

**ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ  
ПРОБЛЕМЫ  
СОВРЕМЕННОГО  
МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ**

**Научный журнал**  
Издается с января 2004 г.

**Том 23**

**Март 2026 г.**

**№ 1**

# Фундаментальные проблемы современного материаловедения

## том 23 №1 2026 г.

Международный специализированный научный журнал  
Выходит ежеквартально  
Издается с января 2004 года

---

### Учредитель:

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова»

### Соучредители:

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Алтайский государственный педагогический университет»

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Сибирский государственный индустриальный университет»

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Томский государственный архитектурно-строительный университет»

---

### Издатель:

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова»

**Адрес издателя:** 656038, Алтайский край, г. Барнаул, пр-т Ленина, д. 46

**Главный редактор:** д.ф.-м.н., профессор Старостенков М.Д.

Тел.: +7 (385) 229-08-52 Факс: +7 (385) 236-78-64

E-mail: genphys@mail.ru

**Зам. главного редактора (ответственный за выпуск):** д.т.н., профессор Гурьев А.М.

Тел.: +7 (385) 229-08-63 Факс: +7 (385) 236-78-64

E-mail: gurievam@mail.ru

**Зам. главного редактора (ответственный за online выпуск):** д.ф.-м.н., доцент Бебихов Ю.В.

Тел.: +7 (385) 229-08-52 Факс: +7 (385) 236-78-64

E-mail: bebikhov.yura@mail.ru

**Технический редактор:** к.ф.-м.н., доцент Семёнова М.Н.

Тел.: +7 (385) 229-08-52 Факс: +7 (385) 236-78-64

E-mail: mariya\_semyonova86@mail.ru

Журнал включен в Перечень ВАК ведущих российских рецензируемых научных журналов и изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание ученых степеней доктора и кандидата наук (редакция от 01.02.2022 г.).

Журнал включен в каталог периодических изданий Ульрих  от 18.02.2015 г., в перечень журналов, вошедших в ядро РИНЦ и в список 650 российских журналов, вошедших в Russian Science Citation Index (RSCI), представленный на платформе Web of Science.

Журнал зарегистрирован в Федеральной службе по надзору в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций.

**Регистрационный номер:** ПИ № ФС77-75026 от 01.02.2019 г.

### Информация о подписке:

«Фундаментальные проблемы современного материаловедения» выходит раз в квартал. Индекс в каталоге ООО «Урал-Пресс» – 31038.

Цена годовой подписки через редакцию: 1600 руб. (400 руб. за номер).

**Адрес редакции:** 678170, Республика Саха (Якутия), г. Мирный, ул. Ойунского, д. 14

Тел./факс 8 (41136) 4-90-00 (доб. 137)

E-mail: genphys@mail.ru

**Адрес в Internet:** <https://ojs.altstu.ru/index.php/fpsm>

**Редакционная коллегия:**

**Старостенков М.Д.** (д.ф.-м.н., профессор, главный научный сотрудник АлтГТУ, г. Барнаул, Россия)

**Громов В.Е.** (д.ф.-м.н., профессор, зав. кафедрой физики СибГИУ, г. Новокузнецк, Россия)

**Гурьев А.М.** (д.т.н., профессор, зав. кафедрой начертательной геометрии и графики АлтГТУ, г. Барнаул, Россия)

**Иванов С.Г.** (д.т.н., ведущий научный сотрудник АлтГТУ, г. Барнаул, Россия)

**Кашенко М.П.** (д.ф.-м.н., профессор, зав. кафедрой общей физики УГЛТУ, г. Екатеринбург, Россия)

**Кхаре А.** (профессор, Индийский институт науки образования и исследований, г. Пуна, Индия)

**Мулюков Р.Р.** (член корр. РАН, д.ф.-м.н., профессор, директор ИПСМ РАН, г. Уфа, Россия)

**Мэй Шунчи** (профессор, декан УТУ, г. Ухань, Китай)

**Плотников В.А.** (д.ф.-м.н., профессор, зав. кафедрой общей и экспериментальной физики АлтГУ, г. Барнаул, Россия)

**Потекаев А.И.** (д.ф.-м.н., профессор, директор СФТИ, главный редактор журнала «Известия вузов. Физика», г. Томск, Россия)

**Пышнограй Г.В.** (д.ф.-м.н., профессор АлтГТУ, г. Барнаул, Россия)

**Рубаник В.В.** (д.т.н., член-корреспондент Национальной академии наук Беларуси, директор ГНУ "ИТА НАН Беларуси", г. Витебск, Беларусь)

**Старенченко В.А.** (д.ф.-м.н., профессор, декан общеобразовательного факультета ТГАСУ, г. Томск, Россия)

**Семёнов А.С.** (д.ф.-м.н., старший научный сотрудник лаборатории физики твердого тела ИФМК УФИЦ РАН, г. Уфа, Россия)

**Бebихов Ю.В.** (д.ф.-м.н., доцент, зав. кафедрой электроэнергетики и автоматизации промышленного производства Политехнического института (филиал) Северо-Восточного федерального университета им. М.К. Аммосова в г. Мирном, Россия)

**Лыгденов Б.Д.** (д.т.н., профессор ВСГУТУ, г. Улан-Удэ, Россия)

**Дмитриев С.В.** (д.ф.-м.н., профессор, зав. лабораторией физики твердого тела ИФМК УФИЦ РАН, г. Уфа, Россия)

**Атучин В.В.** (к.ф.-м.н., доцент, руководитель лаборатории «Оптические материалы и структуры» ИФП СО РАН, г. Новосибирск, Россия)

# **Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedenia (Basic Problems of Material Science (BPMS) Vol. 23 No.1 (2026))**

International specialized scientific journal  
Issued quarterly  
Published since January 2004

---

## **Founders:**

Federal State Budget Educational Institution of Higher Education «Polzunov Altai State Technical University»  
Federal State Budget Educational Institution of Higher Education «Altai State Pedagogical University»  
Federal State Budget Educational Institution of Higher Education «Siberian State Industrial University»  
Federal State Budget Educational Institution of Higher Education «Tomsk State University of Architecture and Building»

---

## **Publisher:**

Federal State Budget Educational Institution of Higher Education «Polzunov Altai State Technical University»  
Lenin Pr., 46, Barnaul, 656038, Russia

## **Editor in chief**

**PhD, Hab., Professor Starostenkov M.D.**

Tel.: +7 (385) 229-08-52 Fax: +7 (385) 236-78-64

E-mail: genphys@mail.ru

## **Sub-Editors**

**PhD, Hab., Professor Guriev A.M.**

Тел.: +7 (385) 229-08-63 Fax: +7 (385) 236-78-64

E-mail: guriavam@mail.ru

**PhD, Hab. Bebikhov Yu.V.**

Тел.: +7 (385) 229-08-52 Fax: +7 (385) 236-78-64

E-mail: bebikhov.yura@mail.ru

## **Editorial board:**

**Starostenkov M.D.**, PhD, Hab., Professor, Chief Researcher, I.I. Polzunov Altai State Technical University, Barnaul, Russia

**Gromov V.E.**, PhD, Hab., Professor, Head of Department, Siberian State Industrial University, Novokuznetsk, Russia

**Guriev A.M.**, PhD, Hab., Professor, Head of Department, I.I. Polzunov Altai State Technical University, Barnaul, Russia

**Ivanov S.G.**, PhD, Hab., Chief Researcher, I.I. Polzunov Altai State Technical University, Barnaul, Russia

**Kaschenko M.P.**, PhD, Hab., Professor, Head of Department, Ural State Forest Engineering University, Yekaterinburg, Russia

**Khare A.**, PhD, Hab., Professor, Indian Institute of Science Education and Research, Pune, India

**Mulyukov R.R.**, member corr. of RAS, PhD, Hab., Professor, director, Institute for Metals Superplasticity Problems of RAS, Ufa, Russia

