

Научная статья
УДК 94(47):379.822
[https://doi.org/10.14258/izvasu\(2026\)1-04](https://doi.org/10.14258/izvasu(2026)1-04)

Влияние примесных атомов водорода на энергетические характеристики кристаллических решеток Ni, Al и Ni₃Al

Денис Игоревич Зюзин¹, Артем Владимирович Маркидонов²

¹Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова, Барнаул, Россия, denis.physic96@mail.ru

²Кузбасский гуманитарно-педагогический институт Кемеровского государственного университета, Новокузнецк, Россия, markidonov_artem@mail.ru

Original article

Effect of Impurity Hydrogen Atoms on the Energy Characteristics of Ni, Al, and Ni₃Al Crystal Lattices

Denis I. Ziuzin¹, Artem V. Markidonov²

¹Polzunov Altai State Technical University, Barnaul, Russia, denis.physic96@mail.ru

²Kuzbass Humanitarian and Pedagogical Institute of Kemerovo State University, Novokuznetsk, Russia, markidonov_artem@mail.ru

Аннотация. В настоящей работе проведено всестороннее исследование влияния механической деформации кристаллической решетки и присутствия внедренных атомов водорода на энергетическую стабильность кристаллических структур никеля, алюминия и интерметаллида Ni₃Al. Представленные материалы благодаря своим свойствам являются ключевыми компонентами в передовых технологиях, включая водородную энергетику, авиакосмическую и ядерную промышленность. В условиях эксплуатации данные материалы подвергаются как механическим нагрузкам, так и воздействию водорода, что может приводить к критическим изменениям их структурной целостности и механической прочности, например, через явление водородного охрупчивания. С помощью метода молекулярной динамики было детально проанализировано изменение потенциальной энергии решетки при приложении упругой деформации в диапазоне 1–5 %. Исследована зависимость расположения водорода в тетраэдрических и октаэдрических порах. Установлена количественная разница между влиянием водорода на потенциальную энергию при его нахождении в тетраэдрических и октаэдрических пустотах.

Ключевые слова: металлы, кристаллическая решетка, потенциальная энергия, водородное охрупчивание, упругая деформация, молекулярная динамика

Abstract. This work contains a comprehensive study of the effect of mechanical deformation of the crystal lattice and the presence of embedded hydrogen atoms on the energy stability of the crystal structures of Ni, Al, and Ni₃Al intermetallic compounds. Due to their properties, such materials are key components in advanced technologies, including hydrogen energy, aerospace, and nuclear industries. These materials are subjected to both mechanical stress and exposure to hydrogen under operating conditions that can lead to critical changes in their structural integrity and mechanical strength, for example, through the phenomenon of hydrogen embrittlement. Changes of the lattice potential energy under elastic deformation within the range of 1–5 % are analyzed in detail using the method of molecular dynamics. The effect of hydrogen atoms placed in tetrahedral and octahedral pores is investigated. A quantitative difference in how the potential energy being affected by hydrogen atoms placed in tetrahedral and octahedral voids is found.

Keywords: metals, crystal lattice, potential energy, hydrogen embrittlement, elastic deformation, molecular dynamics

Для цитирования: Зюзин Д.И., Маркидонов А.В. Влияние примесных атомов водорода на энергетические характеристики кристаллических решеток Ni, Al и Ni₃Al // Известия Алтайского государственного университета. 2026. № 1 (147). С. 36–41. [https://doi.org/10.14258/izvasu\(2026\)1-04](https://doi.org/10.14258/izvasu(2026)1-04).

Введение

Никель и его интерметаллиды, такие как Ni₃Al, являются критически важными конструкционными материалами в энергетической и аэрокосмической отраслях [1]. Их эксплуатационные характеристики в условиях экстремальных температур (до ~1300 К), механических напряжений и водородной коррозии определяются состоянием кристаллической решетки [2].

