

## РАЗДЕЛ 1. ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

Научная статья

1.3.8. Физика конденсированного состояния (физико-математические науки)

УДК 538.911

doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2024.04.001

### МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ОБРАЗОВАНИЯ ОБЛАСТЕЙ РАЗОРИЕНТАЦИИ В ДЕФОРМИРОВАННОМ КРИСТАЛЛЕ ЖЕЛЕЗА ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ ЛАЗЕРНОГО ИМПУЛЬСА

Артём Владимирович Маркидонов<sup>1†</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, пр. Ленина, 46, 656038, Барнаул, Россия

<sup>1,3</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.** Известно, что воздействие лазерных импульсов на поверхность металла сопровождается такими процессами как локальный нагрев, плавление и даже испарение металла, что приводит к различным структурным изменениям поверхности. Очевидно, что в связи с широким применением лазера в качестве инструмента обработки материалов исследование процессов, сопутствующих его воздействию, является актуальной задачей, которую, впрочем, не всегда удается решить исключительно экспериментальным путем и в данном случае требуется применение дополнительных методов исследования. В представленной работе методом молекулярной динамики изучаются структурные изменения, происходящие в монокристалле железа, подвергнутому относительной деформации различной величины, при моделируемом воздействии лазерного импульса. Предполагается, что подобное воздействие сопровождается лишь разогревом облученного материала до достаточно высоких температур. Показано, что в результате последующей структурной релаксации в кристалле образуются дислокации, являющиеся откликом на внешнее воздействие, а по мере роста величины деформации формируются области разориентации. При этом для разориентации в данном случае не требуются большие деформации, а необходимо наличие жидкой фазы, а также избыточный свободный объем. Высказывается предположение, что возникновению областей разориентации также способствуют касательные напряжения, создаваемые межфазной границей.

**Ключевые слова:** модель, кристалл, поверхность, деформация, разориентация.

**Благодарности:** Исследования проводились в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации № 075-00087-2401.

**Для цитирования:** Маркидонов А.В., Старостенков М.Д., Гостевская А.Н., Лубяной Д.А., Захаров П.В. Молекулярно-динамическое моделирование образования областей разориентации в деформированном кристалле железа при воздействии лазерного импульса // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2024. Т. 21, № 4. С. 413–421. doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2024.04.001.

Original article

**MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION OF THE FORMATION OF MISORIENTATION AREAS IN A DEFORMED IRON CRYSTAL UNDER INFLUENCE OF A LASER PULSE****Artem V. Markidonov<sup>1†</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, Tsiolkovsky Str., 23, Novokuznetsk, 654041, Russia<sup>2</sup> I.I. Polzunov Altai State Technical University, Lenin Pr., 46, Barnaul, 656038, Russia<sup>1,3</sup> Siberian State Industrial University, Kirova Str., 42, Novokuznetsk, 654006, Russia<sup>4</sup> Branch of the Kuzbass State Technical University named after T.F. Gorbachev in Prokopyevsk, Nogradskaya Str., 19A, Prokopyevsk, 653039, Russia<sup>5</sup> Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, Politekhnikeskaya Str., 29, St. Petersburg, 195251, Russia<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> zakharovpvl@rambler.ru, <https://orcid.org/0000-0002-6410-1594>

**Abstract.** It is known that the effect of laser pulses on a metal surface is accompanied by processes such as local heating, melting and even evaporation of the metal, which leads to various structural changes in the surface. Obviously, due to the widespread use of lasers as a tool for processing materials, the study of processes accompanying its effects is an urgent task, which, however, cannot always be solved exclusively experimentally and in this case the use of additional research methods is required. In the presented work, the molecular dynamics method is used to study the structural changes occurring in an iron single crystal subjected to relative deformations of various magnitudes under simulated exposure to a laser pulse. It is assumed that such an effect is accompanied only by heating the irradiated material to sufficiently high temperatures. It is shown that as a result of subsequent structural relaxation, dislocations are formed in the crystal, which are a response to external influence, and as the magnitude of the deformation increases, regions of misorientation are formed. Moreover, for misorientation in this case, large deformations are not required, but the presence of a liquid phase, as well as excess free volume, is necessary. It is suggested that the appearance of misorientation regions is also facilitated by tangential stresses created by the interphase boundary.

**Keywords:** model, crystal, surface, deformation, misorientation.

**Acknowledgements:** The investigation was carried out within the framework of the state task of the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation No. 075-00087-2401.

**For citation:** Markidonov, A. V., Starostenkov, M. D., Gostevskaya, A. N., Lubyanyoy, D. A. & Zakharov, P. V. Molecular dynamics modeling of the formation of misorientation regions in a deformed iron crystal under the influence of a laser pulse. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedenia (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 21(4), 413–421. (In Russ.). doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2024.04.001.

