

УДК 538.911

*Зоря И.В.<sup>1</sup>, Полетаев Г.М.<sup>2</sup>, Медведева Е.С.<sup>2</sup>, Кулабухова Н.А.<sup>2</sup>, Старостенков М.Д.<sup>2</sup>*

## ИССЛЕДОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ПРИМЕСИ ВОДОРОДА С ТОЧЕЧНЫМИ И ЛИНЕЙНЫМИ ДЕФЕКТАМИ В ПАЛЛАДИИ И НИКЕЛЕ

Работа посвящена исследованию методом молекулярной динамики взаимодействия водорода с точечными (вакансией, бивакансией, тривакансией, тетраэдром дефектов упаковки, собственным межузельным атомом) и линейными (полной и частичной краевыми дислокациями, винтовой дислокацией) дефектами в Pd и Ni. Взаимодействия атомов металла друг с другом описывались многочастичными потенциалами Клери-Розато, взаимодействия атомов водорода с атомами металла – парными потенциалами Морзе. В работе получены значения энергии связи примеси водорода с точечными и линейными дефектами в Pd и Ni. Показано, что наиболее эффективными ловушками водорода среди рассмотренных дефектов в Pd и Ni являются вакансии и вакансионные кластеры. Высокая сорбционная способность вакансий должна способствовать значительному влиянию их концентрации на общую сорбционную способность металла, особенно для таких металлов, как Ni, для которого энергия абсорбции вакансией и вакансионными кластерами отрицательна, тогда как энергия абсорбции чистым кристаллом положительна. Наличие в Ni дислокаций и дислокационных комплексов, малоугловых границ зерен, согласно полученным данным, слабее влияет на сорбционную способность металла по сравнению с вакансиями и вакансионными кластерами. В работе также показано, что наиболее энергетически выгодное место расположения атома водорода в тетраэдре дефектов упаковки (ТДУ) – его вершина. Ребра ТДУ, являющиеся частичными дислокациями, имеют существенно более низкую сорбционную активность по отношению к водороду, чем вершины. Для тривакансий получены энергии абсорбции, близкие по значениям к энергиям абсорбции водорода вершинами ТДУ, что свидетельствует о схожем расположении атомов вблизи вершин ТДУ и комплекса из трех вакансий.

**Ключевые слова:** молекулярная динамика, металл, водород, точечный дефект, энергия связи, энергия абсорбции, дислокация, тетраэдр дефектов упаковки.

*Zorya I.V.<sup>1</sup>, Poletaev G.M.<sup>2</sup>, Medvedeva E.S.<sup>2</sup>, Kulabukhova N.A.<sup>2</sup>, Starostenkov M.D.<sup>2</sup>*

## THE STUDY OF THE INTERACTION OF HYDROGEN IMPURITY WITH POINT AND LINEAR DEFECTS IN PALLADIUM AND NICKEL

The work is devoted to the study of the interaction of hydrogen with point defects (vacancy, bivacancy, trivacancy, stacking fault tetrahedron, intrinsic interstitial atom) and linear (complete and partial edge dislocations, screw dislocation) defects in Pd and Ni by the method of molecular dynamics. The interactions of metal atoms with each other were described by the many-particle Cleri-Rosato potentials, the interactions of hydrogen atoms with metal atoms – by the pair Morse potentials. In the work, the bond energy of the hydrogen impurity was obtained with point and linear defects in Pd and Ni. It is shown that the most effective hydrogen traps in Pd and Ni are vacancies and vacancy clusters. The high sorption capacity of vacancies should contribute to significantly effect of their concentration on the overall sorption capacity of the metal, especially for metals such as Ni, for which the energy of absorption by vacancies and vacancy clusters is negative while the absorption energy by a pure crystal is positive. The presence of dislocations and dislocation complexes in Ni, low-angle grain boundaries, according to the obtained data, weakly affects to the sorption ability of the metal in comparison with vacancies and vacancy clusters. The paper also shows that the most energetically favorable location of the hydrogen atom in the stacking fault tetrahedron (SFT) is its vertex. The edges of the SFT, which are partial dislocations, have substantially lower sorption activity with respect to hydrogen than the vertices. Absorption energies obtained for the trivacancies close in values to the energies of hydrogen absorption by the SFT vertices, which indicates a similar arrangement of the atoms near the vertices of the SFT and the complex of three vacancies.

**Keywords:** molecular dynamics, metal, hydrogen, point defect, bond energy, absorption energy, dislocation, stacking fault tetrahedron.

