



УДК 538.911

DOI 10.17073/0368-0797-2024-5-567-572



Оригинальная статья

Original article

МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРНЫХ ИЗМЕНЕНИЙ В МЕТАЛЛЕ ПРИ ВЫСОКОИНТЕНСИВНОМ ВНЕШНЕМ ВОЗДЕЙСТВИИ

А. Н. Гостевская¹, А. В. Маркидонов^{1, 2},
М. Д. Старостенков³, Д. А. Лубяной⁴

¹ Сибирский государственный индустриальный университет (Россия, 654007, Кемеровская обл. – Кузбасс, Новокузнецк, ул. Кирова, 42)

² Кузбасский гуманитарно-педагогический институт Кемеровского государственного университета (Россия, 654041, Кемеровская обл. – Кузбасс, Новокузнецк, ул. Циолковского, 23)

³ Алтайский государственный технический университет имени И.И. Ползунова (Россия, 656038, Алтайский край, Барнаул, пр. Ленина, 46)

⁴ Филиал Кузбасского государственного технического университета имени Т.Ф. Горбачева в г. Прокопьевске (Россия, 653039, Кемеровская обл. – Кузбасс, Прокопьевск, ул. Ноградская, 32)

✉ lokon1296@mail.ru

Аннотация. На сегодняшний день перед исследователями и промышленностью стоит задача улучшения физико-механических свойств различных металлических изделий. Для упрочнения конструкций существуют различные технологии обработки поверхности материала путем высокотемпературного воздействия. Большой интерес при этом вызывает применение лазерных технологий. Высокоскоростной локальный лазерный нагрев поверхности материала с последующим быстрым охлаждением путем отвода тепла в глубь объема, а также отсутствие механического воздействия позволяют получить уникальные неравновесные структуры с широким набором свойств. Очевидно, что развитие этих технологий требует глубоких фундаментальных исследований. В настоящей работе методом молекулярной динамики выявлялись особенности структурных изменений поверхностных слоев кристалла железа при высокотемпературном воздействии. Выбор такого метода обусловлен тем, что рассматриваемые явления затруднительно изучать путем реальных экспериментов и прямых наблюдений. Условия компьютерного эксперимента были заданы таким образом, чтобы после прохождения точки температуры плавления в моделируемой системе происходил фазовый переход, при котором осуществляется отрыв частиц от поверхности жидкой фазы. В результате проведенного исследования выполнена оценка пороговой температуры эжектирования частиц и проведено исследование механизмов образования кластеров частиц. При нагреве происходит увеличение количества кластеров, а при охлаждении – его уменьшение, но при этом размеры кластеров увеличиваются, что свидетельствует о реализации механизма конденсации продуктов абляции. Дополнительно проведено исследование влияния внешнего давления на моделируемую систему частиц. Показано, что при увеличении давления количество кластеров уменьшается.

Ключевые слова: кристалл, модель, температура, поверхность, абляция, кластер

Благодарности: Исследование проводилось в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации № 075-00087-2401.

Для цитирования: Гостевская А.Н., Маркидонов А.В., Старостенков М.Д., Лубяной Д.А. Моделирование структурных изменений в металле при высокоинтенсивном внешнем воздействии. *Известия вузов. Черная металлургия*. 2024;67(5):567–572.

<https://doi.org/10.17073/0368-0797-2024-5-567-572>

SIMULATION OF STRUCTURAL CHANGES IN METAL UNDER HIGH-INTENSITY EXTERNAL INFLUENCE

A. N. Gostevskaya¹✉, A. V. Markidonov^{1, 2},
M. D. Starostenkov³, D. A. Lubyanoi⁴

¹ Siberian State Industrial University (42 Kirova Str., Novokuznetsk, Kemerovo Region – Kuzbass 654007, Russian Federation)

² Kuzbass Humanitarian Pedagogical Institute of Kemerovo State University (23 Tsiolkovskogo Str., Novokuznetsk, Kemerovo Region – Kuzbass 654041, Russian Federation)

