

Научная статья

1.3.8. Физика конденсированного состояния (физико-математические науки)

УДК 538.911

doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2026.02.004

## ОЦЕНКА СКОРОСТИ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ФРОНТА ПЛАВЛЕНИЯ В ЖЕЛЕЗЕ, ПОДВЕРГНУТОМ ВОЗДЕЙСТВИЮ ПИКОСЕКУНДНОГО ЛАЗЕРНОГО ИМПУЛЬСА

Артем Владимирович Маркидонов<sup>1,3†</sup>, Михаил Дмитриевич Старостенков<sup>2</sup>,  
Анастасия Николаевна Гостевская<sup>3</sup>, Дмитрий Анатольевич Лубяной<sup>4</sup>,  
Павел Васильевич Захаров<sup>5</sup>

<sup>1</sup>Кузбасский гуманитарно-педагогический институт Кемеровского государственного университета, ул. Циолковского, 23, 654041, Новокузнецк, Россия

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

<sup>3</sup>Сибирский государственный индустриальный университет, ул. Кирова, 42, 654006, Новокузнецк, Россия

<sup>4</sup>Филиал Кузбасского государственного технического университета им. Т.Ф. Горбачева в г. Прокопьевске, ул. Ноградская, 19А, 653039, Прокопьевск, Россия

<sup>5</sup>Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, ул. Политехническая, 29, 195251, Санкт-Петербург, Россия

<sup>†</sup>markidonov\_artem@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-4566-528X>

<sup>2</sup>genphys@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-6326-7613>

<sup>3</sup>lokon1296@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-7328-5444>

<sup>4</sup>lubjanoy@yandex.ru, <https://orcid.org/0000-0001-9773-3558>

<sup>5</sup>zakharovpv1@rambler.ru, <https://orcid.org/0000-0002-6410-1594>

**Аннотация.** Методом молекулярной динамики исследованы кинетика и механизмы плавления монокристалла  $\alpha$ -железа, индуцированного воздействием одиночного пикосекундного лазерного импульса. Для имитации быстрого поверхностного нагрева использовался подход, при котором начальное распределение температуры задавалось в соответствии с решением уравнения теплопроводности с учетом теплофизических свойств материала и параметров облучения. Ключевым варьируемым фактором, определяющим тепловое состояние системы, выступала плотность энергии лазерного импульса. В результате компьютерного эксперимента зафиксировано образование двухфазной системы «расплав-твердое тело» и изучена ее эволюция. С помощью алгоритма анализа общих соседей и последующего построения изоповерхности на основе скалярного поля локальной структурной упорядоченности проведена идентификация положения межфазной границы в различные моменты модельного времени. Анализ показал одновременную реализацию гетерогенного и гомогенного механизмов плавления, что является прямым указанием на достижение кристаллической решеткой существенного перегретого состояния. На основе анализа перемещения межфазной границы определена зависимость скорости фронта плавления от величины перегрева в широком диапазоне плотностей мощности энергии облучения. Установлено, что при перегревах свыше 300 К скорость фронта достигает значений порядка нескольких сотен метров в секунду. Показано, что полученная зависимость удовлетворительно описывается в рамках модифицированной кинетической модели Вильсона-Френкеля, что подтверждает возможность применения данного феноменологического подхода для описания сверхбыстрых фазовых переходов. Полученные количественные данные могут быть применены для верификации континуальных моделей и оптимизации режимов прецизионной лазерной микрообработки и абляции, где критически важен контроль глубины и морфологии расплавленной зоны.

**Ключевые слова:** лазерный импульс, молекулярная динамика, железо, фазовый переход, плавление, скорость межфазной границы

---

**Для цитирования:** Маркидонов А.В., Старостенков М.Д., Гостевская А.Н., Лубяной Д.А., Захаров П.В. Оценка скорости распространения фронта плавления в железе, подвергнутом воздействию пикосекундного лазерного импульса // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2026. Т. 23, № 2. С. 180-188. doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2026.02.004.

