

Научная статья

1.3.8. Физика конденсированного состояния (физико-математические науки)

УДК 538.911

doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2024.02.003

**МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ОБРАЗОВАНИЯ
ДИСЛОКАЦИЙ НА МЕЖФАЗНОЙ ГРАНИЦЕ В ЖЕЛЕЗЕ ПОСЛЕ ВОЗДЕЙСТВИЯ
ЛАЗЕРНОГО ИМПУЛЬСА****Артем Владимирович Маркидонов^{1†}, Михаил Дмитриевич Старостенков²,
Анастасия Николаевна Гостевская³, Дмитрий Анатольевич Лубяной⁴,
Павел Васильевич Захаров⁵**¹ Кузбасский гуманитарно-педагогический институт Кемеровского государственного университета, ул. Циолковского, 23, 654041, Новокузнецк, Россия² Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова, пр. Ленина, 46, 656038, Барнаул, Россия^{1,3} Сибирский государственный индустриальный университет, ул. Кирова, 42, 654006, Новокузнецк, Россия⁴ Филиал Кузбасского государственного технического университета им. Т.Ф. Горбачева в г. Прокопьевске, ул. Ноградская, 19А, 653039, Прокопьевск, Россия⁵ Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, ул. Политехническая, 29, 195251, Санкт-Петербург, Россия¹ markidonov_artem@mail.ru[†], <https://orcid.org/0000-0002-4566-528X>² genphys@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-6326-7613>³ lokon1296@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-7328-5444>⁴ lubjanoy@yandex.ru, <https://orcid.org/0000-0001-9773-3558>⁵ zakharovpvl@rambler.ru, <https://orcid.org/0000-0002-6410-1594>

Аннотация. Под воздействием лазерных импульсов возможны значительные изменения микроструктуры поверхностных слоев материалов, в частности под облученной поверхностью может наблюдаться протяженный дислокационный слой. При этом предлагаются различные механизмы образования дислокаций в данном случае. Очевидно, что более полное понимание первопричин возникновения дислокаций является актуальной задачей и ее решение может найти свое практическое применение. Сложность прямых наблюдений изучаемых процессов не позволяет проводить всестороннее исследование, поэтому в данном случае с успехом применяются численные эксперименты с применением методом компьютерного моделирования. В данной работе представлены результаты моделирования структурных изменений, возникающих при имитации воздействия на поверхность кристалла железа лазерных импульсов с различной плотностью энергии, и сопровождающихся образованием дислокаций. В основе модели лежит приближение, которое предполагает, что воздействие лазера приводит лишь к нагреву облученного материала. Для проведения исследования применялся метод молекулярной динамики с использованием потенциала межчастичного взаимодействия, рассчитанного в рамках метода погруженного атома. В ходе моделирования в расчетной ячейке возникла межфазная граница, которая является источником механических напряжений. Ее особенностью является наличие кривизны поверхности, приводящей к неравномерности распределения напряжений. Высказывается предположение, что именно благодаря этому создаются необходимые условия для образования дислокаций. В работе визуализирован процесс зарождения и последующего роста дислокаций, а также дислокационная реакция. Выполнены оценки изменения длины дислокаций при различных вариациях начальных условий и параметров моделирования. Возможно, результаты исследования найдут свое применение при описании процессов, протекающих при высокоэнергетическом воздействии на твердое тело.

Ключевые слова: модель, кристалл, поверхность, межфазная граница, дислокация.

Для цитирования: Маркидонов А.В., Старостенков М.Д., Гостевская А.Н., Лубяной Д.А., Захаров П.В. Молекулярно-динамическое моделирование образования дислокаций на межфазной границе в железе после воздействия лазерного импульса // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2024. Т. 21, № 2. С. 164–171. doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2024.02.003.

