

УДК 538.913

ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ВОДОРОДА С НАНОЧАСТИЦАМИ ПАЛЛАДИЯ И НИКЕЛЯ*

*Полетаев Г.М.¹, д.ф.-м.н., профессор, заведующий кафедрой высшей математики
и математического моделирования (gmpoletaev@mail.ru)*

Зоря И.В.², к.т.н., директор архитектурно-строительного института

Кулабухова Н.А.¹, к.ф.-м.н., докторант (natalya_domaeva@mail.ru)

*Новоселова Д.В.¹, к.ф.-м.н., докторант кафедры высшей математики
и математического моделирования*

Старостенков М.Д.¹, д.ф.-м.н., профессор, заведующий кафедрой физики (genphys@mail.ru)

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

² Сибирский государственный индустриальный университет
(654007, Россия, Новокузнецк, Кемеровская обл., ул. Кирова, 42)

Аннотация. Методом молекулярной динамики исследуется взаимодействие водорода с наночастицами палладия и никеля. Металлическую частицу в модели создавали путем вырезания шара из ГЦК кристалла. Рассматривали частицы диам. 1, 2 и 3 нм. Взаимодействие атомов металла друг с другом описывали с помощью многочастичного потенциала Клери-Розато, построенного в рамках модели сильной связи. Для описания взаимодействий атомов водорода с атомами металла и друг с другом использовали потенциал Морзе, параметры которого 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 рассматривали температуры от 300 до 1100 К. В процессе компьютерного эксперимента температуру в расчетном блоке удерживали постоянной. Концентрация атомов водорода, вводимых в расчетный блок, соответствовала давлению 10 и 20 МПа. Начальные позиции атомов водорода в расчетном блоке (в металлической частице или вне ее) не влияли на конечное равновесное распределение водорода в расчетном блоке, которое устанавливалось после некоторого времени компьютерного эксперимента, зависящего от температуры. Как показало молекулярно-динамическое моделирование, наночастицы палладия и никеля являются эффективными аккумуляторами водорода, обладающими высокой скоростью обратимого процесса сорбции-десорбции водорода. При комнатной температуре указанные частицы сорбируют практически весь водород, который неравномерно распределяется в объеме частиц, стремясь образовать агрегаты, содержащие по несколько десятков атомов водорода. При этом в случае частиц никеля водород преимущественно располагается вблизи поверхности. В частицах палладия, напротив, водород сильнее связан с решеткой палладия, с ростом температуры образует более крупные агрегаты. Интенсивное испарение водорода частицами палладия и никеля происходит при температуре выше 700 К. При этом, согласно полученным данным, водород сильнее связан с частицами палладия, чем с частицами никеля, и работа, которую нужно затратить на эвакуацию (десорбцию) водорода в случае частиц палладия выше, чем для частиц никеля.

Ключевые слова: молекулярная динамика, металл, водород, наночастица, агрегат, потенциал, температура.

DOI: 10.17073/0368-0797-2017-6-463-468

Повышенное внимание к вопросу взаимодействия водорода с металлами обусловлено практическим интересом использования системы металл – водород: создание радиационноустойчивых материалов, фильтров для получения чистого водорода (в том числе для разделения изотопов), аккумуляция и хранение водорода, проблема транспортировки водорода.

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 большинство исследователей отмечают,

что наиболее эффективными ловушками являются границы зерен, дислокации и вакансии [1 – 7]. Однако очевидно, что для повышения сорбционной способности металлических аккумуляторов и скорости процессов сорбции и эвакуации водорода необходимо использовать металлические материалы с высокой долей свободной поверхности: пористые материалы, пластины, фольги, наночастицы.

Исследование взаимодействия примеси водорода с различными дефектами структуры на атомном уровне в настоящее время находится на начальной стадии, такие исследования проводятся преимущественно методами компьютерного моделирования. Настоящая работа посвящена исследованию методом молекулярной динамики

* Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 16-48-190182 p_a.

