# ФИЗИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ ПРОЧНОСТИ И ПЛАСТИЧНОСТИ

## УДК 538.911

# Моделирование структурных изменений в поверхностном слое деформированного ОЦК-кристалла при кратковременном внешнем высокоинтенсивном воздействии

**А.В. Маркидонов**<sup>1, 2</sup>, д-р физ.-мат. наук, **А.Н. Гостевская**<sup>1\*</sup>,

В.Е. Громов<sup>1</sup>, д-р физ.-мат. наук, М.Д. Старостенков<sup>3</sup>, д-р физ.-мат. наук, П.А. Зыков<sup>4</sup>, канд. техн. наук

<sup>1</sup>Сибирский государственный индустриальный университет, *Новокузнецк, 654007, Россия* <sup>2</sup>Кузбасский гуманитарно-педагогический институт Кемеровского государственного университета, *Новокузнецк, 654027, Россия* 

<sup>3</sup> Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова, *Барнаул*, 656038, *Россия* 

<sup>4</sup>Кузбасский государственный технический университет им. Т.Ф. Горбачева, филиал, *Новокузнецк, 654005, Россия* \**E-mail:* lokon1296@mail.ru

Поступила в редакцию 20.04.2022 После доработки 20.04.2022 Принята к публикации 27.04.2022

Изложены результаты молекулярно-динамического моделирования изменения поверхностного слоя α-Fe при кратковременном высокоэнергетическом воздействии. Построенная модель позволила выявить нарушение сплошности поверхностного слоя, заключающееся в локализации избыточного свободного объема в виде группы сферических пор. Размеры этих несовершенств, а также длительность их существования зависят от плотности энергии лазерного излучения, а также от деформации расчетной ячейки.

**Ключевые слова:** лазерная абляция, молекулярно-динамическое моделирование, импульсная обработка, ОЦК-кристалл, пора, поверхность, деформация

## 1. Введение

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 температуры как плавления, так и испарения. Длительность воздействия пикосекундных лазерных импульсов сопоставима с характеристическими временами термализации и фазовых превращений в материале, но при этом тепловое воздействие вне зоны обработки минимально. Несомненно, что процессы неравновесного нагрева вещества при лазерном воздействии представляют практический интерес, и поэтому являются объектом различных экспериментальных и теоретических исследований [1–4].

Облучение высокомощными лазерными импульсами может приводить к плавлению материала и движению расплава, вызванного резкими температурными градиентами и релаксацией давления, с последующим отрывом вещества от поверхности (абляци-

ей), что находит применение в различных областях [5-9]. Скорость протекания этих процессов может быть настолько большой, что не позволяет проводить их исследование путем прямого наблюдения. В данном случае наиболее рациональным представляется применение методов компьютерного моделирования, которые в условиях возрастаюшей вычислительной мощности современных компьютеров позволяют рассматривать все более сложные системы. Явление лазерной абляции успешно изучается с помощью метода молекулярной динамики [10-12], хотя и предполагает ряд допушений [13, 14]. Так, например, в рамках классической молекулярной динамики необходимо рассматривать временные интервалы, соответствующие характеристическому времени электронно-фононной релаксации.

Структурные изменения, происходящие в аморфной фазе на стадии остывания после прекращения воздействия, несомненно, окажут влияние на различные физические и геометрические характеристики полностью или частично кристаллизованной структуры, и, как следствие, - на формирование поверхности материала. С учетом этого исследование аморфной структуры материала, подверженного лазерному воздействию, вызывает практический интерес. В настоящей работе в рамках проводимого исследования изучались структурные изменения, происходящие в материале при высокотемпературном воздействии методом молекулярной динамики.

## 2. Модель

Модель строилась следующим образом. В прямоугольной системе координат задавался размер расчетной ячейки в трех взаимно ортогональных кристаллографических направлениях, совпадающих с координатными осями. Затем формировалась элементарная ячейка, расположение атомов в которой соответствовало ОЦК-решетке с равновесным параметром *a*<sub>0</sub>, и путем трансляция такими ячейками заполнялся весь заданный объем. Расчетная ячейка представляла собой прямоугольный параллелепипед с соотношением сторон 3:4:25 и включала в себя 48000 атомов. Поскольку предполагалось проведение исследования на модели кристаллита железа, то параметр решетки задавался равным 2,866 Å.

Вдоль осей X и Z использовались периодические граничные условия, а вдоль оси Y — свободные, имитирующие поверхность кристалла. Ориентация расчетной ячейки в пространстве устанавливалась таким образом, чтобы ось X совпадала с кристаллографическим направлением [100], ось Y — с направлением [010], а Z — с направлением [001].

