

*Оригинальная статья*

УДК 669.539.382:669.17:669.046

DOI: 10.57070/2304-4497-2022-4(42)-11-18

**ВЫЯВЛЕНИЕ СТРУКТУРНЫХ ИЗМЕНЕНИЙ В ОЦК КРИСТАЛЛЕ ПРИ ЛАЗЕРНОМ ВОЗДЕЙСТВИИ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ**

© 2022 г. А. Н. Гостевская<sup>1</sup>, А. В. Маркидонов<sup>1,2</sup>

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

<sup>2</sup>Кузбасский гуманитарно-педагогический институт Кемеровского государственного университета, (Россия, 654027, Кемеровская обл. – Кузбасс, Новокузнецк, ул. Циолковского, 23)

**Аннотация.** В представленной работе излагаются результаты молекулярно-динамического моделирования изменения поверхностного слоя расчетной ячейки при кратковременном высокоэнергетическом воздействии. Интерес к данной теме обусловлен тем, что процессы, протекающие в пребывающем в жидком состоянии поверхностном слое в последующем окажут свое влияние при его кристаллизации, и, как следствие, скажутся на различных физических и геометрических характеристиках поверхности материала в целом. Построенная и описанная в работе модель, температура расчетной ячейки в которой распределяется в соответствии с решением линейной задачи теплопроводности, 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 имеют отличия при моделировании при разной плотности энергии лазерного излучения. Дальнейшее исследование позволило выявить условия, при которых поры остаются стабильными на протяжении всего времени моделирования, а также выявить связь между кристаллографической ориентацией межфазной границы твердое тело – жидкость и размерами образуемых пор.

**Ключевые слова:** кристалл, модель, температура, плавление, пора, поверхность, межфазная граница

**Финансирование:** работа выполнена в рамках государственного задания 0809-2021-0013.

**Для цитирования:** Гостевская А.Н., Маркидонов А.В. Выявление преобразования структурных изменений в ОЦК кристалле при лазерном воздействии методом молекулярной динамики // Вестник Сибирского государственного индустриального университета. 2022. №4 (42). С. 11 – 18. [https://doi.org/10.57070/2304-4497-2022-4\(42\)-10-18](https://doi.org/10.57070/2304-4497-2022-4(42)-10-18)

*Original article*

**DETECTION OF STRUCTURAL CHANGES IN A BCC CRYSTAL-LE DYNAMICS UNDER LASER INFLUENCE BY THE METHOD OF MOLECULAR**

© 2022 A. N. Gostevskaya<sup>1</sup>, A. V. Markidonov<sup>1,2</sup>

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

<sup>2</sup>Kuzbass Humanitarian Pedagogical Institute of Kemerovo State University (23 Tsiolkovsky st., Novokuznetsk, Kemerovo Region – Kuzbass, 654007, Russian Federation)

**Abstract.** The presented work presents the results of molecular dynamics modeling of changes in the surface layer of the computational cell under a short-term high-energy impact. Interest in this topic is because the processes occurring in the surface layer, which is in a liquid state, will subsequently have an impact during its

crystallization, and, as a result, will affect various physical and geometric characteristics of the surface of the material as a whole. The model constructed and described in the work, in which the temperature of the computational cell is distributed in accordance with the solution of the linear problem of heat conduction, made it possible to reveal the discontinuity of the surface layer, which consists in the localization of excess free volume in the form of a group of spherical pores. The sizes of these imperfections, as well as the duration of their existence, have differences when modeling different energy densities of laser radiation. Further research made it possible to reveal the conditions under which the pores remain stable throughout the entire simulation time, as well as to reveal the relationship between the crystallographic orientation of the “solid-liquid” interface and the sizes of the formed pores.

