



## **ТЕЗИСЫ**

**ХII Международной конференции  
«ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ  
И ПРОЧНОСТЬ КРИСТАЛЛОВ»**

**памяти академика Г.В. Курдюмова**

**ФПК-2022**

24 – 27 октября 2022 г.  
г. Черноголовка, Россия

Российская Академия наук  
Министерство науки и высшего образования РФ  
Научный Совет РАН по физике конденсированных сред.  
Межгосударственный координационный совет по физике прочности  
и пластичности материалов  
Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»  
Институт физики твердого тела РАН  
Научный Центр металловедения и физики металлов им. Г.В. Курдюмова  
ФГУП "ЦНИИчермет им. И.П. Бардина"

**Двенадцатая Международная Конференция**  
**«Фазовые превращения и**  
**прочность кристаллов»,**  
**памяти академика Г.В. Курдюмова**

Под редакцией д.ф.-м.н. Б.Б.Страумала

XII International G.V. Kurdjumov conference  
"Phase transformations and strengths of the crystals"

*Черноголовка, 24 – 27 октября 2022 г.*

**СБОРНИК ТЕЗИСОВ**

**Черноголовка**  
**2022**

**Фазовые превращения и прочность кристаллов:** сб. тезисов XII Международной конференции (24 – 27 октября 2022 года, Черногоровка) / под ред. Б.Б. Страумала. – Черногоровка, 176 с. – ISBN 978-5-6045956-2-6.

ISBN 978-5-6045956-2-6



9 785604 595626

© Российская Академия наук, 2022  
© Страумал Б.Б. (редактор), 2022

## 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*