Original article

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

Artem V. Markidonov^{1†}, Mikhail D. Starostenkov², Anastasia N. Gostevskaya³,
Dmitry A. Lubyanyoy⁴, Pavel V. Zakharov⁵

¹ Kuzbass Humanitarian Pedagogical Institute, Kemerovo State University, Tsiolkovsky Str., 23, Novokuznetsk, 654041, Russia

² I.I. Polzunov Altai State Technical University, Lenin Pr., 46, Barnaul, 656038, Russia

^{1,3} Siberian State Industrial University, Kirova Str., 42, Novokuznetsk, 654006, Russia

⁴ Branch of the Kuzbass State Technical University named after T.F. Gorbachev in Prokopyevsk, Nogradskaya Str., 19A, Prokopyevsk, 653039, Russia

⁵ Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, Politekhnicheskaya Str., 29, St. Petersburg, 195251, Russia

¹ markidonov_artem@mail.ru[†], <https://orcid.org/0000-0002-4566-528X>

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

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

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

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

Abstract. Under the influence of laser pulses, significant changes in the microstructure of the surface layers of materials are possible; in particular, an extended dislocation layer can be observed under the irradiated surface. At the same time, various mechanisms for the formation of dislocations in this case are proposed. Obviously, a more complete understanding of the root causes of the occurrence of dislocations is an urgent task and its solution can find its practical application. The complexity of direct observations of the processes under study does not allow for a comprehensive study, therefore, in this case, numerical experiments using computer modeling are successfully used. This paper presents the results of modeling structural changes that occur when simulating the impact of laser pulses with different energy densities on the surface of an iron crystal, and which are accompanied by the formation of dislocations. The model is based on an approximation that assumes that laser exposure only leads to heating of the irradiated material. To carry out the study, the molecular dynamics method was used using the interparticle interaction potential calculated within the framework of the embedded atom method. During the simulation, an interphase boundary appeared in the computational cell, which is a source of mechanical stress. Its peculiarity is the presence of surface curvature, leading to uneven stress distribution. It is suggested that it is precisely due to this that the necessary conditions for the formation of dislocations are created. The work visualizes the process of nucleation and subsequent growth of dislocations, as well as the dislocation reaction. The changes in the length of dislocations have been assessed for various variations of initial conditions and modeling parameters. Perhaps the results of the study will find their application in describing the processes that occur during high-energy exposure to a solid body.

Keywords: model, crystal, surface, interfacial boundary, dislocation.

For citation: Markidonov, A. V., Starostenkov, M. D., Gostevskaya, A. N., Lubyanyoy, D. A. & Zakharov, P. V. Molecular dynamics simulation of the reduction in porosity of the surface layer of a bcc crystal caused by influence of laser pulses. *Fundamental'nye problemy sovremennoyo materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 21(2), 164–171. (In Russ.). doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2024.02.003.

Введение

На сегодняшний день лазерное излучение применяется во многих технологиях обработки и модификации поверхности материалов благодаря возможности локализации воздействия и высокой скорости нагрева участка мишени. Тем не менее, кроме очевидных преимуществ данная технология может приводить и к ряду нежелательных явлений в обрабатываемом материале, например, образованию высокой концентрации структурных дефектов. Несмотря на

то, что данное явление общеизвестно, до сих пор остаются вопросы, относящиеся к механизмам образования, в частности, дислокаций. Традиционные представления об их генерации заключаются в образовании высокой концентрации точечных дефектов в поврежденном поверхностном слое, которые в дальнейшем кластеризуются, образуют вакансионные диски, трансформирующиеся путем схлопывания в дислокационные петли [1]. Кроме того, в качестве источника дислокационных петель рассматриваются увеличивающиеся в объеме об-

ласти расплавленного материала, и при этом рост петель продолжается даже после кристаллизации расплава [2]. Некоторые исследователи указывают на образование дислокаций не после релаксации остаточных термоупругих напряжений, а непосредственно в момент воздействия импульса, и которое обусловлено лазерно-индуцированной волной напряжений [3]. Таким образом, можно сделать вывод о разнообразии механизмов генерации дислокаций, которые в том числе зависят и от длительности воздействия лазерного импульса.