³ Polzunov Altai State Technical University (46 Lenina Ave., Barnaul, Altai Territory 656038, Russian Federation)

⁴ Prokopyevsk Branch of the Kuzbass State Technical University named after T.F. Gorbachev (32 Nogradskaya Str., Prokopyevsk, Kemerovo Region – Kuzbass 653039, Russian Federation)

✉ lokon1296@mail.ru

Abstract. Today, researchers and industry are faced with the task of improving the physical and mechanical properties of various metal products. To strengthen the structures, there are various technologies for processing the material surface by high-temperature exposure. At the same time, the use of laser technologies is of great interest. High-speed local laser heating of the material surface followed by rapid cooling with heat removal into the volume depth, as well as the absence of mechanical action, allows us to obtain unique nonequilibrium structures with a wide range of properties. Obviously, the development of these technologies requires deep fundamental research. In this work, the molecular dynamics method revealed the features of structural changes in the surface layers of an iron crystal under high-temperature exposure. The choice of such a method is due to the fact that the phenomena under consideration are difficult to study through real experiments and direct observations. Conditions of the computer experiment were set in such a way that after the melting point is reached, a phase transition occurs in the simulated system, during which particles are separated from the surface of the liquid phase. As a result of the study, the threshold temperature of particle ejection was estimated and the mechanisms of particle cluster formation were investigated. When heated, the number of clusters increases, and when cooled, it decreases, but at the same time their sizes increase, which indicates the implementation of the condensation mechanism of ablation products. Additionally, the influence of external pressure on the simulated particle system was studied. It is shown that as the pressure increases, the number of clusters decreases.

Keywords: crystal, model, temperature, surface, ablation, cluster

Acknowledgements: The study was conducted within the framework of the state assignment of the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation No. 075-00087-2401.

For citation: Gostevskaya A.N., Markidonov A.V., Starostenkov M.D., Lubyanoi D.A. Simulation of structural changes in metal under high-intensity external influence. *Izvestiya. Ferrous Metallurgy*. 2024;67(5):567–572. <https://doi.org/10.17073/0368-0797-2024-5-567-572>

ВВЕДЕНИЕ

Под воздействием высоких температур структура материала претерпевает изменения. Изучение влияния высоких температур на структурные изменения металлов в области механики конденсированных сред ставит множество задач, связанных с основными свойствами и структурными изменениями материалов. Следует отметить, что в последнее время наблюдается рост интереса к методам получения наночастиц путем распыления материала при высокотемпературном воздействии. Облучение ультракороткими лазерными импульсами имеет практический интерес [1; 2], поэтому ему посвящены как экспериментальные, так и теоретические исследования [3 – 5]. В настоящее время существуют теоретические методы, которые основываются на построении тепловых моделей [6], разбросе баланса энергии испускания лазера [7]. Это позволяет оценить воздействие лазерного облучения на изменение поверхностного строения. Следует отметить, что характерные для лазерного облучения материалов явления абляции и десорбции исследовали с использованием метода молекулярно-динамического моделирования [8; 9]. Применительно к твердым телам молекулярная динамика может показать

различия десорбции от абляции, предсказать распределение кластеров в образцах [10 – 12], распределение частиц по радиальной и осевой скоростям и объяснить зависимость абляции от свойств лазера [13 – 15], таких как плотность энергии и длительность импульса [16; 17]. Известно, что для многих материалов процесс абляции сопровождается формированием кластеров частиц. В качестве механизма их образования рассматриваются процессы конденсации облака эжектированных частиц, фазовый взрыв, гидродинамическое распыление и фото-механические эффекты [18; 19]. В рамках настоящей работы было выполнено исследование механизмов образования кластеров частиц.

МЕТОДИКА ИССЛЕДОВАНИЯ

Для реализации численного эксперимента был выбран метод молекулярной динамики, позволяющий реализовать моделирование различных статистических ансамблей частиц, а также выполнить сопоставление полученных результатов в реальном времени.

