

Научная статья

1.3.8. Физика конденсированного состояния (физико-математические науки)

УДК 538.911

doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2023.02.003

**МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ УМЕНЬШЕНИЯ  
ПОРИСТОСТИ ПОВЕРХНОСТНОГО СЛОЯ ОЦК-КРИСТАЛЛА,  
ВЫЗВАННОЙ ВОЗДЕЙСТВИЕМ ЛАЗЕРНЫХ ИМПУЛЬСОВ****Артем 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>1</sup> markidonov\_artem@mail.ru<sup>†</sup>, <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.** Более полное понимание процессов взаимодействия лазерного излучения с веществом может способствовать развитию технологий лазерного синтеза материалов с уникальными свойствами, наноструктурирования поверхностей обрабатываемых твердых тел и так далее. Затруднения, связанные с прямыми наблюдениями различных быстропротекающих процессов, способствуют развитию применения методов компьютерного моделирования для их изучения. В данной работе представлены результаты моделирования процессов уменьшения пористости поверхностных слоев железа, которая образовалась в результате лазерного импульсного воздействия. Исследование проводилось с применением потенциала, рассчитанного в рамках метода погруженного атома. Изучаемая модель подвергалась структурному анализу с применением апробированных алгоритмов, позволяющему количественно оценить площадь поверхности пустот в объеме кристалла. Рассматривались расчетные ячейки, содержащие пустоты в аморфной области, которые остаются устойчивыми при охлаждении модели, соответствующему процессу естественного охлаждения твердого тела в окружающей среде, что описывается математическим выражением. Очевидным подходом избавления от дефектов является отжиг твердого тела. Показано, что после отжига при температуре, значение которой не превышает половину от температуры плавления, поры сохраняются. Учитывая, что основным механизмом уменьшения пористости рассматривается диффузионно-вязкое течения вещества в пустоты, и тот факт, что диффузия в аморфной фазе происходит более интенсивно, чем в кристаллической, необходимо было создать в модели условия, когда при заданной температуре процесс кристаллизации замедляется. Подобные условия были достигнуты путем деформирования расчетной ячейке. В результате показано, что и при сжатии, и при растяжении наблюдается уменьшение пустот.

**Ключевые слова:** модель, температура, пустота, кристаллизация, деформация.

**Благодарности:** Работа выполнена в рамках государственного задания 0809-2021-0013.

**Для цитирования:** 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. doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2023.02.003.

Original article

## MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION OF A REDUCTION IN THE POROSITY OF THE SURFACE LAYER OF A BCC CRYSTAL CAUSED BY THE INFLUENCE OF LASER PULSES

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, Politekhnicheskaya Str., 29, St. Petersburg, 195251, Russia

<sup>1</sup> markidonov\_artem@mail.ru<sup>†</sup>, <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.** A more complete understanding of the processes of interaction of laser radiation with matter can contribute to the development of technologies for laser synthesis of materials with unique properties, nanostructuring of surfaces of treated solids, and so on. Difficulties associated with direct observations of various fast processes contribute to the development of the use of computer simulation methods for their study. This paper presents the results of modeling the processes of reducing the porosity of the surface layers of iron, which was formed as a result of laser pulsed exposure. The study was carried out using the potential calculated within the embedded atom method. The model under study was subjected to structural analysis using proven algorithms, which makes it possible to quantify the surface area of voids in the bulk of the crystal. We considered computational cells containing voids in the amorphous region, which remain stable when the model is cooled, which corresponds to the process of natural cooling of a solid in the environment, which is described by a mathematical expression. An obvious approach to get rid of defects is to anneal the solid. It is shown that pores are preserved after annealing at a temperature not exceeding half of the melting temperature. Taking into account that the main mechanisms for reducing porosity are the diffusion-viscous flow of matter into voids, and the fact that diffusion in the amorphous phase is more intense than in the crystalline one, it was necessary to create conditions in the model when the crystallization process slows down at a given temperature. Similar conditions were achieved by deforming the computational cell. As a result, it is shown that both under compression and under tension, a decrease in voids is observed.