Ранее авторами в работах [4-6] методом молекулярной динамики были рассмотрены структурные изменения, происходящие в поверхностном слое монокристалла железа при импульсном лазерном воздействии. Было обнаружено, что в жидкой фазе формируются пустоты, которые могут сохраняться в материале и после кристаллизации. Этот процесс можно рассматривать как начальную стадию структурных изменений, происходящих в кристалле в процессе релаксации после воздействия лазерного импульса на поверхность. Целью данной работы является исследование изменений, происходящих на более поздней стадии релаксации.

Материалы, методы и методики исследования

Молекулярно-динамическая модель представляет собой прямоугольную расчетную ячейку, имитирующую монокристалл железа, и в которой оси координат соответствуют ортогональным кристаллографическим направлениям $[111]$, $[1\bar{1}0]$ и $[11\bar{2}]$. Параметры потенциала межчастичного взаимодействия, определенного в рамках модели ЕАМ, были заимствованы из работы [7]. Для решения дифференциальных уравнений движения применялся скоростной алгоритм Верле с временным шагом 1 фс. Вычисления проводились с использованием свободно распространяемого пакета молекулярно-динамического моделирования XMD [8].

В основе применяемого в данной работе подхода для моделирования воздействия пикосекундного лазерного импульса лежит тепловая модель, которая предполагает, что воздействие лазерного излучения на мишень сводится лишь к ее термическому нагреву. Методика проведения вычислительного эксперимента изложена в работе [4] и на первом этапе заключается в не-

равномерном нагреве расчетной ячейки в течение 10 пс в соответствии с заданным теоретическим распределением, при котором температура убывает в направлении, перпендикулярном свободной поверхности. Для создания поверхности применялись свободные граничные условия вдоль одной из осей расчетной ячейки, в то время как вдоль остальных осей использовались периодические граничные условия. Основным варьируемым параметром имитируемого лазерного излучения, который в итоге влияет на величину температуры, в данном вычислительном эксперименте является плотность энергии q . На втором этапе в течение 90 пс температура кристалла понижается также в соответствии с заданным распределением. В ходе данных этапов проводится анализ структуры кристалла при помощи различных алгоритмов, которые будут указаны ниже. Визуализация исследуемой структуры осуществлялась при помощи пакета OVITO [9].

Результаты и их обсуждение

Рассмотрим структурные изменения, происходящие в моделируемом кристалле в ходе вычислительного эксперимента, при создании поверхности вдоль направления $[1\bar{1}0]$. На этапе охлаждения расчетной ячейки наблюдается процесс кристаллизации, сопровождающийся образованием краевой дислокации с вектором Бюргерса $a/2 \langle 111 \rangle$ (где a – параметр решетки), длина которой увеличивается по мере движения фронта кристаллизации, с последующей трансформацией в петлю (см. рис.1). На рисунке 1 представлены атомы, которые по методу углов и связей Экланда-Джонса [10] не идентифицированы как располагающиеся в узлах ОЦК решетки, и в большей степени, которые могут быть рассмотрены как относящиеся к жидкой фазе. Для идентификации дислокационной линии использовался алгоритм, изложенный в работе [11]. Также на рисунке представлено изображение межфазной границы в виде поверхности, построенной с применением метода триангуляционной сетки.

При моделировании кристалла, имеющего поверхность вдоль направления $[111]$, в расчетной ячейке было идентифицировано две полные дислокации $a/2 \langle 111 \rangle$ с последующим их объединением и образованием дислокации $a \langle 100 \rangle$, что энергетически выгодно (см. рис.2).