**Mei Shunqi**, Professor, Dean, Wuhan Textile University, Wuhan, China

**Plotnikov V.A.**, PhD, Hab., Professor, Head of Department, Altai State University, Barnaul, Russia

**Potekaev A.I.**, PhD, Hab., Professor, Director, V.D. Kuznetsov's Siberian Physical-Technical Institute, Tomsk, Russia

**Pyshnograev G.V.**, PhD, Hab., Professor, I.I. Polzunov Altai State Technical University, Barnaul, Russia

**Rubanik V.V.**, PhD, Hab., Corresponding Member of the National Academy of Sciences of Belarus, director of the State Scientific Institution «Institute of Technical Acoustics National Academy of Sciences of Belarus», Vitebsk, Republic of Belarus

**Starenchenko V.A.**, PhD, Hab., Professor, Dean, Tomsk State University of Architecture and Building, Tomsk, Russia

**Semenov A.S.**, PhD, Hab., Senior Researcher, Laboratory of Solid State Physics, Institute of Physics of Molecules and Crystals, Ufa Federal Research Center of the Russian Academy of Sciences, Ufa, Russia

**Bebikhov Yu.V.**, PhD, Hab., Head of Department, Mimy Polytechnic Institute (branch) of North-Eastern Federal University named after M. K. Ammosov, Russia

**Lygdenov B.D.**, PhD, Hab., Professor, East Siberia State University of Technology and Management, Ulan-Ude, Russia

**Dmitriev S.V.**, PhD, Hab., Head of Laboratory of Solid State Physics, Institute of Physics of Molecules and Crystals, Ufa Federal Research Center of the Russian Academy of Sciences, Ufa, Russia

**Atuchin V.V.**, PhD, Hab., Institute of Semiconductor Physics SB of RAS, Novosibirsk, Russia

## **Editorial**

Mirny Polytechnic Institute (branch) Ammosov North-Eastern Federal University,

Oyunsky Str., 14, Mirny, Republic of Sakha (Yakutia), 678170, Russia

<https://ojs.altstu.ru/index.php/fpsm>, e-mail: genphys@mail.ru

**PhD, Hab. Semenova M.N.**

Tel.: +7 (41136) 4-90-00 Fax: +7 (41136) 4-90-00, E-mail: mariya\_semyonova86@mail.ru



## СОДЕРЖАНИЕ

### РАЗДЕЛ 1. ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

**Винс В.Г., Елисеев А.П.**

Образование и отжиг радиационных повреждений в облученных нейтронами природных алмазах типа Ia.....9

**Баклушина И.В., Громов В.Е., Иванов Ю.Ф., Литовченко И.Ю., Гусева Т.П., Невский С.А.**

Электронно-микроскопический анализ структуры и свойств переходного слоя «плазменное покрытие быстрорежущей стали-подложка» .....24

**Гордиенко А.Б.**

Метод Хартри-Фока для кристаллов с базисом псевдо-атомных орбиталей .....33

**Давлетишина А.Д., Якишибаев Р.А.**

Зонная структура и энергия связи в соединениях  $Cu_2X$  и  $agcux$  ( $X = S, Se, Te$ ).....43

**Коновалов С.В., Дробышев В.К., Панченко И.А., Бессонов Д.А.**

Изучение структуры неэквивалентных сплавов системы  $CoCrNi$ , легированных Nb и Mn .....51

**Оганесян Е.С., Маслова О.А., Безносюк С.А.**

Исследование халькогенной связи в структуре селенита натрия  $Na_2SeO_3$ .....60

**Панова В.С., Панченко И.А., Ковалов С.В., Запольская Е.М.**

Прогнозирование свойств высокоэнтропийных сплавов с использованием нейронных сетей.....66

**Бассареев А.А., Крылова К.А.**

Водород-сорбционная ёмкость чешуйки скотированного графена с частицами лития.....73

**Медведев Н.Н., Старостенков М.Д., Дмитриев С.В., Захаров П.В.**

Энергообмен внутри сверхзвуковых краудсион-фокусонных пар в 3D компьютерной модели кристалла  $Cu$ .....80

**Нарсеев А.С., Янковская У.И., Маркидонов А.В., Старостенков М.Д., Захаров П.В.**

Механические свойства  $Ti_3Al$ , армированного фуллереном  $C_{60}$ , при одноосной деформации растяжения: молекулярно-динамическое моделирование.....88

**Наумова Д.М., Наумов Е.К., Холмуродов Д.С., Дмитриев С.В.**

О локализации энергии в квадратной решетке  $\beta$ -ФПУЦ при столкновении движущихся дискретных бризеров.....96

---

*Семёнова М.Н., Бебихов Ю.В., Татаринов В.П., Татаринов П.С., Якушев И.А., Абдуллина Д.У., Семёнов А.С., Дмитриев С.В.*

Обзор технологий и первых результатов в области электроимпульсной обработки металлов и сплавов на основе эффекта электропластичности.....106

## **РАЗДЕЛ 2. МЕТАЛЛОВЕДЕНИЕ И ТЕРМИЧЕСКАЯ ОБРАБОТКА МЕТАЛЛОВ И СПЛАВОВ**

*Яшарова Е.В., Гангало А.Н., Суровицкий В.Д., Бурховецкий В.В.*

Повышение сдвигового напряжения разрушения субмикроструктурной меди методом гидроэкструзии.....124

## CONTENTS

### SECTION 1. CONDENSED MATTER PHYSICS

**Vins V.G., Eliseev A.P.**

Formation and annealing of radiation damage in neutron-irradiated natural type Ia diamonds.....9

**Baklushina I.V., Gromov V.E., Ivanov Y.F., Litovchenko I.Yu., Guseva T.P., Nevskii S.A.**

Analysis of the structure and properties of the interface "plasma coating of high-speed steel - substrate".....24

**Gordienko A.B.**

Hartree-Fock method for crystals within the basis of pseudo-atomic orbitals.....33

**Davletshina A.D., Yakshibaev R.A.**

Band structure and binding energy in  $\text{Cu}_2\text{X}$  and  $\text{AgCuX}$  ( $\text{X} = \text{S}, \text{Se}, \text{Te}$ ) compounds.....43

**Konovalov S.V., Drobyshev V.K., Panchenko I.A., Bessonov D.A.**

Study of the structure of non-equiatomic alloys of the  $\text{CoCrNi}$  system alloyed with Nb and Mn.....51

**Oganesyan E.S., Maslova O.A., Beznosyuk S.A.**

Investigation of chalcogen bonding in the structure of sodium selenite  $\text{Na}_2\text{SeO}_3$ .....60

**Panova V.S., Panchenko I.A., Konovalov S.V., Zapolskaya E.M.**

Prediction of properties of high-entropy alloys using neural networks.....66

**Bassareev A.A., Krylova K.A.**

Hydrogen sorption capacity of crumpled graphene flakes with lithium.....73

**Medvedev N.N., Starostenkov M.D., Dmitriev S.V., Zakharov P.V.**

Energy exchange inside supersonic crowdin-focuson pairs in 3D computer model of Cu cristal.....80

**Narseev A.S., Yankovskaya U.I., Markidonov A.V., Starostenkov M.D., Zakharov P.V.**

Mechanical properties of  $\text{Ti}_3\text{Al}$  reinforced with  $\text{C}_{60}$  fullerene under uniaxial tensile deformation: molecular dynamics simulation.....88

**Naumova D.M., Naumov E.K., Kholmurodov D.S., Dmitriev S.V.**

On energy localization in the  $\beta$ -FPUT square lattice during collisions of moving discrete breathers.....96

***Semenova M.N., Bebikhov Y.V., Tatarinov V.P., Tatarinov P.S., Yakushev I.A., Abdullina D.U.,  
Semenov A.S., Dmitriev S.V.***

Review of technology and first results in the field of electropulsed treatment of metals and alloys based  
on the electroplasticity effect.....106

## **SECTION 2. METAL SCIENCE AND HEAT TREATMENT OF METALS AND ALLOYS**

***Iasharova E.V., Gangalo A.N., Surovitsky V.D., Burkhovetskii V.V.***

Fracture shear stress increasing of ultra-fine grained copper by hydrostatic extrusion .....124

## РАЗДЕЛ 1. ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

Научная статья

1.3.8. Физика конденсированного состояния (физико-математические науки)