ки взаимодействия водорода с наночастицами палладия и никеля. 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 Н₂) 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 [1, 10]. В работах [11, 12] было показано, что в случае сорбции водорода вакансией и краевой дислокацией энергия абсорбции для никеля становится отрицательной (от –0,1 до –0,17 эВ), что свидетельствует о возможности значительного повышения сорбционной способности никеля при введении высокой концентрации дефектов.

В настоящей работе рассматривали наночастицы палладия и никеля диам. 1, 2 и 3 нм. Взаимодействие атомов металла друг с другом описывали с помощью многочастичного потенциала Клери-Розато [13], построенного в рамках модели сильной связи. Потенциальная энергия (*U*) *i*-го атома в этом случае находится с помощью выражения

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

где *A*, *p*, *q*, ξ , *r*₀ – параметры потенциала; *r*_{*ij*} – расстояние между *i*-м и *j*-м атомами.

Параметры потенциалов Клери-Розато были взяты из работы [13]. Этот потенциал хорошо зарекомендовал себя в ряде расчетов, выполненных методом молекулярной динамики; многие характеристики, полученные с его помощью, хорошо согласуются с экспериментальными данными [11 – 15].

Металлическую частицу создавали путем вырезания шара из ГЦК кристалла. Расчетный блок имел форму куба, в центре которого находилась круглая металлическая частица, вне ее – пустое пространство. Граничные условия на расчетный блок были наложены периодические для удержания постоянного количества атомов в моделируемом пространстве расчетного блока и начальных условий, соответствующих высокому давлению водорода в блоке.

После создания металлической частицы в расчетный блок вводили атомы водорода. В работе использовали допущение, что водород вне частицы рассматривали только атомарный. Внутри металлов водород, как известно, пребывает в атомарном состоянии: молекулы водорода Н₂, прилипая к свободной поверхности металла, диссоциируют на отдельные атомы вследствие значительного ослабления ковалентной связи [1].

Концентрация атомов водорода, вводимых в расчетный блок, соответствовала номинальному давлению легких газов в баллонах – 20 МПа. Рассматривали так-

же давление в два раза ниже – 10 МПа. Для описания взаимодействий Н–Н, Pd–Н, Ni–Н использовали потенциал Морза:

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

где α , β , *D* – параметры потенциала; *r*_{*ij*} – расстояние между *i*-м и *j*-м атомами.

Параметры потенциалов α , β и *D* были рассчитаны в работе [14] с использованием экспериментальных данных по энергии абсорбции, энергии активации надбарьерной диффузии водорода в металле (при нормальных и высоких температурах), энергии связи с вакансией, дилатации. Значения параметров потенциалов Морза для связей Н–Н, Pd–Н, Ni–Н [14] приведены ниже:

Связь	α , Å ⁻¹	β	<i>D</i> , эВ
Н–Н	1,3	6,50	0,04500
Pd–Н	0,9	9,76	0,10737
Ni–Н	1,2	14,00	0,13310

При исследовании методом молекулярной динамики для атомов металла и водорода использовали разный шаг по времени. Атомы водорода значительно легче и подвижнее атомов палладия и никеля, за одну итерацию компьютерного эксперимента они перемещаются на значительно большее расстояние. Поэтому для них использовали относительно малый временной шаг – 0,5 фс. Для атомов металла применение настолько малого шага по времени нерационально; для них этот шаг задавали в десять раз больше – 5 фс.

Известно, что отличительными особенностями диффузии водорода и гелия в металлах по сравнению с другими более тяжелыми атомами внедрения являются исключительно малая энергия активации и квантовый характер диффузии при низких температурах, проявляющийся для водорода в чистых кристаллах вплоть до комнатной температуры [1, 16, 17]. Так, при сверхнизких температурах возможен преимущественно квантовый механизм диффузии, заключающийся в подбарьерном, квантовом туннелировании атомов водорода между соседними междоузлиями. С ростом температуры и несовершенства кристаллической решетки металла вклад подбарьерной диффузии резко уменьшается, в основном реализуются классические надбарьерные механизмы. При температурах выше комнатной диффузия водорода осуществляется практически надбарьерно [1, 16, 17]. Этот факт позволяет исследовать диффузию легких внедренных атомов классическим методом молекулярной динамики при температурах выше 300 К. В работе рассматривали температуры от 300 до 1100 К. В процессе компьютерного эксперимента температуру в расчетном блоке удерживали постоянной.