В качестве функции межчастичного взаимодействия использовался потенциал, построенный с применением метода погруженного атома [15]. Для интегрирования уравнений движения, описывающих поведение системы частиц, был выбран скоростной алгоритм Верле с временным шагом 1 фс. Расчеты выполнялись в пакете программ XMD [16]. Визуализация результатов моделирования осуществлялась при помощи пакета визуализации OVITO [17].

Для моделирования нагрева мишени под воздействием лазерного излучения расчетная ячейка разбивалась на 10 слоев равной толщины вдоль оси *Y*, в каждом из которых задавалось определенное значение температуры, убывающее по мере удаления от поверхности. При установлении теплового равновесия между электронами и фононами для описания распространения тепла можно применять модель теплопроводности. Для полубесконечного твердого тела аналитически точное решение тепловой задачи можно получить путем интегральных преобразований [18]. При этом если интенсивность источника не зависит от времени, а физические параметры постоянны и не зависят от температуры (линейная задача теплопроводности), то распределение температуры по толщине образца на стадии нагрева (при  $t < \tau$ , где  $\tau$  — длительность воздействия) определяется как функция координат следующим образом:

$$T(y,t) = \frac{2Aq}{\lambda} \sqrt{\alpha t} \cdot ierfc\left(\frac{y}{2\sqrt{\alpha t}}\right), \qquad (1)$$

где A — поглощательная способность; q — плотность энергии;  $\lambda$  — теплопроводность;  $\alpha$  — температуропроводность.

Функция *ierfc*(x), входящая в (1), представляет собой интеграл от дополнительного интеграла вероятности:

$$ierfc(x) = \int_{x}^{\infty} erfc(x)dx,$$
 (2)

После окончания лазерного воздействия  $(t > \tau)$  наступает стадия охлаждения, и распределение температуры определяется как

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

Для вычисления температуры использовали следующие значения параметров, соответствующие моделируемому материалу и пикосекундным лазерным импульсам: A = 0.68; q = 3.0-6.5 MBT/cm<sup>2</sup>;  $\lambda = 80$  BT/м·K;  $\alpha = 2.621 \cdot 10^{-5}$  м<sup>2</sup>/с;  $\tau = 10 \cdot 10^{-12}$  с.

Неравномерный нагрев моделируемого образца может привести к формированию вблизи поверхности области сжатия, распространяющейся вглубь в виде волны давления, и при достижении ею противоположной границы в случае свободных граничных условий способствовать эжектированию атомов. Во избежание этого в наиболее удаленном от моделируемой поверхности слое при помощи процедуры термостатирования поддерживалась постоянная температура 300 К, а также накладывались вязкие граничные условия.

Процесс моделирования состоял из двух этапов. На начальном этапе расчетная ячей-

ка подвергалась неравномерному нагреву в течение 10 пс модельного времени в соответствии с формулой (1). После чего следовал второй этап, заключающийся в неравномерном охлаждении в течение 20 пс, при котором температура расчетной ячейки устанавливалась в соответствии с формулой (3).

Для количественной оценки структурных изменений в приповерхностных слоях расчетной ячейки использовался коэффициент пористости θ, определяемый как доля свободной поверхности, создаваемой формируемыми пустотами, в общей свободной поверхности, идентифицируемой в расчетной ячейке.

Двухосная деформация кристалла создавалась путем изменения межатомного расстояния в расчетной ячейки, вдоль осей *X* и *Z*.

### 3. Результаты моделирования

Теоретические кривые распределения температуры по образцу вдоль оси Y, вычисленные по формуле (1), и усредненные значения температуры выделенных слоев расчетной ячейки при плотности энергии лазерного излучения q = 3,5 MBT/см<sup>2</sup> приведены на рис. 1. Согласно этим данным, температура наиболее удаленных от поверхности слоев не соответствует расчетным значениям, что обусловлено использованием процедуры термостатирования. С учетом этого структура нижних слоев в работе не рассматривалась. Изменение средней температуры расчетной ячейки в процессе моделирования иллюстрируют данные рис. 2.

После того как локальная температура расчетной ячейки на этапе нагрева начинает превышать температуру плавления происходит фазовый переход и в ячейке формируется граница раздела твердой и жидкой фаз, смещающаяся в область более низких температур. Последующее повышение температуры приводит к тому, что от поверхности расчетной ячейки начинают отрываться (испаряться) атомы, формируя облако.



Рис. 1. Расчетное изменение температуры по мере удаления от поверхности кристалла (сплошная линия) и усредненные значения температуры выделенных слоев расчетной ячейки (маркеры) через 1 (*a*) и 12 (*б*) пс модельного времени (*q* = 3,5 МВт/см<sup>2)</sup>



Рис. 2. Временные зависимости средней температуры расчетной ячейки при различной плотности энергии лазерного излучения

Этап охлаждения сопровождается локализацией областей разряжения, сформированных на предыдущем этап нагрева (рис. 3, a), их коалесценцией и образованием сферических пор (рис. 3,  $\delta$ —e). Отметим, что формирование нанопор в поверхностном слое при лазерном воздействии наблюдали также авторы работы [19].