**Keywords:** model, temperature, emptiness, crystallization, deformation.

**Acknowledgements:** The work was performed within the framework of the state assignment 0809-2021-0013.

**For citation:** Markidonov, A. V., Starostenkov, M. D., Gostevskaya, A. N., Lubyanyoy, D. A. & Zakharov, P. V. (2023). Molecular dynamics simulation of a reduction in the porosity of the surface layer of a bcc crystal caused by the influence of laser pulses. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 20(2), 168–175. (In Russ.). doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2023.02.003.

### Введение

Наносекундные лазерные импульсы широко используются при обработке материалов. Взаимодействие лазерного излучения с поверхностью твердого тела является достаточно сложным процессом и представляет собой совокупность целого ряда физических явлений. Нагрев поверхности при таком воздействии приводит к лазерно-индуцированным фазовым переходам, кинетика которых отличается от кинетики подобных процессов при более мед-

ленно нагреве [1]. Кроме того, в поверхностных слоях материала формируются различные дефектные образования: абляционные кратеры, скопления дислокаций и трещин, поры и т.п. [2–6]. Очевидно, что более детальное изучение процессов дефектообразования и последующей эволюции дефектной структуры является актуальной задачей, так как лазерные технологии обработки материалов обладают целым рядом достоинств. Но основные сложности заключаются в невозможности непосредственного наблюдения подобных быстропротекающих про-

цессов. Поэтому в данном случае компьютерное моделирование может рассматриваться как один из приоритетных методов исследования.

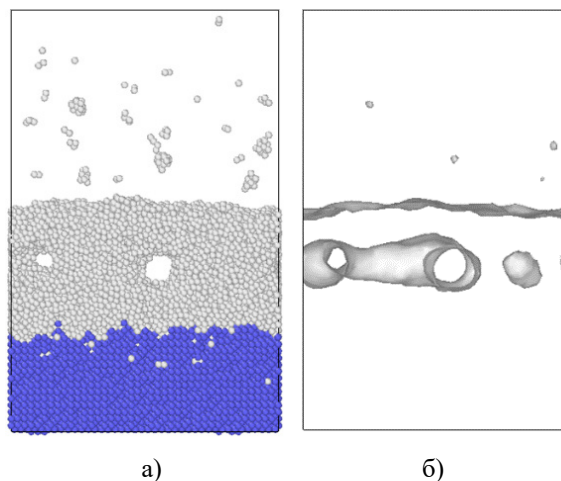
Ранее авторами в рамках молекулярно-динамического моделирования был исследован процесс структурных изменений поверхностных слоев кристалла при внешнем высокоэнергетическом воздействии, приводящему к неравномерному нагреву с последующим естественным остыванием [8, 9]. Визуализация расчетной ячейки, подверженной такому воздействию, продемонстрировала образование пустот в аморфной области, которые постепенно заполнялись веществом. Но, при этом были выявлены значения плотности энергии лазерного излучения, при которых образуемые пустоты остаются не заполненными в течение всего времени моделирования. Вызывает интерес определение условий, позволяющих избавиться от данных пустот, чему и посвящена данная работа.

#### Материалы, методы и методики исследования

В качестве метода исследования был выбран метод молекулярной динамики в связи с тем, что он позволяет осуществлять моделирование различных статистических ансамблей и позволяет сопоставить модельное время с физическим. Расчетная ячейка состояла из 48000 частиц, взаимодействие между которыми описывалось с помощью потенциала, рассчитанного в рамках метода погруженного атома, параметры которого брались из работы [10]. Характеристики модели подбирались таким образом, чтобы она соответствовала кристаллу  $\alpha$ -Fe. Для имитации бесконечной протяженности кристалла по координатным осям X и Z применялись периодические граничные условия, а для имитации поверхности по оси Y – свободные граничные условия. При интегрировании уравнений движения использовался скоростной алгоритм Верле с временным шагом 1 фс. Поддержание постоянной температуры, с учетом того, что моделировался канонический ансамбль, достигалось применением пропорционального термостата. Все вычисления осуществлялись при помощи свободно-распространяемого пакета XMD [11].