Начальные позиции атомов водорода в расчетном блоке (в металлической частице или вне ее) не влияли на конечное равновесное распределение водорода в расчетном блоке, которое устанавливалось после некоторого времени компьютерного эксперимента, зависящего от температуры. Это равновесное распределение (то есть соотношение количества атомов водорода внутри частицы, на ее поверхности и вне ее) зависело от температуры и размера частиц. Очевидно, что быстрее это происходило в случае частиц меньшего размера. Для частиц большего диаметра требовалось время для диффузии водорода внутри частицы. Продолжительность компьютерных экспериментов составляла 300 пс, что являлось достаточным для установления такого равновесия.

За время порядка нескольких десятков пикосекунд водород эффективно сорбировался частицами и образовывал агрегаты. Отличительной особенностью сорбции частицами палладия и никеля являлось то, что в случае применения палладия водород преимущественно располагался в объеме частицы, в случае использования никеля – на поверхности частицы или вблизи нее. По всей видимости, это объясняется разным значением энергии абсорбции для рассматриваемых металлов: $-0,1$ и $0,16$ эВ соответственно (однако нужно учитывать, что эти значения получены для абсорбции водорода бездефектным кристаллом).

Водород в металлических частицах распределялся неравномерно и стремился образовывать агрегаты, содержащие по несколько десятков атомов водорода (рис. 1, 2). В процессе компьютерного эксперимента

наблюдалось формирование различного числа агрегатов в наночастицах: большее их количество наблюдали при относительно низких температурах. С ростом температуры количество атомов водорода, связанных в агрегатах, уменьшалось, а доля атомов, свободно диффундирующих в объеме частицы и испаряемых ею, напротив, увеличивалось.

При комнатной температуре (300 К) практически все атомы водорода сорбировались частицами палладия и никеля, что говорит о высокой эффективности применения данных объектов для аккумуляции водорода. При этом, как уже говорилось выше, в случае частиц никеля атомы водорода располагались преимущественно ближе к поверхности частицы.

Нельзя сказать, что испарение водорода из наночастицы происходило при определенной температуре. Доля атомов водорода вне частицы постепенно увеличивалась с ростом температуры. Наиболее интенсивно процесс испарения (или эвакуации) водорода происходил при температурах выше 700 К. С повышением температуры возрастала подвижность атомов водорода в частицах, что являлось причиной нестабильности агрегатов атомов водорода в объеме частиц, при температурах выше 1000 К такие агрегаты, как правило, уже не наблюдались. При этом разрушение агрегатов в частицах палладия происходило при сравнительно меньших температурах, что, видимо, объясняется меньшей энергией миграции водорода в палладии по сравнению с миграцией в никеле ($0,24$ и $0,38$ эВ соответственно для используемых потенциалов [14, 19 – 20]).