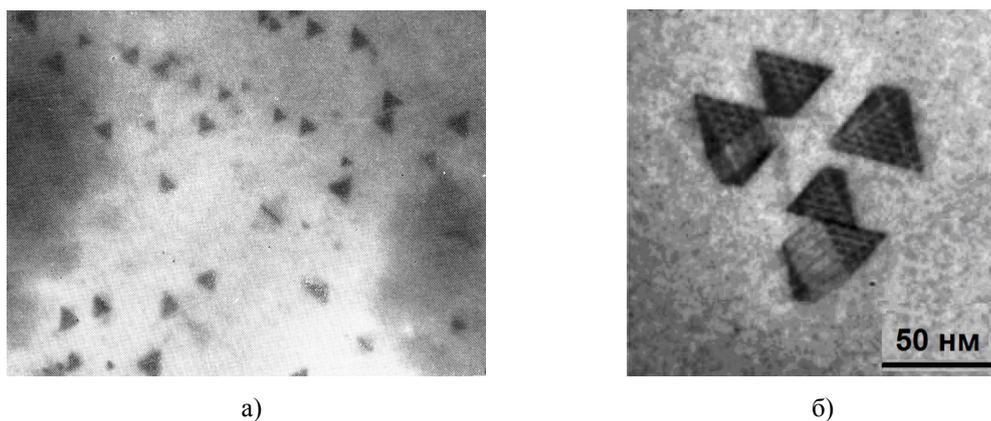
## Введение

Взаимодействие водорода с металлами остается предметом интенсивного изучения на протяжении последнего столетия. С одной стороны, это обусловлено практическим интересом в использовании системы металл-водород: создание радиационноустойчивых материалов, фильтров для получения чистого водорода, аккумуляция и хранение легких газов в металлах и сплавах, проблема транспортировки водорода. С другой стороны, это связано с нежелательным воздействием водорода на свойства материалов: охрупчивание, коррозия, распространение трещин [1].

В технически чистых металлах ловушками, ответственными за захват атомов водорода, являются дефекты кристаллической решетки: точечные дефекты и их комплексы, дислокации, границы зерен, объемные дефекты. При этом исследователи отмечают, что наиболее эффективными ловушками являются границы зерен, дислокации и вакансии [2]. Взаимодействием водорода с этими дефектами объясняют ряд явлений, связанных с изменением свойств гидрированных металлов, как, например, охрупчивание, изменение подвижности дефектов и вызванное этим изменение характеристик самодиффузии металла. С другой стороны, направленное введение ловушек является эффективным способом борьбы с водородной хрупкостью [2]. Поэтому изучение процессов взаимодействия водорода с несовершенствами

структуры является актуальным. На сегодняшний день остается открытым вопрос относительно количественной оценки сорбционной способности по отношению к водороду различных дефектов кристаллической решетки.

Помимо упомянутых выше дефектов интерес представляют уникальные вакансионные кластеры в ГЦК кристаллах – тетраэдры дефектов упаковки (ТДУ). В настоящее время достоверно установлено, что небольшие вакансионные кластеры в ГЦК металлах являются в основном тетраэдрами дефектов упаковки (stacking fault tetrahedron) (рис.1) ориентированы вдоль плоскостей типа  $\{111\}$  и являются дефектами упаковки, а ребра ориентированы вдоль направлений  $\langle 110 \rangle$  и представляют собой частичные дислокации с вектором Бюргера  $1/6\langle 110 \rangle$  [3, 5, 6]. ТДУ образуются во всех ГЦК металлах [7], однако их критический размер, при котором энергетически более выгодными становятся вакансионные диски, в значительной мере зависит от энергии образования дефекта упаковки в данном металле [6]. В связи с этим первые ТДУ наблюдались в металлах с невысокой энергией дефекта упаковки (Au, Ag, Cu и т.д.) [5, 6]. Например, в Au вакансионные диски наблюдаются преимущественно выше определенного размера – 230 Å, в то время как ТДУ – до размера 200 Å [6]. ТДУ образуются в результате радиационного повреждения, быстрого охлаждения от высоких температур, пластической деформации.