**Введение**

При импульсной лазерной обработке, когда длительность воздействия на поверхность обрабатываемого материала не превышает несколько миллисекунд, но при этом локальная температура достигает огромных значений, в материале возникают зоны температурных градиентов. В результате этого воздействие лазерного излучения на твердое тело инициирует протекание различных физико-химических процессов, приводящих к формированию уникальных микроструктур. В зависимости от свойств облучаемых материалов и параметров лазера могут возникать, в частности, локальные

деформации [1, 2], перекристаллизации, сопровождающиеся ротационным поворотом субзерен [3], а также микроискажения кристаллической решетки [4], что особенно заметно для материалов, не содержащих примеси [5]. Деформации и искажения решетки возникают из-за неравновесного нагрева и последующего анизотропного теплового расширения, что может способствовать понижению симметрии кристалла. Но обнаружение искажений кристалла экспериментальным путем, к примеру с помощью рентгеноструктурного анализа, является сложной задачей, так как прочие структурные дефекты, образующиеся при лазерном воздействии, вносят заметный вклад в рентгенограм-

му. Поэтому для изучения изменений, происходящих в структуре кристалла при облучении, с успехом могут применяться методы компьютерного моделирования. Актуальность данного направления исследований обусловлена тем, что без понимания сути физических процессов, лежащих в основе структурных изменений, происходящих в кристалле при высоких скоростях нагрева, невозможно широкое применение лазерных технологий при реализации перспективных технологических процессов.

Ранее авторами с помощью метода молекулярной динамики были рассмотрены процессы структурных изменений, происходящие в ОЦК-кристалле, при модельном воздействии лазерного импульса [6-8]. В основе построенной модели лежит допущение, что лазерное воздействие приводит лишь к термическому нагреву кристалла. Численные эксперименты показали, что процесс релаксации моделируемой системы после прекращения действия лазерного импульса можно разбить на этапы, которые сопровождаются различными структурными изменениями. Так на начальном этапе в жидкой фазе наблюдается образование пустот, которые по мере приближения межфазной границы заполняются веществом. Более поздний этап сопровождается образованием дислокаций в твердой фазе, источником которых является межфазная граница, создающая касательные напряжения. И если влияние деформации на релаксационные процессы начального этапа было исследовано в работе [7], то целью настоящей работы является исследование ее влияния на позднем этапе релаксации.

### Материалы, методы и методики исследования

Молекулярно-динамическая модель Исследование структурных изменений, происходящих в ОЦК-кристалле при имитируемом лазерном воздействии и деформации, проводилось при помощи метода молекулярной динамики. В качестве объекта исследования использовался монокристалл чистого железа. Численные эксперименты проводились на прямоугольной расчетной ячейке, стороны которой соответствовали кристаллографическим плоскостям (111),  $(1\bar{1}0)$  и  $(11\bar{2})$  (перпендикулярные им оси координат обозначим как  $X$ ,  $Y$  и  $Z$  соответственно). При этом вдоль осей  $X$  и  $Z$  использовались периодические граничные условия, а

вдоль оси  $Y$  – комбинация свободных и вязких, благодаря чему создавалась поверхность кристалла.

Для описания межчастичного взаимодействия в модели применялся EAM-потенциал, параметры которого указаны в работе [9].

Решение дифференциальных уравнений движения осуществлялось при помощи скоростного алгоритма Верле. Используемый временной шаг равнялся 1 фс.

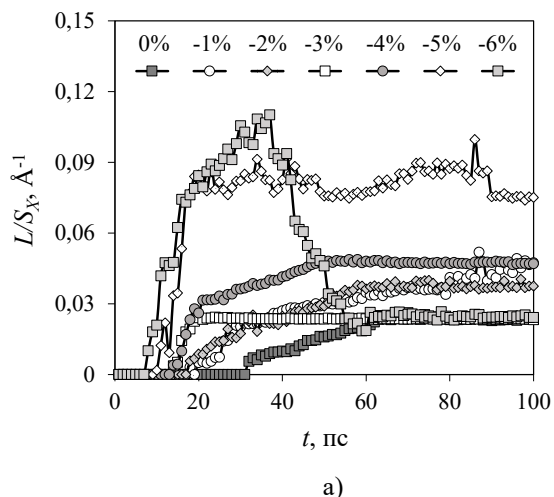
В исходном состоянии межатомное расстояние определяется равновесным параметром решетки  $a$ . Для создания одноосной деформации это расстояние уменьшалось вдоль одной из осей на задаваемую величину. После этого моделируемым частицам присваивалась кинетическая энергия, таким образом, чтобы ее среднее значение было пропорционально задаваемой температуре кристалла. Для того, чтобы поддерживать температуру в соответствии с требуемыми значениями использовалась процедура термостатирования Берендсена.