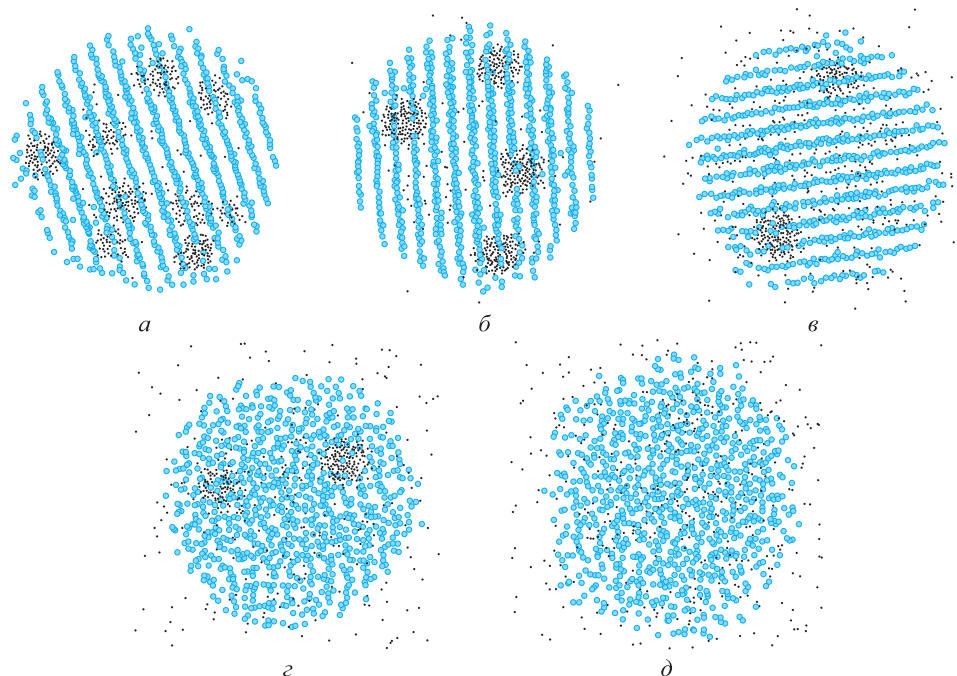


Рис. 1. Абсорбция водорода (черные атомы) частицей палладия (серые атомы) диам. 3 нм при температурах 300, 500, 700, 900 и 1100 К и начальном давлении атомарного водорода в расчетном блоке 20 МПа ($a - д$) (результаты получены после моделирования в течение 300 пс)

Fig. 1. Absorption of hydrogen (black atoms) by a palladium particle (gray atoms) with diameter of 3 nm at temperatures of 300, 500, 700, 900 and 1100 K and the initial pressure of atomic hydrogen of 20 MPa in the calculation block ($a - d$) (the results are obtained after 300 ps simulation)

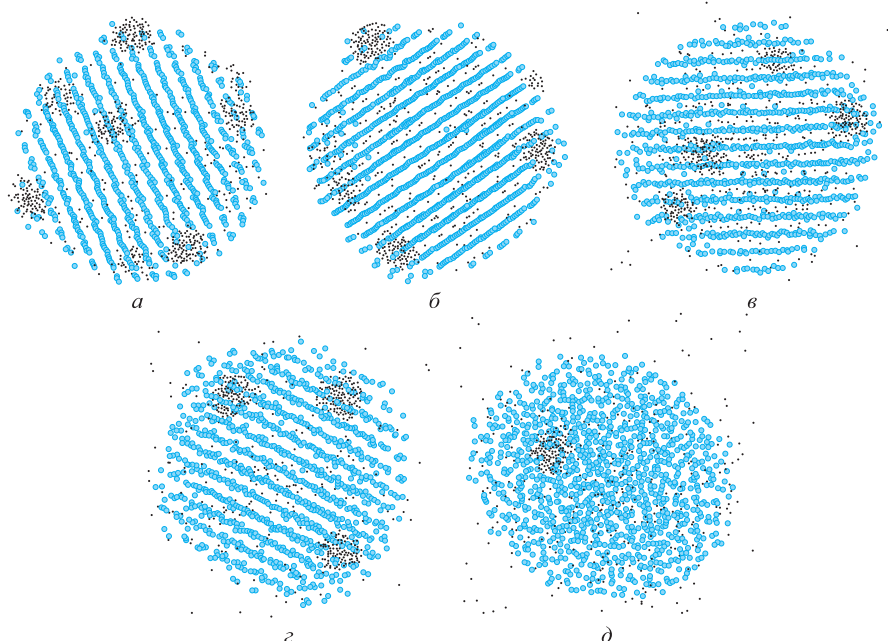


Рис. 2. Абсорбция водорода (черные атомы) частицей никеля (серые атомы) диам. 3 нм при температурах 300, 500, 700, 900 и 1100 К и начальном давлении атомарного водорода в расчетном блоке 20 МПа (а – д) (результаты получены после моделирования в течение 300 пс)