В качестве стартовой исследуемой конфигурации частиц использовались результаты моделирования, полученные при проведении ис-

следований, описанных в [8, 9]. Так, на рис.1а, представлена расчетная ячейка, полученная после 30 пс модельного времени при плотности энергии лазерного излучения  $465 \text{ МВт/см}^2$ . Цветом выделены частицы, идентифицируемые как имеющие локальное окружение, соответствующее ОЦК-решетке кристалла. Идентификация осуществляется с применением метода углов и связей Экланда-Джонса [12], который анализирует распределение углов, образованных парами соседей центрального атома. Ближайшее окружение бесцветных частицы не идентифицируется как имеющее дальний порядок, и считаются принадлежащими аморфной фазе. Также на рис.1а наблюдаются агломерации частиц, оторванных от поверхности. При дальнейшем исследовании они удаляются из системы и не рассматриваются.



**Рис.1.** Визуализация начальной конфигурации расчетной ячейки (а) и присутствующих в ней пустот (б)

**Fig.1.** Visualization of the initial configuration of the computational cell (a) and voids present in it (b)

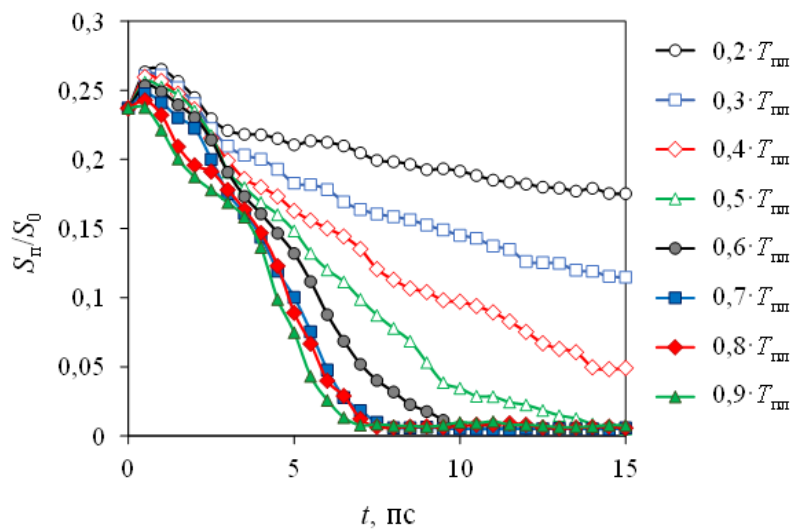
На рис.1б представлена визуализация пустот в расчетной ячейке с применением метода альфа-формы Эдельсбруннера и Мюкке, в котором геометрическое множество точек объединяется поверхностной сеткой при помощи тетраэдризации Делоне с последующей процедурой сглаживания. В данном методе идентификация пустоты в объеме осуществляется путем вписывания виртуальной сферы в межчастичное пространство. При расчетах радиус сферы задавался равным межатомному расстоянию, и, следовательно, непопадание частиц в эту сферу рассматривалось как пустота.

Визуализация моделируемой расчетной ячейки осуществлялась при помощи пакета OVITO [13].

### Результаты и их обсуждение

Как сообщалось ранее, исследуемая пустота остается стабильной в процессе моделирования естественного охлаждения, которое достигается путем постепенного снижения температуры расчетной ячейки в соответствии с установленной закономерностью. Поэтому на начальном этапе расчетная ячейка подвергалась отжигу при постоянной температуре. Для того чтобы оценить изменения размеров пустот в результате постепенного наполнения их веще-

ством выполнялся расчет поверхности пор в объеме ячейки (без учета свободной поверхности кристалла) с применением метода Делоне, описанного выше. Очевидно, что в большей расчетной ячейке будет формироваться большее число пор, поэтому вычисленные значения площади поверхности переводились в безразмерную величину, представляющую собой отношение площади поверхности пустоты к площади поверхности расчетной ячейки. Кроме того, задаваемая при моделировании температура отжига должна сопоставляться с каким-либо известным значением, в качестве которого была выбрана температура плавления железа. Результаты вычислений приведены на рис.2.