**Keywords:** crystal, model, temperature, melting, pore, surface, interface

**Financing:** The work was carried out within the framework of the state task 0809-2021-0013.

**For citation:** Gostevskaya A.N., Markidonov A.V. Revealing the transformation of structural changes in a bcc crystal dynamics under laser exposure by the method of molecular. *Bulletin of the Siberian State Industrial University*. 2022, no. 4 (42), pp. 11 – 18. (In Russ.). [https://doi.org/10.57070/2304-4497-2022-4\(42\)-11-18](https://doi.org/10.57070/2304-4497-2022-4(42)-11-18)

### Введение

Внешние высокоэнергетические воздействия на поверхность твердого тела, например, ультракороткими сверхмощными лазерными импульсами, могут приводить к фазовым переходам, в результате которых структура поверхности претерпевает кардинальные изменения. Скорость протекания таких процессов может быть настолько большой, что не позволяет проводить их исследование путем прямого наблюдения, поэтому наиболее рациональным видится применение методов компьютерного моделирования, которые в условиях возрастающей вычислительной мощности современных компьютеров позволяют рассматривать все более сложные системы.

Практический интерес представляют процессы неравновесного нагрева вещества при лазерном воздействии, поэтому они служат объектом различных экспериментальных и теоретических исследований [1 – 3].

Облучение материала высокоэнергетическими лазерными импульсами приводит к плавлению и движению расплава, вызванному резкими температурными градиентами и релаксацией давления, с последующим отрывом вещества от поверхности (абляция), что находит свое применение в различных областях. Явление лазерной абляции успешно изучается с помощью метода молекулярной динамики [4 – 6], хотя и предполагает целый ряд допущений. Например, в рамках классической молекулярной динамики рассматриваются временные интервалы, соответствующие характеристическому времени электронно-фононной релаксации.

Структурные изменения, происходящие в аморфной фазе на стадии остывания после прекращения воздействия, несомненно, окажут влияние на характеристики полностью или частично кристаллизованной структуры. Поэтому исследования

аморфной структуры материала после лазерного воздействия вызывают практический интерес.

### Материал и методы исследования

В рамках проводимого исследования изучались структурные изменения, происходящие в материале при высокотемпературном воздействии в рамках молекулярно-динамического моделирования. Модель строилась следующим образом. В прямоугольной системе координат задавали размер расчетной ячейки в трех взаимно ортогональных кристаллографических направлениях, совпадающих с координатными осями. Затем формировали элементарную ячейку, расположение частиц в которой соответствовало ОЦК решетке, и путем трансляции такими ячейками заполняли весь заданный объем. Расчетная ячейка представляла собой прямоугольный параллелепипед размерами  $(20 \times 100 \times 12) a_0$  (где  $a_0$  – равновесный параметр решетки). Предполагалось проведение исследования на модели кристаллита железа, то  $a_0 = 2,866 \text{ \AA}$ . Общее количество моделируемых частиц – 48000 ед. Вдоль осей  $X$  и  $Z$  использовали периодические граничные условия, а вдоль оси  $Y$  – свободные, имитирующие поверхность кристалла. Ориентацию расчетной ячейки в пространстве устанавливали таким образом, чтобы ось  $X$  совпадала с кристаллографическим направлением  $[100]$ , ось  $Y$  – с направлением  $[010]$ , а  $Z$  – с  $[001]$ . В качестве функции межчастичного взаимодействия использовали потенциал, построенный с использованием метода погруженного атома [7]. Для интегрирования уравнений движения, описывающих поведение системы частиц, использовали скоростной алгоритм Верле с временным шагом 1 фс. Для выполнения расчетов использовали пакет XMD [8]. Визуализацию результатов моделирования осуществляли при помощи пакета визуализации OVITO [9].

