УДК 538.911

## Зоря И.В.<sup>1</sup>, Полетаев Г.М.<sup>2</sup>, Медведева Е.С.<sup>2</sup>, Руденко Д.С.<sup>2</sup>, Капуста Д.Н.<sup>2</sup>, Новоселова Д.В.<sup>2</sup>, Старостенков М.Д.<sup>2</sup>

## МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ПРИМЕСИ ВОДОРОДА С НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИМИ ПЛЕНКАМИ ИЗ ПАЛЛАДИЯ И НИКЕЛЯ

С помощью метода молекулярной динамики проведено исследование взаимодействия атомов водорода с нанокристаллическими пленками из палладия и никеля. Взаимодействия атомов металла друг с другом описывались с помощью многочастичного потенциала Клери-Розато, построенного в рамках модели сильной связи. Для описания взаимодействий атомов водорода с атомами металла и друг с другом использовались потенциалы Морзе, параметры которых были рассчитаны по экспериментальным данным энергии абсорбции, энергии активации надбарьерной диффузии водорода в металле (при нормальных и высоких температурах), энергии связи с вакансией, дилатации.

В работе показано, что при высокой концентрации водорода (рассматривалась концентрация 10% от атомов металла) атомы водорода объединяются в агрегаты, формирующиеся преимущественно вблизи поверхности металла. Агрегаты содержали, как правило, по несколько десятков атомов водорода и обладали низкой диффузионной активностью. При этом большей сорбционной способностью по отношению к водороду обладал не сам металл, а водородный агрегат в его решетке.

В палладии водородные агрегаты формировались заметно дальше от поверхности, чем в никеле. По всей видимости, это связано не столько с относительно низкой энергией абсорбции водорода палладием (-0,1 эВ) по сравнению с никелем (0,16 эВ), сколько с различием параметров решеток рассматриваемых металлов: 3,89 Å для Pd и 3,524 Å для Ni. По этой же причине, видимо, водородные агрегаты в чистой кристаллической решетке чаще наблюдались в Pd, чем в Ni, в Ni агрегаты, как правило, формировались в дефектных областях, содержащих избыточный свободный объем: вблизи свободной поверхности, в границах зерен и тройных стыках.

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>, Rudenko D.S.<sup>2</sup>, Kapusta D.N.<sup>2</sup>, Novoselova D.V.<sup>2</sup>, Starostenkov M.D.<sup>2</sup>

### MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION OF HYDROGEN IMPURITY INTERACTION WITH PALLADIUM AND NICKEL NANOCRYSTALLINE FILMS

The hydrogen impurity interaction with palladium and nickel nanocrystalline films was studied by the method of molecular dynamics. The interaction of metal atoms with each other was described with the aid of the multiparticle Cleri-Rosato potential, constructed within the tight binding model. To describe the interactions of hydrogen atoms with metal atoms and with each other, the Morse potential was used, the parameters of which were calculated from the experimental data of the absorption energy, the activation energy of the above-barrier diffusion of hydrogen in the metal (at normal and high temperatures), the binding energy with the vacancy and dilatations.

It is shown in the work that at a high concentration of hydrogen (it was considered the 10% concentration from the metal atoms) the hydrogen atoms combine into aggregates, which are formed predominantly near the surface of the metal. The aggregates contained, as a rule, several dozen hydrogen atoms and had low diffusion activity. Besides the hydrogen aggregate in metal lattice has more sorption ability with respect to hydrogen than the metal lattice itself.

In palladium hydrogen aggregates were formed much further from the surface than in nickel. Apparently, this is due not so much to the relatively low energy of hydrogen absorption by palladium (-0.1 eV) compared to nickel (0.16 eV), but rather to the difference in lattice parameters of the metals under consideration: 3.89 Å for Pd and 3.524 Å for Ni. For the same reason, it seems that hydrogen aggregates in a pure crystal lattice were more often observed in Pd than in Ni; in Ni aggregates, as a rule, they were formed in defect areas containing excess free volume: near the free surface, within grain boundaries and triple junctions.

Keywords: molecular dynamics, metal, hydrogen, nanocrystal, aggregate, grain boundary, triple junction, free volume.