---

Original article

## ESTIMATION OF THE FRACTIONAL DISTRIBUTION OF THE MELTING FRONT IN IRON SUBJECTED TO A PICOSECOND LASER PULSE

Artem V. Markidonov<sup>1,3</sup>, Mikhail D. Starostenkov<sup>2</sup>, Anastasia N. Gostevskaya<sup>3</sup>,  
Dmitry A. Lubyanyoy<sup>4</sup>, Pavel V. Zakharov<sup>5</sup>

<sup>1</sup>Kuzbass Humanitarian Pedagogical Institute, Kemerovo State University, st. Tsiolkovsky, 23, 654041, Novokuznetsk, Russia

<sup>2</sup>Altai State Technical University named after I.I. Polzunova, ave. Lenina, 46, 656038, Barnaul, Russia

<sup>3</sup>Siberian State Industrial University, st. Kirova, 42, 654006, Novokuznetsk, Russia

<sup>4</sup>Branch of the Kuzbass State Technical University named after T.F. Gorbachev in Prokopyevsk, Nogradskaya st., 19A, 653039, Prokopyevsk, Russia

<sup>5</sup>Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, st. Politekhicheskaya, 29, 195251, St. Petersburg, Russia

<sup>1</sup> markidonov\_artem@mail.ru†, <https://orcid.org/0000-0002-4566-528X>

<sup>2</sup> genphys@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-6326-7613>

<sup>3</sup> lokon1296@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-7328-5444>

<sup>4</sup> lubjanoy@yandex.ru, <https://orcid.org/0000-0001-9773-3558>

<sup>5</sup> zakharovpvl@rambler.ru, <https://orcid.org/0000-0002-6410-1594>

**Abstract.** The kinetics and mechanisms of melting of an  $\alpha$ -iron single crystal induced by a single picosecond laser pulse were studied using molecular dynamics simulation. To simulate rapid surface heating, an approach was used in which the initial temperature distribution was specified in accordance with the solution of the heat conduction equation, taking into account the thermophysical properties of the material and the irradiation parameters. The key variable factor determining the thermal state of the system was the energy density of the laser pulse. A computer experiment detected the formation of a two-phase "melt-solid" system and studied its evolution. Using a common neighbor analysis algorithm and subsequent construction of an isosurface based on a scalar field of local structural ordering, the position of the interphase boundary was identified at various points in the simulation time. The analysis revealed the simultaneous occurrence of heterogeneous and homogeneous melting mechanisms, which directly indicates that the crystal lattice has reached a significant superheated state. Based on an analysis of interphase boundary displacement, the dependence of melting front velocity on superheating was determined over a wide range of irradiation power densities. It was found that at superheats above 300 K, the front velocity reaches values on the order of several hundred meters per second. It was shown that the resulting dependence is satisfactorily described by the modified Wilson-Frenkel kinetic model, confirming the applicability of this phenomenological approach to describing ultrafast phase transitions. The obtained quantitative data can be used to verify continuum models and optimize precision laser micromachining and ablation modes, where control of the depth and morphology of the melted zone is critical.

**Keywords:** model, temperature, dislocations, relaxation, immersed atom

**For citation:** Markidonov A.V., Starostenkov M.D., Gostevskaya A.N., Lubyanyoy D.A., Zakharov P.V. (2026). Estimation of the melting front velocity in iron exposed to a picosecond laser pulse. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 23(2), 180-188. (In Russ.). doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2026.02.004.

### Введение

Лазерная импульсная обработка материалов является одним из наиболее динамично развивающихся направлений современной лазерной физики и материаловедения. Особый интерес в последние десятилетия представляет переход к ультракоротким (пико- и фемтосекундным) лазерным импульсам, что кардинально изменяет характер взаимодействия излучения с веществом. В отличие от длинных

(наносекундных) импульсов, где доминируют тепловые процессы, ультракороткие импульсы обеспечивают сверхбыструю доставку энергии непосредственно в электронную подсистему материала. Это приводит к реализации нестационарных и неравновесных режимов, при которых релаксационные процессы (электрон-фононное взаимодействие, теплопроводность) начинают играть определяющую роль в последующей трансформации вещества.

Исследование фазовых переходов, в частности, плавления металлов под воздействием пикосекундных лазерных импульсов, представляет собой фундаментальную научную задачу. Классические модели плавления, основанные на концепции квазистатического нагрева, оказываются неприменимыми в условиях экстремально высоких скоростей нагрева и существенного отклонения от термодинамического равновесия между электронами и кристаллической решеткой. В таких условиях возможно возникновение таких явлений, как фазовый взрыв, гомогенное зарождение центров плавления, подавление испарения за счет инерционного удержания вещества, а также реализация метастабильных состояний (например, перегретого твердого тела) [1-3].

Актуальность данной работы обусловлена не только необходимостью углубления понимания физики сверхбыстрых процессов, но и широкими практическими приложениями. Управляемое пикосекундное лазерное воздействие на железо открывает широкие возможности для реализации таких высокоточных технологий, как сверхбыстрая закалка с формированием неравновесных структур, поверхностное упрочение без существенного изменения геометрии изделия, импульсное легирование путем перемешивания материала в расплавленной зоне, а также лазерная абляционная очистка поверхности от оксидов и загрязнений. Эффективность и качество этих технологий напрямую зависят от точного контроля над процессами плавления и последующей перекристаллизации, что невозможно без детального знания их кинетики и механизмов на микро- и наноровне.