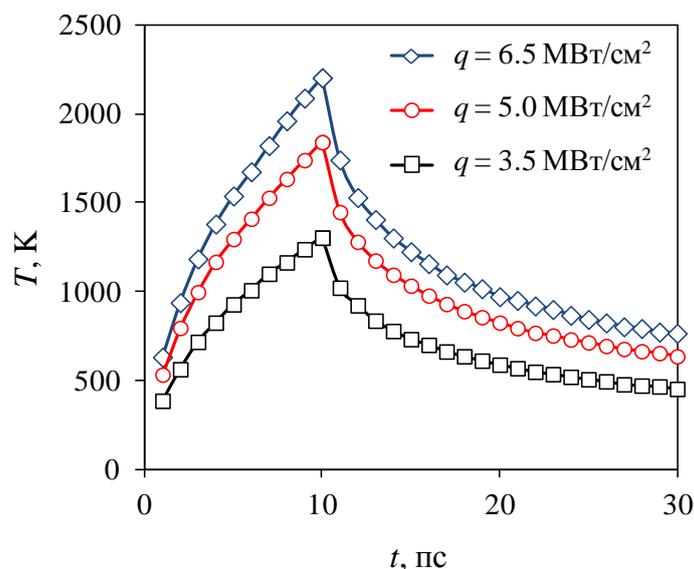


Рис. 1. Изменение температуры расчетной ячейки в процессе моделирование при плотности энергии 6,5, 5,0 и 3,5 МВт/см<sup>2</sup>  
 Fig. 1. Change in the temperature of the computational cell in the process of modeling with a change in the energy density 6,5, 5,0 и 3,5 МВт/см<sup>2</sup>

Для моделирования нагрева мишени под воздействием лазерного излучения расчетную ячейку разбивали на 10 слоев равной толщины вдоль оси  $Y$ , в каждом из которых задавали определенное значение температуры, убывающее по мере удаления от поверхности. При установлении теплового равновесия между электронами и фононами для описания распространения тепла можно использовать модель теплопроводности. При использовании модели полубесконечного твердого тела аналитически точное решение тепловой задачи можно получить путем интегральных преобразований [9]. 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 глубине образца на стадии нагрева определяется как функция координат следующим образом (при  $t < \tau$ ):

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

где  $A$  – поглощательная способность;  $q$  – плотность энергии;  $\lambda$  – теплопроводность;  $a$  – температуропроводность;  $\tau$  – длительность воздействия.

Функция  $\text{ierfc}(x)$ , входящая в зависимость (1), представляет собой интеграл от функции интеграла вероятности:

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

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

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

Для вычисления температуры использовали следующие параметры:  $A = 0,68$ ;  $q = 3,5 \div 6,5$  МВт/см<sup>2</sup>;  $\lambda = 80$  Вт/(м·К);  $a = 2,621 \cdot 10^{-5}$  м<sup>2</sup>/с;  $\tau = 10 \cdot 10^{-12}$  с.

### Результаты и их обсуждение

Процесс моделирования состоял из двух этапов. На начальном этапе расчетную ячейку подвергали неравномерному нагреву в течение 10 пс модельного времени в соответствии с формулой (1). Второй этап заключался в неравномерном охлаждении в течение 20 пс, при котором температура расчетной ячейки устанавливалась в соответствии с формулой (3). На рис. 1 представлено изменение средней температуры расчетной ячейки в процессе моделирования.

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. Последующее повышение температуры приводит к отслоению частиц. Этап охлаждения сопровождается локализацией областей разрядки, сформированных на предыдущем этапе нагрева (рис. 2, а),