Потенциальная энергия кристаллической решетки, фундаментальный параметр, определяющий стабильность и свойства материала, чувствительна к комплексу факторов: внедрению атомов водорода, их концентрации, температуре и упругой деформации [2, 3]. Известно, что тип занятого междоузлия существенно влияет на решетку: водород в тетраэдрических позициях вызывает большее локальное искажение и расширение решетки (+1.8 %) по сравнению с октаэдрическими позициями (+0.9 %) из-за различий в координационном числе и размере пор [2, 4]. Наблюдается также четкая температурная зависимость для междоузельного водорода [3]. Несмотря на имеющиеся исследования влияния отдельных факторов [2–5], микроскопические механизмы их комбинированного воздействия на энергию, особенно в контексте различий между типами междоузлий, изучены недостаточно. Углубленное понимание этих процессов на атомном уровне необходимо для разработки материалов с улучшенными эксплуатационными свойствами.

Целью настоящей работы является установление количественных зависимостей потенциальной энергии ГЦК-решетки никеля, алюминия и интерметаллида Ni₃Al от величины (1–5 %) и направления упругой деформации, типа междоузлия, занимаемого атомом водорода (тетраэдрическое или октаэдрическое). В пред-

For citation: Ziuzin D.I., Markidonov A.V. Effect of Impurity Hydrogen Atoms on the Energy Characteristics of Ni, Al, and Ni₃Al Crystal Lattices. *Izvestiya of Altai State University*. 2026. No 1 (147). P. 36–41. (In Russ.). [https://doi.org/10.14258/izvasu\(2026\)1-04](https://doi.org/10.14258/izvasu(2026)1-04).

ставленном исследовании упругая деформация до 5 % рассматривается исключительно в рамках идеализированных условий молекулярно-динамического моделирования. Однако для реальных материалов (Ni, Al, Ni₃Al) деформация 5 % физически не может сохраняться как упругая. Исследование позволит количественно оценить вклад каждого фактора и их взаимодействия в изменение энергии, непосредственно сравнив влияние водорода в тетраэдрических и октаэдрических порах при различных деформациях и температурах.

Методика исследования

Исследования были проведены с помощью метода молекулярной динамики. Использовалась модель погруженного атома (или как по-другому — потенциал EAM, получившее название от сокращения Embedded Atom Model), которая применяется для описания энергии взаимодействия между атомами [6].

Подход, применяемый в EAM-потенциалах, к описанию энергии атомной системы является удачным при моделировании внутренней структуры и физико-механических свойств металлов, что подтверждается огромным количеством исследований и публикаций по этому направлению [7–9].

Расчетная модель, состоящая из атомов 10×10×10 элементарных ячеек, параметр решетки для каждого из атомов — Ni: 3.52 Å, Al: 4.05 Å, Ni₃Al: 3.572 Å. Тип решетки — гранецентрированная кубическая.

Первостепенно было произведено моделирование ГЦК-решеток Ni, Al, Ni₃Al без добавления примесных атомов водорода, без влияния упругой деформации и температуры (моделирование проведено при 0К). После чего были получены следующие данные энергии (см. табл.).

Справочные и экспериментальные данные энергии для исследуемых материалов

Материал	Справочное значение (эВ/атом)	Экспериментальное значение (эВ/атом)
Ni	–4,435	–4,4500
Al	–3,34	–3,3600
Ni ₃ Al	–4,59	–4,5983

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 EAM-потенциалами. Это подтверждает, что выбранная вычислительная методология адекватно описывает термодинамическое состояние идеальных ГЦК-решеток. Следовательно, последующие результаты работы,

полученные в рамках тех же модельных допущений (влияние деформации, внедрение водорода), могут быть признаны научно обоснованными.

Рассмотрены внедрения атома водорода в решетку в тетраэдрическую и октаэдрическую поры, а также виды и величины упругой деформации (сжатие и растяжение) от 1 до 5 %, вдоль одной, двух и трех осей и их влияние. При проведении исследования влияние изменения температуры на величину потенциальной энергии исключено.

Причины изменения потенциальной энергии кристаллической решетки в различных условиях можно объяснить следующим образом.

При внедрении атомов водорода — атом водорода внедряется в междоузлия решетки, что влечет за собой локальные искажения кристаллической решетки, изменяя энергию межатомного взаимодействия. Вследствие чего возникают дополнительные напряжения из-за разницы в размерах атомов водорода и междоузлий ГЦК-решетки, поэтому возникают дополнительные напряжения, что повышает потенциальную энергию всей системы. Атом водорода, занимая октаэдрические или тетраэдрические пустоты, вызывает локальное искажение кристалли-

ческой решетки, так как его радиус превышает размер доступных пустот.