#### Введение

В настоящее время интерес к поведению водорода в металлических материалах во многом возрос в связи с перспективами развития водородной энергетики, являющейся перспективной альтернативой по отношению к существующим традиционным видам энергетики. Интенсивно разрабатываются водородные технологии, использующие металлы и сплавы для диффузионных мембран, электродов, катализаторов, в связи с чем возникает потребность более глубокого понимания общих закономерностей взаимодействия водорода с металлами. Ключевыми проблемами водородной энергетики является решение проблем хранения и транспортировки водорода. В качестве основных конкурентов рассматриваются углеродные и металлические материалы с высокой сорбционной способностью по отношению к водороду. Например, при комнатной температуре один объем палладия может включать до 900 объемов водорода. Однако использование палладия для промышленного хранения и транспортировки водорода экономически нецелесообразно, очевидно, что следует искать другие варианты материалов для изготовления водородных аккумуляторов.

К настоящему времени известно, что наличие дефектов в металле приводит к увеличению количества водорода, которое может быть введено в металл, и увеличению средней энергии абсорбции за счет появления новых центров захвата водорода. В качестве основных ловушек для водорода в чистых металлах рассматривают вакансии, дислокации и границы зерен. В сплавах к ним еще добавляются примеси внедрения, межфазные границы [1, 2].

Ранее в нашем научном коллективе были проведены исследования с помощью компьютерного моделирования сорбционных характеристик точечных дефектов и краевых дислокаций в Pd и Ni по отношению к водороду [3-5]. Было показано, что варьирование концентрации вакансий и дислокаций, действительно, оказывает существенное влияние на общую сорбционную способность металла. В работе [6] нами также было проведено моделирование взаимодействия водорода с наночастицами Pd и Ni при различных температурах. Было показано, что наночастицы Pd и Ni являются эффективными аккумуляторами водорода, обладающими высокой скоростью обратимого процесса сорбции-десорбции водорода в связи с высокой

долей свободной поверхности. Работа, которую нужно затратить на эвакуацию (десорбцию) водорода в случае частиц Pd выше, чем для частиц Ni, что создает предпосылки для рекомендации нанообъектов из Ni в качестве более эффективных и энергетически выгодных аккумуляторов водорода по сравнению с системами из Pd.

Настоящая работа посвящена исследованию методом молекулярной динамики взаимодействия примеси водорода с нанокристаллическими пленками из Pd и Ni, имеющими высокую плотность границ зерен и тройных стыков. Выбор 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 Н-Н в молекуле двухатомного водорода H<sub>2</sub>) отрицательна и составляет -0,1 эВ [2, 7]. Никель относится к металлам со средней сорбционной способностью, энергия абсорбции для него положительна, но небольшая и составляет 0,16 эВ [1, 8]. При этом энергия абсорбции вакансией и краевой дислокацией в никеле, как показано в [3-5], имеет отрицательные значения.

#### 1. Описание модели

Моделирование проводилось с помощью метода молекулярной динамики. Расчетный блок имел форму пластины (один из размеров расчетного блока задавался сравнительно небольшим – около 2 нм), содержащей специально введенные кристаллические затравки (зародыши) – цилиндрические кристаллические области с неподвижно зафиксированными атомами. Кристаллические зародыши использовались по причине сложности моделирования кристаллизации в молекулярно-динамической модели из жидкого состояния при типичных для этого метода скоростях охлаждения. Дело в том, что для формирования кристаллической структуры из жидкого состояния требуются очень малые, по меркам молекулярной динамики, скорости охлаждения – примерно 10<sup>12</sup> К/с [9]. При обычных скоростях охлаждения, используемых в молекулярной динамике  $(10^{15}-10^{16} \text{ K/c})$ , при затвердевании из жидкого состояния образуется аморфная структура [9].

При создании расчетного блока цилиндрические области с кристаллической структурой поворачивались на случайные либо заданные углы вокруг центральной оси цилиндров, - это делалось для того, чтобы конечные кристаллические зерна имели по завершении кристаллизации между собой границы наклона.

На рис.1 изображен пример расчетного блока, содержащего 4 кристаллические затравки. Расчетные блоки содержали около 20 тысяч атомов. Плоскость XY расчетных блоков соответствовала кристаллографической плоскости (111) ГЦК кристалла. Граничные условия вдоль осей X и Z задавались периодические, вдоль Y – свободные, чтобы расчетный блок имел возможность менять объем в процессе кристаллизации и изменения температуры.



