

УДК 538.9

**ОЦЕНКА ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ПРИМЕСНЫХ АТОМОВ ВОДОРОДА С
ТОЧЕЧНЫМИ ДЕФЕКТАМИ В СТРУКТУРЕ ГЦК РЕШЕТКИ
НИКЕЛЯ**

Зюзин Денис Игоревич¹, аспирант гр.0ФКС-31,3 курс
Маркидонов Артем Владимирович², доктор физико-математических
наук, профессор

¹Федеральное государственное бюджетное образовательное
учреждение высшего профессионального образования «Алтайский
государственный технический университет им. И.И. Ползунова», Барнаул,
Россия;

²Федеральное государственное бюджетное образовательное
учреждение высшего профессионального образования «Кузбасский
гуманитарно-педагогический институт КемГУ, Новокузнецк, Россия»

Аннотация. В настоящей работе с помощью метода компьютерного моделировать и молекулярной динамики с применением потенциала ЕАМ проведено исследование и анализ взаимодействия примесных атомов водорода с вакансией в ГЦК-структуре никеля. Изучено влияние температуры (0–1300 К), упругой деформации ($\pm 5\%$) и концентрации водорода (0–50 атомов на суперячейку) на стабильность комплексов «вакансия–водород». Показано, что одиночный атом водорода слабо стабилизирует вакансию, тогда как коллективное заполнение вакансии водородом является энергетически выгодным при низких и средних температурах. Отмечено, что вакансии выступают эффективными ловушками для водорода, что может ускорять процессы зарождения нанопор и трещин в условиях водородной деградации.

Ключевые слова: водородная деградация, ГЦК-решетка, вакансия, энергия связывания, молекулярная статика, упругая деформация.

Введение

Водородное охрупчивание металлов и сплавов является критической проблемой в материаловедении и промышленности [1]. При внедрении в кристаллическую решетку водород взаимодействует с точечными дефектами, в том числе с вакансиями [2,3], что в свою очередь может привести к образованию стабильных комплексов, их миграции, а также к образованию трещин. Сами металлы с ГЦК-структурой (к примеру никель) обладают чувствительностью к таким процессам из-за повышенной диффузионной подвижности водорода в их структуре.

Таким образом, цель настоящей работы заключается в оценке энергии взаимодействия примесных атомов водорода с вакансиями в ГЦК-структуре никеля в зависимости от концентрации водорода, температуры и упругой

деформации с помощью методов молекулярной динамики и компьютерного моделирования.

Методика расчета

В настоящей работе моделирование производилось с помощью программного обеспечения XMD методами молекулярной динамики. Моделировалась расчетная ячейка никеля $10 \times 10 \times 10$ с периодическими граничными условиями. Межатомное взаимодействие описывалось с помощью потенциала EAM [9].

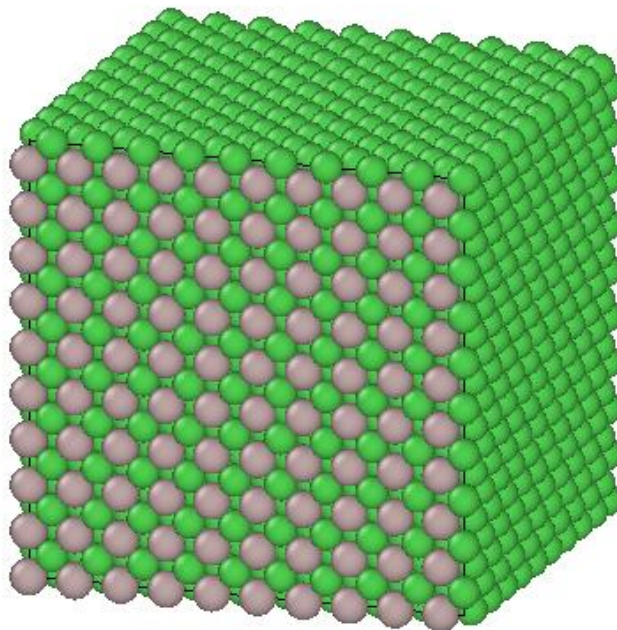


Рисунок 1 – Моделируемая ГЦК-решетка

Для изучения энергетических характеристик рассматривались следующие системы:

- Идеальный кристалл никеля
- Кристалл с одной вакансией
- Кристалл с одним примесным атомом водорода, помещенный в одну из пор (тетраэдрическую или октаэдрическую)
- Кристалл с вакансией и разным количеством примесных атомов водорода (0-50 атомов)

Результаты и обсуждение

1. Влияние концентрации водорода

Потенциальная энергия системы монотонно возрастает с увеличением количества атомов водорода, что свидетельствует о росте упругих искажений и отталкивания между атомами Н. Энергия связывания одиночного атома водорода с вакансией мала, что указывает на отсутствие значительной стабилизации. Однако при заполнении вакансии несколькими атомами Н (10–50) энергия связывания становится положительной и возрастает. Это

подтверждает концепцию коллективного захвата водорода вакансиями с образованием наноконфлюэтов Вакансия-Водород

2. Влияние температуры

При определенных значениях температур (500-700К) энергия связывания имеет положительное значение, что указывает на то, что процесс термодинамически выгоден. Однако, при более высоких температурах (900-1300К) изменение значений энергий связывания на отрицательные указывает на снижение стабильности комплексов. Рост температуры увеличивает энергию системы, снижая её устойчивость.

3. Влияние упругой деформации

Зависимость полной энергии от деформации имеет параболический характер. При сжатии и малых растяжениях комплекс «вакансия–водород» сохраняет стабильность. При деформациях растяжения >3% энергия связывания может становиться положительной, указывая на разрушение комплекса и выход водорода из вакансии. Вакансия снижает локальную устойчивость решетки к деформации.