**Рис.1.** Тетраэдры дефектов упаковки в золоте, наблюдаемые с помощью электронного микроскопа: а) вид вдоль направления  $\langle 111 \rangle$ ,  $\times 10^5$  [5]; б) группа ТДУ [3]

Исследование взаимодействия примеси водорода с различными дефектами структуры на атомном уровне находится на начальной стадии и проводится преимущественно с помощью ме-

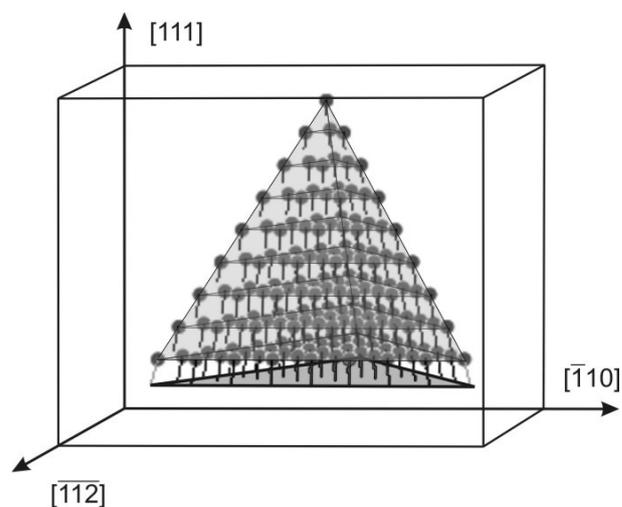
тодов компьютерного моделирования. Настоящая работа посвящена исследованию методом молекулярной динамики взаимодействия водорода с точечными (вакансионными кластерами,

собственным межузельным атомом) и линейными (полной и частичной краевыми дислокациями, винтовой дислокацией) дефектами в Pd и Ni. Выбор ГЦК металлов Pd и Ni обусловлен повышенным к ним вниманием и относительно большим количеством имеющихся для них экспериментальных данных. Палладий имеет исключительно высокую сорбционную способность по отношению к водороду, энергия абсорбции (работа, которую нужно затратить, чтобы поместить один атом водорода в металл с учетом работы разрыва связи H-H в молекуле двухатомного водорода H<sub>2</sub>) отрицательна и составляет -0,1 эВ [8, 9]. Никель относится к металлам со средней сорбционной способностью, энергия абсорбции для него положительна, но небольшая и составляет 0,16 эВ [2, 10]. Ранее нами были проведены исследования взаимодействия примеси водорода с вакансиями и межузельными атомами [11, 12], краевыми дислокациями [13] и малоугловыми границами кручения [14]. В настоящей работе эти результаты объединены и дополнены исследованиями взаимодействия водорода с бивакансиями, тривакансиями, тетраэдрами дефектов упаковки и частичными дислокациями.

## 1. Описание модели

Расчетные блоки в компьютерной модели включали 8400 атомов. Граничные условия использовались периодические. Вакансия вводилась путем удаления атома из расчетного блока. Бивакансия, – две объединившиеся вакансии, – создавалась путем удаления двух соседних атомов, расположенных вдоль плотноупакованного направления, и последующей релаксации. Тривакансия (три объединившихся вакансии) и ТДУ создавались путем введения «треугольных вакансионных дисков». Для образования ТДУ из вакансионных дисков треугольной формы дополнительная термоактивация не требовалась. Механизм перестройки «треугольных вакансионных дисков» в плоскости {111} в ТДУ заключался в последовательном смещении (оседании) групп атомов, имеющих форму равностороннего треугольника, из плоскостей, параллельных плоскости вакансионного

диска, по направлению к нему (рис.2). Из-за особенностей ГЦК решетки размеры смещающихся групп атомов треугольной формы последовательно уменьшались, в результате чего свободный объем исходного вакансионного диска распространялся вглубь тетраэдрической области кристалла и почти равномерно распределялся внутри ТДУ с незначительным увеличением его концентрации в области границ дефекта.



**Рис.2.** Образование ТДУ из «треугольного вакансионного диска»: смещения (показаны отрезками) групп атомов треугольной формы из соседних плоскостей по направлению к вакансионному диску

В расчетный блок в различные позиции относительно рассматриваемого дефекта вводился атом водорода. В каждом случае проводилась структурная релаксация, в завершении которой расчетный блок охлаждался до 0 К для исключения влияния тепловых смещений атомов при расчете энергетических характеристик примеси водорода. Структурная релаксация проводилась методом молекулярной динамики. Шаг интегрирования по времени движения атомов был равен 1 фс = 10<sup>-15</sup> с. Взаимодействия атомов металла друг с другом описывались многочастичными потенциалами Клери-Розато [15], построенными в рамках модели сильной связи. Потенциальная энергия *i*-го атома в этом случае находится с помощью выражения

$$U_i = \sum_j A \exp\left(-p\left(\frac{r_{ij}}{r_0} - 1\right)\right) - \sqrt{\sum_j \xi^2 \exp\left(-2q\left(\frac{r_{ij}}{r_0} - 1\right)\right)}. \quad (1)$$