Вычисления проводились при помощи свободно распространяемого программного обеспечения для молекулярно-динамических расчетов XMD [10], а для визуализации моделируемой структуры применялся пакет OVITO [11].

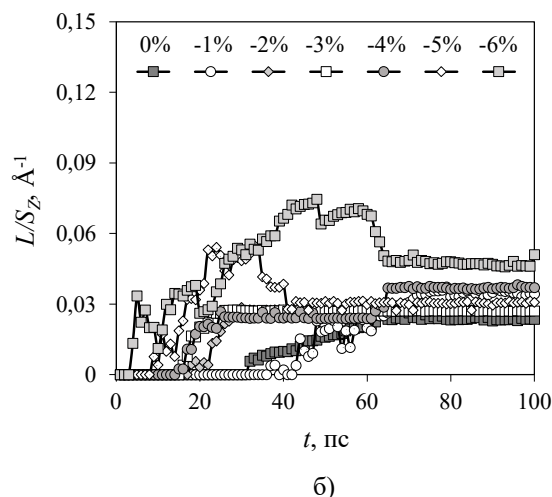
Имитирование нагрева кристалла из-за лазерного воздействия осуществлялось путем неравномерного распределения кинетической энергии частиц, в результате которого вблизи поверхности кристалла температура задавалась выше средней, а по мере удаления от поверхности она снижалась. В результате этого распределение температуры в расчетной ячейке соответствовало решению тепловой задачи, в которую закладываются такие физические параметры моделируемого материала как поглощательная способность, теплопроводность, температуропроводность, а также характеристики облучения – длительность воздействия и плотность энергии  $q$ . Именно варьирование последней величины в численных экспериментах позволяет добиваться различных структурных изменений [6]. При этом начальный этап, включающий в себя нагрев расчетной ячейки моделирования (длительностью 10 пс модельного времени), сопровождается эжектированием частиц со свободной поверхности и образованием жидкой фазы, соседствующей с твердой. На втором этапе – этапе охлаждения (длительностью 90 пс модельного времени) – наблюдается процесс кристаллизации, сопровождающийся смещением межфазной границы и образованием дислокаций.

## Результаты и их обсуждение

На начальном этапе исследования расчетная ячейка деформировалась вдоль оси  $X$ , соответствующей кристаллографическому направлению  $[111]$ . Известно, что для ОЦК-решетки это направление наиболее плотноупакованное и является направлением легчайшего скольжения. Поэтому в данном случае стоит ожидать наиболее заметных изменений структуры кристалла.



В ходе численного эксперимента выполнялись вычисления длины образующихся дислокационных линий. Для этого использовался метод, изложенный в работе [12]. Изменение приведенной длины дислокаций в течение численного эксперимента ( $q = 4 \text{ МВт/см}^2$ ) при различной величине деформации представлено на рисунке 1а. Обоснование выбора в пользу использования приведенной величины будет представлено ниже.



**Рис.1.** Изменение приведенной длины образующихся дислокаций в течение численного эксперимента при различной относительной деформации расчетной ячейки: а) сжатие вдоль оси  $X$ , б) вдоль оси  $Z$

**Fig.1.** Change in the reduced length of the resulting dislocations during a numerical experiment at different relative deformations of the calculation cell: а) compression along the  $X$  axis, б) along the  $Z$  axis

При отсутствии деформации, а также при ее величине  $\epsilon_x = -1\%$  и  $-2\%$ , на межфазной границе зарождается одна или несколько полных дислокаций с вектором Бюргерса  $\mathbf{b} = a/2 \langle 111 \rangle$ , которые по мере движения границы петли растут, и либо смыкаются в петлю, либо объединяются с образованием дислокации  $\mathbf{b} = a \langle 100 \rangle$ . При создании деформации дислокации образуются раньше, а их общая протяженность увеличивается.

При  $\epsilon_x = -3\%$  деформация расчетной ячейки начинает оказывать более значительное влияние на формирование дислокаций, и они начинают располагаться строго в плоскости  $(111)$  (см. рис.2). Поэтому для избежания влияния размера расчетной ячейки при построении зависимостей на рисунке 1 рассматривалась длина дислокаций  $L$ , отнесенная к площади грани расчетной ячейки  $S$ , по нормали к которой осуществлялась деформация.