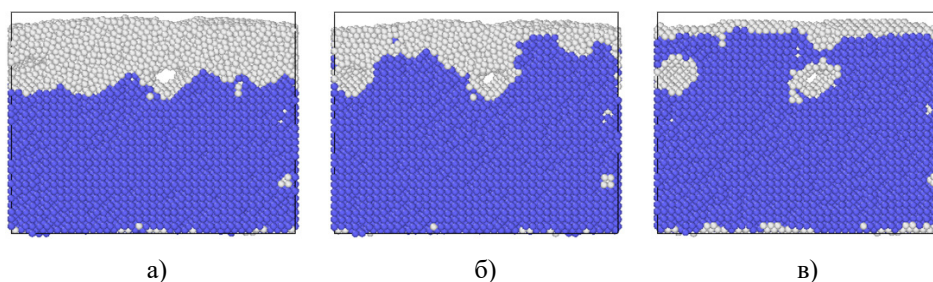


**Рис.2.** Изменение относительной свободной поверхности пустот расчетной ячейки ( $S_p$  – площадь поверхности пустоты,  $S_0$  – площадь поверхность расчетной ячейки в начальный момент времени) в процессе моделирования при поддержании постоянной температуры (задается как доля температуры плавления  $T_{пл}$ )

**Fig.2.** Change in the relative free surface of the voids of the computational cell ( $S_p$  is the surface area of the void,  $S_0$  is the surface area of the computational cell at the initial moment of time) during the simulation while maintaining a constant temperature (given as a fraction of the melting temperature  $T_m$ )

Как следует из рис.2 при температуре отжига меньше  $0,5 \cdot T_{пл}$  пустоты сохраняются в расчетной ячейке. Следовательно, непосредственно отжигом избавиться от пустот удастся лишь при относительно высоких температурах. Ранее, в работах [8, 9], авторами в качестве основного механизма исчезновения пустот рассматривалось диффузионно-вязкое течение вещества в поры. Очевидно, что данный процесс во многом зависит от температуры расчетной ячейки, поэтому при не высокой температуре отжига пустоты остаются.

Если визуализировать изменение структуры в процессе отжига, то можно заметить, что распространяющийся в процессе моделирования фронт кристаллизации огибает пустоты, не вызывая их полного заполнения веществом (см. рис.3), и поры, присутствующие изначально в аморфной области сохраняются и после кристаллизации. Учитывая, что диффузия в аморфном теле протекает более интенсивно чем в кристаллическом, и чему есть различные объяснения [14, 15], в кристаллической области пора остается стабильной при заданной температуре.

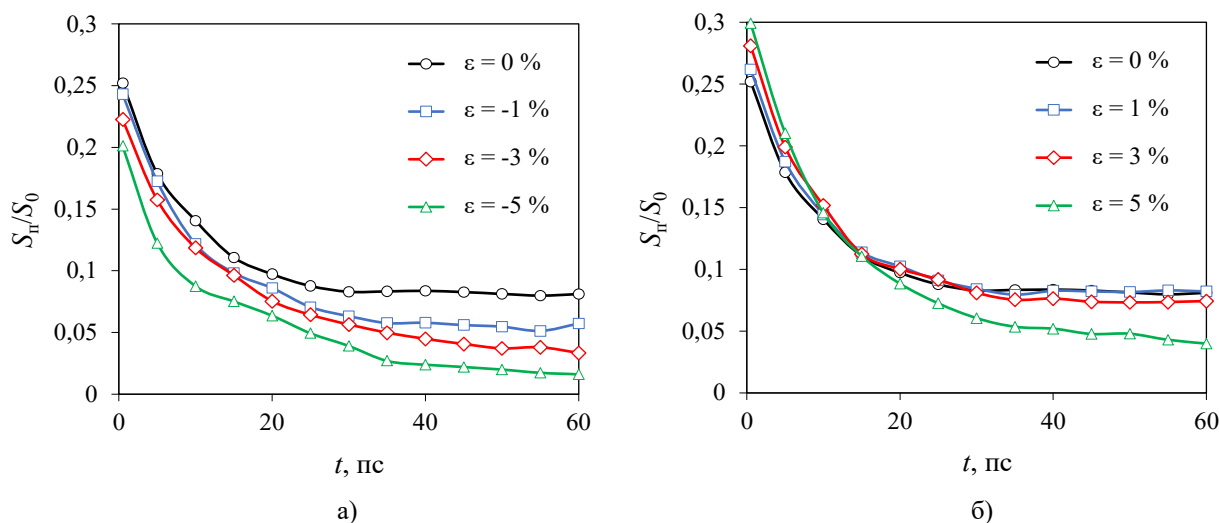


**Рис.3.** Визуализация расчетной ячейки в процессе отжига при температуре  $0,3 \cdot T_{пл}$  через 15 (а), 30 (б) и 60 (в) пс