Целью настоящего исследования является моделирование и анализ процесса инициирования и развития плавления в металлической мишени (на примере железа) под воздействием одиночного пикосекундного лазерного импульса.

Новизна исследования заключается в получении новых количественных данных о зависимости скорости фронта плавления железа от величины перегрева в диапазоне температур, который ранее был исследован недостаточно.

## Материалы, методы и методики исследования

Моделирование методом молекулярной динамики проводилось на прямоугольной расчетной ячейке, представляющей собой монокристалл железа. Ориентация ячейки была выбрана таким образом, чтобы координатные оси совпадали с ортогональными кристаллографическими направлениями: [100], [010] и [001]. Для имитации поверхности вдоль одного из направлений использовались свободные граничные условия, а вдоль оставшихся двух – периодические. Описание межатомных взаимодействий осуществлялось при помощи потенциала погруженного атома (EAM), параметры которого взяты из работы [4]. Интегрирование уравнений движения выполнялось по скоростному алгоритму Верле с временным шагом 1 фс. Все расчеты были проведены с использованием открытого программного пакета для молекулярной динамики XMD [5]. Визуализация атомных конфигураций и результатов анализа структуры с применением специализированных алгоритмов, выполнялась с помощью программного пакета OVITO [6].

Лазерный нагрев имитировался созданием пространственно-неоднородного распределения кинетической энергии атомов, формирующего температурный градиент от поверхности вглубь кристалла. Это распределение соответствовало решению уравнения теплопроводности с учетом поглощательной способности материала, его теплофизических свойств и параметров облучения (длительности импульса и плотности мощности  $q$ ). Более подробно процедура моделирования описана в [7, 8].

Необходимо оговорить, что для моделирования воздействия лазерного импульса на металл часто используют комбинацию классического метода молекулярной динамики и уравнения двухтемпературной модели [9]. При этом для учета обмена энергией между электронами и решеткой вводится дополнительный член в уравнения движения. Применение такого гибридного подхода оправдано при изучении воздействия фемтосекундных лазерных импульсов [10-13]. Так как мы рассматриваем лазерный импульс длительностью 10 пс, которое на порядок превышает время установления равновесия между электронами и решеткой атомов, то внесение корректировок в уравнения движения не требовалось.

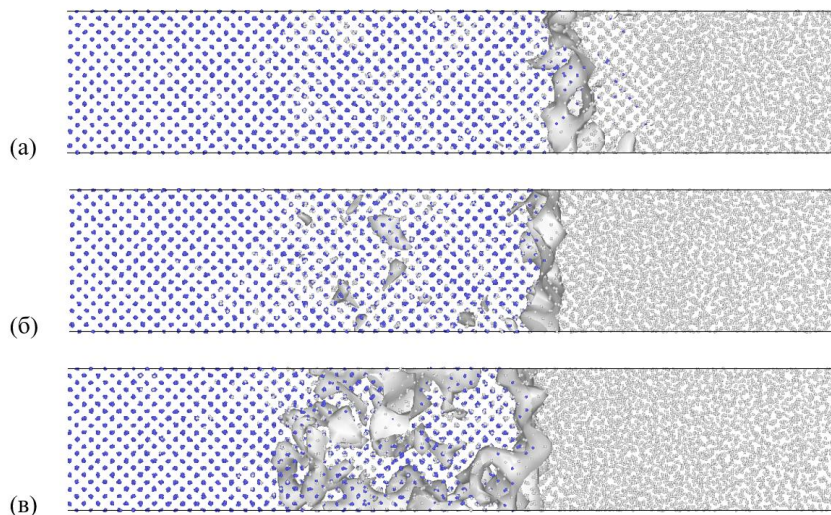
## Результаты и их обсуждение

Процесс моделирования характеризовался быстрым нагревом приповерхностной области расчетной ячейки, испарением атомов с поверхности и формированием двухфазной системы «расплав–твёрдое тело».