При построении рисунка 2 визуализировались моделируемые частицы, в виде множества сфер, межфазная граница, как поверхность, по-

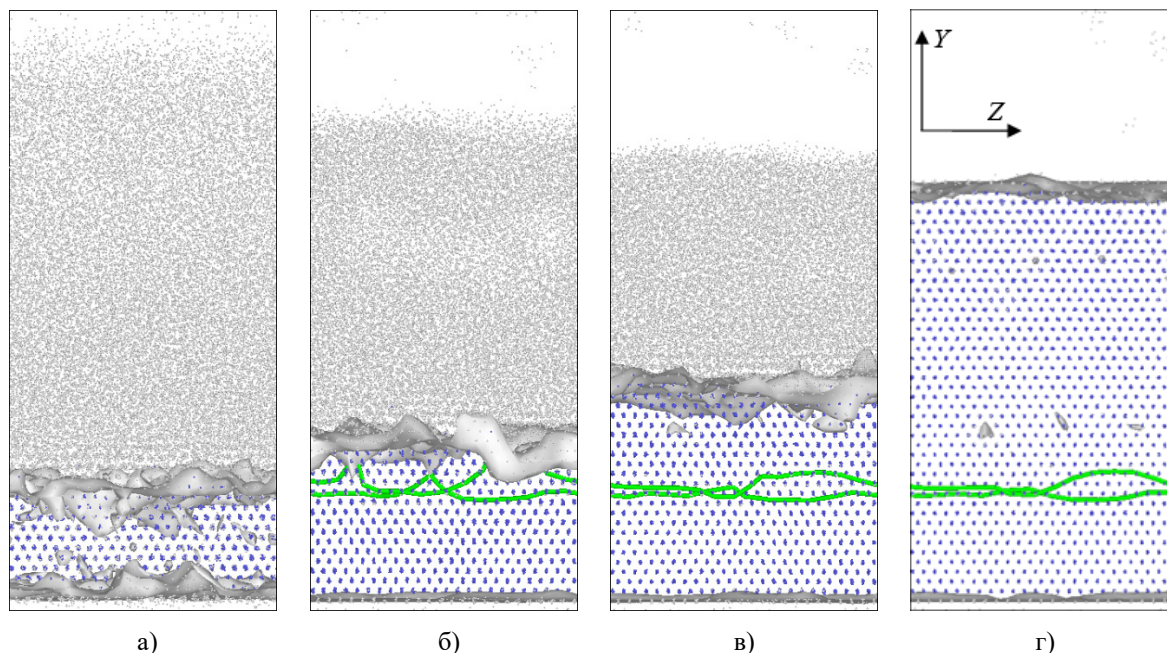
строенная с применением метода триангуляционной сетки, а также дислокационные линии (в данном случае  $\mathbf{b} = a/2 \langle 111 \rangle$ ).

На рисунке 1а график зависимости при  $\epsilon_x = -6\%$  демонстрирует резкое уменьшение приведенной длины дислокаций (почти в три раза) с 37 по 59 пс модельного времени. Визуальный анализ показал, что в данный момент в расчетной ячейке происходит изменение кристаллографической ориентации атомных рядов (см. рис.3). На рисунке заметны две области, имеющие ориентацию, отличную от исходной. Нижняя область разориентации, имеющая вектор разориентации  $\theta = 2^\circ \left( [\bar{1}] \bar{1} 2 \right]$ , сформировалась еще на этапе нагрева и обусловлена деформацией решетки. Для оценки вектора разориентации выполнялись аффинные преобразования координат множества частиц, в результате которых их ориентация в расчетной ячейке возвращалась к исходной. Вторая область, разориентацию которой можно задать векторами  $\theta_1 = 2^\circ \left( [\bar{1}] \bar{1} 2 \right]$  и  $\theta_2 = 1,2^\circ \left[ 1 \bar{1} 0 \right]$ , образовалась



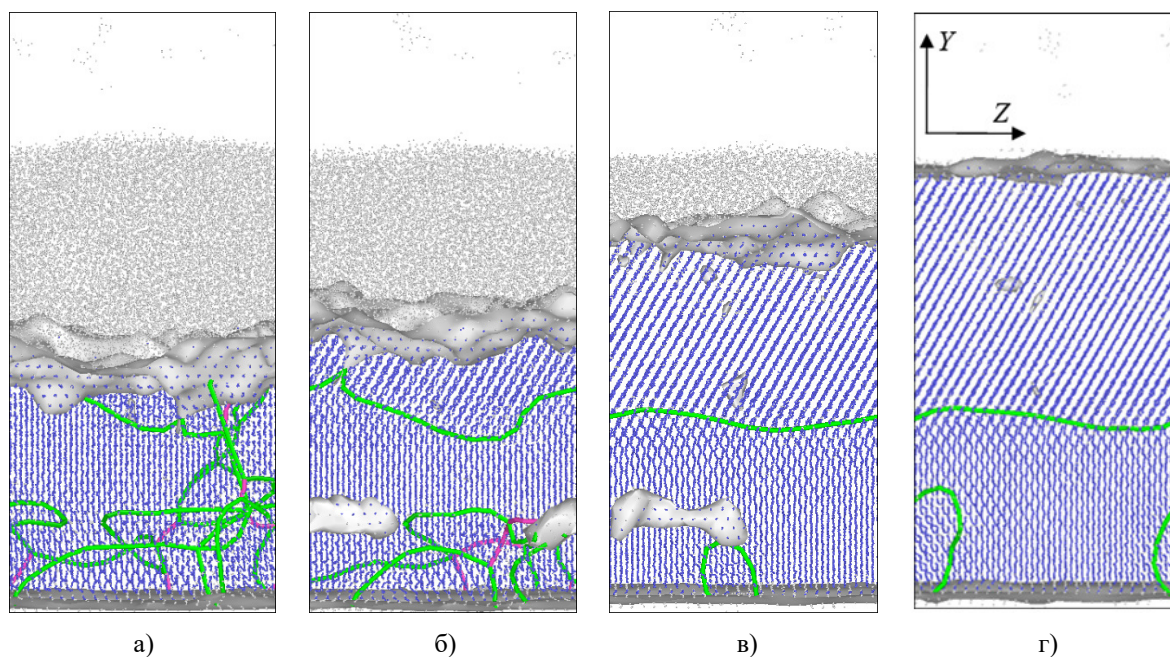
уже на этапе охлаждения и является откликом моделируемой системы на внешнее воздействие. В данном случае процесс разориентации способствует устранению дислокаций в кри-