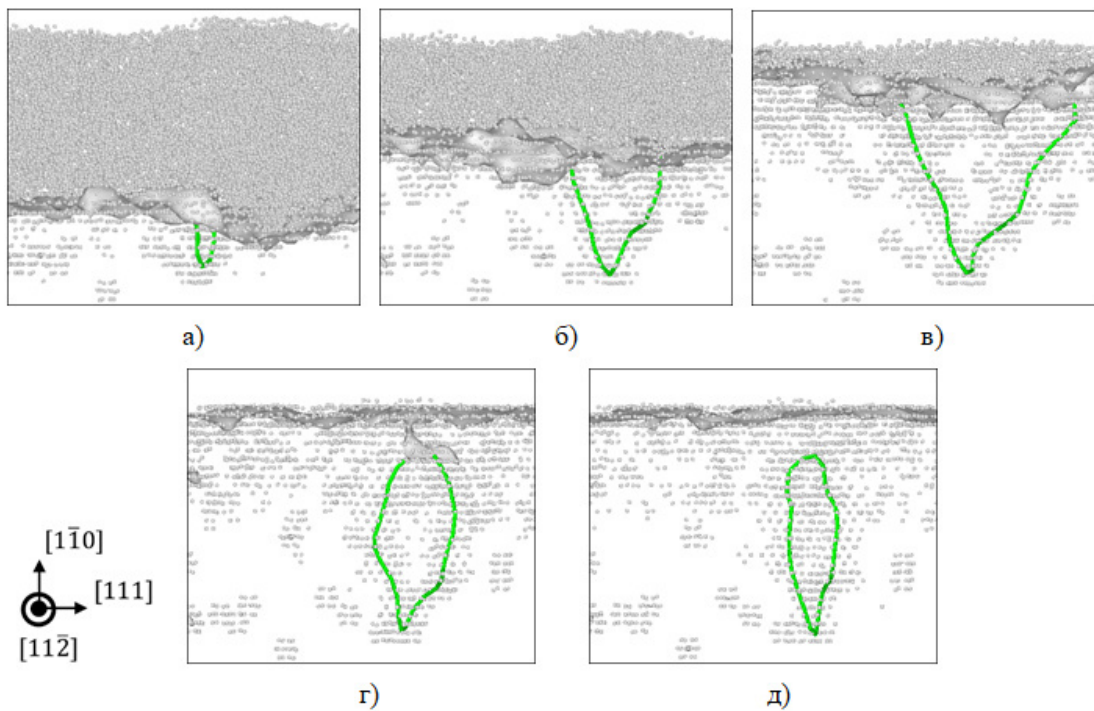


Рис.1. Визуализация образования дислокационной петли при моделируемой плотности энергии $q = 4 \text{ МВт/см}^2$. Представлены фрагменты расчетной ячейки через 32 (а), 47 (б), 62 (в), 77 (г) и 90 (д) пс

Fig.1. Visualization of the formation of a dislocation loop at a simulated energy density $q = 4 \text{ MW/cm}^2$. Fragments of the computational cell are presented through 32 (a), 47 (b), 62 (c), 77 (d) and 90 (e) ps

