

*Оригинальная статья*

УДК 538.955:539.21:539.23:544.032.5

DOI: 10.57070/2304-4497-2026-1(55)-9-16

## ВЛИЯНИЕ ПРИМЕСНЫХ АТОМОВ ВОДОРОДА НА ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ РЕШЕТОК Ni, Al И Ni<sub>3</sub>Al ПРИ УПРУГОЙ ДЕФОРМАЦИИ

© 2026 г. Д. И. Зюзин<sup>1</sup>, А. В. Маркидонов<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова (Россия, 656038, Алтайский край, Барнаул, пр. Ленина, 46)

<sup>2</sup>Кузбасский гуманитарно-педагогический институт Кемеровского государственного университета (Россия, 654079, Кемеровская обл., Новокузнецк, пр. Металлургов, 19)

**Аннотация.** Методом молекулярной динамики при температуре 0 К исследовано влияние упругой деформации (сжатие и растяжение до  $\pm 5$  %) и внедрения атомов водорода (концентрация от 1 до 50 атомов) на внутреннюю энергию кристаллических решеток никеля, алюминия и интерметаллида Ni<sub>3</sub>Al. Моделирование проводили с использованием надежного межатомного потенциала EAM, адекватно описывающего взаимодействие в системе металл – водород. Проанализировано размещение водорода в тетраэдрических и октаэдрических междоузлиях, а также деформация вдоль одной, двух и трех осей, что позволило оценить вклад различных типов напряженного состояния. Показано, что как деформация, так и внедрение водорода приводят к увеличению внутренней энергии систем, снижая их термодинамическую стабильность. Наибольший рост энергии наблюдается при сочетании сжатия ( $-5$  %) и высоких концентраций водорода в тетраэдрических порах, что особенно характерно для интерметаллида Ni<sub>3</sub>Al. Обнаружено, что прочность связи водорода с решеткой зависит от природы металла: связь Ni – H оказывается прочнее, чем Al – H благодаря электронной структуре никеля. Для интерметаллида Ni<sub>3</sub>Al характерен синергетический эффект, приводящий к повышенному сродству с водородом в отсутствие деформации. При деформировании же его чувствительность к водородному внедрению ослабевает, приближаясь к среднему значению между никелем и алюминием. Результаты согласуются с законами термодинамики и теорией упругости, а также объясняют механизм водородного охрупчивания, вызванного локальными искажениями решетки и изменением электронной плотности. Полученные результаты важны для прогнозирования долговечности и надежности материалов в условиях водородсодержащих сред и механических нагрузок.

**Ключевые слова:** никель, алюминий, интерметаллид, кристаллическая решетка, потенциальная энергия, водородное охрупчивание, упругая деформация, молекулярная динамика

**Для цитирования:** Зюзин Д.И., Маркидонов А.В. Влияние примесных атомов водорода на энергетические характеристики кристаллических решеток Ni, Al и Ni<sub>3</sub>Al при упругой деформации. *Вестник Сибирского государственного индустриального университета*. 2026;1(55):9–16. [http://doi.org/10.57070/2304-4497-2026-1\(55\)-9-16](http://doi.org/10.57070/2304-4497-2026-1(55)-9-16)

*Original article*

**EFFECT OF IMPURITY OF HYDROGEN ATOMS ON THE ENERGY CHARACTERISTICS OF Ni, Al AND Ni<sub>3</sub>Al CRYSTAL LATTICES UNDER ELASTIC DEFORMATION**

© 2026 D. I. Ziuzin<sup>1</sup>, A. V. Markidonov<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Altai State Technical University named after I.I. Polzunov (46 Lenin ave., Barnaul, Altai Territory, 656038, Russian Federation)

<sup>2</sup>Kuzbass Humanitarian and Pedagogical Institute of Kemerovo State University (19 Metallurgov ave., Novokuznetsk, Kemerovo region, 654079, Russian Federation)