Реализация моделирования по методу молекулярной динамики во многом зависит от потенциала межчастичного взаимодействия. При вычислении потенциала

применяли модель «погруженного атома», базирующуюся на теории расчета электронной структуры многих систем частиц в физике.

При расчете системы частиц, моделируемой в исследовании, строили ячейки металла (ОЦК решетки) с параметром решетки $a_0 = 2,855 \text{ \AA}$, которые транслировали вдоль осей x , y , z . Полученная расчетная ячейка имитировала кристалл железа и включала в себя 30 000 частиц. Бесконечную протяженность кристалла получили при использовании периодических граничных условий, а для создания поверхности вдоль оси ординат применяли свободные граничные условия.

В ходе моделирования расчетную ячейку разбивали на области, в каждой из которых задавали определенную температуру, убывающую по мере удаления от поверхности. При использовании модели полубесконечного твердого тела аналитически точное решение тепловой задачи можно получить путем интегральных преобразований [20]. При этом, если интенсивность источника постоянна, то распределение температуры по глубине образца на стадии нагрева определяется как функция координат по формуле:

$$T(y, t) = \frac{2Aq}{\lambda} \sqrt{at} \operatorname{ierfc}\left(\frac{y}{2\sqrt{at}}\right), \quad (1)$$

где $A = 0,68$ – поглощательная способность; $q = 3,5 \div 6,5 \text{ МВт/см}^2$ – плотность энергии; $\lambda = 80 \text{ Вт/(м} \cdot \text{К)}$ – коэффициент теплопроводности; $a = 2,621 \cdot 10^{-5} \text{ м}^2/\text{с}$ – температуропроводность; $\tau = 10 \cdot 10^{-12} \text{ с}$ – длительность воздействия.

Функция $\operatorname{ierfc}(x)$ является интегралом от функции интеграла вероятности:

$$\operatorname{ierfc}(x) = \int_x^\infty \operatorname{erfc}(x) dx. \quad (2)$$

После того, как лазерное воздействие прекращается, наступает стадия охлаждения, распределение температуры определяется по следующей формуле:

$$T(y, t) = \frac{2Aq}{\lambda} \left[\sqrt{at} \operatorname{ierfc}\left(\frac{y}{2\sqrt{at}}\right) - \sqrt{a(t-\tau)} \operatorname{ierfc}\left(\frac{y}{2\sqrt{a(t-\tau)}}\right) \right]. \quad (3)$$

РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЙ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Для выявления кластеров систему частиц разбивали на несвязанные группы на основе критерия расстояния, принятого равным удвоенному значению параметра решетки. Под отдельным кластером будем понимать группу частиц, каждая из которых удалена от одной или нескольких частиц той же группы на расстояние, не превышающее радиус обрезания. После выявления кластеров частиц они раскрываются в определенный

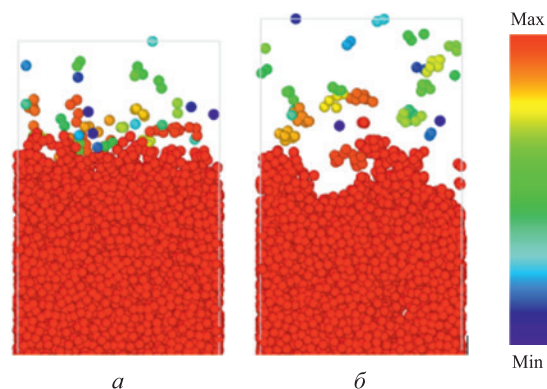


Рис. 1. Визуализация идентифицируемых кластеров через 10 (а) и 18 пс (б) модельного времени ($q = 5 \text{ МВт/см}^2$; цветовая визуализация соответствует размерам кластеров)

Fig. 1. Visualization of identified clusters after 10 (a) and 18 ps (б) of model time ($q = 5 \text{ MW/cm}^2$; color visualization matches sizes of clusters)

цвет в зависимости от его размеров. Цветовая гамма менялась с фиолетовой на красную по мере увеличения количества частиц, принадлежащих кластеру.