Результаты исследования

Были исследованы три кристаллические модели: никель, алюминий и интерметаллид Ni₃Al. В качестве дефекта решетки в пору (тетраэдрическую или октаэдрическую) помещался атом водорода. На каждую такую систему оказывалось одноосное упругое деформационное воздействие в диапазоне от -5 % (сжатие) до +5 % (растяжение) с шагом 1 %. Все расчеты проводились при температуре 0К для моделирования основного энергетического состояния системы.

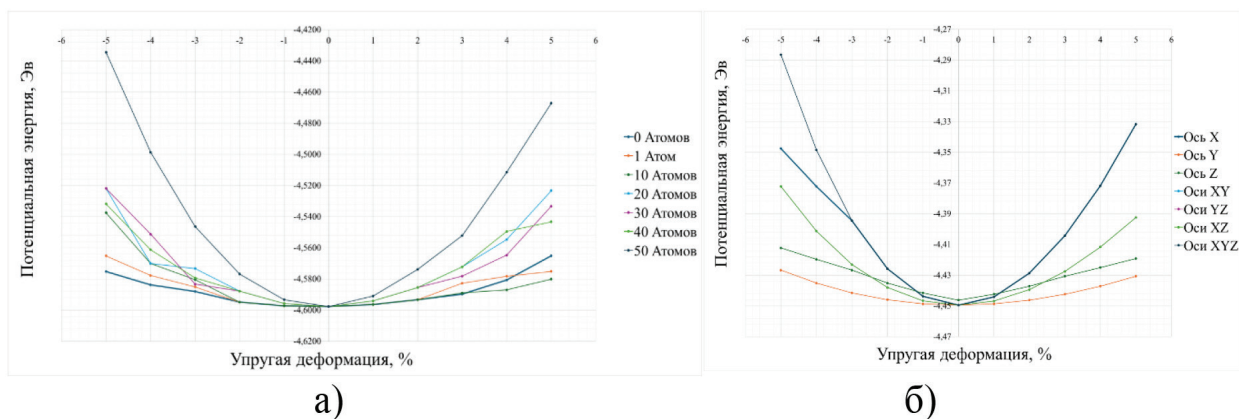


Рис. 1. Потенциальная энергия при расположении одного атома водорода в пору ГЦК-решетки никеля:
а) тетраэдрическая пора, б) октаэдрическая пора

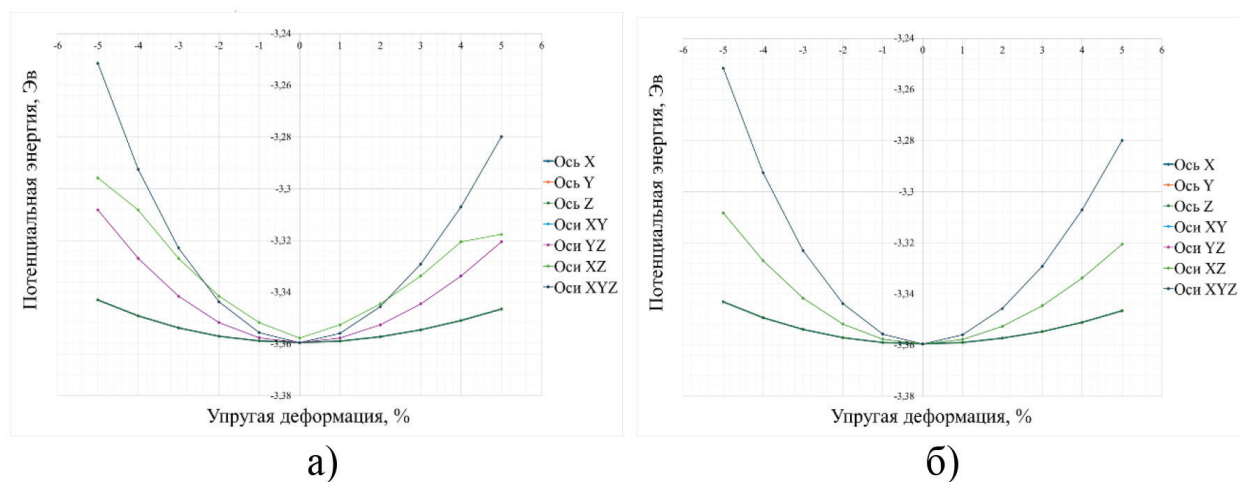


Рис. 2. Потенциальная энергия при расположении одного атома водорода в пору ГЦК-решетки алюминия:
а) тетраэдрическая пора, б) октаэдрическая пора