**Fig.3.** Visualization of the computational cell during annealing at a temperature of  $0.3 \cdot T_m$  after 15 (a), 30 (b), and 60 (c) ps

Движущей силой процесса кристаллизации является стремление системы достичь состояния, характеризующегося минимумом свободной энергии, при этом, чем больше разница свободных энергий жидкой и твердой фазы, тем выше скорость движения фронта кристаллизации. Следовательно, одним из способов замедления фронта может быть уменьшение этой разницы путем повышения свободной энергии твердой фазы, например, при помощи

деформирования расчетной ячейки. Поэтому на следующем этапе исследования моделировалось силовое воздействие на кристалл. Деформация создавалась путем изменения равновесного значения параметра решетки. Рассматривалась двухосная деформация по осям X и Z. Результаты расчетов площади поверхности пустот при различной величине деформации расчетной ячейки представлены на рис.4.



**Рис.4.** Изменение относительной свободной поверхности пустот расчетной ячейки в процессе моделирования при различной величине деформации сжатия (а) и растяжения (б) (температура расчетной ячейки  $0,3 \cdot T_{пл}$ )

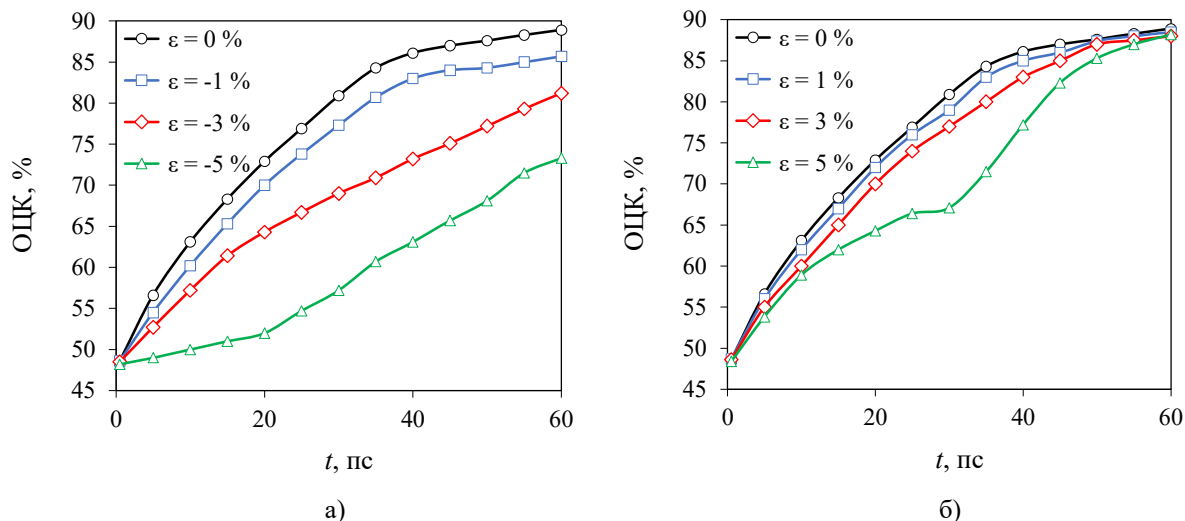
**Fig.4.** Change in the relative free surface of the voids of the computational cell during simulation at different values of compression (a) and tension (b) deformation (temperature of the computational cell  $0.3 \cdot T_m$ )

При деформации сжатия уменьшение пустот идет более интенсивно, так как в данном случае кроме уменьшения скорости фронта кристаллизации происходит уменьшение свободного объема в решетке, и площадь поверхности уменьшается. При деформации растяжения объем пустоты увеличивается, поэтому при небольшой величине деформирования расчет-

ной ячейки механизм диффузионно-вязкого течения вещества в пору при уменьшении скорости фронта кристаллизации не может оказать доминирующего воздействия, но при деформировании с величиной 5 % данный механизм начинает доминировать и площадь поверхности поры начинает стремительно уменьшаться.