Fig. 2. Absorption of hydrogen (black atoms) by a nickel particle (gray atoms) with diameter of 3nm at temperatures of 300, 500, 700, 900 and 1100 K and the initial pressure of atomic hydrogen of 20 MPa in the calculation block (a – d) (the results are obtained after 300 ps simulation)

Примечательно, что плавление частиц палладия, содержащих водород, происходило при меньшей температуре, чем частиц никеля, хотя чистый палладий плавится при большей температуре. Температура плавления палладия составляет 1827 К, никеля – 1726 К. Частица палладия диам. 3 нм при взаимодействии с водородом плавится уже при 900 К (рис. 1), в то время как частица никеля при той же температуре остается в кристаллическом состоянии (рис. 2).

Процесс сорбции-десорбции был полностью обратим, при снижении температуры водород вновь сорбировался частицей, образовывались агрегаты, снижалась доля атомов водорода вне частицы. Результаты, полученные для начального давления водорода в расчетном

блоке 10 и 20 МПа, были аналогичны, существенного влияния давления на соотношение водорода в частице и вне ее в зависимости от температуры замечено не было.

Для анализа эффективности процесса сорбции-десорбции водорода частицами были получены температурные зависимости средней энергии атомов водорода в моделируемых системах (рис. 3).

Средняя энергия атомов водорода (E_H) в расчетном блоке, содержащем частицу никеля, с ростом температуры увеличивалась (рис. 3, б), что объясняется, как уже говорилось выше, увеличением доли атомов водорода вне агрегатов и вне частицы (образование агрегатов, очевидно, приводит к снижению средней энергии). В случае частиц палладия зависимости сложнее,

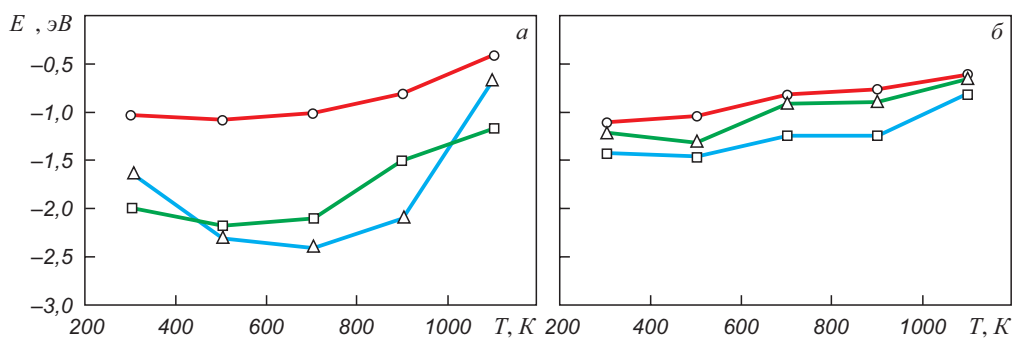


Рис. 3. Температурные зависимости средней энергии атома водорода в расчетном блоке, содержащем частицы палладия (а) и никеля (б) диам. 1 (О), 2 (Δ) и 3 нм (□), при начальном давлении атомарного водорода 20 МПа (результаты получены после моделирования в течение 300 пс)

Fig. 3. Temperature dependences of the average energy of the hydrogen atom in calculation block containing palladium (a) and nickel (b) particles with diameter of 1 (O), 2 (Δ) and 3nm (□), with an initial hydrogen atomic pressure of 20 MPa (results are obtained after 300 ps simulation)

по мере увеличения размера частицы имеют более выраженную седлообразную форму. По всей видимости, снижение энергии водорода с ростом температуры объясняется возникновением при этих температурах условий для образования более крупных агрегатов в объеме частицы, то есть происходит их укрупнение в ущерб деформации кристаллической решетки частицы палладия. При дальнейшем повышении температуры агрегаты теряют стабильность, энергия вновь повышается.