сталле, что приводит к энергетическому выигрышу в системе. Кроме того, наблюдается значительное искривление атомных рядов.



**Рис.2.** Фрагменты расчетной ячейки при относительной деформации  $\epsilon_x = -3\%$  в различные моменты численного эксперимента: а) 10 пс, б) 20 пс, в) 30 пс и г) 100 пс модельного времени

**Fig.2.** Fragments of the computational cell with relative deformation  $\epsilon_x = -3\%$  at different moments of the numerical experiment: а) 10 ps, б) 20 ps, в) 30 ps and д) 100 ps of model time

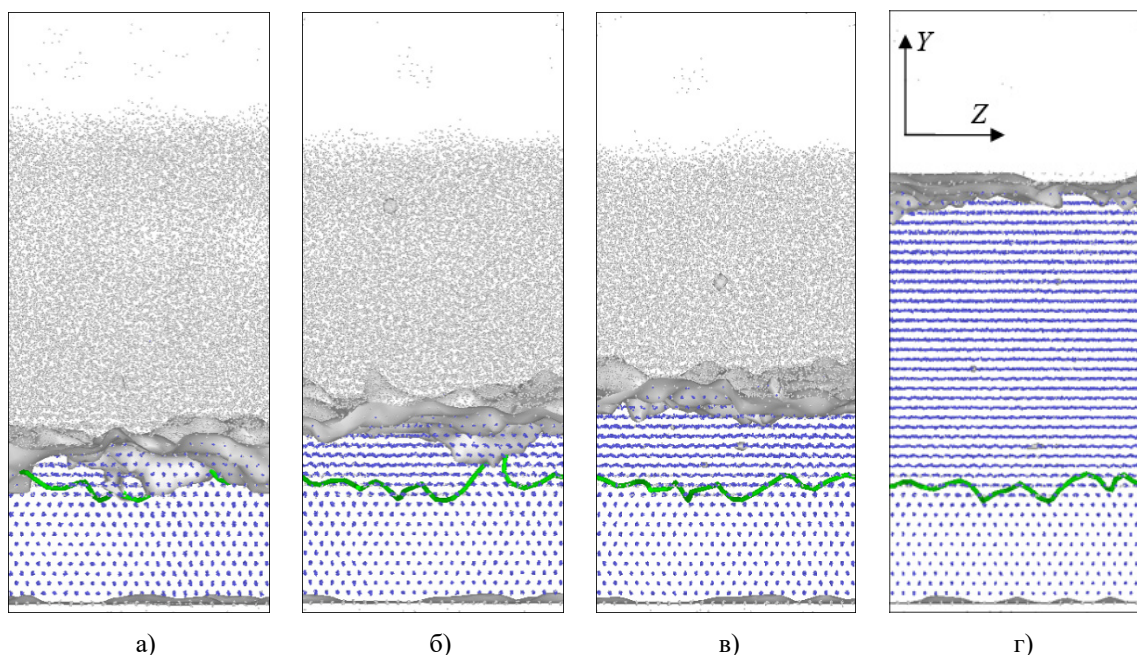


**Рис.3.** Фрагменты расчетной ячейки при относительной деформации  $\epsilon_x = -6\%$  в различные моменты численного эксперимента: а) 37 пс, б) 43 пс, в) 59 пс и г) 100 пс модельного времени

**Fig.3.** Fragments of the computational cell with relative deformation  $\epsilon_x = -6\%$  at different moments of the numerical experiment: а) 37 ps, б) 43 ps, в) 59 ps and д) 100 ps of model time

Нужно отметить, что, несмотря на, казалось бы, незначительную величину угла разориентации, такие области могут оказывать значительное влияние на механические свойства материала. Так в работе [13] приводятся данные, согласно которым в сильнодеформированных металлах, границы ячеек имеют среднюю разориентацию  $2-3^\circ$ , и оказывают сопротивление движению дислокаций по типу сопротивлений дислокаций «леса».