Здесь  $A, p, q, \zeta, r_0$  – параметры потенциала;  $r_{ij}$  – расстояние между  $i$ -м и  $j$ -м атомами. Параметры потенциалов Клери-Розато были взяты из работы [15]. Данный потенциал хорошо зарекомендовал себя в ряде расчетов, выполненных методом молекулярной динамики [15-25].

Для описания взаимодействий Н-Н, Pd-Н, Ni-Н использовался потенциал Морзе:

$$\varphi(r_{ij}) = D\beta e^{-\alpha r_{ij}} (\beta e^{-\alpha r_{ij}} - 2), \quad (2)$$

где  $\alpha, \beta, D$  – параметры потенциала,  $r_{ij}$  – расстояние между  $i$ -м и  $j$ -м атомами. Параметры потенциалов  $\alpha, \beta, D$  были рассчитаны нами ранее [19, 25] с использованием экспериментальных данных по энергии абсорбции, энергии активации надбарьерной диффузии водорода в металле (при нормальных и высоких температурах), энергии связи с вакансией, дилатации. Потенциалы Морзе сравнительно часто используются различными исследователями для описания межатомных взаимодействий в системах металл-водород, например [26-30]. Многочастичные потенциалы физически более обоснованы, но принимая во внимание высокую погрешность данных, по которым подбираются параметры потенциалов, а также погрешность самих методик поиска параметров, выбор парных потенциалов обоснован, поскольку при молекулярно-динамическом моделировании водорода в металлах приходится использовать шаг интегрирования по времени на порядок меньше, чем в отсутствие водорода, из-за чего затраты машинного времени при моделировании примеси водорода существенно выше, тогда как парные потенциалы, по сравнению с многочастичными, требуют значительно меньше затрат машинного времени.

## 2. Результаты и обсуждение

Основными энергетическими характеристиками, описывающими взаимодействие водорода с точечными дефектами, являются энергия связи водорода с дефектом и энергия абсорбции водорода дефектом. Энергия связи водорода с точечным дефектом  $E_b$  рассчитывалась в настоящей работе как разность потенциальной энергии расчетного блока, содержащего рассматриваемый дефект и атом водорода в октаэдрической поре (в ГЦК решетке, как известно, водород преимущественно располагается в октаэдрических порах [1, 2, 8, 31, 32]) на таком расстоянии друг от друга, которое исключает взаимодействие точечного дефекта и водорода, и потенциальной энергии расчетного блока, со-

державшего атом водорода в дефекте. Рассматривались различные позиции атома водорода в дефекте. При этом из всех значений энергии связи выбиралось максимальное, свидетельствующее о наиболее энергетически выгодной позиции водорода в дефекте.

Энергия абсорбции водорода дефектом – это работа, которую нужно затратить, чтобы поместить один атом водорода из бесконечности в область дефекта с учетом работы разрыва связи Н-Н в молекуле двухатомного водорода  $H_2$  (известно, что молекулы водорода  $H_2$  в объеме металла диссоциируют на отдельные атомы вследствие значительного ослабления ковалентной связи; в металлах, в кристаллической решетке и в области дефектов, водород пребывает в атомарном состоянии [2]). Энергия абсорбции водорода точечным дефектом рассчитывалась по формуле

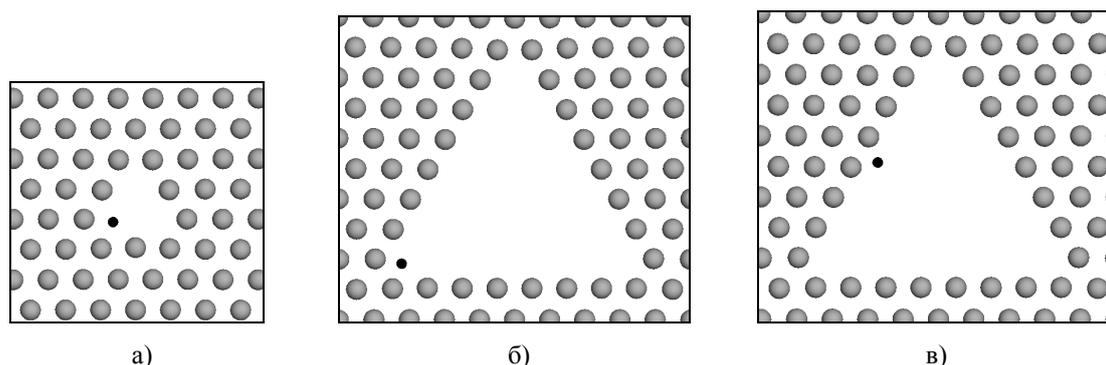
$$E_{ab} = (U_H - U_0) + \frac{1}{2} E_{дис}, \quad (3)$$