**Abstract.** The effect of elastic deformation (compression and stretching up to  $\pm 5\%$ ) and the incorporation of hydrogen atoms (concentration from 1 to 50 atoms) on the internal energy of crystal lattices of nickel, aluminum and Ni<sub>3</sub>Al intermetallic compounds has been studied by the method of molecular dynamics at a temperature of 0 K. The simulation was performed using a reliable interatomic potential EAM, which adequately describes the interaction in the metal–hydrogen system. The placement of hydrogen in tetrahedral and octahedral interstices, as well as deformation along one, two, and three axes, was analyzed, which made it possible to evaluate the contribution of various types of stress states. It is shown that both the deformation and the introduction of hydrogen lead to an increase in the internal energy of the systems, reducing their thermodynamic stability. The greatest increase in energy is observed with a combination of compression ( $-5\%$ ) and high carbon concentrations in tetrahedral pores, which is especially typical for Ni<sub>3</sub>Al intermetallic. It was found that the bond strength of hydrogen with the lattice depends on the nature of the metal: the Ni – H bond turns out to be stronger than Al – H due to the electronic structure of nickel. Ni<sub>3</sub>Al intermetallic compound is characterized by a synergistic effect leading to increased affinity with hydrogen in the absence of deformation. When deformed, its sensitivity to hydrogen incorporation weakens, approaching the average value between nickel and aluminum. The results are consistent with the laws of thermodynamics and the theory of elasticity, and explain the mechanism of hydrogen embrittlement caused by local lattice distortions and changes in electron density. The results obtained are important for predicting the durability and reliability of materials in conditions of hydrogen-containing media and mechanical loads.

**Keywords:** nickel, aluminum, intermetallic, crystal lattice, potential energy, hydrogen embrittlement, elastic deformation, molecular dynamics

**For citation:** Ziuzin D.I., Markidonov A.V. Effect of impurity of hydrogen atoms on the energy characteristics of Ni, Al, and Ni<sub>3</sub>Al crystal lattices under elastic deformation. *Bulletin of the Siberian State Industrial University*. 2026;1(55):9–16. (In Russ.). [http://doi.org/10.57070/2304-4497-2026-1\(55\)-9-16](http://doi.org/10.57070/2304-4497-2026-1(55)-9-16)

**Введение**

Высокая прочность, коррозионная стойкость и термическая устойчивость делают никель, алюминий и интерметаллид Ni<sub>3</sub>Al востребованными в высокотехнологичных отраслях. При этом примесные атомы водорода способны значительно ухудшать их эксплуатационные характеристики [1 – 6]. Целью настоящей работы является установление количественных зависимостей потенциальной энергии ГЦК решеток никеля, алюминия и интерметаллида Ni<sub>3</sub>Al от упругой деформации (1 – 5 %), ее направления вдоль одной, двух, трех осей, типа междоузлия, занимаемого атомом водорода (тетраэдрическое или октаэдрическое), и концентрации примесных атомов водорода (1 – 50 атомов). Для этого методом молекулярной динамики при температуре 0 К рассмотрели влияние указанных факторов на энергетическое состояние систем. Это позволит количественно

оценить вклад каждого фактора и их взаимодействия в изменение энергии, непосредственно сравнив влияние разного количества атомов водорода в тетраэдрических и октаэдрических порах при различных деформациях.

**Методы и принципы исследования**

Исследования были проведены с помощью метода молекулярной динамики [7], используя модифицированный потенциал EAM [8 – 11]. Размер моделируемой решетки составляет  $10 \times 10 \times 10$  элементарных ячеек, граничные условия приняли периодические.

Рассмотрели внедрение атомов водорода в решетку в тетраэдрическую и октаэдрическую поры, а также виды и размеры упругой деформации (сжатие и растяжение) от 1 до 5 % вдоль одной, двух, трех осей и их влияние. При проведе-

нии исследований влияние изменения температуры на потенциальную энергию исключено. Упругая деформация до 5 % рассматривается в рамках идеализированных условий молекулярно-динамического моделирования. Однако для реальных материалов (Ni, Al, Ni<sub>3</sub>Al) деформация 5 % физически не может сохраняться как упругая.