Для идентификации границы раздела твёрдой и жидкой фазы можно воспользоваться методом построения изоповерхности на базе скалярного поля локальной структурной упорядоченности. В данном случае строится непрерывная трехмерная сетка, которая разделяет области с «идеальной» кристаллической структурой и с нарушенной упорядоченностью [14]. Для этого производится анализ общих соседей, чтобы идентифицировать тип упаковки (при помощи метода CNA), и для каждого атома вычисляется показатель, характеризующий степень соответствия его локального окружения эталонной кристаллической решётке. Далее полученные значения упорядоченности в точках расположения атомов интерполируются на трехмерную сетку, что создает непрерывное скалярное поле, а затем строится треугольная сетка, аппроксимирующая поверхность некото-

рого уровня, который определяет порог между рассматриваемыми областями («расплав–твёрдое тело»).

На рисунке 1 представлен фрагмент расчетной ячейки в различные моменты времени, демонстрирующий наличие поверхности раздела фаз, и из которого видно, что в течение численного эксперимента межфазная граница смещается от поверхности вглубь кристалла, так как в данном случае температура моделируемой системы превышает температуру плавления железа. Кроме того, применяемый метод визуализации показывает, что существуют области плавления, формирующиеся непосредственно в твёрдой фазе. Это свидетельствует о том, что моделируемая система пребывает в перегретом состоянии, при котором реализуется еще один механизм плавления – объёмный. Таким образом, в нашем случае нагрев осуществляется со скоростью, при которой реализация только поверхностного механизма плавления становится не достаточным откликом на внешнее воздействие – к моменту приближения межфазной границы в объеме кристалла уже происходят структурные преобразования.



**Рис.1.** Визуализация межфазной границы «твёрдое тело - жидкость» в различные моменты компьютерного эксперимента ( $q = 5 \text{ ГВт/см}^2$ ): 4 (а), 6 (б) и 8 (в) пс модельного времени

**Fig. 1.** Visualization of the solid-liquid interface at different moments of the computer experiment ( $q = 5 \text{ GW/cm}^2$ ): 4 (a), 6 (b) and 8 (c) ps of model time

Напомним, что плавление твёрдых тел представляет собой сложный физический процесс, для описания которого традиционно рас-

сматривается два механизма – гетерогенный (поверхностный) и гомогенный (объёмный).

Гетерогенное плавление рассматривается как движение сплошной среды с поверхностью

разрыва, на которой происходит скачкообразное изменение термодинамических и теплофизических параметров вещества. В рамках классической термодинамики этот процесс относится к фазовому переходу первого рода, протекающему при определённой равновесной температуре плавления  $T_{пл}$ , при которой свободные энергии Гиббса твёрдой и жидкой фаз равны.

Гомогенный механизм плавления предполагает флуктуационное зарождение новой фазы (жидкости) внутри некоторого объёма кристалла, усиливающееся при повышении температуры. Данный механизм возможен при условии перегрева кристаллической решётки выше  $T_{пл}$ .

Необходимо отметить, что процессы лазерного плавления при условии длительного воздействия и медленного нагрева образца, рассматриваются в рамках квазистационарных условий, т.е. когда фазовый переход происходит при постоянной  $T_{пл}$  и вся подводимая энергия тратится на перестройку структуры решетки. Однако при быстром лазерном нагреве скорость подвода энергии настолько велика, что кристаллическая решётка просто не успевает перестраиваться при постоянной температуре и фазовый переход происходит в некотором диапазоне температур.

Основной кинетической характеристикой гетерогенных фазовых переходов является скорость межфазной границы. Согласно термодинамическому подходу, эта величина при малых отклонениях от равновесного состояния линейно пропорциональна величине перегрева:

$$v(T) \approx \mu \Delta T, \quad (1)$$

где  $\Delta T = T - T_{пл}$ ,  $T$  – текущая температура образца,  $\mu$  – константа пропорциональности (кинетический коэффициент).

В работе [15] показано, что температурная зависимость скорости (1) остается справедливой в том числе и для некоторого малого температурного диапазона перегретых состояний твердой фазы вблизи  $T_{пл}$ , при котором она во многом определяется разницей свободных энергий кристалла и жидкости, а аналитическое выражение для  $\mu$  может быть получено исходя из кинетического подхода в рамках феноменологической теории Вильсона-Френкеля, согласно которой скорость межфазной границы связана с диффузией атомов в жидкой фазе.