Для идентификации пустот и последующей оценки площади их поверхности использовался алгоритм [20], основанный на методе альфа-формы Эдельсбруннера и Мюкке, в котором геометрическое множество точек объединяется поверхностной сеткой при помощи тетраэдризации Делоне с последующей процедурой сглаживания.

Идентификация пустоты в объеме твердого тела определяется радиусом виртуальной сферы, которая вписывается в межатомные пространства. Радиус такой сферы должен, как минимум, превышать половину кратчайшего межатомного расстояния, иначе в расчеты будут включены «искусственные» пустоты. В настоящей работе радиус виртуальной сферы равнялся параметру решетки.

При моделировании различной плотности поглощенной энергии излучения, достигаемой варьированием параметра q в формулах (1) и (3), наблюдаются различные структурные изменения в приповерхностных слоях расчетной ячейки. Так, при  $q \le 3,5$  MBT/см<sup>2</sup> пустоты, формирующиеся в ячейке, в процессе моделирования растворяются (рис. 4). При бо́льших значениях q в аморфной области образуются протяженные пустоты, остающиеся стабильными на протяжении всего моделирования (дефекты подобного рода объект дальнейшего изучения).

Механизмом растворения пор в поверхностном слое расчетной ячейки является диффузионно-вязкое течение материала в образовавшуюся пустоту. Скорость протекания диффузионных процессов во многом определяется температурой, и, следовательно, стабильность поры на втором этапе моделирования будет зависеть от скорости охлаждения расчетной ячейки. Данная ве-



Рис. 3. Визуализация свободной поверхности, образующейся в расчетной ячейке (представлен ее фрагмент), через 11 (*a*), 15 (*б*), 19 (*в*) и 22 (*г*) пс модельного времени (*q* = 3,5 МВт/см<sup>2)</sup>

личина, при реализации охлаждения в соответствии с формулой (3), оценивается как  $3,53 \cdot 10^{13}$  К/с. Для достижения других скоростей в формулу был добавлен коэффициент ( $\tau/t$ )*n*, где *n* — произвольное рациональное число. При варьировании *n* были получены более высокие скорости охлаждения, при которых пористость верхних слоев сохранялась. Результаты моделирования приведены на рис. 5.

При локальном воздействии на материал с помощью источников концентрированной энергии неизбежно возникают высокоградиентные температурные поля, приводящие к развитию различных деформаций [21, 22]. В связи с этим интерес представляет исследование эволюции образующихся пор в поверхностном слое кристалла, подвергнутого деформированию. Для того чтобы коэффи-



Рис. 4. Временные зависимости коэффициента пористости расчетной ячейки при различной плотности энергии лазерного излучения



Рис. 5. Временные зависимости коэффициента пористости расчетной ячейки на заключительной стадии моделирования при различной скорости охлаждения (q = 3,5 МВт/см<sup>2</sup>)

циент пористости более наглядно характеризовал процесс развития пор, использовалась обрезка малых значений пустот путем удвоения радиуса виртуальной сферы, используемой для их идентификации.

Результаты вычислений при различной величине деформации приведены на рис. 6. Как следует из этих данных, деформация растяжения способствует формированию более крупных пор в поверхностном слое, а также стабилизирует их, в результате чего поры сохраняются более длительное время по сравнению с порами в недеформированном кристалле. Сжатие расчетной ячейки, наоборот, способствует быстрейшему растворению пор, а дальнейший рост величины деформации предотвращает их формирование.

### 4. Заключение

Внешнее высокоэнергетическое воздействие на поверхность твердого тела, например, ультракороткими сверхмощными лазерными импульсами, может приводить к фазовым переходам, в результате которых структура поверхности претерпевает кардинальные изменения. Подобные быстропротекающие процессы в твердых телах успешно изучаются с помощью методов компьютерного моделирования. В настоящей



Рис. 6. Временные зависимости коэффициента пористости расчетной ячейки при различной деформации (q = 3,5 МВт/см<sup>2</sup>)

работе построена молекулярно-динамическая модель для изучения процессов, происходящих в поверхностных слоях материала при внешнем кратковременном высокоэнергетическом воздействии. 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 или же путем создания деформации растяжения. Сжатие же расчетной ячейки позволяет вообще избежать процесса порообразования. Результаты данного исследования могут найти применение при изучении процессов лазерной абляции и модифицировании поверхности.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках научного проекта № 0809-2021-0013.

#### Список литературы

- 1. Ионин А.А., Кудряшов С.И., Самохин А.А. Абляция поверхности материалов под действием ультракоротких лазерных импульсов // Успехи физических наук. 2017. Т. 187. № 2. С. 159—172.
- Starinskiy S.V., Shukhov Y.G., Bulgakov A.V. Laserinduced damage thresholds of gold, silver and their alloys in air and water // Applied Surface Science. 2017. V. 396. P. 1765–1774.