где  $U_0$  – потенциальная энергия кристалла металла, содержащего рассматриваемый дефект, с учетом релаксации атомной структуры;  $U_H$  – потенциальная энергия кристалла, содержащего атом водорода в области дефекта;  $E_{дис}$  – энергия диссоциации молекулы водорода  $H_2$  ( $E_{дис} = 4,485$  эВ [2]).

На рис.3 изображены позиции атома водорода в тривакансии и ТДУ, для которых были рассчитаны энергии связи и абсорбции. Все значения  $E_b$  и  $E_{ab}$  для точечных и линейных дефектов в Pd и Ni приведены в таблице.

При введении одного атома водорода в вакансию были получены значения энергии связи  $E_b$ : 0,262 эВ для Pd и 0,401 эВ для Ni. Поскольку эта величина являлась одним из параметров, по которым подбирались потенциалы взаимодействия атомов металла с атомом водорода в [19, 25], полученные значения полностью согласуются с известными экспериментальными данными: 0,25-0,27 эВ для Pd [33-35] и 0,32-0,54 эВ для Ni [10, 36].

Хорошее согласие с данными других авторов также наблюдается для энергии связи водорода с краевой дислокацией. Нами в модели были получены следующие значения: 0,21 эВ для Pd и 0,16 эВ для Ni. В работах [37, 38] приведены очень близкие цифры: 0,19-0,22 эВ [37] для Pd и 0,09-0,15 эВ [38-46] для Ni. Энергия связи атома водорода с изломом (ступенью или порогом) на дислокации, естественно, оказалась выше, чем с неискривленным ядром дислокации: 0,23 эВ для Pd и Ni.



**Рис.3.** Позиции атома водорода, показанные в сечении, в котором находится грань ТДУ или тривакансии: а) в тривакансии; б) в вершине ТДУ; в) на ребре ТДУ

**Таблица.** Энергия связи водорода с дефектом  $E_b$  и энергия абсорбции водорода дефектом  $E_{ab}$  в Pd и Ni. В скобках указаны данные из других работ

	Pd		Ni	
	$E_b, \text{эВ}$	$E_{ab}, \text{эВ}$	$E_b, \text{эВ}$	$E_{ab}, \text{эВ}$
вакансия [11, 12]	0,262 (0,25-0,27 [33-35])	-0,362	0,401 (0,32-0,54 [10, 36])	-0,241
бивакансия	0,172	-0,272	0,310	-0,150
тривакансия	0,105	-0,205	0,229	-0,069
ТДУ вершина	0,106	-0,206	0,197	-0,037
ТДУ ребро (частичная дислокация $1/6\langle 110 \rangle$ )	0,003	-0,103	0,105	0,055
межузельный атом [12]	0,041	-0,141	0,095	0,065
краевая дислокация $1/2\langle 110 \rangle$ [13]	0,21 (0,19 – 0,22 [37])	-0,31	0,16 (0,09 – 0,15 [38])	0
излом на краевой дислокации $1/2\langle 110 \rangle$ [13]	0,23	-0,33	0,23	-0,07
винтовая дислокация $1/2\langle 110 \rangle$ [14]	0,01	-0,11	0,01	0,15

С частичной дислокацией  $1/6\langle 110 \rangle$ , являющейся также ребром ТДУ, энергия связи ниже, чем с ядром полной дислокации. Энергетически выгоднее атому водорода располагаться в вершине ТДУ, чем в каком либо другом месте. При этом, как видно из таблицы, энергия связи с вершиной ТДУ почти такая же, как с тривакансией, что свидетельствует о схожем расположении атомов вблизи вершин ТДУ и комплекса из трех вакансий.