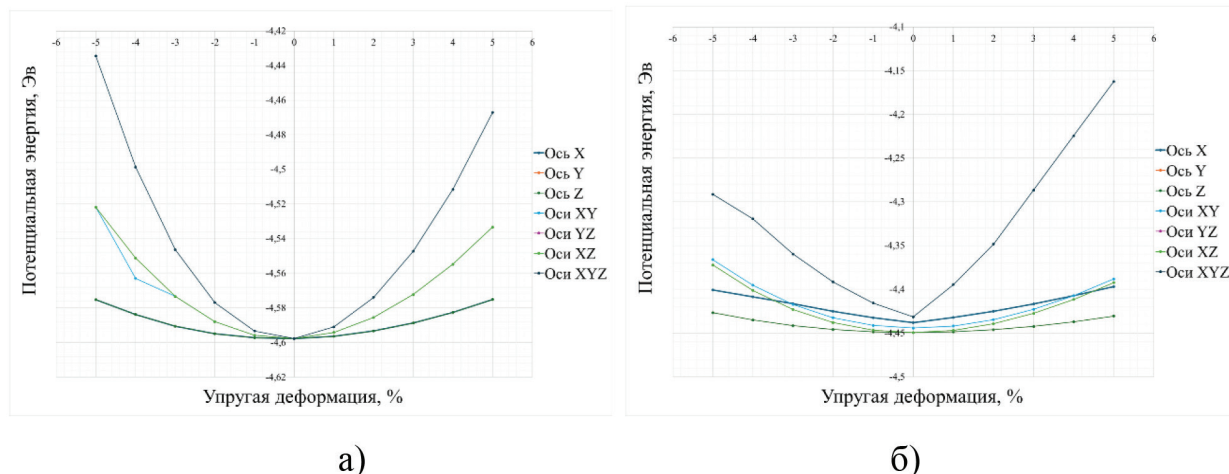


Рис. 3. Потенциальная энергия при расположении одного атома водорода в пору ГЦК-решетки интерметаллида Ni₃Al: а) тетраэдрическая пора, б) октаэдрическая пора

Обсуждение полученных результатов

1. Общие закономерности для всех материалов

Результаты проведенного анализа свидетельствуют о том, что рост упругой деформации в исследованном диапазоне (от -5 % до +5 %) сопровождается увеличением потенциальной энергии для всех трех материалов: никеля, алюминия и интерметаллида Ni₃Al. Это проявляется в уменьшении абсолютного значения потенциальной энергии.

Например, для никеля с одним атомом Н в тетраэдрической поре энергия возрастает с -4.4493 эВ/атом при 0 % деформации до -4.4305 эВ/атом при +5 % растяжении, т.е. на 0.0188 эВ/атом.

Наблюдаемая зависимость согласуется с законом Гука: для создания упругой деформации необходимо приложение механического напряжения, что связано с совершением работы над кристаллом и, как следствие, увеличением запаса его потенциальной энергии.

С физической точки зрения такое явление системы закономерно, так как в рамках упругого деформирования (как сжатия, так и растяжения) происходит рост потенциальной энергии (уменьшение абсолютного значения ее отрицательной величины), что является прямым следствием закона Гука, согласно которому работа внешних сил не рассеивается, а накапливается в кристаллической решетке в форме потенциальной энергии. Таким образом, хотя полная энергия связи и сохраняет отрицательное значение, ее абсолютная величина снижается независимо от типа деформации.

Также с точки зрения термодинамики дефектов любая деформация, даже упругая, искажает кристаллическую решетку, что приводит к изменению межатомных расстояний и углов, что, в свою очередь, влияет на энергию межатомных связей [10]. Водород, снижая энергию связи между атомами металла, оказывает влияние на зарождение и распространение трещин, особенно под влиянием упругой деформации [11].