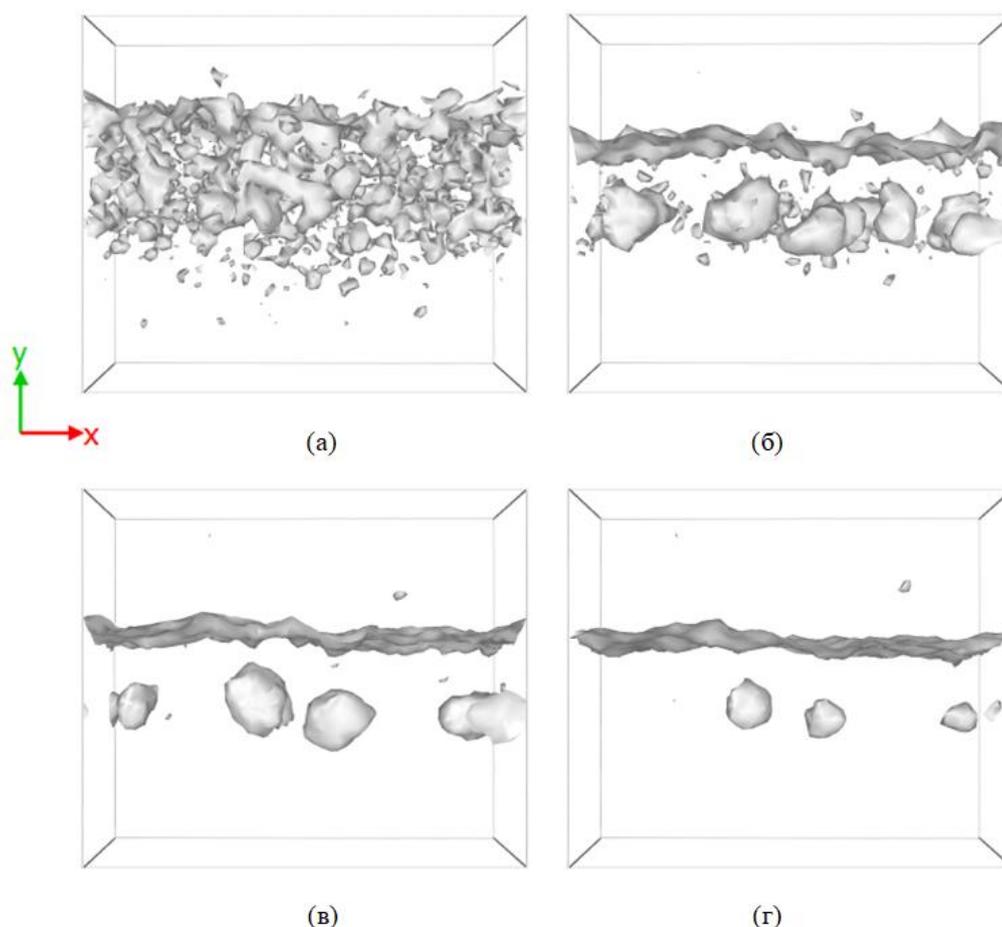


Рис. 2. Визуализация свободной поверхности, образующейся в расчетной ячейке, через 11, 15 19 и 22 пс модельного времени (а – д)

Fig. 2. Visualization of the free surface formed in the computational cell after 11, 15 19 and 22 ps of simulation time (a – d)

их коалесценцией и образованием сферических пор (рис. 2, б – д).

Для идентификации пустот и в последующем оценки площади их поверхности использовали алгоритм [10], 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 принимали равным параметру решетки.

При моделировании различной плотности поглощенной энергии излучения, достигаемой изменением значения  $q$  в формулах (1) и (3), наблюдаются различные структурные изменения в приповерхностных слоях расчетной ячейки. Как правило, для количественной оценки подобного рода изменений используют коэффициент пористости, выражаемый через плотности аморфной и кристалличе-

ской структур. В рассматриваемом случае более наглядным будет являться коэффициент пористости  $\theta$ , определяемый как доля свободной поверхности, создаваемой порами, в общей свободной поверхности, идентифицируемой в расчетной ячейке. На рис. 3 представлено изменение  $\theta$  в процессе моделирования при различных  $q$ . При  $q \leq 3,5$  МВт/см<sup>2</sup> пустоты, формирующиеся в ячейке, в процессе моделирования растворяются. При более высоких значениях  $q$  в аморфной области формируются протяженные пустоты, остающиеся стабильными на протяжении всего моделирования.

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. Эта величина 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  $n$  – произ-