Сорбционная способность бивакансий по отношению к водороду, согласно полученным данным, находится между сорбционными способностями вакансий и тривакансий. Вообще, среди рассмотренных дефектов наиболее эффективной ловушкой для водорода является вакансия. Энергия связи водорода с дислокациями оказалась ниже, чем для вакансий, особенно для Ni.

Высокая сорбционная способность вакансий должна способствовать значительному влиянию их концентрации на общую сорбционную способность металла. Например, для чистого кристалла Ni энергия абсорбции положительна (0,16 эВ [2, 10]), т.е. помещение водорода в кристалл Ni энергетически невыгодно и в состоянии термодинамического равновесия концентрация водорода в Ni невысокая, как правило, десятые доли процента [2]. Однако энергия абсорбции вакансией и вакансионными кластерами, согласно полученным данным, отрицательна. Это значит, что сорбционная способность таких металлов как Ni должна сильно зависеть от концентрации вакансий. Для Pd, для которого энергия абсорбции чистым кристаллом и так отрицательна (-0,1 эВ [8, 9]), влияние вакансий, по-видимому, должно быть менее значительным.

## Заключение

С помощью метода молекулярной динамики получены значения энергии связи примеси водорода с точечными (вакансией, бивакансией, тривакансией, тетраэдром дефектов упаковки, собственным межузельным атомом) и линейными (полной и частичной краевыми дислокациями, винтовой дислокацией) дефектами в Pd и Ni, а также энергии абсорбции водорода рассматриваемыми дефектами. Показано, что наиболее эффективными ловушками водорода в Pd и Ni являются вакансии и вакансионные кластеры.

Высокая сорбционная способность вакансий должна способствовать значительному влиянию их концентрации на общую сорбционную способность металла, особенно для таких металлов, как Ni, для которого энергия абсорбции вакансией и вакансионными кластерами отрицательна, тогда как энергия абсорбции чистым кристаллом положительна. Наличие в Ni дислокаций и дислокационных комплексов, малоугловых границ зерен, согласно полученным данным, слабее влияет на сорбционную способность металла по сравнению с вакансиями и вакансионными кластерами.

*Результаты исследований были получены в рамках выполнения государственного задания Минобрнауки России №3.4820.2017/8.9 и гранта РФФИ №16-48-190182 p\_a.*

## Список используемой литературы

1. Товбин Ю.К., Вотяков Е.В. Оценка влияния растворенного водорода на механические свойства палладия // Физика твердого тела. 2000. т.42. №7. С. 1158-1160.
2. Взаимодействие водорода с металлами / Под ред. А.П. Захарова. М.: Наука, 1987. 296 с.
3. Matsukawa Y., Zinkle S.J. Dynamic observation of the collapse process of a stacking fault tetrahedron by moving dislocations // Journal of Nuclear Materials. 2004. V.329-333. P. 919-923.
4. Rodney D., Martin G., Brechet Y. Irradiation hardening by interstitial loops: atomistic study and micromechanical model // Materials Science and Engineering. 2001. V.A309-310. P. 198-202.
5. Томпсон М. Дефекты и радиационные повреждения в кристаллах. М.: Мир, 1971. 368 с.
6. Хирт Д., Лоте И. Теория дислокаций. М.: Атомиздат, 1972. 600 с.
7. Kiritani M., Satoh Y., Kizuka Y., Arakawa K., Ogasawara Y., Arai S., Shimomura Y. Anomalous production of vacancy clusters and the possibility

of plastic deformation of crystalline metals without dislocations // Philosophical Magazine Letters. 1999. V.79. No.10. P. 797-804.

8. Водород в металлах / Под ред. Г. Алефельда и И. Фелькля. М.: Мир, 1981. т.2. 480 с.

9. Lewis F.A. The Palladium-Hydrogen System // Platinum Metals Review. 1982. V.26. No.1. P. 20-27.

10. Daw M.S., Baskes M.I. Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals // Physical Review B. 1984. V.29. No.12. P. 6443-6453.

11. Кулабухова Н.А., Полетаев Г.М., Старостенков М.Д. Взаимодействие примеси водорода с решеточной вакансией в ГЦК металлах // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2011. т.8. №2. С. 85-89.

12. Кулабухова Н.А., Полетаев Г.М. Молекулярно-динамическое исследование сорбционных свойств точечных дефектов по отношению к водороду в Pd и Ni // Химическая физика и мезоскопия. 2013. т.15. №2. С. 231-235.