Первостепенно было проведено моделирование ГЦК решеток Ni, Al, Ni<sub>3</sub>Al без добавления примесных атомов водорода и без влияния упругой деформации и температуры. После чего были получены следующие значения:

Материал	Энергия, эВ/атом
Ni	-4,435/-4,450
Al	-3,340/-3,360
Ni <sub>3</sub> Al	-4,5900/-4,5983

Примечание: в числителе и знаменателе указаны справочные и экспериментальные значения.

Расхождение для никеля составляет 0,34 %, для алюминия 0,6 % и для интерметаллида 0,18 %.

Установленные расхождения между смоделированными значениями потенциальной энергии и справочными данными находятся в пределах характерной погрешности метода молекулярной динамики с ЕАМ-потенциалами [5; 12]. Это свидетельствует о корректном описании термодинамического состояния идеальных ГЦК решеток в рамках принятой модели. Следовательно, полученные на ее основе результаты, касающиеся влияния деформации и внедрения водорода, являются научно обоснованными и достоверными.

Эксперименты, проведенные в настоящей работе, состояли в следующем:

1. Расчетная модель состояла из атомов никеля, алюминия, интерметаллида Ni<sub>3</sub>Al.
2. В поры (тетраэдрические или октаэдрические) помещали примесный атом водорода (1, 10, 20, 30, 40, 50).
3. Кристаллические решетки подвергали упругой деформации (сжатие от 0 до -5 и растяжение от 0 до +5 % с шагом 1 %) вдоль определенной оси (X, Y, Z).
4. Температура системы была установлена на уровне 0 К.

Полученные зависимости представлены в табл. 1 и 2.

### Обсуждение полученных результатов

Увеличение упругой деформации (сжатие от -5 до 0 %, растяжение от 0 до +5 %) приводит к росту внутренней энергии (уменьшению ее отрицатель-

ного значения). Это наблюдается для всех трех исследуемых материалов (никеля, алюминия и интерметаллида Ni<sub>3</sub>Al).

Это объясняется законом Гука, где при упругой деформации приложенное для нее напряжение требует совершения работы над кристаллом. Растяжение ослабляет связи (увеличивает энергию), сжатие усиливает отталкивание на малых расстояниях (также увеличивает энергию). Изменение энергии при деформации можно описать с точки зрения термодинамики дефектов, так как при любой деформации искажается кристаллическая решетка [8; 9], что приводит к изменению межатомных расстояний и углов, а вместе с тем это влияет на энергию межатомных связей [8; 12].

Расчеты показывают, что энергия связи Ni – H более отрицательна (то есть связь прочнее), чем Al – H. Это обусловлено электронной структурой никеля, который как переходный металл обладает частично заполненной *d*-электронной оболочкой [13 – 15]. Электроны водорода эффективно взаимодействуют с *d*-электронами, образуя более прочную химическую связь. Эта особенность согласуется со склонностью переходных металлов (Ni, Pd) к образованию гидридных фаз и водородному охрупчиванию под нагрузкой [2; 3; 16]. В отличие от никеля, алюминий является непереходным металлом, его электронная структура обеспечивает более слабое взаимодействие с электронами водорода. Как следствие, никель проявляет большую способность удерживать водород в своей кристаллической решетке по сравнению с алюминием.

Интерметаллическое соединение Ni<sub>3</sub>Al демонстрирует уникальное сочетание свойств. При отсутствии деформации энергия связи водорода в соединении Ni<sub>3</sub>Al оказывается еще более отрицательной (то есть связь еще прочнее), чем в чистом никеле. Это указывает на синергетический эффект, усиливающий взаимодействие водорода с решеткой интерметаллида. При упругой деформации относительное изменение энергии связи в соединении Ni<sub>3</sub>Al оказывается близким к алюминию и меньшим, чем в чистом никеле. Несмотря на изначально более прочную связь, энергетическое состояние системы Ni<sub>3</sub>Al с водородом менее чувствительно к упругим искажениям решетки, чем состояние системы Ni – H, но более чувствительно чем Al – H.