Выводы. Как показало молекулярно-динамическое моделирование, наночастицы палладия и никеля являются эффективными аккумуляторами водорода, обладающими высокой скоростью обратимого процесса сорбции-десорбции водорода. При комнатной температуре указанные частицы сорбируют практически весь водород, который неравномерно распределяется в объеме частиц, стремясь образовать агрегаты, содержащие по несколько десятков атомов водорода. При этом в случае частиц никеля водород преимущественно располагается вблизи поверхности. В частицах палладия, напротив, водород сильнее связан с решеткой палладия, с ростом температуры образует более крупные агрегаты и приводит к более существенному снижению температуры плавления частиц палладия по сравнению с частицами никеля. Интенсивное испарение водорода частицами палладия и никеля происходит, начиная с температуры 700 К. При этом, согласно полученным данным, водород сильнее связан с частицами палладия, чем с частицами никеля; работа, которую нужно затратить на эвакуацию (десорбцию) водорода в случае частиц палладия выше, чем для частиц никеля. Это создает предпосылки для рекомендации нанообъектов из никеля в качестве более эффективных и энергетически выгодных аккумуляторов водорода по сравнению с системами из палладия. Очевидно, что помимо рассмотренных в настоящей работе наночастиц круглой формы эффективными аккумуляторами также могут служить и другие нанообъекты из рассмотренных металлов с высокой долей свободной поверхности: фольги, пластины, пористые материалы и т.п.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

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

2. Гельд П.В., Рябов Р.А., Кодес Е.С. Водород и несовершенства структуры металла. – М.: Металлургия, 1979. – 221 с.
3. Fukai Y. The metal-hydrogen system – basic bulk properties. – Berlin: Springer-Verlag, 1993. – 309 p.
4. 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. P. 81 – 87.
5. Gapontsev A.V., Kondratev V.V. Hydrogen diffusion in disordered metals and alloys // Physics-Uspekhi. 2003. Vol. 46. P. 1077 – 1098.
6. Andrievski R.A. Hydrogen in nanostructures // Physics-Uspekhi. 2007. Vol. 50. P. 691 – 704.
7. Shin D.S., Robertson I.M., Birnbaum H. K. Hydrogen effects on the character of dislocations in high-purity aluminum // Acta Metallurgica. 1999. Vol. 47. P. 2991 – 2998.
8. Водород в металлах / Под ред. Г. Алефельда и И. Фелькля. Т. 2. – М.: Мир, 1981. – 480 с.
9. Lewis F.A. The Palladium-Hydrogen System // Platinum Metals Rev. 1982. Vol. 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 // Phys. Rev. B. 1984. Vol. 29. No. 12. P. 6443 – 6453.
11. 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. 225 – 229.
12. 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.
13. Cleri F., Rosato V. Tight-binding potentials for transition metals and alloys // Physical Review B. 1993. Vol. 48. No. 1. P. 22 – 33.
14. Poletaev G.M., Starostenkov M.D., Dmitriev S.V. Interatomic potentials in the systems Pd-H and Ni-H // Materials Physics and Mechanics. 2016. Vol. 27. No. 1. P. 53 – 59.
15. Kulabukhova N.A., Poletaev G.M., Starostenkov M.D., Kulagina V.V., Potekaev A.I. A molecular dynamics study of hydrogen-atom diffusion in fcc-metals // Russian Physics Journal. 2012. Vol. 54. No. 12. P. 1394 – 1399.
16. Kashlev Yu.A. Three regimes of diffusion migration of hydrogen atoms in metals // Theoretical and Mathematical Physics. 2005. Vol. 145. P. 1590 – 1603.
17. Tovbin Yu.K., Votyakov E.V. Evaluation of the influence of dissolved hydrogen on mechanical properties of palladium // Physics of the Solid State. 2000. Vol. 42. P. 1192 – 1195.
18. Katagiri M., Onodera H. Molecular dynamics simulation of hydrogen-induced amorphization: softening effect by incorporation of hydrogen // Materials Transactions. 1999. Vol. 40. No. 11. P. 1274 – 1280.
19. Лариков Л.Н., Исайчев В.И. Диффузия в металлах и сплавах. – Киев: Наукова думка, 1987. – 511 с.
20. Tanaka K., Atsumi T., Yamada M. An internal friction peak due to hydrogen-dislocation interaction in nickel // Journal de physique. 1981. Vol. 42. No. 10. P. 139 – 144.