13. Кулабухова Н.А., Полетаев Г.М., Старостенков М.Д. Взаимодействие атома водорода с краевой дислокацией в Pd и Ni // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2014. т.11. №1. С. 99-104.

14. Poletaev G.M., Medvedeva E.S., Zorya I.V., Novoselova D.V., Starostenkov M.D. Molecular dynamics simulation of interaction of hydrogen impurity with twist boundaries in Pd and Ni // Materials Physics and Mechanics. 2016. V.29. No.2. P. 133-137.

15. Cleri F., Rosato V. Tight-binding potentials for transition metals and alloys // Physical Review B. 1993. V.48. No.1. P.22-33.

16. Полетаев Г.М., Старостенков М.Д. Определение температуры плавления и температурного коэффициента линейного расширения методом молекулярной динамики // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2004. т.1. №1. С. 81-85.

17. Краснов В.Ю., Полетаев Г.М., Старостенков М.Д. Исследование структуры аморфного никеля // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2006. т.3. №4. С. 37-45.

18. Медведев Н.Н., Старостенков М.Д., Полетаев Г.М., Пожидаева О.В., Терещенко О.А., Ракитин Р.Ю., Краснов В.Ю., Попов В.А. Образование и агрегатизация пар Френкеля при имплантации внедренных атомов в сплаве Ni<sub>3</sub>Al // Изв. вузов. Физика. 2007. №9. С. 421-423.

19. Полетаев Г.М., Кулабухова Н.А., Старостенков М.Д. Потенциалы межатомного взаимодействия в системах Pd-H и Ni-H // Химическая физика и мезоскопия. 2011. т.13. №3. С. 411-418.
20. Кулабухова Н.А., Полетаев Г.М., Старостенков М.Д. Молекулярно-динамическое исследование взаимодействия водорода с наночастицами Pd и Ni // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2014. т.11. №2. С. 235-240.
21. Полетаев Г.М., Новоселова Д.В., Кайгородова В.М., Старостенков М.Д. Особенности образования свободного объема в тройных стыках границ наклона  $\langle 111 \rangle$  и  $\langle 100 \rangle$  в Ni при кристаллизации // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2015. т.12. №2. С. 253-258.
22. Poletaev G.M., Sannikov A.V., Berdychenko A.A., Starostenkov M.D. Molecular dynamics study of plastic deformation mechanisms near the interphase boundary in two-dimensional bimetallic systems // Materials Physics and Mechanics. 2015. V.22. No.1. P. 15-19.
23. Маркидонов А.В., Старостенков М.Д., Сосков А.А., Полетаев Г.М. Изучение структурных трансформаций нанопор цилиндрической формы в золоте методом молекулярной динамики в условиях термоактивации и воздействия звуковых и ударных волн // Физика твердого тела. 2015. т.57. №8. С. 1521-1524.
24. Poletaev G.M., Novoselova D.V., Kaygorodova V.M. The causes of formation of the triple junctions of grain boundaries containing excess free volume in fcc metals at crystallization // Solid State Phenomena. 2016. V.249. P. 3-8.
25. Poletaev G.M., Starostenkov M.D., Dmitriev S.V. Interatomic potentials in the systems Pd-H and Ni-H // Materials Physics and Mechanics. 2016. V.27. No.1. P. 53-59.
26. Баранов М.А., Дроздов А.Ю., Чудинов В.Г., Баянкин В.Я. Атомные механизмы развития микротрещины в чистых ГЦК и ОЦК металлах и с примесью водорода // Журнал технической физики. 2000. т.70. №4. С. 46-51.
27. Kurokawa H., Nakayama T., Kobayashi Y., Suzuki K., Takahashi M., Takami S., Kubo M., Itoh N., Selvama P., Miyamoto A. Monte Carlo simulation of hydrogen absorption in palladium and palladium-silver alloys // Catalysis Today. 2003. V.82. P. 233-240.
28. Zhou G., Zhou F., Zhao X., Zhang W., Chen N., Wan F., Chu W. Molecular dynamics simulation of hydrogen enhancing dislocation emission // Science in China. 1998. V.41. No.2. P. 176-181.
29. Liu S.J., Shi S.Q., Huang H., Woo C.H. Interatomic potentials and atomistic calculations of some metal hydride systems // Journal of Alloys and Compounds. 2002. V.330-332. P. 64-69.
30. Shalashilin D.V., Jackson B., Persson M. Eley-ideal and hot-atom dynamics of HD formation by H(D) incident from the gas phase on D(H)-covered Cu(111) // Faraday Discussions. 1998. V.110. P. 287-300.
31. Кашлев Ю.А. Три режима диффузионной миграции атомов водорода в металлах // Теоретическая и математическая физика. 2005. т.145. №2. С. 256-271.
32. Максимов Е.Г., Панкратов О.А. Водород в металлах // Успехи физических наук. 1999. т.116. №3. С. 385-410.
33. Myers S.M., Picraux S.T., Stoltz R.E. Defect trapping of ion-implanted deuterium in Fe // Journal of Applied Physics. 1979. V.50. P. 5710-5719.
34. Еремеев С.В., Кульков С.С., Кулькова С.Е. Влияние примесей d-металлов на границах зерен на сорбцию водорода в палладии // Физическая мезомеханика. 2010. т.13. №6. С. 81-87.
35. Flanagan T.B., Balasubramaniam R., Kirchheim R. Exploring lattice defects in palladium and its alloys using dissolved hydrogen. Part I: Hydrogen solubility and its segregation to dislocations and vacancies // Platinum Metals Review. 2001. V.45. No.3. P. 114-121.
36. Besenbacher F., Bottiger J., Myers S.M. Defect trapping of ion-implanted deuterium in nickel // Journal of Applied Physics. 1982. V.53. P. 3536-3546.
37. Sicking G., Glugla M., Huber B. Diffusion of tritium in cold-worked palladium // Berichte der Bunsen-Gesellschaft Physical Chemistry Chemical Physics. 1983. V.87. No.5. P. 418-424.
38. Thomas G.J. Hydrogen effects in metals / Ed. I.M. Bernstein, A.W. Thompson. N.Y.: Met. Soc. AIME, 1981. P. 77-85.
39. Ракитин Р.Ю., Полетаев Г.М., Аксенов М.С., Старостенков М.Д. Механизмы диффузии по границам зерен в двумерных металлах // Письма в Журнал технической физики. 2005. т.31. №15. С. 44-48.
40. Андрухова О.В., Козлов Э.В., Дмитриев С.В., Старостенков М.Д. О возможных механизмах атомного разупорядочения в бинарных сплавах // Физика твердого тела. 1997. т.39. №8. С. 1456-1460.