1.1. Никель. При растяжении на +5 % энергия XYZ-компонента снижается с -4.4493 эВ/атом до -4.3316 эВ/атом (для тетраэдрической поры), что соответствует информации о водородной хрупкости в работе [12], где внешние напряжения действуют как катализатор, усиливая миграцию водорода к дефектам решетки и снижая энергию связи атомов металла.

1.2. Алюминий. Энергия падает при +5 % растяжении с -3.3595 эВ/атом до -3.3465 эВ/атом (тетраэдрическая пора), что указывает на меньшую чувствительность к нагрузкам по сравнению с никелем (изменение 0.0130 эВ/атом против 0.0188 эВ/атом).

1.3. Ni₃Al. Сохраняет высокую начальную стабильность (-4.5970 эВ/атом при 0% деформации), но при +5 % растяжении энергия снижается до -4.5784 эВ/атом, что связано с гетерогенной структурой материала, ограничивающей диффузию водорода.

2. Сравнение материалов по устойчивости к деформации

2.1. Ni и Al. Сравнение энергии связи атома водорода с никелем и алюминием демонстрирует существенное различие. Энергия связи водород-никель ниже (т.е. связь прочнее), чем водород-алюминий. Это обусловлено наличием у никеля, как у переходного металла, частично заполненной d-электронной оболочки [13, 14]. Электрон водорода эффективно гибридизуется с локализованными d-орбиталями никеля, что приводит к формированию прочной ковалентной связи. Данный вывод согласуется с обширными исследованиями водородного охрупчивания, в которых переходные металлы, такие как Ni и Pd, демонстрируют склонность к образованию гидридных фаз в условиях механической нагрузки.

В случае связи алюминий-водород, где алюминий, являясь непременным металлом, не обладает доступными d-состояниями для сильного взаимодействия.

Поэтому, такая связь формируется за счет взаимодействия с делокализованными s, p -электронами и оказывается значительно слабее [15]. Это количественно подтверждается значениями энергии при 0 % деформации: -4.4493 эВ/атом для Ni-H против -3.3595 эВ/атом для Al-H. Следовательно, никель изначально обладает большей способностью удерживать водород в своей кристаллической решетке [16].

2.2. Ni_3Al и Ni/Al. Интерметаллид Ni_3Al сочетает преимущества обоих материалов: энергия связи водорода в Ni_3Al при 0 % деформации даже ниже (более отрицательна, -4.5970 эВ/атом), чем в чистом Ni, что означает, что связь крепче. Но, относительное изменение энергий при упругой деформации аналогично алюминию и оказывается меньшим, чем в чистом никеле. Абсолютное изменение энергии для Ni_3Al составляет 0.0186 эВ/атом, что меньше, чем у Ni (0.0188 эВ/атом), но больше, чем у Al (0.0130 эВ/атом). В связи с чем интерметаллид Ni_3Al определяется как более перспективный материал для применений, где важна стойкость к водородной хрупкости, чем сплавы на основе никеля, так как он сохраняет способность удерживать водород, но лучше сопротивляется его разрушительному действию под умеренными нагрузками.

3. Влияние геометрии пор на распределение энергии

3.1. Тетраэдрические поры обеспечивают равномерное распределение энергии по осям (X, Y, Z), что указывает на симметричное взаимодействие водорода с решеткой. Например, для Ni при +5 % растяжении значения по осям X, Y, Z идентичны и равны -4.4305 эВ/атом.

3.2. Октаэдрические поры приводят к анизотропии, например, в Ni_3Al при +5 % растяжении Z-компонента энергии значительно отличается от X-компоненты (-4.4459 эВ/атом против -4.4306 эВ/атом). Это связано с несимметричным окружением атома водорода, что усиливает влияние деформации на определенные оси.

Согласно работе [13], в которой отражены фундаментальные положения о взаимодействиях водорода с металлами и сплавами, выходит, что атомы водорода преимущественно занимают октаэдрические поры,

что является следствием различий в энергии внедрения атома водорода в доступные поры. Главным фактором такого поведения является геометрический размер пор, так как, подчеркивает автор, октаэдрические поры имеют существенно больший размер по сравнению с тетраэдрическими, а, следовательно, внедрение атома водорода в такие поры требует большего локального искажения кристаллической решетки. Это приводит к тому, что энергия, необходимая для размещения атома водорода в тетраэдрической поре существенно выше, чем для октаэдрической, что подтверждается нашими расчетами: для Ni разница в энергии между системами с H в тетра- и октапорах составляет 0.0001 эВ/атом в пользу октаэдрической поры.