При сжатии расчетной ячейки вдоль оси  $Z$ , соответствующей кристаллографическому направлению, имеющему меньшую плотность упаковки по сравнению с предыдущим случаем, приведенная длина образующихся дислокаций значительно меньше (см. рис.1б). При малой величине деформации характерно образование области разориентации для той части расчетной ячейки, в которой пребывала жидкая фаза (см. рис.4). Оценки показывают для данной области  $\theta = 1,3^\circ [1\bar{1}0]$ .



**Рис.4.** Фрагменты расчетной ячейки при относительной деформации  $\varepsilon_z = -3\%$  в различные моменты численного эксперимента: а) 20 пс, б) 26 пс, в) 29 пс и г) 100 пс модельного времени

**Fig.4.** Fragments of the computational cell with relative deformation  $\varepsilon_z = -3\%$  at different moments: а) 20 ps, б) 26 ps, в) 29 ps and д) 100 ps model time

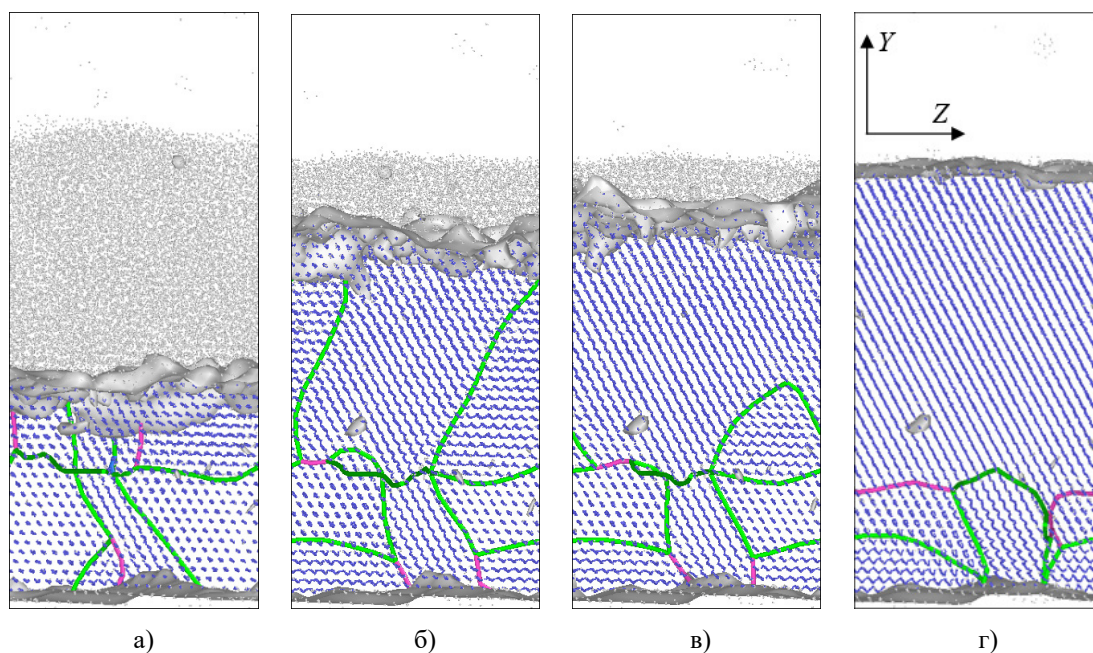
По мере увеличения сжатия наблюдается образование устойчивых конфигураций дислокаций с  $\mathbf{b} = a/2 \langle 111 \rangle$  и  $\mathbf{b} = a \langle 100 \rangle$  (см. рис.5, на котором дислокации  $\mathbf{b} = a \langle 100 \rangle$  имеют цвет, отличный от цвета дислокаций  $\mathbf{b} = a/2 \langle 111 \rangle$ ). Кроме того, для данного случая характерно образование в процессе структурных трансформаций нескольких областей разориентации, с последующим их объединением. Так разориентация между атомными рядами на рисунке 5б достигает  $30^\circ$ . В результате последующей релаксации к концу численного эксперимента область разориентации имеет  $\theta_1 = 1,3^\circ [11\bar{2}]$  и  $\theta_2 = 0,5^\circ [1\bar{1}0]$ .

Численные эксперименты, проводимые при растяжении расчетной ячейки вдоль осей  $X$  и  $Z$ , показали, что при таком виде деформации об-

разование дислокаций в модели не наблюдается вплоть до  $\varepsilon = 6\%$ . Дальнейшие эксперименты проводились до  $\varepsilon = 9\%$ , и они показали, что также имеет место разориентация кристаллической решетки.