Для подтверждения уменьшения скорости фронта кристаллизации при деформировании расчетной ячейки была выполнена оценка доли атомов, локальное окружение которых соответ-

ствует ОЦК-решетке, то есть кристаллической фазе, в общем числе моделируемых частиц. Результаты вычислений приведены на рис.5.



**Рис.5.** Изменение доли частиц расчетной ячейки, локальное окружение которых соответствует ОЦК-решетке, в процессе моделирования при различной величине деформации сжатия (а) и растяжения (б) (температура расчетной ячейки  $0,3 \cdot T_{пл}$ )

**Fig.5.** Change in the proportion of particles of the computational cell, the local environment of which corresponds to the bcc lattice, in the process of modeling at different values of compressive strain (a) and tension (b) (computational cell temperature  $0.3 \cdot T_m$ )

Как следует из рис.5, доля частиц, принадлежащих кристаллической фазе, постепенно увеличивается в процессе моделирования, но при этом увеличение величины деформации снижает их долю в общем числе частиц, то есть фронт кристаллизации движется с меньшей скоростью. Данный результат подтвержден и визуальным наблюдением за расчетной ячейкой. Более пологая форма кривых в конце моделирования обусловлена тем, что кристаллизация завершается, а оставшиеся частицы, которые не идентифицируются как ОЦК-кристалл, принадлежат поверхностному слою (см. рис.3в). При этом нужно отметить, что при растяжении, несмотря на снижение скорости фронта кристаллизации в начале моделирования, в конце все же наблюдается полная кристаллизация. По-видимому, в данном случае дополнительно проявляется эффект уменьшения энергии активации самодиффузии атомов за счет увеличения свободного объема в решетке, что упрощает кристаллизацию.

### Заключение

В представленной работе приведены результаты молекулярно-динамического модели-

рования процесса уменьшения объема пустот в кристалле, возникших при неравномерном нагреве расчетной ячейки, в результате процесса кристаллизации. Основным механизмом, приводящим к уменьшению, называется диффузионно-вязкое течения вещества в пустоты. Учитывая, что в аморфной фазе вещества процесс диффузии протекает более интенсивно, чем в кристаллической, одним из возможных способов снижения пористости поверхностного слоя материала, подвергнутого воздействию лазерных импульсов, может рассматриваться его деформация, способствующая уменьшению скорости распространения фронта кристаллизации.

### Список литературы

1. Яковлев Е.Б., Свирина В.В., Сергаева О.Н. Особенности плавления металлов при действии ультракоротких лазерных импульсов // Известия высших учебных заведений. Приборостроение. 2010. Т. 53, № 4. С. 57–62.
2. Кузнецов П.М., Федоров В.А. Формирование рельефа кратера при воздействии лазерного излучения на

- поверхность сплава Fe-Si // Вестник ТГУ. 2010. Т. 15, Вып. 6. С. 1790–1793.
3. Smirnov N.A., Kudryashov S.I., Rudenko A.A., Nastulyavichus A.A., Ionin A.A. Ablation efficiency of gold at fs/ps laser treatment in water and air // *Laser Physics Letters*. 2022. V. 19, N 2. P. 026001.
  4. Филаретов С.В., Каштанова Е.А., Зубков Е.Г., Поляков А.А. Механизм образования дефектов в монокристаллах кремния при воздействии лазерного излучения // *Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки*. 2013. № 3(27). С. 212–222.
  5. Zhang B., Li Y., Bai Q. Defect formation mechanisms in selective laser melting: a review // *Chinese Journal of Mechanical Engineering*. 2017. V. 30. P. 515–527.
  6. Murzin S.P., Prokofiev A.B., Safin A.I. Study of Cu-Zn alloy objects vibration characteristics during laser-induced nanopores formation // *Procedia Engineering*. 2017. V. 176. P. 552–556.
  7. Глотов А.Н., Голубенко Ю.В., Десяцков В.А., Степанов А.В. Некоторые особенности взаимодействия лазерного излучения с металлами // *Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Приборостроение*. 2020. № 1. С. 15–32.
  8. 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.
  9. 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.
  10. 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, N 35. P. 3977–3994.
  11. XMD – Molecular Dynamics Program. [Электронный ресурс] / Официальный сайт – <https://xmd.sourceforge.net>. Дата обращения 11.04.2023.
  12. Ackland G.J., Jones A.P. Applications of local crystal structure measures in experiment and simulation // *Physical Review B*. 2006. V. 73, N 5. P. 054104.
  13. OVITO – Open Visualization Tool. [Электронный ресурс] / Официальный сайт – <https://www.ovito.org>. Дата обращения 11.04.2023.
  14. Михайлин А.И., Слуцкер И.А. Изменение вероятности появления флуктуаций энергии атомов при аморфизации // *Письма в ЖТФ*. 1991. Т. 17, Вып.15. С. 12–14.
  15. Белашенко Д.К. Механизмы диффузии в неупорядоченных системах (компьютерное моделирование) // *Успехи физических наук*. 1999. Т. 169, № 4. С. 361–384.