УДК 549.211:666.233:535.376

doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2026.01.001

### ОБРАЗОВАНИЕ И ОТЖИГ РАДИАЦИОННЫХ ПОВРЕЖДЕНИЙ В ОБЛУЧЕННЫХ НЕЙТРОНАМИ ПРИРОДНЫХ АЛМАЗАХ ТИПА Ia

Виктор Генрихович Винс<sup>1</sup>, Александр Павлович Елисеев<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Общество с ограниченной ответственностью «ВЕЛМАН», ул. Русская, 43, Новосибирск, 630058, Россия

<sup>2</sup> Институт Геологии и Минералогии им. В.С.Соболева СО РАН, пр. академика Коптюга, 3, Новосибирск, 630090, Россия

<sup>1</sup> vgvins@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-0773-0810>

<sup>2</sup> eliseev@igm.ncs.ru, <https://orcid.org/0000-0002-0509-2122>

**Аннотация.** Методами оптической спектроскопии исследована коллекция природных алмазов типа Ia подвергнутых облучению нейтронами в комбинации с последующим отжигом в вакууме. Определены доминирующие в структуре алмазов атомные дефекты (центры) в зависимости от дозы облучения и температуры последующего отжига. Определено, что среда высокого кристаллического качества с максимально интенсивной НЗ - люминесценцией и минимальным содержанием других оптически активных дефектов может быть получена из алмаза чистого типа IaA (с Na  $\approx$  200 ppm) облучением нейтронами дозой  $D_N = 0.2 \times 10^{17} \text{ см}^{-2}$  в комбинации с последующим высокотемпературным отжигом в вакууме. Найдено пороговое значение произведения дозы облучения на суммарное содержание азота в кристалле, выше которого, при отжиге 1500° С за счет последовательной трансформации дефектов, в кристаллической решетке появляется около 4 ppm C-дефектов, составляющее  $380 \cdot 10^{17} \text{ ppm} \times \text{нейтронов/см}^2$ . Характерными для облучения нейтронами являются: а) система N1g ( $\sim 4444 \text{ см}^{-1}$  или  $\sim 2250 \text{ нм}$ ); б) дуплет узких линий поглощения (80К) при 638/643 нм; и в) система в ближнем ИК диапазоне с линией при 913 нм.

**Ключевые слова:** облучение нейтронами, высокотемпературный отжиг, природные алмазы типа Ia, оптически активные дефекты (центры)

**Благодарности:** Исследование выполнено по государственному заданию ИГМ СО РАН № 122041400157-9

---

**Для цитирования:** Винс В.Г., Елисеев А.П. Образование и отжиг радиационных повреждений в облученных нейтронами природных алмазах типа Ia // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2026. Т. 23, № 1. С. 9-23. doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2026.01.001.

---

Original article

## FORMATION AND ANNEALING OF RADIATION DAMAGE IN NEUTRON-IRRADIATED NATURAL TYPE Ia DIAMONDS

Viktor G. Vins<sup>1</sup>, Alexander P. Eliseev<sup>2</sup>

<sup>1</sup> LLC VELMAN, 43 Russkaya St., Novosibirsk, 630058, Russia

<sup>2</sup> Sobolev Institute of Geology and Mineralogy, Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences, 3 Academician Koptyug Ave., Novosibirsk, 630090, Russia

<sup>1</sup> vgvins@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-0773-0810>

<sup>2</sup> eliseev@igm.ncs.ru, <https://orcid.org/0000-0002-0509-2122>

**Abstract.** Optical spectroscopy was used to study a collection of natural type Ia diamonds subjected to neutron irradiation followed by vacuum annealing. The dominant atomic defects (centers) in the diamond structure were determined as functions of the irradiation dose and subsequent annealing temperature. It was determined that a high-quality crystalline medium with the most intense H3 luminescence and a minimum content of other optically active defects can be obtained from pure type IaA diamond (with Na  $\approx$  200 ppm) by neutron irradiation with a dose of  $D_N = 0.2 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2}$  in combination with subsequent high-temperature annealing in vacuum. A threshold value of the product of the irradiation dose and the total nitrogen content in the crystal was found, above which, upon annealing at 1500° C, due to sequential transformation of defects, about 4 ppm of C defects appear in the crystal lattice, amounting to  $380 \cdot 10^{17} \text{ ppm} \times \text{neutrons/cm}^2$ . The following are characteristic for neutron irradiation: a) the H1g system ( $\sim 4444 \text{ cm}^{-1}$  or  $\sim 2250 \text{ nm}$ ); b) a doublet of narrow absorption lines (80K) at 638/643 nm; and c) a system in the near-IR range with a line at 913 nm.

**Keywords:** neutron irradiation, high-temperature annealing, type Ia natural diamonds, optically active defects (centers)

**Acknowledgments:** The study was carried out under a state assignment from the Institute of Geology and Mineralogy SB RAS No. 122041400157-9

**For citation:** Vins V.G., Eliseev A.P (2026). Formation and annealing of radiation damage in neutron-irradiated type Ia natural diamonds. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 23(1), 9-23. (In Russ.). doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2026.01.001.

### Введение

Алмаз высоко ценится за свои экстремальные физические свойства, такие как высокая теплопроводность, исключительная твердость, высокая радиационная стойкость и широкая запрещенная зона. Недавние достижения в материаловедении дополнительно позиционируют его как ключевую платформу для новых технологий [1,2]. От  $NV^-$  - алмазных лазеров и квантовых сенсоров [3-7], от высокочастотной силовой электроники до квантовых фотонных устройств и излучателей одиночных фотонов [8], технологический потенциал алмаза заключается не только в его кристаллической структуре, но и в его способности содержать богатый спектр оптически - и электронно - активных дефектов [9-11]. Алмаз является и безальтернативным материалом для элементов рентгенов-

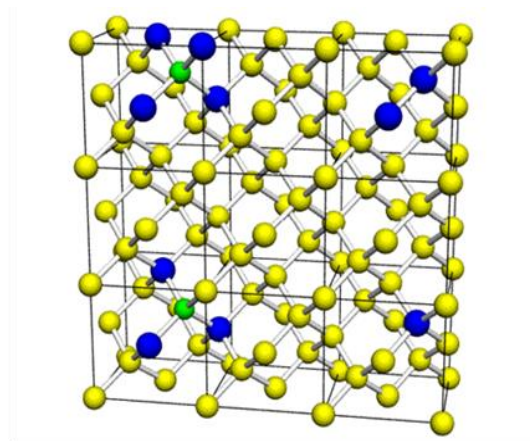
ской оптики - поскольку увеличение средней мощности и яркости рентгеновских пучков источников синхротронного излучения 4-го поколения и лазеров на свободных электронах приводит к экстремальным тепловым нагрузкам на эти элементы, ограничивая возможность использования в дифракционной кристаллооптике традиционных материалов, таких как кремний и германий [12]. Поэтому исследование радиационных повреждений, создаваемых в алмазах ионизирующими излучениями, помимо фундаментального, имеет и большое практическое значение. Конечно, в различных «хай-тек» и «ультра хай-тек» устройствах в первую очередь планируется использование лабораторно-выращенных алмазов. Однако нужно иметь в виду, что такие монокристаллы всегда содержат дефект С: атом азота в замещающем положении в нейтральном зарядовом состоянии, а

также производные от дефекта С: в НРНТ монокристаллах это азотно-вакансионные центры, а в CVD – центры NVH [13,14]. Дело в том, что одиночный азот в процессе НРНТ или CVD синтеза, и/или термобарической обработки, даже при самых высоких допустимых температурах, диффундируя по кристаллу, не успевает полностью трансформироваться в агрегаты азота. То есть монокристаллы лабораторно-выращенного алмаза, всегда содержат азот, в основном в виде С-дефекта. Но присутствие в структуре даже следовых количеств дефекта С может негативно сказываться на микроэлектронных и квантово-сенсорных свойствах алмаза. В отличие от лабораторно-выращенных, природные алмазы формировались в мантии Земли под воздействием сравнительно невысоких (менее 1400°C) температур, но зато в течение миллионов лет, за которые произошла практически полная трансформация дефектов С в более сложные А- и В1-дефекты. Это означает, что в перспективных для квантово-сенсорных и лазерных исследованиях дефекта N3 в природном алмазе [15,16], негативное влияние дефекта С и производных от него центров будет минимизировано. В связи с чем, исследования образования и отжига радиационных повреждений в облученных нейтронами природных алмазах типа Ia представляются весьма актуальными.