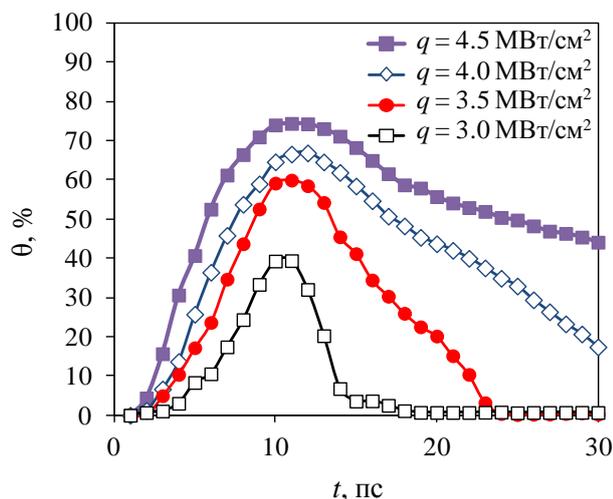


Рис. 3. Изменение коэффициента пористости в течении 30 пс при  $q = 4,5$  МВт/см<sup>2</sup> (■),  $q = 4,0$  МВт/см<sup>2</sup> (◇),  $q = 3,5$  МВт/см<sup>2</sup> (●),  $q = 3,0$  МВт/см<sup>2</sup> (□)

Fig. 3. Porosity coefficient change within 30 ps при  $q = 4,5$  МВт/см<sup>2</sup> (■),  $q = 4,0$  МВт/см<sup>2</sup> (◇),  $q = 3,5$  МВт/см<sup>2</sup> (●),  $q = 3,0$  МВт/см<sup>2</sup> (□)

вольное рациональное число).

Стоит отметить, что с точки зрения квази-термодинамического 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 связи с этим для гомогенного зарождения поры необходимы упругие растягивающие напряжения, источником которых могут являться избыточные вакансии [11]. Еще одним источником напряжений в твердом теле может являться ударная волна [12 – 14]. В рассматриваемом случае напряженное состояние расчетной ячейки обусловлено неравномерным нагревом, и, кроме того, граница раздела создает собственное поле напряжений, величина которых пропорциональна свободной поверхностной энергии  $\gamma$ . Свободная энергия границы раздела кристалл – расплав анизотропна и зависит от кристаллографической ориентации твердой фазы [15]. При этом, как следует из результатов работы [16], для ОЦК структуры анизотропия проявляется в гораздо меньшей степени, чем для ГЦК. В работе [17] при выполнении расчетов анизотропии свободной поверхностной энергии железа с помощью различных методов исследования получены результаты с разбросом порядка 5 %. При анализе результатов можно сделать вывод, что справедливо соотношение  $\gamma_{110} \leq \gamma_{111} < \gamma_{100}$ . Следовательно, чем выше ретикулярная плотность кристаллографической плоскости, обра-

зующей поверхность раздела, тем меньше значение энергии.

В настоящей работе проведено моделирование расчетных ячеек, содержащих границы раздела различной кристаллографической ориентации. 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. На рис. 4, а приведены результаты расчетов коэффициента пористости на стадии охлаждения (показан временной отрезок, содержащий наиболее наглядный результат).

Существует взаимосвязь между кристаллографической ориентацией границы и размерами формируемых пустот (рис. 4, а), но отчетливо она проявляется лишь на определенном временном интервале. По-видимому, в наибольшей степени влияние границы начинает проявляться в том момент, когда она в процессе своего смещения на стадии охлаждения расчетной ячейки приближается к пустотам. При этом межфазная граница, обладающая большей энергией  $\gamma$ , движется с большей скоростью. В результате этого уплотнение поверхностного слоя идет более интенсивно и большее количество свободного объема локализуется в виде пор, а не растворяется. Поэтому при моделировании межфазной границы с кристаллографической ориентацией (100) формируются более крупные поры, но так как скорость охлаждения одинакова, то во всех случаях они растворяются за примерно равный промежуток времени. Подтверждением этого механизма является тот факт, что доля атомов с локальным ОЦК окружением в трех верхних слоях при моделировании межфазной границы с ориентацией (100) на этапе охлаждения увеличивается гораздо быстрее по сравнению с другими моделируемыми ориентациями границ (рис. 4, б). В данном случае для проведения структурного анализа применялась идентификация локального окружения частиц с использованием метода углов и связей Экланда-Джонса [18].