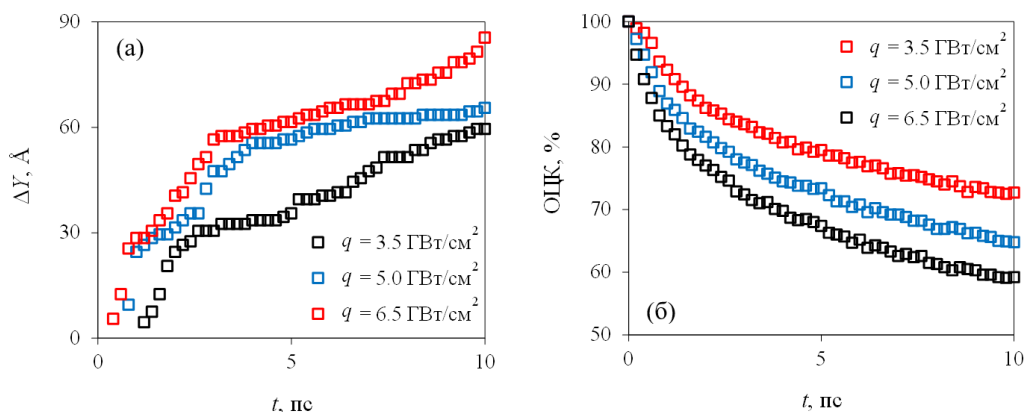
Лазерное облучение материала приводит к неоднородному и нестационарному нагреву.

Фронт плавления обычно распространяется от облучаемой поверхности вглубь материала, а после окончания действия импульса происходит затвердевание, при которой фронт кристаллизации движется в обратном направлении. В данном случае для определения распределения температурных полей в твёрдой и жидкой фазах, а также для определения положения межфазной границы в каждый момент времени, требуется решение задачи Стефана, при постановке которой делается обобщение квазистационарных моделей плавления на случай нестационарного и неоднородного нагрева. Аналитическое решение задачи Стефана для условий лазерного нагрева является сложной математической задачей, и обычно его получают с применением численных методов. Тем не менее, в рамках молекулярно-динамического моделирования достаточно успешно осуществляется исследование кинетики быстрых фазовых переходов. Так, например, в работах [16, 17] авторы демонстрируют удовлетворительное соответствие результатов моделирования металлов, пребывающих в перегретых состояниях (в среднем температура моделируемой системы превышает  $T_{пл}$  на 20%), со значениями скорости межфазной границы, вычисленной в рамках модифицированной кинетической модели Вильсона-Френкеля:

$$v(T) = \alpha \sqrt{\frac{3k}{m}} T \cdot \left[ \exp\left(\beta \frac{L_{пл}}{kT_{пл}} \cdot \frac{\Delta T}{T}\right) - 1 \right], \quad (2)$$

где  $\alpha$ ,  $\beta$  – параметры аппроксимации,  $k$  – Постоянная Больцмана,  $m$  – масса частицы,  $L_{пл}$  – скрытая теплота плавления.

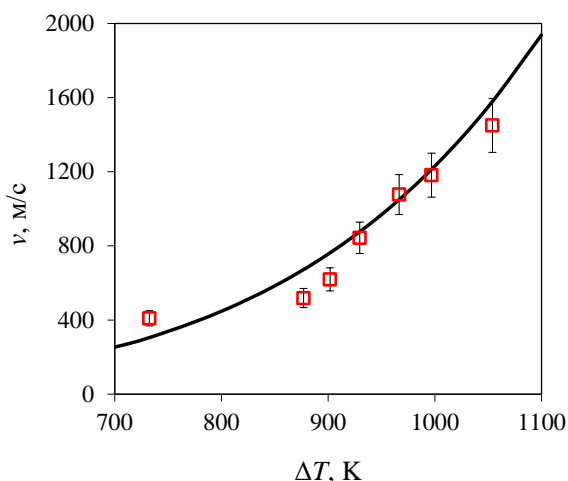
В нашем случае оценка скорости фронта межфазной границы выполнялась следующим образом. В расчетной ячейке определялось положение границы раздела в различные моменты времени (см. рис. 2.а), затем, зная за какой временной интервал граница переместилась через выбранную область, вычислялась средняя температура данной области на этом же интервале. Таким образом, варьируя  $q$  и, как следствие, нагрев расчетной ячейки, вычислялось множество точек зависимости  $v(T)$ . Влияние  $q$  на скорость фронта плавления можно оценить по уменьшению доли атомов, принадлежащих ОЦК-фазе в течение вычислительного эксперимента (см. рис. 2.б).