### Объект и методы исследований

Общепринятая мировая система классификации алмазов основывается на наличии или отсутствии примеси азота в них. В соответствии с этим критерием выделяют два типа алмазов: I - азотные и II - безазотные (малоазотные). Тип I является наиболее распространенным среди природных алмазов. Для него характерно присутствие азота в качестве основной примеси, обычно в количестве до 0,1%. В свою очередь тип I подразделяется на два подтипа, а и b, в зависимости от положения азота в структуре алмаза. В алмазах типа Ia возможны две конфигурации атомов азота: два атома азота, находящиеся в непосредственной близости друг от друга (так называемые А-дефекты) и четыре атома азота, окружающие вакансию (В1-дефекты). В соответствии с этим выделяют алмазы типов IaA и IaB1. Если же атомы азота образуют отдельные узлы в решетке, заменяя углерод, и находятся изолированно друг от

друга (т.н. дефект С, или донорный азот), то тип алмазов называется Ib. Азотные С-, А-, и В1 – дефекты относятся к основным, которые могут присутствовать в кристаллах самостоятельно, без сопровождения других дефектов (рис.1).

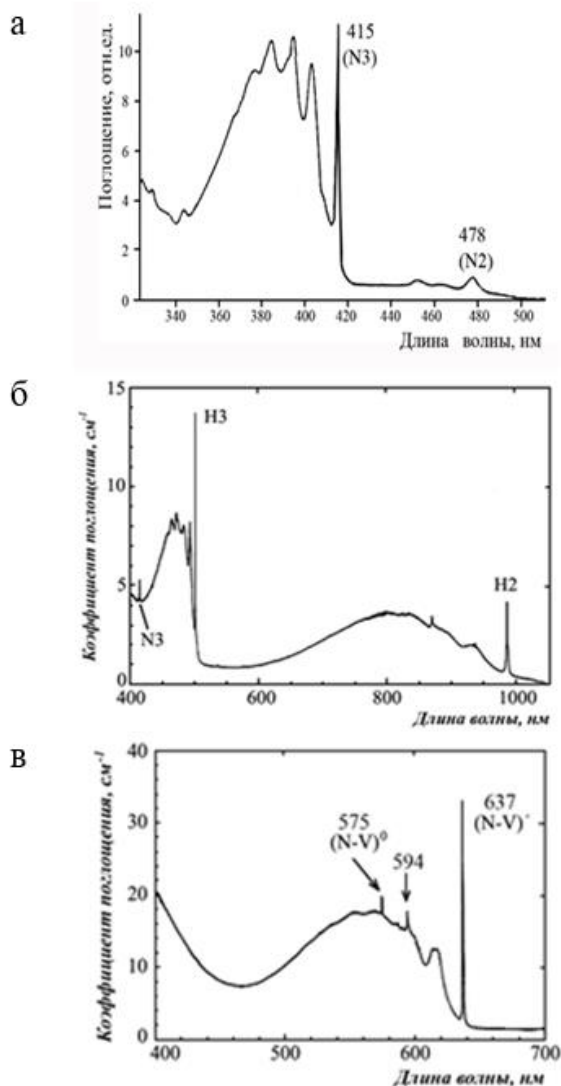


**Рис.1.** Фрагмент кристаллической структуры алмаза, содержащей основные примесные С-, А-, В1-дефекты. Атомы углерода изображены шарами желтого цвета, атомы азота – синего цвета, вакансии – зеленого. С – дефект – изолированный атом азота в позиции замещения; А – дефект – два атома азота в соседних узлах решетки; В1-дефект – четыре замещающих атома азота в первой координационной сфере вакансии. Здесь же изображен N3-дефект – три замещающих атома азота с вакансией, образующие треугольник в плоскости {111}

**Fig. 1.** Fragment of the diamond crystal structure containing the main impurity C-, A-, B1- defects. Carbon atoms are shown as yellow spheres, nitrogen atoms are blue, and vacancies are green. The C defect is an isolated nitrogen atom in a substitution position; the A defect is two nitrogen atoms in adjacent lattice sites; the B1- defect is four substitutional nitrogen atoms in the first coordination sphere of a vacancy. Also shown here is the N3- defect - three substitutional nitrogen atoms with a vacancy, forming a triangle in the {111} plane.

Кроме основных, в алмазе есть и дополнительные дефекты, которые присутствуют только в сочетании с основными дефектами. Наиболее распространёнными из них является дефект B2 - пластинчатая сегрегация в плоскости {100}, содержащаяся только в кристаллах с А-, и В1-дефектами. Классическая азотная модель этого дефекта сменилась сначала моделью планарного дефекта, состоящего из интерстиционных атомов углерода с низким содер-

жанием азота (5-10% от общего), а затем аналогичной моделью без участия атомов азота.



**Рис.2.** Спектры поглощения основных азотно-вакансионных дефектов - центров окраски алмаза: а) дефект N3; б) дефекты H3/H2; в) дефекты NV<sup>-</sup>/NV<sup>°</sup>.

**Fig. 2.** Absorption spectra of the main nitrogen-vacancy defects - diamond color centers: a) N3 defect; b) H3/H2 defects; c) NV<sup>-</sup>/NV<sup>°</sup> defects.

Помимо вышеперечисленных, в структуре алмазов встречаются азотно-вакансионные дефекты, имеющие поглощение в видимом спектральном диапазоне и, таким образом, являющимися центрами окраски. Наиболее известный и распространенный из них дефект N3 - ответственный за систему N3 с бесфонной линией (БФЛ) 415,2 нм во многих оптических спектрах природных алмазов (рис.2а). По со-

вокупности данных дефекту приписывается структура из трех атомов азота окружающих вакансию (рис.1). В синтетических алмазах типа Ib эти центры могут быть получены после высокотемпературного отжига при T выше 1700°C. "Визитная карточка" дефекта N3 - полоса с БФЛ 415,2 нм в спектрах поглощения (рис.2а) и зеркально симметричных им спектрах фотолюминесценции. Алмазы с большим содержанием N3 - дефектов окрашены в желтый цвет.

**Дефекты H3/H2.** По современным представлениям, являются А - дефектами, захватившими вакансию, в нейтральном и отрицательном зарядовом состоянии, соответственно. С дефектом H3 связывается зеленовато-желтая окраска алмазов и их желтовато-зеленая фотолюминесценция в системе с БФЛ 503,2 нм. Когда конфигурация N-V-N находится вблизи атома донорного азота (дефекта С), она приобретает отрицательный заряд и возникает H2-дефект с полосой поглощения с БФЛ при 986,3 нм (рис.2б).

**Дефекты NV.** Вакансия, захваченная С - дефектом, образует дефект NV. Эти дефекты могут существовать в отрицательном зарядовом состоянии, и тогда они являются оптическим центром NV<sup>-</sup> с БФЛ при 637,2 нм, или в нейтральном состоянии, и тогда они становятся оптическим центром NV<sup>°</sup> с БФЛ при 575,0 нм (рис.2в). Зарядовое состояние NV определяется его близостью к донору электронов - одиночному атому азота (С-дефекту).

**Дефекты H4/H5.** Дефект H4 образуется при захвате вакансии В1 - дефектом. Захватив вакансию, В1-дефекты трансформируются так, что атомы азота декорируют первую координационную сферу дивакансии. Дефекты H4 проявляются в спектрах поглощения и люминесценции системой с БФЛ 495,8 нм. Те из H4 - дефектов, которые находятся вблизи с атомам донорного азота (С-дефектами), с приобретением пятого валентного электрона С-дефекта переходят в отрицательное зарядовое состояние, образуя дефекты H5 [17]. Спектральным проявлением дефекта H5 является система поглощения с БФЛ 805,2 нм, интенсивность которой коррелирует с интенсивностью линии 495,8 нм.