### Выводы

Быстропротекающие процессы в твердых телах на сегодняшний день успешно изучаются с помощью методов компьютерного моделирования. 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

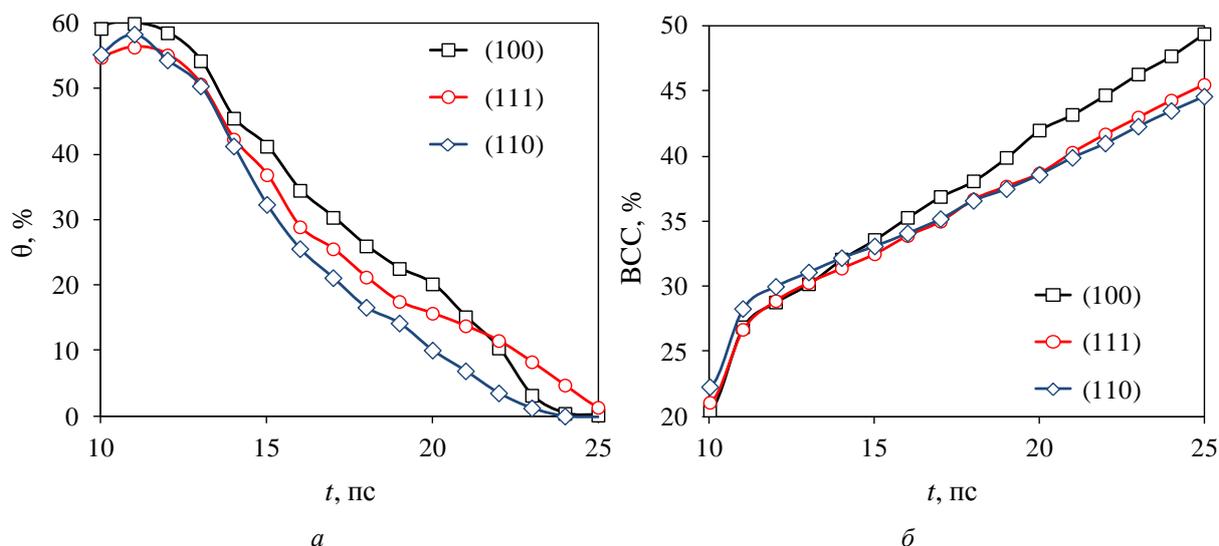


Рис. 4. Изменение коэффициента пористости расчетной ячейки ( $a$ ) и доли атомов с локальным ОЦК окружением ( $b$ ) на заключительной стадии моделирования при кристаллографической ориентации межфазной границы:

□ – (110); ○ – (111); ◇ – (110)

Fig. 4. Changes in the porosity coefficient of the computational cell ( $a$ ) and the fraction of atoms with a local bcc environment ( $b$ ) at the final stage of modeling for different crystallographic orientations of the interfacial boundary:

□ – (110); ○ – (111); ◇ – (110)

свободный объем локализуется в виде группы пор, которые растворяются в процессе усадки. Стабилизировать данные поры можно путем увеличения скорости охлаждения расчетной ячейки. Установлено влияние ориентации межфазной границы твердое тело – жидкость на размеры формируемых пор.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Markidonov A.V., Starostenkov M.D., Gostevskaya A.N., et al. Molecular dynamics study of structural changes in the BCC crystal surface layer under short-term high-energy external impact. In book: Materials in external fields. Second, revised and supplemented edition. Novokuznetsk: Siberian State Industrial University, 2022. P. 145–155.
2. Gostevskaya A.N., Markidonov A.V. Modeling of structural changes in metals under high-intensity external action. In book: Materials in external fields: proceedings of the 11th International online symposium, Novokuznetsk, 15–16 February 2022 г. Novokuznetsk: Siberian State Industrial University, 2022. P. 55 – 57.
3. 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. Т. 15. № 4 (5). С. 1033–1037.
4. 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  $\alpha$ -Fe substrate // MATEC Web of Conferences. 2018. Vol. 167. Article 03011.
5. 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. Vol. 25. No. 4. P. 543–550.
6. Cheng C., Wu A.Q., Xu X. Molecular dynamics simulation of ultrafast laser ablation of fused silica // Journal of Physics: Conference Series. 2007. Vol. 59. P. 100–104.
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. Vol. 83. No. 35. P. 3977–3994.
8. Stukowski A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO – the open visualization tool // Modelling and Simulation Materials Science and Engineering. 2010. Vol. 18. Article 015012.
9. Рыкалкин Н.Н., Углов А.А., Зуев И.В., Кокора А.Н. Лазерная и электронно-лучевая обработка материалов: справочник. Москва: Машиностроение, 1985. 496 с.
10. Stukowski A. Computational analysis methods in atomistic modeling of crystals // The Journal of The Minerals, Metals & Materials Society. 2014. Vol. 66. No. 3. P. 399–407.
11. Орлов В.Л., Малышкина А.Г. Образование нанометровых упорядоченных структур радиационных пор // Известия вузов. Физика. 2003. Т. 46. № 2. С. 31–35.
12. Маркидонов А.В., Старostenkov М.Д. О возможности гомогенного зарождения поры в зернограничной области под воздействи-