**Рис.1.** Пример расчетного блока для моделирования кристаллизации и получения нанокристаллической пленки. Кристаллические затравки (кристаллические зародыши) выделены в виде цилиндрических областей и отмечены буквой «К»

Кристаллизация в молекулярно-динамической модели проводилась по следующей схеме. Сначала расчетный блок плавился путем нагревания до температуры 3000 К. Затем постепенно охлаждался, при этом температура ступенчато изменялась с 1500 К до 800 К. При каждой температуре расчет проводился от нескольких десятков до нескольких сотен пикосекунд. При задании той или иной температуры все межатомные расстояния в расчетном блоке изменялись в соответствии с коэффициентом теплового расширения.

После завершения процедуры кристаллизации и получения нанокристаллической структуры следующим этапом было введение высокой концентрации водорода. Расчетный блок увеличивался вдоль оси Y в три раза. Граничные условия вдоль всех осей в данном случае задавались периодические. В свободное пространство сверху и снизу расчетного блока вводились случайным образом атомы водорода в количестве 10% от атомов металла.

В течение 100-200 пс проводилось моделирование взаимодействия водорода с нанокристаллическими пленками из Pd и Ni при различных температурах от 300 до 1500 К. Шаг интегрирования по времени движения атомов в методе молекулярной динамики был равен 1 фс. Взаимодействия атомов металла друг с другом описывались многочастичными потенциалами Клери-Розато [10], построенными в рамках модели сильной связи. Потенциальная энергия *i*-го атома в этом случае находится с помощью выражения

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

Здесь  $A, p, q, \xi, r_0$  – параметры потенциала;  $r_{ij}$  – расстояние между *i*-м и *j*-м атомами. Параметры потенциалов Клери-Розато были взяты из работы [10]. Данный потенциал хорошо зарекомендовал себя в ряде расчетов, выполненных методом молекулярной динамики [11-18].

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

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

где  $\alpha$ ,  $\beta$ , D – параметры потенциала,  $r_{ij}$  – расстояние между *i*-м и *j*-м атомами. Парамет-

ры потенциалов  $\alpha$ ,  $\beta$ , D были рассчитаны нами ранее [13, 18] 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 [19-23]. 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 отсутствии 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

На рис.2 изображена конечная структура расчетного блока Pd (для Ni была получена аналогичная структура) после моделирования кристаллизации. На рис.26 расчетный блок представлен с помощью визуализатора среднего расстояния до ближайших атомов. Он дает представление о наличии локального растяжения и косвенно о распределении свободного объема. Для каждого атома проводился расчет среднего расстояния до ближайших атомов. Если среднее расстояние незначительно отличалось от расстояния, соответствующего идеальному кристаллу, атом не изображался. В противном случае атом закрашивался в тот или иной оттенок серого цвета.

При проведении кристаллизации в рассматриваемых расчетных блоках Pd и Ni обращалось внимание на то, происходит ли запирание свободного объема в процессе кристаллизации в области тройных стыков. Проведенное компьютерное моделирование однозначно показало, что в большинстве случаев свободный объем, действительно, запирается в области тройных стыков, причем в большей степени, чем в области границ зерен. На приведенных рисунках стрелочками отмечены примеры такого концентрирования свободного объема. Следует отметить, что свободный объем в процессе диффузии может частично уходить вдоль границ зерен к свободной поверхности. Но это, очевидно, возможно только на сравнительно небольшом расстоянии от нее.



**Рис.2.** Изображение расчетного блока в плоскости ХҮ (а) и соответствующая визуализация средних расстояний до ближайших атомов (б) после моделирования кристаллизации в течение 2000 пс

Во многих работах отмечается, что вакансии и краевые дислокации, т.е. избыточный свободный объем, являются ловушками для атомов водорода в металле. Ранее, в работах [3-5] нами было показано, что водород в процессе диффузии, действительно, задерживается и скапливается в районе указанных дефектов. В настоящей работе специально было введено большое количество водорода, соответствующее концентрации 10% по отношению к числу атомов в металле. Высокая концентрация водорода была введена по двум причинам: вопервых, чтобы изучить в рамках используемого потенциала взаимодействие атомов водорода друг с другом в металле, и, во-вторых, для более наглядного изучения распределения примеси водорода в нанокристаллической структуре, содержащей высокую долю избыточного свободного объема в тройных стыках и границах зерен.