Проведенное исследование показало, что в процессе нагрева идентифицируется постепенно увеличивающееся количество кластеров, которые, как правило, представляют собой одиночные частицы (рис. 1, а). В процессе охлаждения количество идентифицируемых кластеров уменьшается, а их размеры увеличиваются, то есть ранее эжектированные частицы начинают объединяться в группы (рис. 1, б). В рассмотренной модели реализуется механизм конденсации продуктов абляции.

Идентифицированные кластеры при различной плотности лазерного излучения представлены на рис. 2.

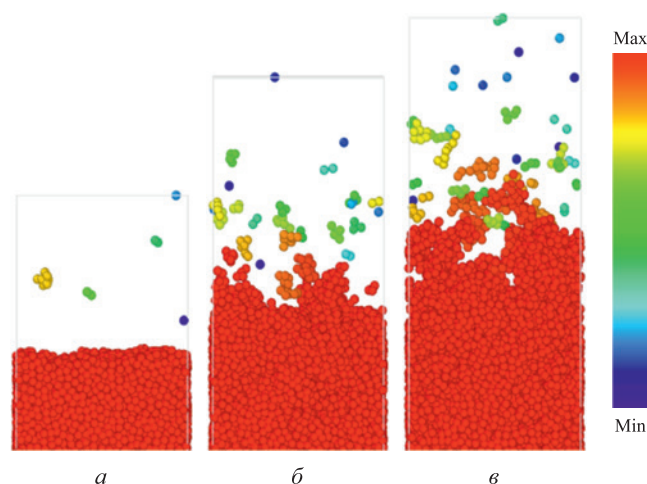


Рис. 2. Визуализация идентифицируемых кластеров через 20 пс модельного времени при плотности энергии лазерного излучения 3,5; 5,0 и 6,5 МВт/см² (а – в) (цветовая визуализация соответствует размерам кластеров)

Fig. 2. Visualization of identified clusters after 20 ps of model time at a laser radiation energy density of 3.5; 5.0 and 6.5 MW/cm² (a – в) (color visualization matches sizes of clusters)

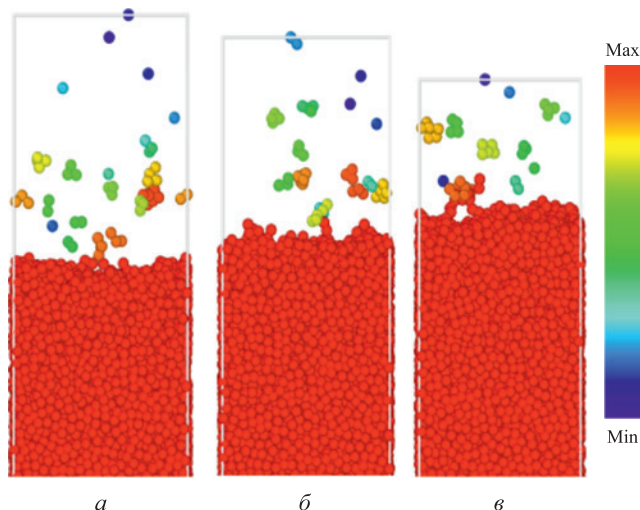


Рис. 3. Визуализация идентифицируемых кластеров через 20 пс модельного времени при давлении 1, 2 и 3 ГПа (а – в) ($q = 5 \text{ МВт/см}^2$; цветовая визуализация соответствует размерам кластеров)

Fig. 3. Visualization of identified clusters after 20 ps of model time at pressures of 1, 2 and 3 GPa (а – в) ($q = 5 \text{ МВт/см}^2$; color visualization matches sizes of clusters)