Радиационные нарушения в решетке природного алмаза сопровождаются появлением в оптических спектрах систем GR1 (пара БФЛ при 740,9 и 744,5 нм) и ND1 (БФЛ при 393,5



нм), обусловленных одиночными изолированными вакансиями в нейтральном и отрицательном зарядовых состояниях, соответственно. Также, сразу после любых радиационных воздействий в алмазах всех типов появляется система 3Н с БФЛ 503.5нм, связываемая с проявлением атома углерода в межузельном положении (т.н. собственная интерстиция).

В настоящей работе комплексом методов оптической спектроскопии исследованы радиационные повреждения, образующиеся в кристаллах природного алмаза типа Ia при облучении нейтронами. Облучение происходило в нейтронном канале с воздушным теплообменником активной зоны ядерного реактора, с плотностью потока нейтронов выше  $10^{13}$  нейтронов/сек $\times$ см<sup>2</sup>. Кристаллы были разделены на три группы, по 5 образцов с одинаковыми спектральными характеристиками в каждой группе, что позволило анализировать результаты облучения и отжига, как выполненные на одном образце, облученном все возрастающими дозами нейтронов. Кристаллы были подобраны таким образом, чтобы в каждой группе было по одному образцу, близкому к чистым подтипам IaA и IaB1 и по три образца смешанного подтипа IaAB1. Суммарное содержание азота в дефектах A и B1 составляло от 200 до 400 ppm. Условия облучения алмазов всех трех групп: значения интегрального потока нейтронов и потока нейтронов с  $E_N > 0,5$  МэВ, приведены в Таблице 1. В дальнейшем описании, под флюенсом нейтронов, будут пониматься не интегральные потоки, а дозы «надепловых» нейтронов с  $E_N > 0,5$  МэВ составлявшие в наших исследованиях от  $0,20 \times 10^{17}$  до  $2,2 \times 10^{17}$  см<sup>-2</sup>.

**Таблица 1.** Условия облучения - потоки нейтронов  $\Psi_N$  (нейтронов/см<sup>2</sup>) – для разных групп исследованных образцов

**Table 1.** Irradiation conditions - neutron fluxes  $\Psi_N$  (neutrons/cm<sup>2</sup>) - for different groups of studied samples

| Группа | Интегральный поток $\Psi_N$       | $\Psi_N (E > 0,5 \text{ МэВ})$     |
|--------|-----------------------------------|------------------------------------|
| 1      | $(1,14 \div 2,83) \times 10^{18}$ | $(0,20 \div 0,936) \times 10^{17}$ |
| 2      | $(2,96 \div 4,02) \times 10^{18}$ | $(0,95 \div 1,390) \times 10^{17}$ |
| 3      | $(4,1 \div 5,10) \times 10^{18}$  | $(1,42 \div 2,200) \times 10^{17}$ |

Последующий за радиационным воздействием отжиг алмазных пластинок осуществлялся в вакууме в диапазоне от 100 до 1500°C. Детальное описание вакуумной печи и методики

отжига дано в работе [18]. Используя в исследовании методы оптической спектроскопии и методики расчета содержания основных азотных A-, и B1- центров описаны в наших работах [19-21].

### Общие закономерности образования радиационных дефектов в алмазе при облучении быстрыми нейтронами

Поскольку нейтрон не имеет заряда, он производит радиационные нарушения только при прямом взаимодействии с ядром атома мишени. Быстрый нейтрон передает импульс ядру, с которым он сталкивается. Под понятием «быстрые» понимаются нейтроны, с энергией более 0,5 МэВ, способные создавать радиационные нарушения кристаллической структуры. Наиболее вероятным типом взаимодействия для таких нейтронов являются упругие столкновения, и энергия, передаваемая атому, лежит в пределах от нуля до максимальной величины  $T_m$ , определяемой следующим выражением:

$$T_m = 4M_N M_C E_N / (M_N + M_C)^2,$$

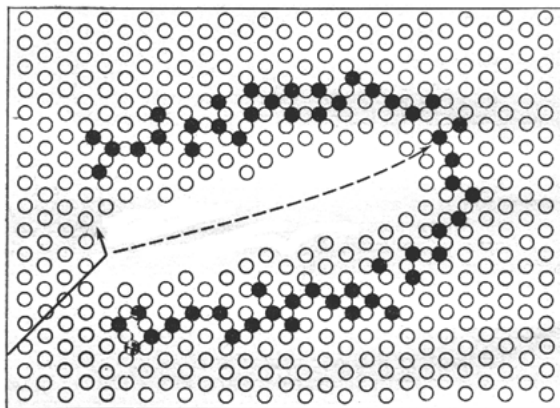
где  $M_N$  – масса нейтрона,  $E_N$  – энергия нейтрона,  $M_C$  – масса ядра атома углерода.

Расчет  $T_m$ , в диапазоне эффективных энергий нейтронов от 0.5 до 1 МэВ, что соответствует реальным условиям облучения наших образцов в ядерном реакторе, дает величины: для  $E_N = 1,0$  МэВ;  $T_m = 284$  кэВ. В случае наиболее распространенного предположения об изотропном характере рассеивания нейтронов, все значения энергии отдачи между 0 и  $T_m$  являются равновероятными, также как в случае столкновений твердых шаров. При этих условиях средняя энергия  $T_{ср}$ , передаваемая при одном столкновении равна:  $T_{ср} = T_m/2$ . Таким образом, выбитые из решетки алмаза атомы углерода получают среднюю энергию  $T_{ср}$  при энергии падающего нейтрона:

$$E_N = 1,0 \text{ МэВ}; T_{ср} = 140 \text{ кэВ};$$

Полученные значения  $T_{ср}$  на порядки больше средних значений энергии первично выбитых атомов при бомбардировке электронами с энергией 3 МэВ [17]. Соответственно, первично выбитые атомы, обладая такой огромной энергией, способны привести к дальнейшему смещению сотен атомов углерода. В результате, в кристаллической структуре алмаза, возникают так называемые «клинья смещения» - частично аморфизированных областей,

содержащих большое количество атомов. Приосевая, внутренняя часть этих клиньев обогащена вакансиями, а наружная – межузельными атомами (рис.3).



**Рис. 3.** Клин смещений, образовавшийся при взаимодействии быстрого нейтрона с кристаллом [22].

**Fig. 3.** Displacement wedge formed during the interaction of a fast neutron with a crystal [22].

Рассмотрим общие закономерности оптических спектров алмазов облученных нейтронами в зависимости от дозы облучения и температуры последующего отжига. При малых дозах облучения в видимом диапазоне спектра алмазов всех типов наблюдались системы GR1 и 3Н, обусловленные одиночными изолированными вакансиями в нейтральном зарядовом состоянии и интерстиционными центрами, соответственно. По мере увеличения дозы, кристаллы, вне зависимости от физического типа, темнели, их край прозрачности смещался в ИК-область. После облучения дозами выше  $1,5 \times 10^{17} \text{ см}^{-2}$  интенсивное, т.н. «серое», поглощение простиралось вплоть до однофононной области, частично налагая на примесное поглощение. В области поглощения, примыкающей к однофононной области, в алмазах всех типов появлялись линии при 1530, и на порядок меньшей интенсивности при 1570  $\text{см}^{-1}$ . В дополнение им, в кристаллах типа Ia регистрировалось слабое поглощение в линии 1450  $\text{см}^{-1}$ . Интенсивности всех трех линий возрастали линейно до дозы облучения  $1,0 \times 10^{17} \text{ см}^{-2}$ , затем интенсивности линий 1530 и 1570  $\text{см}^{-1}$  по-прежнему линейно возрастали в зависимости от дозы облучения, а поглощение в линии 1450  $\text{см}^{-1}$  насыщалось, оставаясь без изменений при больших дозах. Поведение линий позволяет