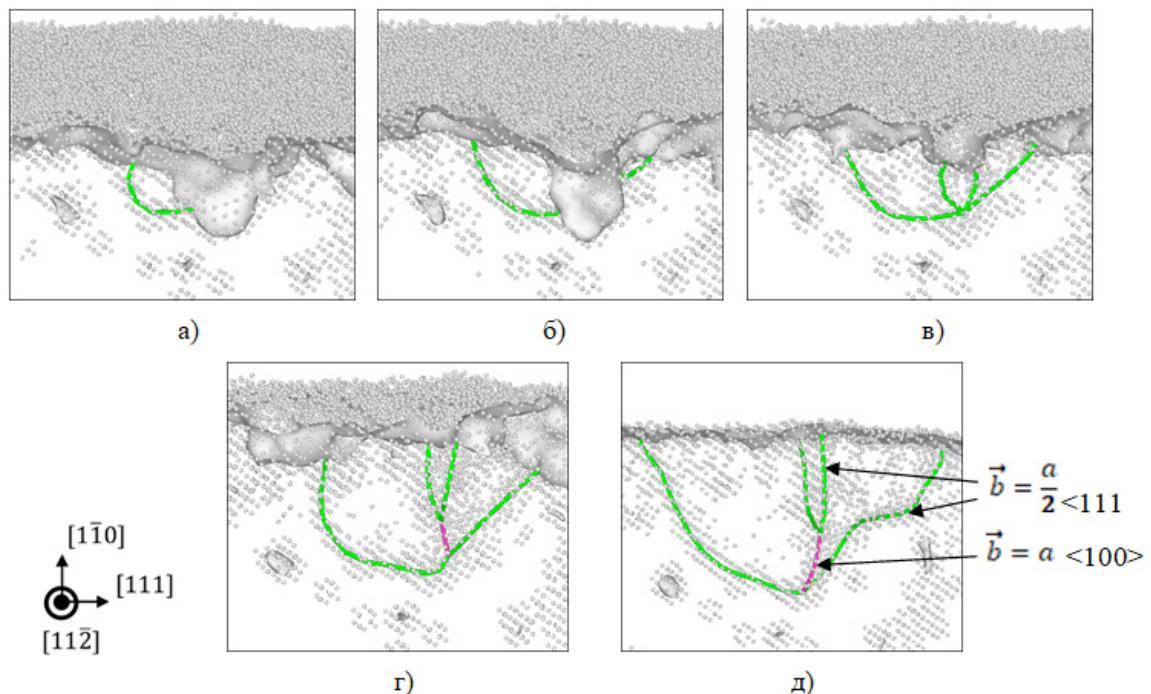


Рис.2. Визуализация образования дислокаций при моделируемой плотности энергии $q = 3,5 \text{ МВт/см}^2$. Представлены фрагменты расчетной ячейки через 40 (а), 43 (б), 45 (в), 56 (г) и 80 (д) пс.

Цветовая дифференциация дислокационных линий выполнена в соответствии с вектором Бюргерса

Fig.2. Visualization of dislocation formation at a simulated energy density $q = 3.5 \text{ MW/cm}^2$. Fragments of the computational cell are presented through 40 (a), 43 (b), 45 (c), 56 (d) and 80 (e) ps. Color differentiation of dislocation lines is carried out in accordance with the Burgers vector

При создании поверхности вдоль направления $[1\bar{1}2]$ образование дислокаций зафиксировано не было.

В обоих рассмотренных случаях дислокации $a/2 \langle 111 \rangle$ зарождаются на межфазной границе и скользят в плоскостях $\{112\}$ и $\{110\}$. Но в численном эксперименте, результаты которого представлены на рис.1, вектор Бюргера дислокации коллинеарен вектору, соответствующему одному из ребер расчетной ячейки,