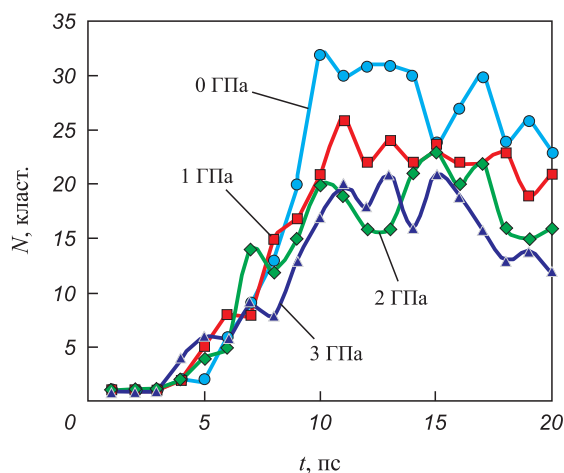


Рис. 4. Изменение количества кластеров при моделировании при различном давлении ($q = 5 \text{ МВт/см}^2$)

Fig. 4. Change in the number of clusters during simulation at different pressures ($q = 5 \text{ МВт/см}^2$)

Большая плотность энергии лазерного излучения способствует образованию большого количества кластеров (для $q = 3,5, 5,0$ и $6,5 \text{ МВт/см}^2$ составляет 6, 23 и 38 соответственно).

Было проведено исследование влияния давления в системе на количество формирующихся кластеров. Алгоритм баростатирования, применяемый при моделировании, заключается в том, что объем системы становится переменной величиной, значение которой меняется, чтобы давление в системе оставалось постоянным [20]. Кластеры при различном давлении представлены на рис. 3.

Количество кластеров при увеличении давления уменьшается. Изменение их числа в процессе моделирования представлено на рис. 4.

Выводы

В результате проведенного исследования была построена модель с помощью метода молекулярной динамики, которая дала возможность изучить процесс лазерной абляции, протекающий под влиянием коротких импульсов с малой плотностью. Проведено исследование формирования кластеров частиц при абляции. Построена числовая зависимость количества сформированных кластеров от воздействующего на них давления.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ / REFERENCES

1. Гостевская А.Н. Воздействие ультракоротких сверхмощных лазерных импульсов на твердое тело. В кн.: *Актуальные проблемы физического металловедения сталей и сплавов. Сб. тезисов докладов XXVI Уральской школы металловедов-термистов*. Екатеринбург. 2022:259–261.
2. Мажукин В.И., Мажукин А.В., Демин М.М., Шапранов А.В. Эффекты неравновесности при воздействии импульсного лазерного излучения на металлы. *Оптический журнал*. 2011;78(8):29–37.
Mazhukin V.I., Mazhukin A.V., Demin M.M., Shapranov A.V. Nonequilibrium effects accompanying the action of pulsed laser radiation on metals. *Journal of Optical Technology*. 2011;78(8):491–497.
<https://doi.org/10.1364/JOT.78.000491>
3. Zhigilei L.V., Kodali P.B.S., Garrison B.J. Molecular dynamics model for laser ablation and desorption of organic solids. *The Journal of Physical Chemistry B*. 1997;101(11): 2028–2037. <https://doi.org/10.1021/jp9634013>
4. Tabetah M., Matei A., Constantinescu C. The minimum amount of “matrix” needed for matrix-assisted pulsed laser deposition of biomolecules. *The Journal of Physical Chemistry B*. 2014;118(46):13290–13299.
<http://dx.doi.org/10.1021/jp508284n>
5. Bauerle D. *Laser Processing and Chemistry*. Luxembourg: Springer Science Business Media; 2011:851.
6. Гостевская А.Н., Маркидонов А.В. Изменение внутреннего строения металлов при воздействии лазерных импульсов. В кн.: *Инновационные технологии в материаловедении и машиностроении. Материалы 5-й Всероссийской научно-практической конференции с международным участием*. Пермь: Изд-во Пермского нац. исслед. политехн. ун-та; 2021:60–63.
7. Гостевская А.Н., Маркидонов А.В., Коваленко В.В. Молекулярно-динамическое моделирование лазерной абляции. В кн.: *Перспективные материалы и технологии: материалы международного симпозиума, Минск, 23–27 августа 2021 г.* / Под. ред. В.В. Рубаника. Минск: Белорусский государственный институт стандартизации и сертификации; 2021:21.
8. Willis D.A., Grosu V. The effect of melting-induced volumetric expansion on initiation of laser-induced forward transfer.