Происходит рост энергии при внедрении атомов водорода. Это наблюдается для всех трех исследуемых материалов (никеля, алюминия и интерметаллида Ni<sub>3</sub>Al). Водород, располагаясь в кристаллической решетке, снижает энергию связи между атомами металла, что приводит к зарождению и распространению трещин, особенно под влиянием деформации [4; 16; 17]. Атомы водорода в междууз-

**Изменение потенциальной энергии в зависимости от количества примесных атомов водорода и упругой деформации (расположение атомов водорода в тетраэдрической поре)**

*Table 1. Change in potential energy depending on the number of impurity hydrogen atoms and elastic deformation (arrangement of hydrogen atoms in a tetrahedral pore)*

Направление упругой деформации	Упругая деформация, %	Значение потенциальной энергии, эВ, при количестве примесных атомов водорода				
		0	5	10	15	20
Ось Y	1	-4,596928	-4,594071	-4,591216	-4,588365	-4,585523
	2	-4,593894	-4,591070	-4,588249	-4,585433	-4,582625
	3	-4,589264	-4,586471	-4,583683	-4,580899	-4,578122
	4	-4,583152	-4,580388	-4,577629	-4,574876	-4,572129
	5	-4,575679	-4,572942	-4,570210	-4,567484	-4,564764
	-1	-4,597802	-4,594874	-4,591946	-4,589020	-4,586105
	-2	-4,595462	-4,592495	-4,589528	-4,586562	-4,583608
	-3	-4,591055	-4,588048	-4,585040	-4,582032	-4,579038
	-4	-4,584371	-4,581323	-4,578272	-4,575222	-4,572185
	-5	-4,575791	-4,572700	-4,569605	-4,566509	-4,563429
Ось YZ	1	-4,594681	-4,591857	-4,589038	-4,586221	-4,583413
	2	-4,586031	-4,583268	-4,580512	-4,577757	-4,575011
	3	-4,572732	-4,570020	-4,567316	-4,564613	-4,561919
	4	-4,555196	-4,552522	-4,549857	-4,547192	-4,544536
	5	-4,533825	-4,531171	-4,528528	-4,525884	-4,523249
	-1	-4,596352	-4,593383	-4,590417	-4,587453	-4,584499
	-2	-4,588476	-4,585426	-4,582376	-4,579330	-4,576294
	-3	-4,573914	-4,570777	-4,567640	-4,564506	-4,561383
	-4	-4,551823	-4,548596	-4,545365	-4,542139	-4,538924
	-5	-4,522494	-4,519171	-4,515841	-4,512517	-4,509205
Ось XYZ	1	-4,591493	-4,588701	-4,585914	-4,583130	-4,580354
	2	-4,574426	-4,571714	-4,569010	-4,566308	-4,563613
	3	-4,547749	-4,545085	-4,542430	-4,539778	-4,537132
	4	-4,512021	-4,509355	-4,506700	-4,504047	-4,501401
	5	-4,467681	-4,465011	-4,462351	-4,459692	-4,457041
	-1	-4,593922	-4,590913	-4,587907	-4,584902	-4,581908
	-2	-4,577488	-4,574352	-4,571216	-4,568081	-4,564958
	-3	-4,546926	-4,543651	-4,540375	-4,537099	-4,533838
	-4	-4,499321	-4,495901	-4,492476	-4,489049	-4,485639
	-5	-4,435131	-4,431553	-4,427967	-4,424376	-4,420805

лиях создают локальные напряжения из-за несоответствия размеров.

Выявленный рост энергии при комбинации сжатия и внедрения водорода в поры указывает на склонность материалов к охрупчиванию водородом. Полученные данные согласуются с известной на практике высокой чувствительностью интерметаллидов на основе никеля к водородному охрупчиванию [6; 18 – 20]. Наблюдаемое увеличение внутренней энергии системы по мере роста концентрации водорода указывает на суммарный эффект от внедрения каждого дополнительного атома H. Особенно при высоких концентрациях рост энергии стано-

вится нелинейным, что объясняется наложением локальных полей упругих напряжений, создаваемых соседними атомами водорода и усиливающимся взаимодействием между ними [5; 19].