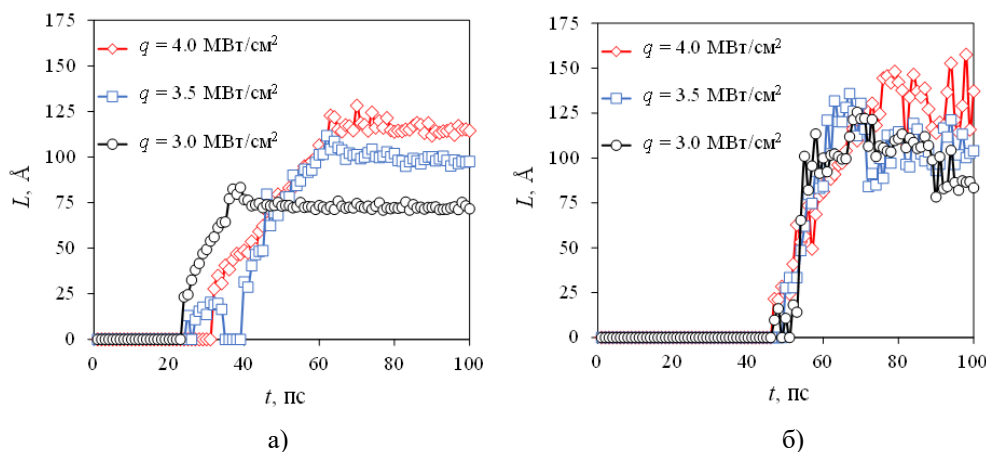


Рис.3. Изменение длины дислокационных линий в расчетной ячейке в ходе численного эксперимента при различной величине плотности энергии q . При моделировании создавалась поверхность кристалла вдоль направления $[1\bar{1}0]$ (а) и $[111]$ (б)

Fig.3. Change in the length of dislocation lines in a computational cell during a numerical experiment at different energy densities q . During the simulation, the crystal surface was created along the $[1\bar{1}0]$ (a) and $[111]$ (b) directions

Возможность образования дислокации обусловлено имеющимся недостатком атомов для выстраивания идеального атомного ряда в процессе кристаллизации, так как часть частиц была эжектирована со свободной поверхности на этапе нагревания. Этим объясняется увеличение длины дислокационной линии при возрастании плотности энергии q , так как при этом увеличивается и число оторванных частиц. Тем не менее, для создания необходимых условий к образованию дислокации необходимо наличие механических напряжений. В расчетной ячейке при проведении численного эксперимента присутствуют как температурные напряжения, обусловленные применением периодических граничных условий, так и межфазные напряжения, девиаторный компонент тензора которых создает поверхностное натяжение межфазной границы. Образование дислокаций, по-видимому, возникает из-за неравномерности распределения касательных напряжений в меж-

что в рамках модели упрощает последующие оценки условий, необходимых для зарождения дислокации.

Общая протяженность формирующихся дислокационных линий увеличивается при возрастании плотности энергии имитируемого лазерного импульса, и, следовательно, увеличении температуры расчетной ячейки (см. рис.3).

фазном слое, обусловленной его кривизной. Именно искривление межфазной границы может приводить к формированию концентраторов напряжений [12-14], и как следует из рисунков 1 и 2 именно в области наибольшей кривизны начинают образовываться дислокации, что способствует релаксации касательных напряжений (см. рис.4).

Расчет напряжений, результаты которого представлены на рис.4, проводился для модели, с созданной поверхностью вдоль направления $[1\bar{1}0]$ (см. рис.1), так как в данном случае, как уже было сказано ранее, вектор Бюргера коллинеарен оси X . Вычисления осуществлялись для области расчетной ячейки, которая охватывает одновременно обе фазы. Пока доминирующей фазой является жидкость, касательное напряжение равно нулю. По мере кристаллизации напряжение начинает расти, а затем, с момента образования дислокации, наблюдается его снижение.

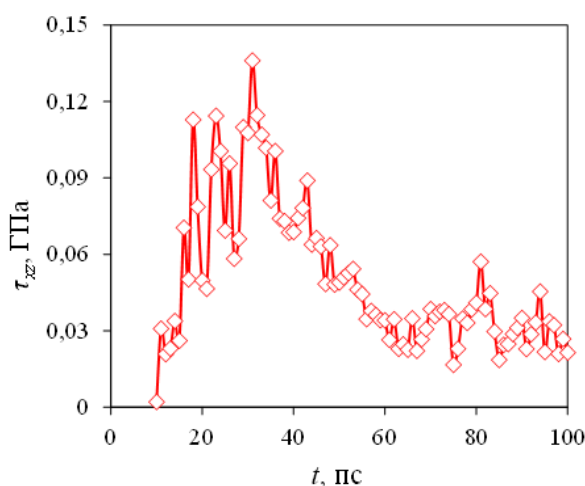


Рис.4. Изменение касательных напряжений в расчетной ячейке в ходе вычислительного эксперимента на этапе охлаждения