Поступила 30 января 2017 г.

IZVESTIYA VUZov. CHERNAYA METALLURGIYA = IZVESTIYA. FERROUS METALLURGY. 2017. VOL. 60. No. 6, pp. 463–468.

THE STUDY OF HYDROGEN INTERACTION WITH PALLADIUM AND NICKEL NANOPARTICLES BY THE METHOD OF MOLECULAR DYNAMICS

G.M. Poletaev¹, I.V. Zorya², N.A. Kulabukhova¹, D.V. Novoselova¹, M.D. Starostenkov¹

²Siberian State Industrial University, Novokuznetsk, Russia

¹Altai State Technical University named after I.I. Polzunov, Barnaul, Russia

Abstract. Hydrogen interaction with Pd and Ni nanoparticles was studied by the method of molecular dynamics. The metal particle in the model was created by cutting a ball from the fcc crystal. 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 absorption energy, activation energy of the above-barrier diffusion of hydrogen in the metal (at normal and high temperatures), binding energy with the vacancy and dilatations. Temperatures from 300 to 1100 K were considered. During the computer experiment the temperature in calculation block was constant. The concentration of hydrogen atoms introduced into the calculation block corresponded to a pressure of 10 and 20 MPa. The initial positions of the hydrogen atoms in the calculation block (in the metal particle or outside it) did not affect the final equilibrium distribution of hydrogen, which was established after some time of the computer experiment, depending on the temperature. As it was shown by the molecular dynamics simulation, nanoparticles are effective hydrogen accumulator having a high velocity of reversible sorption-desorption process of hydrogen. At room temperature, Pd and Ni nanoparticles sorb substantially all hydrogen which is unevenly distributed in the particle volume in an effort to form aggregates containing a few tens of hydrogen atoms. In the case of Ni particles hydrogen predominantly is located near the surface. In the Pd particles, by contrast, hydrogen strongly connected with the Pd lattice, and at increasing temperature it form larger aggregates. Intensive evaporation of hydrogen from the Pd and Ni particles occurs at temperatures above 700 K. At the same time, according to the obtained data, hydrogen is more strongly associated with the particles of Pd than with Ni particles, and the work that needs to be spent for hydrogen evacuation (desorption) in the case of Pd particles is higher than for Ni particles.

Keywords: molecular dynamics, metal, hydrogen, palladium, nickel, nanoparticle, aggregate, potential, temperature.