Заключение

Результаты настоящего исследования представляют количественное описание влияния механических деформаций на стабильность водорода в кристаллических решетках. Такая информация является критически важной для разработки и оптимизации материалов, предназначенных для работы в водородной энергетике, авиакосмической и ядерной отраслях, где надежность и долговечность конструкций находятся под постоянным воздействием водородной коррозии. Упругая деформация снижает стабильность решеток, насыщенных водородом, что связано с увеличением энергии активации дефектов. Ni_3Al сочетает высокую начальную стабильность и устойчивость к нагрузкам, что делает его перспективным материалом для водородных технологий. Геометрия поры (тетраэдрическая и октаэдрическая) определяет анизотропию реакции решетки на нагрузку, что требует учета пространственного расположения примесей.

Эти данные могут быть использованы для оптимизации выбора материалов в водородной энергетике, авиакосмической и химической промышленности, где критичны стабильность решетки и сопротивление водородной хрупкости.

Библиографический список

1. Гуляев А.П. Металловедение. М.: Металлургия, 1986. 544 с.
2. Fukai Y. The Metal-Hydrogen System. Berlin: Springer, 2005. 450 p.
3. 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.
4. Sofronis P, Birnbaum H.K. Mechanics of the Hydrogen-Dislocation Interaction in FCC Metals // Journal of the Mechanics and Physics of Solids. 1988. Vol. 36. No 1. P. 49–90.
5. Zhao J., Zhang X., Li Y. Hydrogen Embrittlement Mechanisms in High-Strength Steels // Acta Materialia. 2020. Vol. 183. P. 10–18.
6. Baskes M.I., Angelo J.E., Moody N.R. Atomistic Calculations of Hydrogen Interactions with Ni_3Al Grain Boundaries and Ni/ Ni_3Al Interfaces // Hydrogen Effects in Materials: Proceedings of the Fifth International Conference / eds. Moran, W.Y., USA, 1994. Warrendale, PA: The Minerals, Metals & Materials Society (TMS), 1996. P. 77–90.
7. Белашенко Д.К., Островский О.И. Применение модели погруженного атома к жидким металлам. Жидкие галлий и висмут // Журнал физической химии. 2006. Т. 80, № 4. С. 602–615.
8. Белашенко Д.К. Применение модели погруженного атома к жидким металлам. Жидкое железо // Журнал физической химии. 2006. Т. 80, № 5. С. 872–883.

9. Белашченко Д.К. Применение модели погруженно-го атома к жидким металлам. Жидкий рубидий // Журнал физической химии. 2006. Т. 80, № 10. С. 1767–1777.

10. Callister W.D., Rethwisch D.G. *Fundamentals of Materials Science and Engineering: an Integrated Approach*. 4th ed. New York: John Wiley & Sons, 2013. 1200 p.

11. Robertson I.M., Sofronis P., Nagao A., et al. Hydrogen Embrittlement Understood // *Metallurgical and Materials Transactions B: Process Metallurgy and Materials Processing Science*. 2015. Vol. 46. No 3. P. 1085–1103. <https://doi.org/10.1007/s11663-015-0325-y>

12. Колачев Б.А. Водородная хрупкость металлов. М.: Metallurgiya, 1985. 215 с.

13. Fukai Y. *The Metal-Hydrogen System Basic Bulk Properties*. Springer Series in Materials Science. 2005. Vol. 21. P. 1–28. https://doi.org/10.1007/978-3-662-02801-8_1

14. Flanagan T.B., Clewley J.D. Hysteresis in Metal Hydrides // *Journal of the Less Common Metals*. 1982. Vol. 83. No 1. P. 127–141. [https://doi.org/10.1016/0022-5088\(82\)90176-X](https://doi.org/10.1016/0022-5088(82)90176-X)

15. Wolverton C., Ozolins V., Asta M. Hydrogen in Aluminum: First-Principles Calculations of Structure and Thermodynamics // *Physical Review B*. 2004. Vol. 69, No 14. P. 144109.