Fig.4. Change in tangential stresses in a computational cell during a computational experiment at the cooling stage

На рис.4 приведены изменения касательных напряжений τ_{xz} при моделируемой плотности энергии $q = 4$ МВт/см² как наиболее наглядные. При меньших рассматриваемых значениях q релаксация напряжений происходит не так интенсивно и в конце вычислительного эксперимента напряжения имеют большие значения (0,084 и 0,075 ГПа при $q = 3$ и 3,5 МВт/см² соответственно).

Напряжения, необходимые для зарождения дислокаций в численном эксперименте, результаты которого представлены на рис.2, оценить при помощи выбранного пакета моделирования не представляется возможным, так как при вычислении компонентов тензора напряжений не допускается поворот координатных осей.

При проведении численных экспериментов с различной q кривизна формирующейся межфазной границы также оказывается различна. Так как выделение границы осуществляется с применением метода триангуляционной сетки, то можно приближенно выполнить количественное сопоставление ее кривизны при различных условиях проведения моделирования. Вначале определим интервал изменения координат точек границы вдоль оси, перпендикулярной поверхности, имеющий единичную длину. Для этого вычислялись положения точек и определялись наибольшие и наименьшие значения, которые определяли границы искомого интервала значений. Далее, определяя положение точек на этом интервале, вычислялось их среднее удаление от его левой границы. Полученное

значение, отнесенное к длине интервала, принималась за меру кривизны межфазной границы (обозначим как γ). Для численного эксперимента с моделируемой плотностью энергии $q = 3$ МВт/см² расчетная величина γ получилась равной 0,099, а для $q = 4$ МВт/см² – $\gamma = 0,105$, что говорит о большей кривизне границы во втором случае. Изменение γ вдоль оси X расчетной ячейки представлено на рис.5.

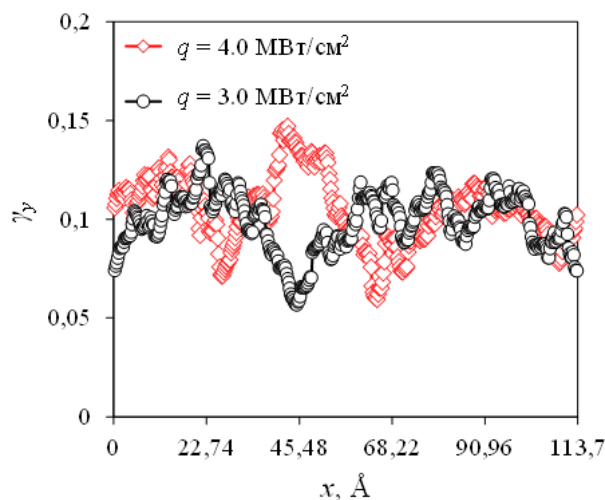


Рис.5. Изменение меры кривизны межфазной границы вдоль оси X в момент окончания этапа нагрева расчетной ячейки

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

Заключение

Таким образом, в ходе проведенного численного эксперимента продемонстрировано образование дислокаций, при этом на данный процесс оказывает влияние как выбор кристаллографической плоскости, используемой в качестве свободной поверхности для моделируемого кристалла, так и величина плотности энергии имитируемого лазерного импульса, что оказывает влияние на температуру расчетной ячейки. Высказано предположение, что образованию дислокаций способствует кривизна межфазной границы, приводящей к неравномерности распределения возникающих касательных напряжений.

Список литературы

1. Yang Z., Watanabe S. Dislocation loop formation under various irradiations of laser and/or electron beams // Acta Materialia. 2013. V. 61, N 8. P. 2966–2972.