сделать вывод, что первые две линии связаны с проявлением первичных собственных радиационных дефектов: вакансий, интерстиций и их комплексов. Линия 1450  $\text{см}^{-1}$ , обозначаемая в литературе как система Н1а, по современным представлениям связывается с дефектом, содержащим два межузельных атома азота: межузельный расщепленный атом азота  $\langle 001 \rangle$  (дефект  $N_{2i}$ ) [23]. При последующем отжиге линии 1530 и 1570  $\text{см}^{-1}$  разрушались начиная с температуры 100° С, особенно быстро их интенсивность падала в интервале 250-400°С. Одновременно происходило «осветление» кристаллов – край прозрачности смещался в видимую область, существенно уменьшалось «серое» поглощение в ИК диапазоне. При температуре выше 250° С, начинался рост интенсивности линии 1450  $\text{см}^{-1}$  (система Н1а). Линия достигала своего максимума при 500° С и оставалась практически неизменной до 1200° С. Затем ее интенсивность монотонно уменьшалась и полностью отжигалась при 1500° С. В своем максимуме интенсивность линии линейно зависит от суммарного содержания азота в основных примесных дефектах А и В1. Эти результаты подтверждает модель дефекта, как двух азотных интерстиций. Действительно, образовавшиеся при облучении собственные интерстиции, при температурах отжига 250 - 400° С приобретают подвижность - мигрируя по кристаллу и встречая примесный азотный атом в регулярном положении, собственная интерстиция выдавливает его из узла решетки в межузельное положение:  $C_i + N_s \rightarrow C_s + N_i$ . Появление вблизи друг от друга двух межузельных атомов азота, приводит к образованию центра  $N_{2i}$ , сопровождающееся ростом поглощения в системе Н1а. Появление линии 1450  $\text{см}^{-1}$  сразу после облучения нейтронами не противоречит данной модели и указывает на то, что в образующихся клиньях смещения, содержащих сотни (или даже тысячи) атомов, в том числе присутствуют и атомы азота, причем часть из них находится в межузельном положении. То есть, после облучения нейтронами алмазов типов Ib и Ia в наружной части образовавшихся клиньев смещения, помимо регулярных атомов, вакансий, собственных интерстиций, пар Френкеля (вакансия – собственная интерстиция), присутствуют и азотные интерстиции. В таком кластере все составляющие находятся на разных расстояниях друг от друга и образуют набор разных структурных конфигураций друг с дру-

гом. Спектральным проявлением кластера, скорее всего, является интенсивное поглощение во всем диапазоне длин волн, а также линии 1530 и 1570  $\text{см}^{-1}$ . Кроме того, часть межузельных атомов азота участвуют в формировании центра  $N_{21}$ . При отжиге начинается разрушение кластера и восстановление кристаллической решетки. Очевидно, что разрушение кластера начинается с межузельных атомов, которые при повышении температуры занимают близлежащие более устойчивые позиции в структуре, для релаксации в которые требуется минимум энергии. Одновременно с этим аннигилируют пары Френкеля, компоненты которых находятся на расстояниях, близких к расстояниям без активационной аннигиляции. Эти трансформации приводят к снижению «серого» поглощения. Дальнейшее повышение температуры отжига приводит к интенсивному разрушению кластера, сопровождающемуся уменьшением линий 1530 и 1570  $\text{см}^{-1}$ , формированию новых дефектов, набор которых зависит от типа кристалла. В алмазах типов Ia и Ib, содержащих азотные центры, наряду с другими дефектами, формируется высокостабильный  $N_{21}$ -дефект с линией 1450  $\text{см}^{-1}$ , интенсивность поглощения в которой, как уже упоминалось, зависит: а) от суммарного содержания азота; б) флюенса нейтронов; и в)  $T/t$  – параметров последующего отжига. При дозе облучения  $2,2 \times 10^{17} \text{см}^{-2}$ , в кристаллах с содержанием азота  $\approx 200 \text{ ppm}$ , после отжига 800° C/120 минут, коэффициент поглощения в линии достигает 10  $\text{см}^{-1}$ . При этом в существенной мере отжигается «серое» поглощение и восстанавливается прозрачность кристаллов.

Таковы общие закономерности трансформации оптических спектров алмазов содержащих азотные центры при их облучении быстрыми нейтронами. Перейдем к более детальному рассмотрению особенностей оптических спектров облученных и отожженных алмазов типа Ia.

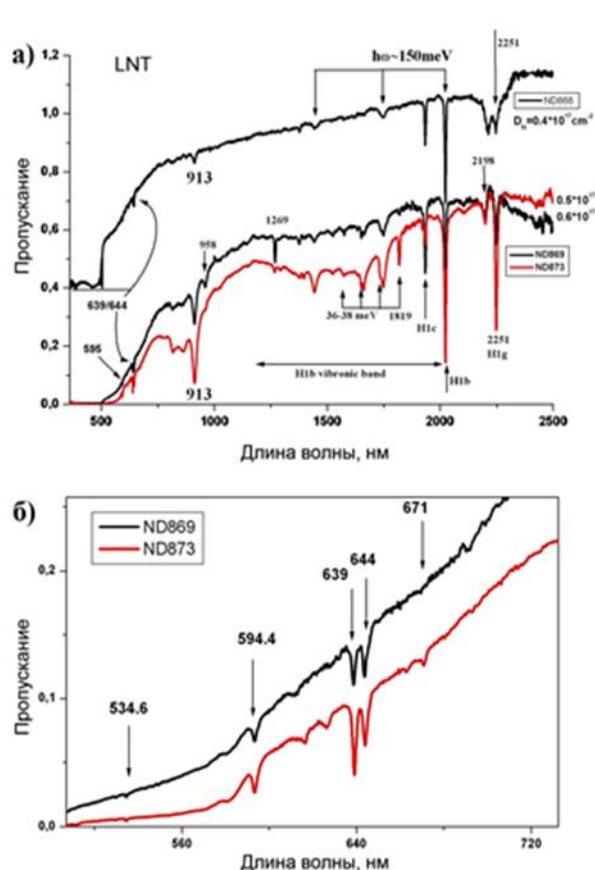
### Алмазы типа Ia

Спектр поглощения кристаллов, облученных дозой  $0,2 \times 10^{17} \text{см}^{-2}$  и отожженных (800° C/120 мин.), в видимом и ближнем ИК диапазоне определяется (рис.4) краем пропускания при 350 нм, доминирующей системой H3, и линиями меньшей интенсивности 594, 1077 нм. В ИК спектрах присутствуют системы

группы H1, наблюдавшиеся в алмазах типа Ia и после облучения высокоэнергетичными электронами [17]: а) узкая интенсивная линия при 1450  $\text{см}^{-1}$  (система H1a); б) производная от дефектов A система H1b (4941  $\text{см}^{-1}$  или 2024 нм) с интенсивностью не более 0,5  $\text{см}^{-1}$  для алмазов с поглощением центров A около 12  $\text{см}^{-1}$ ; в) производная от B1- дефектов система H1c (5170  $\text{см}^{-1}$  или 1934 нм) также с малой интенсивностью – менее 0,2  $\text{см}^{-1}$  для поглощения дефектов B1 около 2,5  $\text{см}^{-1}$ .