#### Выводы

Стабильность системы Ni – Al определяется балансом между упругими напряжениями, геометрией внедрения водорода и электронными взаимодействиями.

Упругая деформация (сжатие/растяжение) и внедрение атомов водорода увеличивают внутреннюю энергию системы за счет локальных искажений кристаллической решетки.

**Изменение потенциальной энергии в зависимости от количества примесных атомов водорода и упругой деформации (расположение атомов водорода в тетраэдрической поре)**

*Table 2. Change in potential energy depending on the number of impurity hydrogen atoms and elastic deformation (arrangement of hydrogen atoms in an octahedral pore)*

Направление упругой деформации	Упругая деформация, %	Значение потенциальной энергии, эВ, при количестве примесных атомов водорода				
		0	5	10	15	20
Ось Y	1	-4,596928	-4,594070	-4,591217	-4,588368	-4,585532
	2	-4,593894	-4,591069	-4,588251	-4,585435	-4,582632
	3	-4,589264	-4,586472	-4,583685	-4,580901	-4,578129
	4	-4,583152	-4,580389	-4,577632	-4,574878	-4,572135
	5	-4,575679	-4,572943	-4,570214	-4,567486	-4,564769
	-1	-4,597802	-4,594872	-4,591945	-4,589023	-4,586116
	-2	-4,595462	-4,592493	-4,589525	-4,586565	-4,583620
	-3	-4,591055	-4,588045	-4,585037	-4,582036	-4,579052
	-4	-4,584371	-4,581319	-4,578268	-4,575225	-4,572201
	-5	-4,575791	-4,572696	-4,569599	-4,566514	-4,563447
Ось YZ	1	-4,594681	-4,591857	-4,589038	-4,586223	-4,583421
	2	-4,586031	-4,583268	-4,580512	-4,577759	-4,575017
	3	-4,572732	-4,570020	-4,567316	-4,564615	-4,561923
	4	-4,555196	-4,552522	-4,549857	-4,547194	-4,544538
	5	-4,533825	-4,531171	-4,528528	-4,525885	-4,523249
	-1	-4,596352	-4,593383	-4,590417	-4,587456	-4,584511
	-2	-4,588476	-4,585426	-4,582376	-4,579333	-4,576308
	-3	-4,573914	-4,570777	-4,567640	-4,564509	-4,561399
	-4	-4,551823	-4,548596	-4,545365	-4,542143	-4,538943
	-5	-4,522494	-4,519171	-4,515841	-4,512522	-4,509227
Ось XYZ	1	-4,591493	-4,588701	-4,585914	-4,583132	-4,580361
	2	-4,574426	-4,571714	-4,569010	-4,566310	-4,563618
	3	-4,547749	-4,545085	-4,542430	-4,539779	-4,537132
	4	-4,512021	-4,509355	-4,506700	-4,504047	-4,501396
	5	-4,467681	-4,465011	-4,462351	-4,459693	-4,457040
	-1	-4,593922	-4,590913	-4,587907	-4,584905	-4,581921
	-2	-4,577488	-4,574352	-4,571216	-4,568084	-4,564975
	-3	-4,546926	-4,543651	-4,540375	-4,537104	-4,533859
	-4	-4,499321	-4,495901	-4,492476	-4,489055	-4,485666
	-5	-4,435131	-4,431553	-4,427967	-4,424384	-4,420840

Водород изменяет распределение электронной плотности, создавая дополнительные напряжения в решетке. Наибольший эффект наблюдается в тетраэдрических порах из-за их меньшего объема и более сильного искажения межатомных связей.