- Applied Surface Science*. 2007;253(10):4759–4763.
<https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2006.10.046>
9. Fardel R., Nagel M., Nuesch F. Energy balance in a laser-induced forward transfer process studied by shadowgraphy. *Journal of Physical Chemistry C*. 2009;113(27):11628–11633.
<http://dx.doi.org/10.1021/jp901340s>
 10. Zhigilei L. Yingling Ya., Itina T., Schoolcraft T., Garrison B. Molecular dynamics simulations of matrix-assisted laser desorption-connections to experiment. *International Journal of Mass Spectrometry*. 2003;226(1):85–106.
[https://doi.org/10.1016/S1387-3806\(02\)00962-4](https://doi.org/10.1016/S1387-3806(02)00962-4)
 11. Анисимов С.И., Лукьянчук Б.С. Избранные задачи теории лазерной абляции. *Успехи физических наук*. 2007; 45(3):293. <https://doi.org/10.3367/ufnr.0172.200203b.0301>
Anisimov S.I., Luk'yanchuk B.S. Selected problems of laser ablation theory. *Physics – Uspekhi*. 2007;45(3):293. (In Russ.). <https://doi.org/10.1070/pu2002v045n03abeh000966>
 12. Завьялова М.А. Поверхностная модификация кварцевого стекла импульсами пикосекундного лазера. *Компьютерная оптика*. 2016;40(6):863–870.
<https://doi.org/10.18287/2412-6179-2016-40-6-863-870>
Zavyalova M.A. Surface modification of quartz glass by picosecond laser pulses. *Computer Optics*. 2016;40(6): 863–870. (In Russ.).
<https://doi.org/10.18287/2412-6179-2016-40-6-863-870>
 13. Кузнецов П.М., Федоров В.А. Формирование рельефа кратера при воздействии лазерного излучения на поверхность сплава Fe – Si. *Вестник ТГУ*. 2010;15(6):1790–1793.
Kuznetsov P.M., Fedorov V.A. Formation of crater relief under laser radiation on Fe – Si alloy surface. *Vestnik TGU*. 2010;15(6):1790–1793. (In Russ.).
 14. Явтушенко Т.О., Кадочников А.С., Новиков С.Г., Беринцев А.В., Столяров Д.А. Экспериментальное исследование процесса структурирования поверхности металла фемтосекундными лазерными импульсами высокой мощности. *Известия Самарского научного центра Российской академии наук*. 2013;15(4-5):1033–1037.
Yavtushenko T.O., Kadochnikov A.S., Novikov S.G., Berintsev A.V., Stolyarov D.A. Experimental research of metal surface structuring via high power femtosecond laser pulses. *Izvestiya Samarskogo nauchnogo tsentra Rossiiskoi akademii nauk*. 2013;15(4-5):1033–1037. (In Russ.).
 15. Kuo J.-K., Huang P.-H., Chien S.-K., Huang K.-Y., Chen K.-T. Molecular dynamics simulations of crater formation induced by laser ablation on the surface of α -Fe substrate. *MATEC Web of Conferences*. 2018;167:03011.
<https://doi.org/10.1051/mateconf/201816703011>
 16. Gong X.-F., Yang G.-X., Li P., Wang Y., Ning X.-J. Molecular dynamics simulation of pulsed laser ablation. *International Journal of Modern Physics B*. 2011;25(4):543–550.
<http://dx.doi.org/10.1142/S0217979211058122>
 17. Cheng C., Wu A.Q., Xu X. Molecular dynamics simulation of ultrafast laser ablation of fused silica. *Journal of Physics: Conference Series*. 2007;59:100–104.
<http://dx.doi.org/10.1088/1742-6596/59/1/022>
 18. Рыкалкин Н.Н., Углов А.А., Зуев И.В., Кокора А.Н. Лазерная и электронно-лучевая обработка материалов. Москва: Машиностроение; 1985:496.
 19. 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. Новосибирск: ИТ СО РАН. 2009:147–220.
 20. Andersen H.C. Molecular dynamics simulations at constant pressure and/or temperature. *The Journal of Chemical Physics*. 1980;72(4):2384–2393.
<https://doi.org/10.1063/1.439486>