**Рис.2.** Изменения положения фронта межфазной границы «расплав–твердое тело» относительно поверхности кристалла (а) и доли атомов расчетной ячейки, принадлежащих ОЦК-фазе (б), в течение компьютерного эксперимента при различной плотности мощности излучения

**Fig. 2.** Changes in the position of the melt-solid interphase boundary front relative to the crystal surface (a) and the proportion of atoms in the computational cell belonging to the bcc phase (b) during a computer experiment at different radiation power densities

Для сопоставления результатов моделирования с модифицированной кинетической модели Вильсона-Френкеля методом наименьших квадратов по полученным значениям (добавлялась еще очевидное условие, что при  $T = T_{nl}$  скорость фронта равна 0) определялись параметры аппроксимации в уравнении (2) и строился график функции  $v(T)$  (см. рис. 3) (на графике заданы планки 10%-погрешности).



**Рис.3.** Зависимость скорости фронта межфазной границы «расплав–твердое тело» от величины перегрева моделируемой системы

**Fig. 3.** Dependence of the velocity of the melt-solid interphase boundary front on the superheating value of the simulated system

В нашем случае удалось определить скорость фронта при большем перегреве моделируемой системе по сравнению с работами [16, 17] (поэтому для наглядности по оси абсцисс приводится  $\Delta T$ ), и полученное значение скорости выше, но не противоречащее результатам сторонних авторов (например, можно сделать вывод из графика, представленного в работе [16], что при  $\Delta T \approx 300$  К скорость равна 280 м/с). Различия в полученных значениях  $\alpha$  и  $\beta$  вряд ли можно считать большим недостатком, так как сами авторы [16] указывают на то, что эти параметры необходимы лишь для достижения точности зависимости  $v(T)$  на широком температурном интервале. И, кроме того, необходимо учесть наличие объемного механизма плавления, из-за которого в отдельных случаях наблюдалось скачкообразное изменение положения межфазной границы (см. рис. 2.а), что в итоге привело к более высоким скоростям фронта.

Также необходимо оговорить, что в ряде работ [15, 18] приводятся результаты, свидетельствующие о том, что скорость фронта межфазной границы зависит от кристаллографического направления, по крайней мере, для температурного диапазона вблизи  $T_{nl}$ . Для изучения этого вопроса нами было проведено дополнительное исследование при изменении кристаллографической ориентации расчетной ячейки (рассматривалась поверхность вдоль

направлений  $[111]$ ,  $[1\bar{1}0]$  и  $[11\bar{2}]$ ), но полученные различия в скорости можно свести лишь к статистической погрешности и, таким образом, следует признать, что при высокой степени перегрева системы этот фактор становится не существенным.

### Заключение.

В рамках молекулярно-динамического моделирования проведено исследование кинетики плавления монокристалла железа, индуцированного пикосекундным лазерным импульсом.

Визуализация процесса с использованием метода построения изоповерхности на основе поля локальной упорядоченности позволила однозначно идентифицировать межфазную границу «твердое тело–жидкость» и отследить ее эволюцию во времени. Обнаружено одновременное протекание двух механизмов плавления: гетерогенного (с движением четкой границы из приповерхностной области) и гомогенного (с флуктуационным зарождением жидкой фазы в объеме). Это является прямым свидетельством достижения перегретого состояния кристаллической решетки при моделируемых скоростях нагрева.

Количественная оценка скорости движения фронта плавления  $v(T)$  в зависимости от величины перегрева системы  $\Delta T$ , индуцированного варьированием плотности мощности энергии лазерного импульса  $q$ , показала, что достигаемые значения составляют нескольких сотен метров в секунду. Полученная температурная зависимость скорости удовлетворительно аппроксимируется модифицированным уравнением кинетической теории Вильсона-Френкеля. Это подтверждает применимость данного феноменологического подхода для описания кинетики фазовых переходов не только вблизи равновесия, но и в условиях значительного перегрева.

Таким образом, проведенное исследование вносит вклад в понимание механизмов и кинетики сверхбыстрого лазерного плавления металлов.