Ожидалось, что атомы водорода в процессе диффузии будут преимущественно скапливаться в области тройных стыков и границ зерен при средних температурах, а при высоких – испаряться, как, например, это происходило при моделировании взаимодействия водорода с металлическими наночастицами в [6]. Однако выяснилось, что при высокой концентрации водорода, при которой высока вероятность взаимодействия атомов водорода друг с другом, они сравнительно быстро образуют агрегаты в металле недалеко от его поверхности (рис.3). Агрегаты содержали, как правило, по несколько десятков атомов водорода и обладали низкой диффузионной активностью. Атомы водорода при всех рассматриваемых температурах стремились объединиться в агрегаты, которые оставались малоподвижными даже при высоких температурах. процессе молекулярно-B

динамического эксперимента свободные диффундирующие атомы водорода захватывались агрегатами и становились их частью. При этом, очевидно, большей сорбционной способностью обладал не сам металл, а водородный агрегат в его решетке.

Агрегаты формировались вблизи поверхности металла, причем в палладии они формировались заметно дальше от поверхности, чем в никеле (рис.3). По всей видимости, это связано не столько с относительно низкой энергией абсорбции водорода палладием (-0,1 эВ) по сравнению с никелем (0,16 эВ), сколько с различием параметров решеток рассматриваемых металлов: 3,89 Å для Pd и 3,524 Å для Ni. По этой же причине, видимо, водородные агрегаты в чистой кристаллической решетке чаще наблюдались в Pd, чем в Ni (рис.3), в Ni агрегаты, как правило, формировались в дефектных областях, содержащих избыточный свободный объем.



**Рис.3.** Распределение агрегатов атомов водорода в нанокристаллических пленках из палладия (а) и никеля (б) после молекулярно-динамического эксперимента в течение 200 пс при температуре 700 К и последующе-го охлаждения

Ранее образование подобных агрегатов из атомов водорода в металлах уже обсуждалось в работе [6] при исследовании взаимодействия водорода с наночастицами Pd и Ni, а также в [24] при моделировании диффузии водорода в Al и Ag. В обеих работах использовались разные потенциалы межатомного взаимодействия, но имеющие ненулевую глубину потенциальной ямы взаимодействия атомов водорода друг с другом. Наличие этой ямы, хоть и сравнительно небольшой (энергия связи двух атомов водорода в металле в настоящей работе и в [6] всего 0,045 эВ), оказывается достаточно для образования водородных скоплений в металле – водородных агрегатов.

Энергия связи атомов водорода друг с другом в металле имеет ненулевое и положительное значение для всех типов межатомных потенциалов, найденных нами в литературе. Однако величина потенциальной ямы на зависимости потенциала от расстояния между атомами водорода для разных потенциалов зачастую отличается существенно. Полуэмпирические потенциалы, описывающие взаимодействие атомов водорода друг с другом в металлах, можно разделить на две группы. В обоих случаях для получения параметров потенциалов используются результаты расчетов из первых принципов. Первая группа потенциалов использует расчеты взаимодействия атомов водорода в электронном газе определенной плотности, которая определяется в зависимости от металла [8, 19, 25-35]. В работе [26] показано, что эта связь значительно слабее, чем в вакууме. Другая группа потенциалов строится на базе характеристик металлического водорода (как правило, параметра решетки, энергии сублимации и модуля всестороннего сжатия), полученных первопринципными методами [20-22]. Потенциалы второй группы существенно отличаются от потенциалов первой группы более глубокой и расположенной правее (т.е. соответствующей большим межатомным расстояниям связи H-H) потенциальной ямой. Используемый в настоящей работе потенциал взаимодействия Н-Н в большей степени относится к первой группе и имеет сравнительно небольшую потенциальную яму, которой, тем не менее, достаточно для формирования устойчивых водородных агрегатов при высокой их концентрации в металле.

#### Заключение

С помощью метода молекулярной динамики проведено исследование взаимодействия водорода с нанокристаллическими атомов пленками из палладия и никеля. Показано, что при высокой концентрации водорода (в работе рассматривалась концентрация 10% от атомов металла) атомы водорода объединяются в агрегаты, формирующиеся преимущественно вблизи поверхности металла. Агрегаты содержали, как правило, по несколько десятков атомов водорода и обладали низкой диффузионной активностью. При этом большей сорбционной способностью по отношению к водороду обладал не сам металл, а водородный агрегат в его решетке.