Сведения об авторах

Information about the Authors

Анастасия Николаевна Гостевская, аспирант кафедры естественнонаучных дисциплин им. профессора В.М. Финкеля, Сибирский государственный индустриальный университет
ORCID: 0000-0002-7328-5444
E-mail: lokon1296@mail.ru

Артем Владимирович Маркидонов, д.ф.-м.н., доцент кафедры естественнонаучных дисциплин имени В.М. Финкеля, Сибирский государственный индустриальный университет; заведующий кафедрой информатики и вычислительной техники им. В.К. Буторина, Кузбасский гуманитарно-педагогический институт Кемеровского государственного университета
ORCID: 0000-0002-4566-528X
E-mail: markidonov_artem@mail.ru

Михаил Дмитриевич Старостенков, д.ф.-м.н., профессор, заведующий кафедрой физики, Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова
ORCID: 0000-0002-6326-7613
E-mail: genphys@mail.ru

Дмитрий Анатольевич Лубяной, к.т.н., доцент кафедры технологии и комплексной механизации горных работ, Филиал Кузбасского государственного технического университета им. Т.Ф. Горбачева в г. Прокопьевск
ORCID: 0000-0001-9773-3558
E-mail: lubjanoy@yandex.ru

Anastasia N. Gostevskaya, Postgraduate of Chair of Science named after V.M. Finkel', Siberian State Industrial University
ORCID: 0000-0002-7328-5444
E-mail: lokon1296@mail.ru

Artem V. Markidonov, Dr. Sci. (Phys.-Math.), Assist. Prof. of the Chair of Science named after V.M. Finkel', Siberian State Industrial University; Head of the Chair of Informatics and Computer Engineering named after V.C. Butorin, Kuzbass Humanitarian Pedagogical Institute of Kemerovo State University
ORCID: 0000-0002-4566-528X
E-mail: markidonov_artem@mail.ru

Mikhail D. Starostenkov, Dr. Sci. (Phys.-Math.), Prof., Head of the Chair of Physics, Polzunov Altai State Technical University
ORCID: 0000-0002-6326-7613
E-mail: genphys@mail.ru

Dmitrii A. Lubyanoy, Cand. Sci. (Eng.), Assist. Prof. of the Chair of Technology and Integrated Mechanization of Mining, Prokopyevsk Branch of the Kuzbass State Technical University named after T.F. Gorbachev
ORCID: 0000-0001-9773-3558
E-mail: lubjanoy@yandex.ru

Вклад авторов

Contribution of the Authors

А. Н. Гостевская – постановка и проведение вычислительных экспериментов, обзор литературы, написание текста статьи.

А. В. Маркидонов – построение компьютерной модели, написание программного кода, визуализация и анализ результатов моделирования.

М. Д. Старостенков – формулирование концепции исследования, обсуждение результатов.

Д. А. Лубяной – обсуждение результатов.

A. N. Gostevskaya – formulation and implementation of computational results, literature review, writing the text.

A. V. Markidonov – building a computer model, writing a program code, visualizing and analyzing the simulation results.

M. D. Starostenkov – formulation of the research concept, discussion of the results.

D. A. Lubyanoi – discussion of the results.

Поступила в редакцию 27.10.2023

После доработки 28.03.2024

Принята к публикации 21.08.2024

Received 27.10.2023

Revised 30.03.2024

Accepted 21.08.2024