Заключение

Согласно полученным в ходе исследования результатам, можно заключить, что вакансии в ГЦК-структуре никеля становятся эффективными ловушками для атомов водорода. Однако одиночный атом водорода не стабилизирует вакансию в достаточном размере. Стабилизация достигается при коллективном заполнении вакансии несколькими атомами водорода.

Также отмечается, что температура оказывает большое влияние на энергию связывания водорода с вакансией при определенных значениях. При высоких температурах может происходить дестабилизация структурных комплексов.

Упругая деформация влияет на стабильность комплекса: сжатие способствует удержанию водорода, растяжение может приводить к его высвобождению

Список литературы

1. Исследование взаимодействия примеси водорода с точечными и линейными дефектами в палладии и никеле / И. В. Зоря, Г. М. Полетаев, Е. С. Медведева [и др.] // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2017. – Т. 14, № 2. – С. 207-214. – EDN YRLKJN.
2. Зоря, И. В. Изучение причин агрегации примесных атомов водорода в металлах в молекулярно-динамических моделях / И. В. Зоря, Г. М. Полетаев, М. Д. Старостенков // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2018. – Т. 15, № 3. – С. 366-373. – DOI 10.25712/ASTU.1811-1416.2018.03.009. – EDN YBKJKN.
3. Компьютерное моделирование взаимодействия примесных атомов водорода с границами кручения в Ni и Pd / Г. М. Полетаев, И. В. Зоря, Е. С. Медведева [и др.] // Новые материалы и технологии : сборник научных статей IV Российско-Казахстанской молодежной научно-технической конференции,

Барнаул, 12–15 декабря 2016 года / Алтайский государственный университет. – Барнаул: ИГ "Си-пресс", 2016. – С. 4-9. – EDN YFZLOF.

4. L12-type Ni₃Al-based high-entropy aluminides with superior strength-ductility: From design to criteria / Zh. Liu, L. Zhang, P. Zhao, Ch. Wang // *Intermetallics*. – 2025. – Vol. 187. – P. 108979. – DOI 10.1016/j.intermet.2025.108979. – EDN FEQYYD.

5. Fukai Y. *The Metal-Hydrogen System*. — Berlin: Springer, 2005. — 450 p.

6. Zhao J., Zhang X., Li Y. Hydrogen embrittlement mechanisms in high-strength steels // *Acta Materialia*. — 2020. — Vol. 183. — P. 10–18.

7. Critical assessment of hydrogen pipe diffusion at dislocations in metals / X. Zhou, P. Ou, N. Mousseau, Ju. Song // *Acta Materialia*. – 2024. – Vol. 268. – P. 119758. – DOI 10.1016/j.actamat.2024.119758. – EDN HWRSXJ.

8. Kirchheim R. Reducing grain boundary, dislocation line and vacancy formation energies by solute segregation: I. Theoretical background // *Acta Materialia*. — 2007. — Vol. 55, No. 15. — P. 5129–5138.

9. Степанова, Л. В. Молекулярно-динамическое моделирование нагружения ультратонкой алюминиевой пластины на кремниевом основании / Л. В. Степанова, К. А. Мушанкова // *Вестник Самарского университета. Естественная серия*. – 2025. – Т. 31, № 3. – С. 141-155. – DOI 10.18287/2541-7525-2025-31-3-141-155. – EDN ICQZGB.

10. Шалаев, А. А. Основы физического материаловедения : учебное пособие / А. А. Шалаев ; Иркутский государственный университет, Институт геохимии им. А. П. Виноградова Сибирского отделения Российской академии наук. – Иркутск : федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования "Иркутский государственный университет", 2013. – 159 с. – (Методы экспериментальной физики конденсированного состояния ; Часть 1). – EDN TKRZUX.

11. Зоря, И. В. Влияние упругой деформации кристаллической решетки ГЦК металлов на энергию связи и миграции примесных атомов легких элементов / И. В. Зоря, Г. М. Полетаев // *Химическая физика и мезоскопия*. – 2019. – Т. 21

12. Molecular dynamics simulation of hydrogen atom diffusion in crystal lattice of fcc metals / G. M. Poletaev, D. V. Novoselova, M. D. Starostenkov, I. V. Zorya // *International Journal of Materials Research*. – 2017. – Vol. 108, No. 10. – P. 785-790. – DOI 10.3139/146.111556. – EDN XOKKQY.

13. Callister, W. D., & Rethwisch, D. G. (2013). *Fundamentals of Materials Science and Engineering: An Integrated Approach* (4th ed.). John Wiley & Sons.

14. Fukai, Y. *The Metal-Hydrogen System Basic Bulk Properties* / Y. Fukai // *Springer Series in Materials Science*. – 2005. – Vol. 21. – P. 1-28. – DOI 10.1007/978-3-662-02801-8_1. – EDN KMHOFO.

15. Hydrogen Embrittlement Understood / Ia. M. Robertson, P. Sofronis, A. Nagao [et al.] // *Metallurgical and Materials Transactions B: Process Metallurgy*

and Materials Processing Science. – 2015. – Vol. 46, No. 3. – P. 1085-1103. – DOI 10.1007/s11663-015-0325-y. – EDN DOMXPA.

16. Nagumo, M. (2004). Hydrogen related failure of steels – a new aspect. Materials Science and Technology, *20*(8), 940–950. DOI: 10.1179/026708304225019687

17. Kirchheim, R. (2007). Reducing grain boundary, dislocation line and vacancy formation energies by solute segregation: I. Theoretical background. Acta Materialia, *55*(15), 5129–5138. DOI: 10.1016/j.actamat.2007.05.047