Тетраэдрические поры проявляют высокую чувствительность к внедрению водорода, тогда как октаэдрические поры обеспечивают меньший рост энергии. Наибольшее увеличение энергии зафиксировано для интерметаллида Ni<sub>3</sub>Al, что связано с его упорядоченной структурой. Система демонстрирует иерархию чувствительности: Ni<sub>3</sub>Al > Ni > Al.

Упругая деформация и внедрение водорода повышают внутреннюю энергию никеля, алюминия и соединения Ni<sub>3</sub>Al, что свидетельствует о снижении термодинамической устойчивости материалов. Максимальный эффект достигается при комбинации сжатия (-5 %) и внедрения водорода в тетраэдрические поры. Результаты согласуются с законами термодинамики и теорией упругости, подтверждая роль водорода как дестабилизирующего фактора.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Овчинников И.И., Овчинников И.Г. Влияние водородосодержащей среды при высоких

- температурах и давлениях на поведение металлов и конструкций из них. *Интернет-журнал Науковедение*. 2012;4(13):95. EDN: PVXFRN.
2. Fukai Y. *The Metal-Hydrogen System*. Berlin: Springer, 2005;450.
  3. Zhao J., Zhang X., Li Y. Hydrogen embrittlement mechanisms in high-strength steels. *Acta Materialia*. 2020;183:10–18.
  4. Зюзин Д.И., Маркидонов А.В. Водородное охрупчивание и влияние водорода на свойства металлов и сплавов. *Механика XXI века*. 2024;23:389–395. EDN: DDSXFP.
  5. Kirchheim R. Reducing grain boundary, dislocation line and vacancy formation energies by solute segregation: I. Theoretical background. *Acta Materialia*. 2007;55(15):5129–5138.
  6. Robertson I.A.M., Sofronis P., Nagao A. et al. Hydrogen Embrittlement Understood. In: *Metallurgical and Materials Transactions B: Process Metallurgy and Materials Processing Science*. 2015;46(3):1085–1103. <https://doi.org/10.1007/s11663-015-0325-y>. EDN: DOMXPA.
  7. Зоря И.В., Поletaev Г.М. Влияние упругой деформации кристаллической решетки ГЦК металлов на энергию связи и миграции примесных атомов легких элементов. *Химическая физика и мезоскопия*. 2019;21:135–139.
  8. Нагорных И.Л., Бурнышев И.Н. Численное моделирование влияния водорода на поведение кристаллов Al, Fe, Ni и Pd при растяжении. *Химическая физика и мезоскопия*. 2012;14(4):604–608. EDN: PVHTCZ.
  9. Бурнышев И.Н., Нагорных И.Л. О механизмах водородного охрупчивания и некоторых результатах молекулярно-динамического моделирования систем металл-водород. В кн.: *Труды Института механики УрО РАН "Проблемы механики и материаловедения"*. Ижевск: изд. Института механики Уральского отделения РАН, 2015:20–30. EDN: TPGOXR.
  10. Poletaev G.M., Novoselova D.V., Starostenkov M.D., Zorya I.V. Molecular dynamics simulation of hydrogen atom diffusion in crystal lattice of fcc metals. *International Journal of Materials Research*. 2017;108(10):785–790. <https://doi.org/10.3139/146.111556>. EDN: XOKKQY.
  11. Нагорных И.Л., Бурнышев И.Н. Молекулярно-динамическое исследование механизмов водородной хрупкости металлов. В кн.: *Механика и физико-химия гетерогенных сред, наносистем и новых материалов: Материалы научных исследований*. Ижевск: Институт механики Уральского отделения РАН, 2015:199–211. EDN: ULMEXT.
  12. Шалаев А.А. *Основы физического материаловедения. Методы экспериментальной физики конденсированного состояния. Ч. 1*. Иркутск: изд. Иркутского государственного университета, 2013;159. EDN: TKRZUX.
  13. Callister W. D., Rethwisch D. G. *Fundamentals of Materials Science and Engineering: An Integrated Approach*. 4th ed. Hoboken, NJ: John Wiley & Sons, 2013.
  14. Fukai Y. *The Metal-Hydrogen System Basic Bulk Properties*. Springer Series in Materials Science. 2005;21:1–28. [https://doi.org/10.1007/978-3-662-02801-8\\_1](https://doi.org/10.1007/978-3-662-02801-8_1). EDN: KMHOFO.
  15. Смирнов Ю.М. Возбуждение 3F-уровней атома никеля соударениями с медленными электронами. *Журнал прикладной спектроскопии*. 2009;76(5):645–651. EDN: KUISAN.
  16. Robertson I.A.M., Sofronis P., Nagao A. et al. Hydrogen Embrittlement Understood. In: *Metallurgical and Materials Transactions B: Process Metallurgy and Materials Processing Science*. 2015;46(3):1085–1103. <https://doi.org/10.1007/s11663-015-0325-y>. EDN: DOMXPA.
  17. Nagumo M. Hydrogen related failure of steels – a new aspect. *Materials Science and Technology*. 2004;20(8):940–950. <https://doi.org/10.1179/026708304225019687>
  18. Агеева Е.В., Горохов А.А. *Конструкционные материалы, используемые в машиностроении*. Курск: ЗАО «Университетская книга», 2014:130. EDN: SHGOUT.
  19. Zorya I. V., Poletaev G. M. Influence of elastic deformation of the crystal lattice of FCC metals on the binding energy and migration of impurity atoms of light elements. *Chemical Physics and mesoscopy*. 2019;21(4):135.
  20. Зоря И.В. *Взаимодействие атомов C, N, O, H с дефектами кристаллической решетки в ГЦК металлах на примере Ni, Ag, Al*: автореф. дис. докт. наук, 2022:31. EDN: CBFCLP.