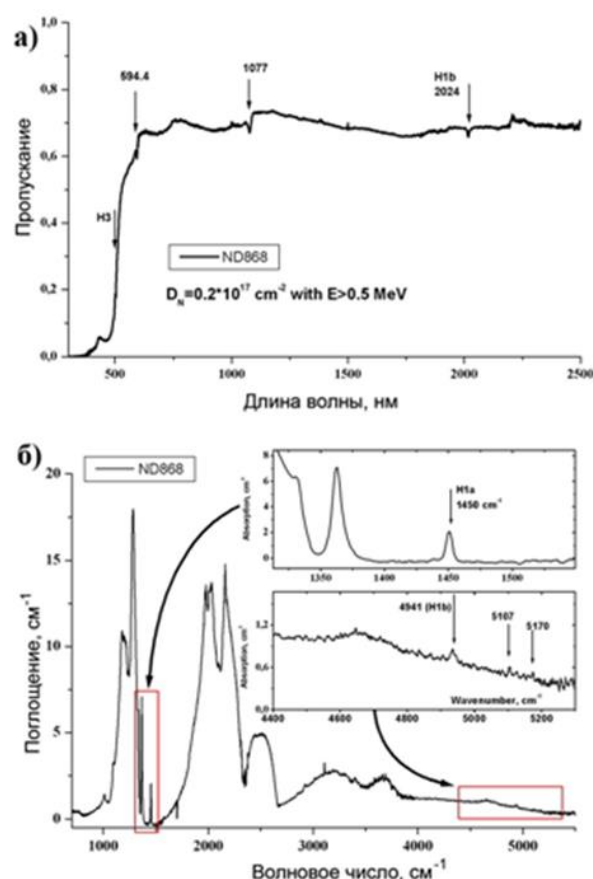
Увеличение дозы облучения до  $(0,4 \div 0,6) \times 10^{17} \text{см}^{-2}$  и температуры отжига до (1000° C/ 120 мин.) приводит к существенному изменению вида кривых поглощения (рис.5). Край пропускания смещается к 500 нм, появляется группа новых особенностей: дуплет узких линий при 638/643 нм, новая интенсивная система с линией при 913 нм, интенсивные линии при 958, 1268, 1646-1659, 1729-1746 нм, а также теперь уже интенсивные системы группы H1: системы H1a, H1c, H1b, плюс система H1g ( $\sim 4444 \text{ см}^{-1}$  или  $\sim 2250 \text{ нм}$ ). Структура электронно-колебательных систем с выделенными ноль - фононными линиями и энергиями участвующих фононов приведена на рис.5.

Дальнейшее увеличение дозы облучения до  $(1,0 \div 2,2) \times 10^{17}$  нейтронов/ $\text{см}^2$  и температуры отжига до (1500° C/180 мин.) приводит к следующим изменениям (рис.6): в видимом диапазоне доминируют две системы H3 и H2, в ближней ИК области сохраняется интенсивное поглощение в системах H1c и H1b, а остальные линии выжигаются, в том числе и система H1a. Появляется ряд новых линий с интенсивностью менее 1  $\text{см}^{-1}$ . В видимом диапазоне это дуплет 644,4/649,6 нм; в однофононном диапазоне линии 2682,5; 2850,4; 2921,7; 4412,2  $\text{см}^{-1}$  (детали на рис.6), близкие по положению к обнаруженным в [16] после облучения электронами и последующего отжига.



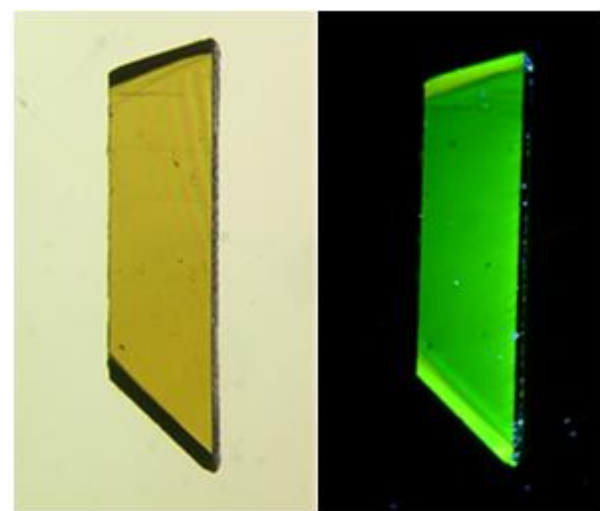
**Рис.5.** Спектры пропускания (а,б) алмазов типа Ia (ND 869 и ND 873) после облучения дозами нейтронов  $D_N = (0.4 \div 0.6) \times 10^{17} \text{ см}^{-2}$  и НТ – отжига ( $1000^\circ\text{C}/120 \text{ мин.}$ ), (б) – детали спектра в диапазоне 520-720 нм.

**Fig. 5.** Transmission spectra (a, b) of type Ia diamonds (ND 869 and ND 873) after irradiation with neutron doses  $D_N = (0.4 \div 0.6) \times 10^{17} \text{ cm}^{-2}$  and HT annealing ( $1000^\circ\text{C}/120 \text{ min.}$ ), (b) – details of the spectrum in the range of 520-720 nm.



**Рис.4.** Спектры пропускания (а) и поглощения (б) алмаза типа Ia (ND 868) после облучения нейтроном дозой  $D_N = 0.2 \times 10^{17} \text{ см}^{-2}$  и НТ – отжига ( $800^\circ\text{C}/120 \text{ мин.}$ ): а) видимый и ближний ИК-диапазон, б) ИК-диапазон.

**Fig. 4.** Transmission (a) and absorption (b) spectra of type Ia diamond (ND 868) after neutron irradiation with a dose of  $D_N = 0.2 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2}$  and LT annealing ( $800^\circ\text{C}/120 \text{ min.}$ ): a) visible and near IR range, b) IR range.

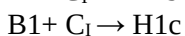
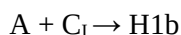


**Рис.7.** Вид в проходящем свете и фотолюминесценция (возб.  $\lambda_{\text{Hg}} = 365 \text{ нм}$ ) алмаза типа IaA (ND 843) после облучения нейтронами дозой  $D_N = 0.2 \times 10^{17} \text{ см}^{-2}$  и НТ – отжига ( $800^\circ\text{C}/120 \text{ мин.}$ ). Окраска и люминесценция кристалла обусловлены центром НЗ.

### Обсуждение результатов

Полученные экспериментальные результаты позволяют проанализировать трансформацию оптически активных дефектов в облученных нейтронами алмазах при их последующем отжиге.

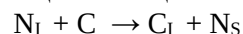
Следует отметить, что увеличение дозы облучения и температуры отжига тут же приводят к появлению множества других оптически активных дефектов. Первичные радиационные дефекты: вакансии, интерстиции и их комплексы, практически полностью отжигаются к 800° С трансформируясь в более высокотемпературные дефекты: в видимом диапазоне спектра - это центры НЗ и Н4, в ИК диапазоне - центры Н1а, Н1б и Н1с характерные для всех азотсодержащих алмазов. Исключение составляет центр 594 нм, также являющийся собственным дефектом кристаллической структуры алмаза. Поскольку он наблюдается в спектрах поглощения алмазов всех типов, в том числе CVD алмазов с  $N_c \sim$ несколько ppb [24], облученных 3 МэВ-ными электронами в комбинации с последующим отжигом при 800°С. Поглощения в линии 594 нм становится заметным при 400° С, достигает максимума при 700°С, остается на этом уровне до 800°С, а при дальнейшем увеличении температуры в диапазоне 800-1100°С интенсивность линии 594 нм монотонно убывает и полностью отжигается при 1200°С. Синхронно, с уменьшением интенсивности линии 594 нм, начинается рост поглощения в системах Н1б и Н1с, связываемых с дефектами, производными от основных азотных А-, и В1- дефектов, соответственно. Возможно, распад дефекта 594 нм сопровождается освобождением собственных интерстиций, с большой вероятностью входящих в состав этого дефекта. Освободившиеся интерстиции (или их комплексы) тут же захватываются А-, и В1-дефектами, с образованием дефектов Н1б и Н1с, соответственно:



Поведение дефектов Н1б и Н1с при отжиге похоже друг на друга: - их интенсивность достигает максимума при 1200° С, когда поглощение 594 нм полностью отжигается. Затем приблизительно до 1250° С интенсивность дефектов почти не изменяется. При более высоких температурах начинается разрушение дефектов и обусловленное ими поглощение полностью исчезает при 1600 - 1650°С.