### 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 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. Yakovlev, E. B., Svirina, V. V. & Sergaeva, O. N. (2010). Peculiarities of melting of metals under the action of ultrashort laser pulses. *Izvestia of higher educational institutions. Instrumentation*, 4(53), 57–62. (In Russ.).
2. Kuznetsov, P. M. & Fedorov, V. A. (2010). Formation of the relief of the crater under the influence of laser radiation on the surface of the

- Fe-Si alloy. *Bulletin of TSU*, 6(15), 1790–1793. (In Russ.).
3. Smirnov, N. A., Kudryashov, S. I., Rudenko, A. A., Nastulyavichus, A. A. & Ionin, A. A. (2022). Ablation efficiency of gold at fs/ps laser treatment in water and air. *Laser Physics Letters*, 2(19), 026001.
4. Filaretov, S. V., Kashtanova, E. A., Zubkov, E. G. & Polyakov, A. A. (2013). The mechanism of defect formation in silicon monocrystals under the influence of laser radiation. *Volga region. Physical and mathematical sciences*, 3(27), 212–222. (In Russ.).
5. Zhang, B., Li, Y. & Bai Q. (2017). Defect formation mechanisms in selective laser melting: a review. *Chinese Journal of Mechanical Engineering*, (30), 515–527.
6. Murzin, S. P., Prokofiev, A. B. & Safin, A. I. (2017). Study of Cu-Zn alloy objects vibration characteristics during laser-induced nanopores formation. *Procedia Engineering*, (176), 552–556.
7. Glotov, A. N., Golubenko, Yu. V., Desyatskov, V. A. & Stepanov, A. V. (2020). Some features of the interaction of laser radiation with metals. *Vestnik MGTU im. N.E. Bauman. Ser. Instrumentation*, 1, 15–32. (In Russ.).
8. Markidonov, A. V., Starostenkov, M. D., Gostevskaya, A. N., Lubyanyoy, D. A. & Zakharov, P. V. (2022). Modeling of structural changes in the surface layer of bcc metal under short-term high-energy impact by the method of molecular dynamics. *Metal Science and Thermal Processing of Metals*, 5(803), 16–21. (In Russ.).
9. 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 a short-term external high-intensity impact. *Deformation and destruction of materials*, 8, 2–8. (In Russ.).
10. 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*, 35(83), 3977–3994.
11. XMD – Molecular Dynamics Program. [Electronic resource] / Official site – <https://xmd.sourceforge.net>. Date of the application 11.04.2023.
12. Ackland, G. J. & Jones, A. P. (2006). Applications of local crystal structure measures in experiment and simulation. *Physical Review B*, 5(73), 054104.
13. OVITO – Open Visualization Tool. [Electronic resource] / Official site – <https://www.ovito.org>. Date of the application 11.04.2023.
14. Mikhailin, A. I. & Slutsker, I. A. (1991). Change in the probability of occurrence of fluctuations in the energy of atoms during amorphization. *Letters to ZhTF*, 15(17), 12–14. (In Russ.).
15. Belashchenko, D. K. (1999). Mechanisms of diffusion in disordered systems (computer simulation). *Uspekhi fizicheskikh nauk*, 4(169), 361–384. (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 03.05.2023; одобрена после рецензирования 17.05.2023; принята к публикации 29.05.2023.

The article was received by the editorial board on 03 May 23; approved after reviewing 17 May 23; accepted for publication 29 May 23.