Кроме того, дополнительно были проведены численные эксперименты при различной плотности энергии  $q$  моделируемого лазерного воздействия, меняющейся в пределах  $3-4,5$  МВт/см<sup>2</sup>. Оказалось, что и величина  $q$  оказывает влияние на происходящие структурные изменения. Так, например, создавая деформацию  $\varepsilon_x = -5\%$  и моделируя лазерное воздействие с  $q = 3$  и  $3,5$  МВт/см<sup>2</sup> области разориентации в расчетной ячейке не наблюдаются, а при увеличении  $q$  до  $4$  и  $4,5$  МВт/см<sup>2</sup> – разориентация возникает.





**Рис.5.** Изменение меры кривизны межфазной границы вдоль оси  $X$  в момент окончания этапа нагрева расчетной ячейки

**Fig.5.** Change in the measure of curvature of the interface along the  $X$  axis at the end of the heating stage of the computational cell

Нужно отметить следующее. Проведение сравнительных численных экспериментов при деформации расчетной ячейки и ее равномерном нагреве до 1500 К показало, что приведенная длина образующихся дислокаций сопоставима со значениями, полученными в экспериментах, приведенных выше, но при этом не наблюдаются строго выраженные области разориентации. Поэтому можно сделать вывод, что образование таких областей становится возможным только в результате образования в расчетной ячейке жидкой фазы. При последующей кристаллизации атомные ряды формируются с наиболее энергетически выгодной ориентацией. При этом увеличение  $q$  приводит к большему числу эжектированных с поверхности кристалла частиц и, как следствие, увеличению свободного объема в системе, благодаря чему процесс разориентации упрощается. Разориентация же тех областей, которые остаются в твердом состоянии, по-видимому, становится возможным благодаря межфазной границе, кривизна которой, как показали наши предыдущие исследования, создает дополнительные касательные напряжения.

### Заключение

Проведенное исследование показало, что в результате модельного комбинирования тепло-

вого и силового внешнего воздействия на кристалл, в нем возможны структурные изменения, заключающиеся в образовании областей различной разориентации. При этом для формирования подобных областей не требуются большие величины деформации, но необходимы такие условия как наличие жидкой фазы, существование избыточного свободного объема и дополнительные касательные напряжения, создаваемые кривизной межфазной границы.

### Список литературы

1. Бровер А.В. Комплекс механизмов упрочнения металлических материалов при импульсной лазерной обработке // Перспективные материалы. 2008. № 1. С. 63–69.
2. Малинский Т.В., Роголин В.Е., Ямщиков В.А. Пластическая деформация меди и ее сплавов при воздействии наносекундным ультрафиолетовым лазерным импульсом // Физика металлов и металловедение. 2022. Т. 123, № 2. С. 192–199.
3. Бровер А.В., Бровер Г.И. О протекании процесса рекристаллизации в быстрорежущих сталях при импульсном лазерном облучении // Вестник Донского государственного технического университета. 2011. Т. 11, № 9(60). С. 1601–1610.

4. Васильев С.В., Иванов А.Ю., Лиопо В.А. Изменения кристаллической структуры металлов под воздействием лазерного излучения // Инженерно-физический журнал. 2007. Т. 80, № 5. С. 12–18.

5. Тарасова Е.Ю., Кузнецов С.И. Гомологическое искажение кристаллической структуры алюминия при воздействии лазерного излучения // Краткие сообщения по физике ФИАН. 2008. № 10. С. 3–10.

6. Гостевская А.Н., Маркидонов А.В. Выявление преобразования структурных изменений в ОЦК кристалле при лазерном воздействии методом молекулярной динамики // Вестник Сибирского государственного индустриального университета. 2022. Т. 42, № 4. С. 11–18.

7. 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.

8. Маркидонов А.В., Старостенков М.Д., Гостевская А.Н., Лубяной Д.А., Захаров П.В. Молекулярно-динамическое моделирование уменьшения пористости поверхностного слоя ОЦК-кристалла, вызванной воздействием лазерных импульсов // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2023. Т. 20, № 2. С. 168–175.

9. Mendelev 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, N 35. P. 3977–3994.

10. XMD – Molecular Dynamics Program: [Электронный ресурс] – Режим доступа <https://xmd.sourceforge.net>. Дата обращения: 08.06.2024.

11. 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, N 1. 015012.

12. Stukowski A., Albe K. Extracting dislocations and non-dislocation crystal defects from atomistic simulation data // Modeling and Simulation in Materials Science and Engineering. 2010. V. 18, N 8. 085001.

13. Полухин П.И., Горелик С.С., Воронцов В.К. Физические основы пластической деформации. М.: «Металлургия», 1982. 584 с.