### Список литературы

1. Phillips K.C., Gandhi H.H., Mazur E., Sundaram S.K. Ultrafast laser processing of materials: a review // *Advances in Optics and Photonics*. 2015. V.7. №4. Pp.684-712.
2. Liu X. Ultrafast lasers as a versatile processing tool // *High-Power Lasers in Manufacturing*. 2000. V.3888. Pp.198-209.
3. Sugioka K. Progress in ultrafast laser processing and future prospects // *Nanophotonics*. 2016. V.5. Pp.17-37.
4. Mendeleev M.I., Han S., Srolovitz D.J., Ackland G.J., Sun D.Y., Asta M. Development of new interatomic potentials appropriate for crystalline and liquid iron // *Philosophical Magazine*. 2003. V.83. №35. Pp.3977-3994.
5. XMD - Molecular Dynamics Program. URL: <https://xmd.sourceforge.net>.
6. Stukowski A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO – the Open Visualization Tool // *Modelling and Simulation Materials Science and Engineering*. 2010. V.18. 015012.
7. Маркидонов А.В., Старостенков М.Д., Гостевская А.Н., Лубяной Д.А., Захаров П.В. Моделирование структурных изменений поверхностного слоя ОЦК-металла при кратковременном высокоэнергетическом воздействии методом молекулярной динамики // *Металловедение и термическая обработка металлов*. 2022. №5 (803). С.16-21.
8. Маркидонов А.В., Гостевская А.Н., Громов В.Е., Старостенков М.Д., Зыков П.А. Моделирование структурных изменений в поверхностном слое деформированного ОЦК-кристалла при кратковременном внешнем высокоинтенсивном воздействии // *Деформация и разрушение материалов*. 2022. №8. С.2-8.
9. Жигилей Л.В., Левегль Э., Иванов Д.С., Лин Ж., Волков А.Н. Моделирование короткоимпульсной лазерной абляции методом молекулярной динамики: механизмы эжекции материала и формирования наночастиц // *Синтез наноразмерных материалов при воздействии мощных потоков энергии на вещество – Новосибирск: Ин-т теплофизики СО РАН*, 2009. С.147-220.
10. Ohmura E., Fukumoto I. Modified molecular dynamics simulation on laser ablation of metal // *Ibid*. 1997. V.31. P.206-207.
11. Gan Y., Chen J. K. Integrated continuum-atomistic modeling of nonthermal ablation of gold nanofilms by femtosecond lasers // *Applied Physics Letters*. 2009. V.94. №20. 201116.
12. Meng Y., Gong A., Chen Z., Wang Q., Guo J., Li Z., Li J. Atomistic-continuum study of an ultrafast melting process controlled by a femto-

second laser-pulse train // *Materials*. 2024. V.17. №1. 185.

13.Алексашкина А.А., Мажукин В.И. Молекулярно-динамическое исследование механизмов абляции золота под воздействием ультракоротких лазерных импульсов с использованием различных потенциалов // *Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша*. 2024. №36. 30 с.

14.Stukowski A. Computational analysis methods in atomistic modeling of crystals // *The Journal of The Minerals, Metals & Materials Society*. 2014. V.66. №3. P.399-407.

15.Mendelev M.I., Rahman M.J., Hoyt J.J., Asta M. Molecular-dynamics study of solid-liquid inter face migration in FCC metals // *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*. 2010. V.18. 074002.

16.Мажукин В.И., Шапранов А.В., Пережигин В.Е., Королёва О.Н., Мажукин А.В. Кинетические стадии плавления и кристаллизации сильно перегретых и переохлажденных металлов // *Математическое моделирование*. 2016. Т.28. №12. С.83-94.

17.Мажукин В.И., Шапранов А.В., Королева О.Н., Мажукин А.В. Атомистическое моделирование распространения фронта плавления/кристаллизации для металлов на основе обобщения модифицированной теории переходного состояния // *Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша*. 2021. №90. 20 с.

18.Hoyt J.J., Asta M., Karma A. Atomistic and continuum modeling of dendritic solidification // *Materials Science and Engineering R*. 2003. V.41. P.121-163.

### Информация об авторах

*А.В. Маркидонов – доктор физико-математических наук, доцент, заведующий кафедрой информатики и вычислительной техники им. В.К. Буторина КГПИ ФГБОУ ВО КемГУ, профессор кафедры прикладной математики и информатики СибГИУ;*

*М.Д. Старостенков – доктор физико-математических наук, профессор, профессор кафедры физики АлтГТУ;*

*А.Н. Гостевская – преподаватель кафедры механики и машиностроения СибГИУ;*

*Д.А. Лубяной – кандидат технических наук, доцент кафедры технологии и комплексной механизации горных работ филиала КузГТУ в г. Прокопьевске;*

*П.В. Захаров – доктор физико-математических наук, доцент, профессор кафедры физики СПбПУ.*

### References

1. Phillips K.C., Gandhi H.H., Mazur E., Sundaram S.K. Ultrafast laser processing of materials: a review // *Advances in Optics and Photonics*. 2015. V.7. No. 4. Pp.684-712.

2. Liu X. Ultrafast lasers as a versatile processing tool // *High-Power Lasers in Manufacturing*. 2000.V.3888. Pp.198-209.

3. Sugioka K. Progress in ultrafast laser processing and future prospects // *Nanophotonics*. 2016. V.5. Pp.17–37.

4. Mendelev M.I., Han S., Srolovitz D.J., Ackland G.J., Sun D.Y., Asta M. Development of new interatomic potentials appropriate for crystal-line and liquid iron // *Philosophical Magazine*. 2003. V.83. No. 35. Pp.3977-3994.

