

## МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ДЛЯ ИЗУЧЕНИЯ ПРОЦЕССОВ, ПРОИСХОДЯЩИХ В ПОВЕРХНОСТНЫХ СЛОЯХ МАТЕРИАЛА ПРИ ВНЕШНЕМ КРАТКОВРЕМЕННОМ ВЫСОКОЭНЕРГЕТИЧЕСКОМ ВОЗДЕЙСТВИИ

Гостевская А.Н.<sup>1</sup>, Маркидонов А.В.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Сибирский государственный индустриальный университет, Новокузнецк, Россия

<sup>2</sup>Кузбасский гуманитарно-педагогический институт Кемеровского государственного университета, Новокузнецк, Россия

[lokon1296@mail.ru](mailto:lokon1296@mail.ru)

В результате воздействия на металл ультракороткими сверхмощными лазерными импульсами создаются уникальные физические условия – высокая скорость нагрева материала и объемный механизм выделения энергии лазерного излучения. Все это приводит к тому, что конденсированная среда нагревается до температур, превышающих равновесное значение, как температуры плавления, так и температуры испарения. Длительность воздействия пикосекундных лазерных импульсов сопоставима с характеристическими временами термализации и фазовыми превращениями в материале, но при этом тепловое воздействие вне зоны обработки минимально.

В рамках проводимого исследования изучались структурные изменения, происходящие в материале при высокотемпературном воздействии, в рамках молекулярно-динамического моделирования. Процесс моделирования состоял из двух этапов. На начальном этапе расчетная ячейка подвергалась неравномерному нагреву в течение 10 пс модельного времени, ПОСЛЕ чего следовал второй этап, заключающийся в неравномерном охлаждении в течение 20 пс, при котором температура расчетной ячейки устанавливалась. Нами было проведено моделирование расчетных ячеек, содержащих границы раздела различной кристаллографической ориентации. Стоит отметить, что с точки зрения квазитермодинамического подхода к описанию образования новой фазы в конденсированной среде, формирование флуктуационным путем зародыша поры («фазы пустоты») с размером, превышающим некоторое критическое значение, определяемое удельной поверхностной энергией, маловероятно. В нашем случае напряженное состояние расчетной ячейки обусловлено неравномерным нагревом, и граница раздела создает собственное поле напряжений, величина которых пропорциональна свободной поверхностной энергии  $\gamma$ . Оказалось, что размеры пор и время их существования при этом также меняются, хотя температура верхних слоев при моделировании межфазных границ различной кристаллографической ориентации меняется пренебрежимо мало. Нами была построена молекулярно-динамическая модель для изучения процессов, происходящих в поверхностных слоях материала при внешнем кратковременном высокоэнергетическом воздействии. Было обнаружено, что в поверхностном слое после прекращения внешнего воздействия свободный объем локализуется в виде группы пор, которые растворяются в процессе усадки. Стабилизировать данные поры можно путем увеличения скорости охлаждения расчетной ячейки. Кроме того, было установлено влияние ориентации межфазной границы «твердое тело - жидкость» на размеры формируемых пор.

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