## REFERENCES

1. Ovchinnikov I.I., Ovchinnikov I.G. Influence of a hydrogen-containing medium at high temperatures and pressures on the behavior of metals and structures made of them. *Internet-zhurnal Naukovedenie*. 2012;4(13):95. (In Russ.). EDN: PVXFRN.
2. Fukai Y. *The Metal-Hydrogen System*. Berlin: Springer, 2005;450.
3. Zhao J., Zhang X., Li Y. Hydrogen embrittlement mechanisms in high-strength steels. *Acta Materialia*. 2020;183:10–18.

4. Zyuzin D.I., Markidonov A.V. Hydrogen embrittlement and the effect of hydrogen on the properties of metals and alloys. *Mekhaniki XXI veku*. 2024;23:389–395. (In Russ.). EDN: DDSXFP.
5. Kirchheim R. Reducing grain boundary, dislocation line and vacancy formation energies by solute segregation: I. Theoretical background. *Acta Materialia*. 2007;55(15):5129–5138.
6. Robertson Ia.M., Sofronis P., Nagao A. et al. Hydrogen Embrittlement Understood. In: *Metallurgical and Materials Transactions B: Process Metallurgy and Materials Processing Science*. 2015;46(3):1085–1103. <https://doi.org/10.1007/s11663-015-0325-y>. EDN: DOMXPA.
7. Zorya I.V., Poletaev G.M. The effect of elastic deformation of the crystalline lattice of FCC metals on the binding energy and migration of impurity atoms of light elements. *Khimicheskaya fizika i mezoskopiya*. 2019;21:135–139. (In Russ.).
8. Nagornykh I.L., Burnyshev I.N. Numerical modeling of the influence of hydrogen on the behavior of crystals of Al, Fe, Ni and Pd under tension. *Khimicheskaya fizika i mezoskopiya*. 2012;14(4):604–608. (In Russ.). EDN: PVHTCZ.
9. Burnyshev I.N., Nagornykh I.L. On the mechanisms of hydrogen embrittlement and some results of molecular dynamic modeling of metal-hydrogen systems. In: *Proceedings of the Institute of Mechanics of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences "Problems of Mechanics and Materials Science"*. Izhevsk: izd. Instituta mekhaniki Ural'skogo otdeleniya RAN, 2015:20–30. (In Russ.). EDN: TPGOXR.
10. Poletaev G.M., Novoselova D.V., Starostenkov M.D., Zorya I.V. Molecular dynamics simulation of hydrogen atom diffusion in crystal lattice of fcc metals. *International Journal of Materials Research*. 2017;108(10):785–790. <https://doi.org/10.3139/146.111556>. EDN: XOKKQY.
11. Nagornykh I.L., Burnyshev I.N. Molecular dynamic investigation of mechanisms of hydrogen brittleness of metals. In: *Mechanics and physico-chemistry of heterogeneous media, nanosystems and new Materials: Materials of scientific research*. Izhevsk: Institut mekhaniki Ural'skogo otdeleniya RAN, 2015:199–211. (In Russ.). EDN: ULMEXT.
12. Shalaev A.A. *Fundamentals of physical materials science. Methods of experimental condensed matter physics. Part 1*. Irkutsk: izd. Irkutskogo gosudarstvennogo universiteta, 2013;159. (In Russ.). EDN: TKRZUX.
