* Atomistic characterization of solid-liquid interfaces in the Cu-Ni binary alloy system[J]. *Computational Materials Science*, 2016, 125: 72-81.
- [20] Zhou L L, Yang R Y, Tian Z A, *et al.* Molecular dynamics simulation on structural evolution during crystallization of rapidly super-cooled $Cu_{50}Ni_{50}$ alloy [J]. *Journal of Alloys and Compounds*, 2017, 690: 633-639.
- [21] Zheng X Q, Yang Y, Gao Y F, *et al.* Disorder trapping during crystallization of the B2-ordered NiAl compound[J]. *Physical Review E*, 2012, 85(4): 041601.
- [22] Kramer M J, Mendelev M I, Napolitano R E. *In situ* observation of antisite defect formation during crystal growth [J]. *Physical Review Letters*, 2010, 105(24): 245501.
- [23] Yang Y, Humadi H, Buta D, *et al.* Atomistic simulations of nonequilibrium crystal-growth kinetics from alloy melts[J]. *Physical Review Letters*, 2011, 107(2): 025505.
- [24] Frenkel J. *Kinetic theory of liquids*[M]. New York: Dover Publications, 1955.
- [25] Wilson H W. *Reviews-On the velocity of solidification and viscosity of supercooled liquids*[J]. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, 1900, 50(303): 238-250.
- [26] Plimpton S. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics [J]. *Journal of Computational Physics*, 1995, 117(1): 1-19.
- [27] Nosé S. A unified formulation of the constant temperature molecular dynamics methods [J]. *The Journal of Chemical Physics*, 1984, 81(1): 511-519.
- [28] Hoover W G. Canonical dynamics: equilibrium phase-space distributions [J]. *Physical Review A*, 1985, 31(3): 1695-1697.
- [29] Parrinello M, Rahman A. Polymorphic transitions in single crystals: a new molecular dynamics method [J]. *Journal of Applied Physics*, 1981, 52(12): 7182-7190.
- [30] Parrinello M, Rahman A. Crystal structure and pair potentials: a molecular-dynamics study[J]. *Physical Review Letters*, 1980, 45(14): 1196-1199.
- [31] Foiles S M, Baskes M I, Daw M S. Embedded-atom-method functions for the FCC metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, and their alloys[J]. *Physical Review B*, 1986, 33(12): 7983-7991.
- [32] Davidchack R L, Laird B B. Crystal structure and interaction dependence of the crystal-melt interfacial free energy[J]. *Physical Review Letters*, 2005, 94(8): 086102.
- [33] Monk J, Yang Y, Mendelev M I, *et al.* Determination of the crystal-melt interface kinetic coefficient from molecular dynamics simulations[J]. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2009, 18(1): 015004.
- [34] Mendelev M I, Rahman M J, Hoyt J J, *et al.* Molecular-dynamics study of solid-liquid interface

- migration in FCC metals [J]. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2010, 18(7): 074002.
- [35] Sun D Y, Asta M, Hoyt J J. Kinetic coefficient of Ni solid-liquid interfaces from molecular-dynamics simulations[J]. *Physical Review B*, 2004, 69(2): 024108.
- [36] Ashkenazy Y, Averback R S. Kinetic stages in the crystallization of deeply undercooled body-centered-cubic and face-centered-cubic metals [J]. *Acta Materialia*, 2010, 58(2): 524-530.
- [37] Gao Y F, Yang Y, Sun D Y, *et al.* Molecular dynamics simulations of the crystal-melt interface mobility in HCP Mg and BCC Fe [J]. *Journal of Crystal Growth*, 2010, 312(21): 3238-3242.