16. Griessen R., Driessen A. Heat of Formation of Hydrides // *Physical Review B*. 1984. Vol. 30, No. 8. P. 4372–4381.

References

1. Gulyaev A.P. *Metal Science*. Moscow: Metallurgiya, 1986. 544 p. (In Russ.).

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

3. 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.

4. Sofronis P., Birnbaum H.K. Mechanics of the Hydrogen-Dislocation Interaction In FCC Metals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. 1988. Vol. 36. No 1. P. 49–90.

5. Zhao J., Zhang X., Li Y. Hydrogen Embrittlement Mechanisms in High-Strength Steels. *Acta Materialia*. 2020. Vol. 183. P. 10–18.

6. Baskes M.I., Angelo J.E., Moody N.R. Atomistic Calculations of Hydrogen Interactions with Ni₃Al Grain Boundaries and Ni/Ni₃Al Interfaces. *Hydrogen Effects in Materials: Proceedings of the Fifth International Conference*. Moran, WY, USA, 1994. Warrendale, PA: The Minerals, Metals & Materials Society (TMS), 1996. P. 77–90.

7. Belashchenko D.K., Ostrovsky O.I. Application of the Embedded Atom Model to Liquid Metals: Liquid Gallium and Bismuth. *Russian Journal of Physical Chemistry*. 2006. Vol. 80. No 4. P. 602–615. (In Russ.).

8. Belashchenko D.K. Application of the Embedded Atom Model to Liquid Metals: Liquid Iron. *Russian Journal of Physical Chemistry*. 2006. Vol. 80. No 5. P. 872–883. (In Russ.).

9. Belashchenko D.K. Application of the Embedded Atom Model to Liquid Metals: Liquid Rubidium. *Russian Journal of Physical Chemistry*. 2006. Vol. 80. No 10. P. 1767–1777. (In Russ.).

10. Callister W.D., Rethwisch D.G. *Fundamentals of Materials Science and Engineering: an Integrated Approach*. 4th ed. New York: John Wiley & Sons, 2013. 1200 p.

11. Robertson I.M., Sofronis P., Nagao A., et al. Hydrogen Embrittlement Understood. *Metallurgical and Materials Transactions B: Process Metallurgy and Materials Processing Science*. 2015. Vol. 46. No 3. P. 1085–1103. <https://doi.org/10.1007/s11663-015-0325-y>

12. Kolachev B.A. *Hydrogen Embrittlement of Metals*. Moscow: Metallurgiya, 1985. 215 p. (In Russ.).

13. Fukai Y. *The Metal-Hydrogen System Basic Bulk Properties*. Springer Series in Materials Science. 2005. Vol. 21. P. 1–28. https://doi.org/10.1007/978-3-662-02801-8_1

14. Flanagan T.B., Clewley J.D. Hysteresis in Metal Hydrides. *Journal of the Less Common Metals*. 1982. Vol. 83. No 1. P. 127–141. [https://doi.org/10.1016/0022-5088\(82\)90176-X](https://doi.org/10.1016/0022-5088(82)90176-X)

15. Wolverton C., Ozolins V., Asta M. Hydrogen in Aluminum: First-Principles Calculations of Structure and Thermodynamics. *Physical Review B*. 2004. Vol. 69. No 14. P. 144109.

16. Griessen R., Driessen A. Heat of Formation of Hydrides. *Physical Review B*. 1984. Vol. 30. No 8. P. 4372–4381.

Информация об авторах

Д.И. Зюзин, аспирант факультета специальных технологий, Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова, Барнаул, Россия;

А.В. Маркидонов, доктор физико-математических наук, доцент кафедры информатики и вычислительной техники им. В.К. Буторина, Кузбасский гуманитарно-педагогический институт (филиал) Кемеровского государственного университета, Новокузнецк, Россия.

Information about the authors

D.I. Ziuzin, Postgraduate Student of the Faculty of Special Technologies, Polzunov Altai State Technical University, Barnaul, Russia;

A.V. Markidonov, Doctor of Sciences in Physics and Mathematics, Associate Professor of the Department of Computer Science and Computer Engineering named after V.K. Butorin, Kuzbass Humanitarian Pedagogical Institute, Kemerovo State University, Novokuznetsk, Russia.