41. Старостенков М.Д. Кристаллогеометрическое описание планарных дефектов в сверхструктурах: автореф. ... д-ра физ.-мат. наук. Барнаул, 1994. 85 с.
42. Dem'yanov B.F., Kustov S.L., Starostenkov M.D. Computer simulation of the interaction of vacancies with the special tilt grain boundaries // *Materials Science and Engineering: A*. 2004. V.387-389. No.1-2 Spec. Iss. P. 738-742.
43. Иванов С.Г., Гурьев А.М., Старостенков М.Д., Иванова Т.Г., Левченко А.А. Особенности приготовления насыщающих смесей для диффузионного борохромирования // *Известия высших учебных заведений. Физика*. 2014. т.57. №2. С. 116-118.
44. Mulyukov R.R., Starostenkov M.D. Structure and physical properties of submicrocrystalline metals prepared by severe plastic deformation // *Acta Metallurgica Sinica (English Letters)*. 2000. т.13. №1. С. 301.
45. Безносюк С.А., Потекаев А.И., Старостенков М.Д. Теоретические основы компьютерного нанотехнологического биомиметического наносистем : монография / М. С. Жуковский [ и др.] ; Алтайский гос. ун-т [и др.]. Томск, 2011. 236 с.
46. Полетаев Г.М., Дмитриенко Д.В., Старостенков М.Д. Атомная структура тройных стыков границ наклона в никеле // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. 2012. т.9. №3. С. 344-348.

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

<sup>2</sup>*Алтайский государственный технический университет, Барнаул, Россия.*

Подписано в печать 24.05.17.

*Сведения об авторах*

Зоря Ирина Васильевна, к.т.н., доцент СибГИУ, zorya.i@mail.ru  
Полетаев Геннадий Михайлович, д.ф.-м.н., профессор, зав. кафедрой АлтГТУ, gmpoletaev@mail.ru  
Медведєва Екатерина Сергеевна, асп. АлтГТУ, k.s.medvedeva@mail.ru  
Кулабухова Наталья Александровна, к.ф.-м.н., ст. преподаватель АлтГТУ, natalya\_domaeva@mail.ru  
Старостенков Михаил Дмитриевич, д.ф.-м.н., профессор, зав. кафедрой АлтГТУ, genphys@mail.ru