- ем ударных послекаскадных волн // Вопросы атомной науки и техники. Серия «Математическое моделирование физических процессов». 2016. № 3. С. 37–46.
13. Маркидонов А.В., Старостенков М.Д., Павловская Е.П. Влияние послекаскадных ударных волн на процессы укрупнения вакансионных пор // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2012. Т. 9. № 4-2. С. 694–701.
  14. Маркидонов А.В., Старостенков М.Д., Захаров П.В. Рост малых вакансионных скоплений, инициированный послекаскадными ударными волнами // Письма о материалах. 2012. Т. 2. № 2. С. 111–114.
  15. Morris J.R., Song X. The anisotropic free energy of the Lennard-Jones crystal-melt interface // Journal of Chemical Physics. 2003. Vol. 119. No. 7. P. 3920–3925.
  16. Sun D.Y., Asta M., Hoyt J.J., Mendeleev M.I., Srolovitz D.J. Crystal-melt interfacial free energies in metals: fcc versus bcc // Physical Review B. 2004. Vol. 69. No. 2. Article 020102.
  17. Liu J., Davidchack R.L., Dong H.B. Molecular dynamics calculation of solid-liquid interfacial free energy and its anisotropy during iron solidification // Computational Materials Science. 2013. Vol. 74. P. 92–100.
  18. Ackland G.J., Jones A.P. Applications of local crystal structure measures in experiment and simulation // Physical Review B. 2006. Vol. 73. No. 5. Article 054104.
- REFERENCES**
1. Markidonov A.V., Starostenkov M.D., Gostevskaya A.N. et al. *Molecular dynamics study of structural changes in the BCC crystal surface layer under short-term high-energy external impact*. In: *Materials in external fields. Second, revised and supplemented edition*. Novokuznetsk: ITs Sibirskii gosudarstvennyi industrial'nyi universitet, 2022, pp. 145–155.
  2. Gostevskaya A.N., Markidonov A.V. *Modeling of structural changes in metals under high-intensity external action*. In: *Materials in external fields: proceedings of the 11th International online symposium, Novokuznetsk, February 15-16, 2022*. Novokuznetsk: Siberian State Industrial University, 2022, pp. 55 – 57.
  3. Yavtushenko T.O., Kadochnikov A.S., Novikov S.G., Berintsev A.V., Sto-lyarov D.A. Experimental study of the process of structuring a metal surface by femtosecond laser pulses of high power. *Izvestiya Samarskogo nauchnogo tsentra Rossiiskoi akademii nauk*. 2013, vol. 15, no. 4 (5), pp. 1033–1037. (In Russ.).
  4. 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  $\alpha$ -Fe substrate. *MATEC Web of Conferences*. 2018, vol. 167, article 03011.
  5. 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, vol. 25, no. 4, pp. 543–550.
  6. Cheng C., Wu A.Q., Xu X. Molecular dynamics simulation of ultrafast laser ablation of fused silica. *Journal of Physics: Conference Series*. 2007, vol. 59, pp. 100–104.
  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, vol. 83, no. 35, pp. 3977–3994.
  8. Stukowski A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO – the open visualization tool. *Modelling and Simulation Materials Science and Engineering*. 2010, vol. 18, article 015012.
  9. Rykalkin N.N., Uglov A.A., Zuev I.V., Kokora A.N. *Laser and electron beam processing of materials: reference*. Moscow: Mashinostroyeniye, 1985, 496 p. (In Russ.).
  10. Stukowski A. Computational analysis methods in atomistic modeling of crystals. *The Journal of The Minerals, Metals & Materials Society*. 2014, vol. 66, no. 3, pp. 399–407.
  11. Orlov V.L., Malyshkina A.G. Formation of nanometer ordered structures of radiation pores. *Izvestiya vuzov. Fizika*. 2003, vol. 46, no. 2, pp. 31–35. (In Russ.).
  12. Markidonov A.V., Starostenkov M.D. On the possibility of homogeneous pore generation in the grain boundary region under the influence of shock post-cascade waves. *Voprosy atomnoi nauki i tekhniki. Seriya «Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov»*. 2016, no. 3, pp. 37–46. (In Russ.).
  13. Markidonov A.V., Starostenkov M.D., Pavlovskaya E.P. The influence of post-cascade shock waves on the processes of enlargement of vacancy pores. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya*. 2012, vol. 9, no. 4-2, pp. 694–701. (In Russ.).
  14. Markidonov A.V., Starostenkov M.D., Zakharov P.V. Growth of small vacancy clusters initiated by post-cascade shock waves. *Pis'ma o materialakh*. 2012, vol. 2, no. 2, pp. 111–114. (In Russ.).
  15. Morris J.R., Song X. The anisotropic free energy of the Lennard-Jones crystal-melt interface. *Journal of Chemical Physics*. 2003, vol. 119, no. 7, pp. 3920–3925.