13. Callister W. D., Rethwisch D. G. *Fundamentals of Materials Science and Engineering: An Integrated Approach*. 4th ed. Hoboken, NJ: John Wiley & Sons, 2013.
14. Fukai Y. The Metal-Hydrogen System Basic Bulk Properties. *Springer Series in Materials Science*. 2005;21:1–28. [https://doi.org/10.1007/978-3-662-02801-8\\_1](https://doi.org/10.1007/978-3-662-02801-8_1). EDN: KMHOFO.
15. Smirnov Yu.M. Excitation of 3F levels of a nickel atom by collisions with slow electrons. *Zhurnal prikladnoi spektroskopii*. 2009;76(5):645–651. (In Russ.). EDN: KUISAN.
16. Robertson Ia.M., Sofronis P., Nagao A. et al. Hydrogen Embrittlement Understood. In: *Metallurgical and Materials Transactions B: Process Metallurgy and Materials Processing Science*. 2015;46(3):1085–1103. <https://doi.org/10.1007/s11663-015-0325-y>. EDN: DOMXPA.
17. Nagumo M. Hydrogen related failure of steels – a new aspect. *Materials Science and Technology*. 2004;20(8):940–950. <https://doi.org/10.1179/026708304225019687>
18. Ageeva E.V., Gorokhov A.A. *Structural materials used in mechanical engineering*. Kursk: ZAO «Universitetskaya kniga», 2014:130. (In Russ.). EDN: SHGOUT.
19. Zorya I.V., Poletaev G.M. Influence of elastic deformation of the crystal lattice of FCC metals on the binding energy and migration of impurity atoms of light elements. *Chemical Physics and mesoscopy*. 2019;21(4):135.
20. Zorya I.V. *Interaction of C, N, O, H atoms with crystalline lattice defects in FCC metals on the example of Ni, Ag, Al*: avtoref. dis. dokt. nauk, 2022:31. (In Russ.). EDN: CBFCLP.

**Сведения об авторах:**

**Денис Игоревич Зюзин**, аспирант 3 курса «Физика конденсированного состояния», Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова

**E-mail:** denis.physic96@mail.ru

**ORCID:** 0009-0008-6602-6058

**SPIN-код:** 4479-0654

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

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

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

**SPIN-код:** 3939-7328

**Information about the author:**

**Denis I. Zyuzin**, 3rd year postgraduate student "Condensed Matter Physics", Altai State Technical University named after I.I. Polzunov

**E-mail:** denis.physic96@mail.ru

**ORCID:** 0009-0008-6602-6058

**SPIN-код:** 4479-0654

**Artem V. Markidonov**, Dr. Sci. (Phys.-Math.), Associate Professor of the Department of Computer Science and Computer Engineering. Butorina V.K., Kuzbass Humanitarian Pedagogical Institute of KemSU, Novokuznetsk, Russia.

**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 12.01.2026

После доработки 06.02.2026

Принята к публикации 20.02.2026

Received 12.01.2026

Revised 06.02.2026

Accepted 20.02.2026