- Petrov Y.V., Khokhlov V.A., Zhakhovsky V.V., Inogamov N.A. Hydrodynamic phenomena induced by laser ablation of metal into liquid // Applied Surface Science. 2019. V. 492. P. 285–297.
- Rajcic B., Petronic S., Colic K., Stevic Z., Petrovic A., Miškovic Ž., Milovanovic D. Laser processing of Ni-based superalloy surfaces susceptible to stress concentration // Metals. 2021. V. 11. Art. N 750.
- Smirnov N.A., Kudryashov S.I., Danilov P.A., Rudenko A.A., Gakovic B., Milovanović D., Ionin A.A., Nastulyavichus A.A., Umanskaya S.F. Microprocessing of a steel surface by single pulses of variable width // Laser Physics Letters. 2019. V. 16. N 5. Art. N 056002.
- Shih C.Y., Wu C., Shugaev M.V., Zhigilei L.V. Atomistic modeling of nanoparticle generation in short pulse laser ablation of thin metal films in water // Journal of Colloid and Interface Science. 2017. V. 489. P. 3–17.
- Danilov P.A., Ionin A.A., Kudryashov S.I., Rudenko A.A., Saraeva I.N., Zayarny D.A. Non-monotonic variation of Au nanoparticle yield during femtosecond / picosecond laser ablation in water // Lases Physics Letters. 2017. V. 14. N 5. Art. N 056001.
- 8. **Gurevich E.L., Levy Y., Gurevich S.V., Bulgakova N.M.** Role of the temperature dynamics in formation of nanopatterns upon single femtosecond laser pulses on gold // Physical Review B. 2017. V. 95. N 5. Art. N 054305.
- Ionin A., Ivanova A., Khmel»nitskii R., Klevkov Y., Kudryashov S., Mel»nik N., Nastulyavichus A., Rudenko A., Saraeva I., Smirnov N., Zayarny D. Milligram-per-second femtosecond laser production of Se nanoparticle inks and ink-jet printing of nanophotonic 2D-patterns // Applied Surface Science. 2018. V. 436. P. 662–669.
- 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. V. 167. Art. N 03011.
- Ivanov D.S., Blumenstein A., Ihlemann J., Simon P., Garcia M.E., Rethfeld B. Molecular dynamics modeling of periodic nanostructuring of metals with a short UV laser pulse under spatial confinement by a water layer // Applied Physics A. 2017. V. 123. N 12. Art. N 744.
- Bai Q.S., Li Y.H., Shen R.Q., Zhang K., Miao X.X., Zhang F.H. Molecular simulation and ablation property on the laser-induced metal surface // Proc. Pacific Rim Laser Damage 2019: Optical Materials for High-Power

Lasers (Qingdao, China, 19–22 May 2019). V. 11063. Art. N 1106306.

- 13. Гостевская А.Н. Воздействие ультракоротких сверхмощных лазерных импульсов на твердое тело / Актуальные проблемы физического металловедения сталей и сплавов: Сб. тез. докл. XXVI Уральской школы металловедов-термистов (Екатеринбург, 7—11 февраля 2022 г.). Екатеринбург: Изд-во Урал. ун-та, 2022. С. 259—261.
- 14. Гостевская А.Н. Маркидонов А.В., Коваленко В.В. Молекулярно-динамическое моделирование лазерной абляции / Перспективные материалы и технологии: Материалы Междунар. симпоз. (Минск, Беларусь, 23—27 августа 2021 г.). Минск: БелГИСС, 2021. С. 21—22.
- Mendelev 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.
- XMD—Molecular Dynamics for Metals and Ceramics [Электронный ресурс]. URL: http://xmd.sourceforge. net/about.html (дата обращения 15.04.2022).
- 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. Art. N 015012.
- Рыкалкин Н.Н., Углов А.А., Зуев И.В., Кокора А.Н. Лазерная и электронно-лучевая обработка материалов: Справочник. М.: Машиностроение, 1985. 496 с.
- 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.
- Stukowski A. Computational analysis methods in atomistic modeling of crystals // The Journal of The Minerals, Metals & Materials Society. 2014. V. 66. N 3. P. 399–407.
- Malinskii T.V., Rogalin V.E., Yamshchikov V.A. Plastic deformation of copper and its alloys under the action of nanosecond UV laser pulse // Physics of Metals and Metallography. 2022. V. 123. P. 178–185.
- Yin F., Ye X., Yao H., Wei P., Wang X., Cong J., Tong Y. Surface forming criteria of Ti-6AL-4V titanium alloy under laser loading // Applied Sciences. 2021. V. 11. Art. N 5406.