16. Sun D.Y., Asta M., Hoyt J.J., Mendeleev M.I., Srolovitz D.J. Crystal-melt interfacial free energies in metals: fcc versus bcc. *Physical Review B*. 2004, vol. 69, no. 2, article 020102.
17. Liu J., Davidchack R.L., Dong H.B. Molecular dynamics calculation of solid-liquid interfacial free energy and its anisotropy during iron solidification. *Computational Materials Science*. 2013, vol. 74, pp. 92–100.
18. Ackland G.J., Jones A.P. Applications of local crystal structure measures in experiment and simulation. *Physical Review B*. 2006, vol. 73, no. 5, article 054104.

#### Сведения об авторах

*Анастасия Николаевна Гостевская*, аспирант кафедры естественнонаучных дисциплин им. профессора В.М. Финкеля, научный сотрудник лаборатории электронной микроскопии и обработки изображения, Сибирский государственный индустриальный университет

*E-mail:* gostevskaya\_an@mail.ru

*ORCID:* 0000-0002-7328-5444

*Артем Владимирович Маркидонов*, д.ф.-м.н., доцент, заведующий кафедрой информатики и вычислительной техники им. В.К. Буторина, Кузбасский гуманитарно-педагогический институт Кемеровского государственного университета; профессор кафедры

*прикладной математики и информатики*, Сибирский государственный индустриальный университет

*E-mail:* markidonov\_artem@mail.ru

*ORCID:* 0000-0002-4566-528X

#### Information about the authors

*Anastasia N. Gostevskaya*, postgraduate student of the Department of Natural Sciences named after professor V.M. Finkelya, Researcher, Laboratory of Electron Microscopy and Image Processing, Siberian State Industrial University

*E-mail:* gostevskaya\_an@mail.ru

*ORCID:* 0000-0002-7328-5444

*Artem V. Markidonov*, Dr. Sci. (Phys.-math.), Associate Professor, Head of the Department of IVT im. Butorina, Kuzbass Humanitarian and Pedagogical Institute of Kemerovo State University; Professor of the Department of Applied Mathematics and Computer Science, Siberian State Industrial University

*E-mail:* markidonov\_artem@mail.ru

*ORCID:* 0000-0002-4566-528X

*Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.  
The authors declare that there is no conflict of interest.*

Поступила в редакцию 24.08.2022

После доработки 08.09.2022

Принята к публикации 17.10.2022

Received 24.08.2022

Revised 08.09.2022

Accepted 17.10.2022