5. XMD - Molecular Dynamics Program. URL: <https://xmd.sourceforge.net>.

6. Stukowski A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO – the Open Visualization Tool // *Modeling and Simulation Materials Science and Engineering*. 2010. V.18. 015012.

7. Markidonov A.V., Starostenkov M.D., Gostevskaya A.N., Lubyany D.A., Zakharov P.V. Modeling of structural changes in the surface layer of a bcc metal under short-term high-energy impact using the molecular dynamics method // *Metallography and heat treatment of metals*. 2022. No. 5 (803). P. 16-21.

8. Markidonov A.V., Gostevskaya A.N., Gromov V.E., Starostenkov M.D., Zykov P.A. Modeling of structural changes in the surface layer of a deformed bcc crystal under short-term external high-intensity impact // *Deformation and fracture of materials*. 2022. No. 8. P. 2-8.

9. Zhigilev L.V., Levegle E., Ivanov D.S., Lin Zh., Volkov A.N. Modeling of short-pulse laser ablation by the molecular dynamics method: mechanisms of material ejection and nanoparticle formation // *Synthesis of nanosized materials under the action of powerful energy flows on matter - Novosibirsk: Institute of Thermal Physics SB RAS*, 2009. pp. 147-220.

10. Ohmura E., Fukumoto I. Modified molecular dynamics simulation on laser ablation of metal // *Ibid*. 1997. Vol. 31. pp. 206-207.

11. Gan Y., Chen J. K. Integrated continuum-atomistic modeling of nonthermal ablation of gold nanofilms by femtosecond lasers // *Applied Physics Letters*. 2009. Vol. 94. No. 20. 201116.

12. Meng Y., Gong A., Chen Z., Wang Q., Guo J., Li Z., Li J. Atomistic-continuum study of an ultrafast melting process controlled by a femtosecond laser-pulse train // *Materials*. 2024. Vol. 17. No. 1. 185.

13. Aleksashkina A.A., Mazhukin V.I. Molecular dynamics study of gold ablation mechanisms under the influence of ultrashort laser pulses using different potentials // *Preprints of the Keldysh Institute of Problems of Materials Science*. 2024. No. 36. 30 p.

14. Stukowski A. Computational analysis methods in atomistic modeling of crystals // *The Journal of The Minerals, Metals & Materials Society*. 2014. Vol. 66. №3. P.399-407.

15. Mendeleev M.I., Rahman M.J., Hoyt J.J., Asta M. Molecular-dynamics study of solid-liquid interface migration in FCC metals // *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*. 2010. V.18. 074002.

16. Mazhukin V.I., Shapranov A.V., Perezhigin V.E., Koroleva O.N., Mazhukin A.V. Kinetic stages of melting and crystallization of highly superheated and supercooled metals // *Mathematical modeling*. 2016. Vol.28. №12. P.83-94.

17. Mazhukin V.I., Shapranov A.V., Koroleva O.N., Mazhukin A.V. Atomistic modeling of melting/crystallization front propagation for metals

based on a generalization of the modified transition state theory // *Preprints of the Keldysh Institute of Problems of Materials Science*. 2021. No. 90. 20 p.

18. Hoyt J.J., Asta M., Karma A. At-omistic and continuum modeling of dendritic solidification // *Materials Science and Engineering R*. 2003. V.41. P.121-163.

### ***Information about the authors***

*A.V. Markidonov - Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor, Head of the Department of Informatics and Computer Engineering. VC. Butorina KSPI FSBEI HE KemSU, Professor of the Department of Applied Mathematics and Informatics of SibSIU;*

*M.D. Starostenkov - Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Professor of the Department of Physics of the Altai State Technical University;*

*A.N. Gostevskaya - post-graduate student of the Department of Natural Sciences named after prof. V.M. Finkel SibGIU;*

*Y. Lubyanyoy - Candidate of Technical Sciences, Associate Professor of the Department of Technology and Integrated Mechanization of Mining at the branch of KuzGTU in Prokopyevsk;*

*P.V. Zakharov - Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor, Professor of the Department of Physics, St. Petersburg Polytechnic University.*

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

Статья поступила в редакцию 07.03.2026; одобрена после рецензирования 25.05.2026; принята к публикации 01.06.2026.

The article was received by the editorial board on 07 Mar. 2026; approved after reviewing 25 May 2026; accepted for publication 01 Jun. 2026.