DOI: 10.17073/0368-0797-2017-6-463-468

REFERENCES

1. *Vzaimodeistvie vodoroda s metallami* [Hydrogen interaction with metals]. Zakharov A.P. ed. Moscow: Nauka, 1987, 296 p. (In Russ.).
2. Gel'd P.V., Ryabov R.A., Kodes E.S. *Vodorod i nesovershenstva struktury metalla* [Hydrogen and metal structure insufficiency]. Moscow: Metallurgiya, 1979, 221 p. (In Russ.).
3. Fukai Y. *The metal-hydrogen system – basic bulk properties*. Berlin: Springer-Verlag, 1993, 309 p.
4. Eremeev S.V., Kul'kov S.S., Kul'kova S.E. Influence of d-metals impurities on grain boundaries on hydrogen sorption in palladium. *Fizicheskaya mekhanika*. 2010, vol. 13, no. 6, pp. 81–87. (In Russ.).
5. Gapontsev A.V., Kondratev V.V. Hydrogen diffusion in disordered metals and alloys. *Physics-Uspokhi*. 2003, vol. 46, pp. 1077–1098.
6. Andrievski R.A. Hydrogen in nanostructures. *Physics-Uspokhi*. 2007, vol. 50, pp. 691–704.
7. Shin D.S., Robertson I.M., Birnbaum H.K. Hydrogen effects on the character of dislocations in high-purity aluminum. *Acta Metallurgica*. 1999, vol. 47, pp. 2991–2998.
8. Alefeld Georg, Völkl Johann. *Hydrogen in Metals. Vol. 2. Application-Oriented Properties*. Springer-Verlag, 1978. (Russ.ed.: Alefeld G., Völkl J. *Vodorod v metallakh. T. 2. Prikladnye aspekty*. Moscow: Mir, 1981.).
9. Lewis F.A. The Palladium-Hydrogen System. *Platinum Metals Rev.* 1982, vol. 26, no. 1, pp. 20–27.
10. Daw M.S., Baskes M.I. Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals. *Phys. Rev. B*. 1984, vol. 29, no. 12, pp. 6443–6453.
11. Kulabukhova N.A., Poletaev G.M. Molecular dynamic study of sorption properties of spot defects in relation to hydrogen in Pd and Ni. *Khimicheskaya fizika i mezoskopiya*. 2013, vol. 15, no. 2, pp. 225–229. (In Russ.).
12. Kulabukhova N.A., Poletaev G.M., Starostenkov M.D. Interaction of hydrogen atom with edge dislocation in Pd and Ni. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya*. 2014, vol. 11, no. 1, pp. 99–104. (In Russ.).
13. Cleri F., Rosato V. Tight-binding potentials for transition metals and alloys. *Physical Review B*. 1993, vol. 48, no. 1, pp. 22–33.
14. Poletaev G.M., Starostenkov M.D., Dmitriev S.V. Interatomic potentials in the systems Pd-H and Ni-H. *Materials Physics and Mechanics*. 2016, vol. 27, no. 1, pp. 53–59.
15. Kulabukhova N.A., Poletaev G.M., Starostenkov M.D., Kulagina V.V., Potekaev A.I. A molecular dynamics study of hydrogen-atom diffusion in fcc-metals. *Russian Physics Journal*. 2012, vol. 54, no. 12, pp. 1394–1399.
16. Kashlev Yu.A. Three regimes of diffusion migration of hydrogen atoms in metals. *Theoretical and Mathematical Physics*. 2005, vol. 145, pp. 1590–1603.
17. Tovbin Yu.K., Votyakov E.V. Evaluation of the influence of dissolved hydrogen on mechanical properties of palladium. *Physics of the Solid State*. 2000, vol. 42, pp. 1192–1195.
18. Katagiri M., Onodera H. Molecular dynamics simulation of hydrogen-induced amorphization: softening effect by incorporation of hydrogen. *Materials Transactions*. 1999, vol. 40, no. 11, pp. 1274–1280.
19. Larikov L.N., Isaichev V.I. *Diffuziya v metallakh i splavakh* [Diffusion in metals and alloys]. Kiev: Naukova dumka, 1987, 511 p. (In Russ.).
20. Tanaka K., Atsumi T., Yamada M. An internal friction peak due to hydrogen-dislocation interaction in nickel. *Journal de physique*. 1981, vol. 42, no. 10, pp. 139–144.

Acknowledgements. The work was financially supported by RFBR within scientific project no. 16-48-190182 p_a.

Information about the authors:

G.M. Poletaev, Dr. Sci. (Phys.-math.), Professor, Head of the Chair of Advanced Mathematics and Mathematical Modeling (gmpoletaev@mail.ru)

I.V. Zorya, Cand. Sci. (Eng.), Director of the Institute of Architecture and Construction

N.A. Kulabukhova, Cand. Sci. (Phys.-math.), Doctoral (natalya_domaeva@mail.ru)

D.V. Novoselova, Cand. Sci. (Phys.-math.), Doctoral of the Chair of Advanced Mathematics and Mathematical Modeling

M.D. Starostenkov, Dr. Sci. (Phys.-math.), Professor, Head of the Chair of Physics (genphys@mail.ru)

Received January 30, 2017