В палладии водородные агрегаты формировались заметно дальше от поверхности, чем в никеле. По всей видимости, это связано не столько с относительно низкой энергией абсорбции водорода палладием (-0,1 эВ) по сравнению с никелем (0,16 эВ), сколько с различием параметров решеток рассматриваемых металлов: 3,89 Å для Рd и 3,524 Å для Ni. По этой же причине, видимо, водородные агрегаты в чистой кристаллической решетке чаще наблюдались в Pd, чем в Ni, в Ni агрегаты, как правило, формировались в дефектных областях, содержащих избыточный свободный объем: вблизи свободной поверхности, в границах зерен и тройных стыках.

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

### Список используемой литературы

1. Взаимодействие водорода с металлами / Под ред. А.П. Захарова. М.: Наука, 1987. 296 с.

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

3. 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.

4. 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.

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

6. Кулабухова Н.А., Полетаев Г.М., Старостенков М.Д. Молекулярно-динамическое исследование взаимодействия водорода с наночастицами Рd и Ni // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2014. т.11. №2. С. 235-240.

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

8. 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.

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

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

11. 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.

12. 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.

13. Полетаев Г.М., Кулабухова Н.А., Старостенков М.Д. Потенциалы межатомного взаимодействия в системах Рd-Н и Ni-Н // Химическая физика и мезоскопия. 2011. т.13. №3. С. 411-418.

14. Полетаев Г.М., Новоселова Д.В., Кайгородова В.М., Старостенков М.Д. Особенности образования свободного объема в тройных стыках границ наклона <111> и <100> в Ni при кристаллизации // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2015. т.12. №2. С. 253-258.

15. 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.

16. 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.

17. 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.

18. 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.

19. 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.

20. Kurokawa H., Nakayama T., Kobayashi Y., Suzuki K., Takahashi M., Takami S., Kubo M., It-

oh 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.

21. 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.

22. 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.

23. Shalashilin D.V., Jackson B., Persson M. Eleyrideal 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.

24. Кулабухова Н.А., Полетаев Г.М., Старостенков М.Д., Голубь П.Д. Молекулярнодинамическое моделирование примеси водорода в ГЦК металлах // Известия АлтГУ. Серия: Математика и механика. Управление, вычислительная техника и информатика. Физика. 2011. т.69. №1-1. С. 160-164.

25. Daw M.S., Baskes M.I. Semiempirical, quantum mechanical calculation of hydrogen embrittlement in metals // Physical Review Letters. 1983. V.50. No.17. P. 1285-1288.

26. Christensen O.B., Ditlevsen P.D., Jacobsen K.W., Stoltze P., Nielsen O.H., Norskov J.K. H-H interactions in Pd // Physical Review B. 1989. V.40. No.3. P.1993-1996.

27. Katagiri M., Onodera H. Molecular dynamics simulation of hydrogen-induced amorphization: softening effect by incorporation of hydrogen // Materials Transactions. 1999. V.40. No.11. P. 1274-1280.

28. 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.

29. 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.

30. Старостенков М.Д. Кристаллогеометрическое описание планарных дефектов в сверхструктурах: автореф. ... д-ра физ.-мат. наук. Барнаул, 1994. 85 с.

31. 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.

32. 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.

33. Mulyukov R.R., Starostenkov M.D. Structure and physical properties of submicrocrystalline metals prepared by severe plastic deformation // Acta Metallurgica Sinica (English Letters). 2000. T.13. №1. C. 301.

34. Безносюк С.А., Потекаев А.И., Старостенков М.Д. Теоретические основы компьютерного наноинжиниринга биомиметических наноси-

стем : монография / М. С. Жуковский [ и др.]; Алтайский гос. ун-т [и др.]. Томск, 2011. 236 с. 35. 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 Медведева Екатерина Сергеевна, асп. АлтГТУ, k.s.medvedeva@mail.ru

Руденко Дмитрий Сергеевич, студент АлтГТУ, gmpoletaev@mail.ru

Капуста Дмитрий Николаевич, студент АлтГТУ, gmpoletaev@mail.ru

Новоселова Дарья Викторовна, к.ф.-м.н., докторант АлтГТУ, gmpoletaev@mail.ru

Старостенков Михаил Дмитриевич, д.ф.-м.н., профессор, зав. кафедрой АлтГТУ, genphys@mail.ru