2. Volosyuk M.A. Mechanisms of micro-voids formation caused by optical breakdown in KCl single crystals under laser emission // Вопросы атомной науки и техники. 2014. Т. 92, № 4. С. 55–59.
3. Xie J., Yan J., Zhu D., He G. Atomic-level insight into the formation of subsurface dislocation layer and Its effect on mechanical properties during ultrafast laser micro/nano fabrication // Advanced Functional Materials. 2022. V. 32, N 15. 2108802.
4. 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.
5. 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.
6. 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.
7. 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.
8. XMD – Molecular Dynamics Program: [Электронный ресурс] – Режим доступа <https://xmd.sourceforge.net>. Дата обращения: 04.03.2024.
9. 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.
10. Ackland G.J., Jones A.P. Applications of local crystal structure measures in experiment and simulation // Physical Review B. 2006. V. 73, N 5. 054104.
11. Stukowski A., Albe K. Extracting dislocations and non-dislocation crystal defects from atomistic simulation data // Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering. 2010. V. 18, N 8. 085001.
12. Готовцев В.М., Шатунов А.Г., Румянцев А.Н., Сухов В.Д. Механизм формирования межфазных напряжений // Современные наукоемкие технологии. 2012. № 11. С. 45–49.
13. Греков М.А., Макаров С.Н. Концентрация напряжений на периодически искривленной межфазной поверхности // Вестник Санкт-Петербургского университета. Прикладная математика. Информатика. Процессы управления. 2008. № 1. С. 25–31.
14. Игнатъев А.А., Готовцев В.М. Модель контактного взаимодействия жидкой и твердой фаз // Транспортные сооружения. 2023. Т. 10, № 2. С. 1–22.

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. Yang, Z. & Watanabe, S. (2013). Dislocation loop formation under various irradiations of laser and/or electron beams. *Acta Materialia*, 61(8), 2966–2972.
2. Volosyuk, M. A. (2014). Mechanisms of micro-voids formation caused by optical breakdown in KCl single crystals under laser emission. *Issues of atomic science and technology*, 92(4), 55–59.

3. Xie, J., Yan, J., Zhu, D. & He, G. (2022). Atomic-level insight into the formation of subsurface dislocation layer and Its effect on mechanical properties during ultrafast laser micro/nano fabrication. *Advanced Functional Materials*, 32(15), 2108802.
4. 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 a bcc metal under short-term high-energy exposure using the molecular dynamics method. *Metal Science and Thermal Treatment of Metals*, 803(5), 16–21. (In Russ.).
5. 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.).
6. 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.).
7. 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.
8. XMD – Molecular Dynamics Program: [Electronic resource] – Access mode <https://xmd.sourceforge.net>. Date of the application: 04.03.2024.
9. Stukowski, A. (2010). Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO – the Open Visualization Tool. *Modeling and Simulation Materials Science and Engineering*, (18), 015012.
10. Ackland, G. J. & Jones, A. P. (2006). Applications of local crystal structure measures in experiment and simulation. *Physical Review B*, 73(5), 054104.
11. 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.
12. Gotovtsev, V. M., Shatunov, A. G., Rumyantsev, A. N. & Sukhov, V. D. (2012). Mechanism of formation of interphase stresses. *Modern science-intensive technologies*, (11), 45–49. (In Russ.).
13. Grekov, M. A. & Makarov, S. N. (2008). Stress concentration on a periodically curved interphase surface. Bulletin of St. Petersburg University. Applied Mathematics. *Computer science. Management processes*, (1), 25–31. (In Russ.).
14. Ignatiev, A. A. & Gotovtsev, V. M. (2023). Model of contact interaction of liquid and solid phases. *Transport structures*, 10(2), 1–22. (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 12.04.2024; одобрена после рецензирования 06.05.2024; принята к публикации 20.05.2024.

The article was received by the editorial board on 12 Apr. 24; approved after reviewing 06 May 24; accepted for publication 20 May 24.