## Информация об авторах

А. В. Маркидонов – доктор физико-математических наук, доцент, заведующий кафедрой информатики и вычислительной техники им. В.К. Буторина Кузбасского гуманитарно-педагогического института Кемеровского государственного университета; профессор кафедры прикладной математики и информатики Сибирского государственного индустриального университета.

М. Д. Старостенков – доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник, профессор Алтайского государственного технического университета им. И.И. Ползунова.

А. Н. Гостевская – аспирант кафедры естественнонаучных дисциплин им. проф. В.М. Финкеля Сибирского государственного индустриального университета.

Д. А. Лубяной – кандидат технических наук, доцент кафедры технологии и комплексной механизации горных работ филиала Кузбасского государственного технического университета им. Т.Ф. Горбачева в г. Прокопьевске.

П. В. Захаров – доктор физико-математических наук, доцент, профессор кафедры физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.

## References

1. Brover, A. V. (2008). Complex of mechanisms for strengthening metal materials during pulsed laser processing. *Perspective materials*, (1), 63–69. (In Russ.).

2. Malinsky, T. V., Rogalin, V. E. & Yamshchikov, V. A. (2022). Plastic deformation of copper and its alloys when exposed to a nanosecond ultraviolet laser pulse. *Physics of metals and metal science*, 123(2), 192–199. (In Russ.).

3. Brover, A. V. & Brover, G. I. (2011). On the course of the recrystallization process in high-speed steels under pulsed laser irradiation. *Bulletin of the Don State Technical University*, 11(9(60)), 1601–1610. (In Russ.).

4. Vasiliev, S. V., Ivanov, A. Yu. & Liopo, V. A. (2007). Changes in the crystal structure of metals under the influence of laser radiation. *Engineering and Physical Journal*, 80(5), 12–18. (In Russ.).

5. Tarasova, E. Yu. & Kuznetsov, S. I. (2008). Homological distortion of the crystal structure of



aluminum under the influence of laser radiation. *Brief communications on physics of the Lebedev Physical Institute*, (10), 3–10. (In Russ.).

6. Gostevskaya, A. N. & Markidonov, A. V. (2022). Revealing the transformation of structural changes in a BCC crystal dynamics under laser exposure by the method of molecular. *Bulletin of the Siberian State Industrial University*, 42(4), 11–18. (In Russ.).

7. Markidonov, A. V., Gostevskaya, A. N., Gromov, V. E., Starostenkov, M. D. & Zykov, P. A. (2022). Modeling of structural changes in the surface layer of a deformed BCC crystal under short-term external high-intensity influence. *Deformation and destruction of materials*, (8), 2–8. (In Russ.).

8. Markidonov, A. V., Starostenkov, M. D., Gostevskaya, A. N., Lubyanyoy, D. A. & Zakharov, P. V. (2023). Molecular dynamics modeling of the reduction in the porosity of the surface layer of a BCC crystal caused by the action of laser pulses. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 20(2), 168–175. (In Russ.).

9. Mendeleev, M. I., Han, S., Srolovitz, D. J., Ackland, G. J., Sun, D. Y. & Asta, M. (2003). Development of new interatomic potentials appropriate for crystalline and liquid iron. *Philosophical Magazine*, 83(35), 3977–3994.

10. XMD – Molecular Dynamics Program: [Electronic resource] – Access mode <https://xmd.sourceforge.net>. Date of the application: 08.06.2024.

11. Stukowski, A. (2010). Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO – the Open Visualization Tool. *Modeling and*

*Simulation Materials Science and Engineering*, 18(1), 015012.

12. Stukowski, A. & Albe, K. (2010). Extracting dislocations and non-dislocation crystal defects from atomistic simulation data. *Modeling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 18(8), 085001.

13. Polukhin, P. I., Gorelik, S. S. & Vorontsov, V. K. (1982). Physical basis of plastic deformation. M.: «Metallurgy». P. 584. (In Russ.).

### Information about the authors

A. V. Markidonov – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor, Head of the Department of Informatics and Computer Engineering named after V.K. Butorin, Kuzbass Humanitarian Pedagogical Institute, Kemerovo State University; Professor of the Department of Applied Mathematics and Informatics, Siberian State Industrial University.

M. D. Starostenkov – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Chief Researcher, Professor, I.I. Polzunov Altai State Technical University.

A. N. Gostevskaya – Post-Graduate Student of the Department of Natural Sciences named after prof. V.M. Finkel, Siberian State Industrial University.

D. A. Lubyanyoy – Candidate of Technical Sciences, Associate Professor of the Department of Technology and Integrated Mechanization of Mining, Branch of the Kuzbass State Technical University named after T.F. Gorbachev 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 09.09.2024; одобрена после рецензирования 17.10.2024; принята к публикации 02.12.2024.

The article was received by the editorial board on 09 Sept. 2024; approved after reviewing 17 Oct. 2024; accepted for publication 02 Dec. 2024.