Отдельно проанализируем поведение оптического центра Н1а (дефект  $N_{21}$ ), проявляющегося в спектрах ИК поглощения линией 1450  $cm^{-1}$ . Центр регистрируется непосредственно после облучения, интенсивность линии 1450  $cm^{-1}$  возрастает до 500°С, остается неизменным почти

до 1200°С, затем монотонно спадает, полностью отжигаясь при 1500°С. Когда начиная с 1200° С интенсивность линии 1450  $cm^{-1}$  уменьшается, наблюдается резкий рост поглощения в системе Н2 с линией 986,3 нм. По-видимому, распад дефекта  $N_{21}$  происходит с образованием донора электронов - дефекта С, что в свою очередь приводит к перезарядке части сформировавшихся вследствие облучения и отжига дефектов НЗ. Пятый валентный электрон атомов донорного азота (дефекта С) переходит на близлежащие дефекты НЗ – дефекты, трансформируя их в Н2-дефекты:  $H3 + e^- \rightarrow H2$ . Для наблюдаемого интенсивного роста содержания Н2-дефектов, требуются большие концентрации как исходных НЗ-дефектов, так и вновь образующихся С-дефектов. Одновременное с разрушением дефектов Н1а возрастание поглощения Н2-дефектов указывает на то, что, скорее всего, именно  $N_{21}$  – дефекты трансформируются при отжиге в С-дефекты. Механизм трансформации представляется следующим образом. При повышении температуры отжига выше 1200°С,  $N_{21}$  – дефекты приобретают подвижность и распадаются на две отдельные азотные интерстиции. Мигрируя по кристаллической решетке и оказываясь вблизи регулярного узла, азотная интерстиция оказывается способной сместить регулярный атом углерода в межузельное положение. Заняв освободившийся узел решетки, азотная интерстиция становится С-дефектом - изолированным одиночным атомом азота в позиции замещения:



Интенсивность поглощения в системе Н2, а следовательно и концентрация донора электронов – С-дефектов, возрастает с возрастанием дозы облучения. Очевидно, что количество образующихся С-дефектов, также должно зависеть от суммарного содержания азота в кристалле. Действительно, как было установлено, интенсивность поглощения системы Н1а линейно зависит и от дозы облучения и от суммарного содержания азота в кристалле. Таким образом, появляется возможность оценить пороговое значение произведения дозы «надтепловых» нейтронов на суммарное содержание азота в кристалле, выше которого, за счет последовательной трансформации дефектов при отжиге 1500°С в кристаллической решетке появляются С-дефекты. Для расчетов можно выбрать кристаллы ND1 и ND1а (рис.6 а), в спектрах которых начинает проявляться

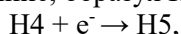
система Н2. В данном случае интенсивность Н2, сравнима в интенсивностью этой же системы, возникающей после НРНТ отжига пластически деформированных коричневых алмазов в тех случаях, когда в кристаллической структуре образуется около 4 ppm С-дефектов [21,25]. Поглощение в пике  $1344\text{ см}^{-1}$ , вызываемое таким количеством С-дефектов, составляет около  $0,1\text{ см}^{-1}$ . Следовательно, пороговой величиной образования такого же количества С-дефектов в облученных нейтронами и отожженных алмазах типа Ia, равной произведению суммарной концентрации атомов азота в основных А-, и В1 – дефектах и дозы облучения, будет величина  $380 \cdot 10^{17}\text{ ppm} \times \text{нейтронов/см}^2$ .

Скорее всего, диссоциация Н1b -, и Н1с – дефектов, происходящая при более высокой температуре, к образованию С-дефектов отношения не имеет и сопровождается освобождением А-, и В1-дефектов и межузельных атомов углерода – либо в виде одиночных атомов, либо в виде более сложных комплексов.

Отметим, что в спектрах кристаллов, близких к чистому подтипу IaB1, т.е. с преобладанием азота в В1-форме, после облучения и отжига при  $1500^\circ\text{C}$ , не удалось зарегистрировать производные от В1-дефекта азотно-вакансионные Н4/Н5 -дефекты. В кристаллах подтипа IaB1 после облучения и отжига закономерно образуются  $594\text{ нм}$  -, и  $\text{N}_{21}$  – дефекты. Наряду с ними, при захвате мигрирующей вакансии В1-дефектом, в диапазоне температур  $800 - 1200^\circ\text{C}$ , образуются Н4-дефекты:



Линии  $594\text{ нм}$  и Н1с в алмазе типа IaB1 подвергаются такому же воздействию отжига как и линии  $594\text{ нм}$  и Н1b в алмазах типа IaA, с преобладанием азота в А-форме, но при этом в алмазах подтипа IaB1 не возникает поглощения Н2. Однако, в структуре таких кристаллов вследствие отжига  $\text{N}_{21}$  – дефектов, должны образовываться С-дефекты. При появлении этих дефектов – доноров электронов, как было показано в работе [17], близлежащие к С-дефектам Н4-дефекты будут переходить в отрицательное зарядовое состояние, образуя Н5-дефекты:



Спектральным проявлением Н5-дефектов является ЭКС с БФЛ при  $805,2\text{ нм}$  ( $1,539\text{ эВ}$ ). Однако в спектрах систем Н4/Н5 не наблюдались. Возможно, это связано с тем, что при температуре отжига  $1500^\circ\text{C}$  большая часть де-

фектов Н4 уже трансформировалась в дефекты Н3:  $\text{Н4} \rightarrow \text{Н3} + \text{Н3}$ , но при этом достаточного количества Н3-дефектов еще не образовалось. Но, и возможно, что  $\text{Н4} \rightarrow \text{Н3}$ -трансформация происходит через промежуточные стадии.

В спектрах поглощения облученных нейтронами и затем отожженных алмазов появляется множество и других особенностей в виде линий и систем: система  $1077\text{ нм}$ ; дуплет линий  $644,4/649,6\text{ нм}$ ; интенсивная система с линией при  $913\text{ нм}$ ; группа интенсивных линий при  $958, 1268, 1646-1659, 1729-1746\text{ нм}$ ; линии в ИК диапазоне  $2682,5; 2850,4; 2921,7; 4412,2\text{ см}^{-1}$ ; и система Н1g ( $\sim 4444\text{ см}^{-1}$  или  $\sim 2250\text{ нм}$ ). Некоторые из этих особенностей, например система  $1077\text{ нм}$ , появляются в спектрах алмазов после их облучения электронами в комбинации с последующим отжигом. Но большая часть особенностей, например дублет линий  $644,4/649,6\text{ нм}$  [26], система с линией при  $913\text{ нм}$  и система Н1g, по-видимому, являются характеристичными для облучения нейтронами. Система Н1g ( $\sim 4444\text{ см}^{-1}$  или  $\sim 2250\text{ нм}$ ) появляется в спектральном диапазоне, близком к проявлению в безазотных алмазах типа Ia т.н. янтарных центров ( $4100\text{ см}^{-1}$ ) (Amber Centers [27]), связываемых с проявлением вакансионных кластеров [28,29]. Возможно, система Н1g также связана с вакансионными кластерами, модифицированными примесными атомами азота. Логично, и большую часть не описанных ранее в литературе центров, наблюдаемых в спектрах после облучения и отжига, также связать с проявлением собственных дефектов кристаллической структуры, устойчивых при данной температуре отжига в комбинации с атомами примесного азота.

## Заключение и выводы

Таким образом, проведенное на представительной коллекции кристаллов исследование закономерностей образования и отжига радиационных повреждений в облученных нейтронами природных алмазах типа Ia, позволяет сделать следующие выводы:

1. При бомбардировке нейтронами, выбитые из решетки алмаза атомы углерода получают на порядки большую энергию, чем первично выбитые атомы при бомбардировке электронами с энергией  $3\text{ МэВ}$ . Соответственно, обладая огромной энергией, первично выбитые атомы способны привести к дальнейше-



му смещению сотен атомов углерода – в кристаллах возникают «клинья смещения» (или кластеры) – частично аморфизированные области, приосевая, внутренняя часть которых обогащена вакансиями, а наружная – межузельными атомами. Различие в механизмах дефектообразования и в наборе первичных радиационных дефектов, при облучении быстрыми электронами и нейтронами, отражается в оптических спектрах.

2. Спектральным проявлением кластеров является интенсивное поглощение во всем диапазоне длин волн, а также линии 1530 и 1570 см<sup>-1</sup>. При отжиге происходит разрушение кластеров – первичные радиационные дефекты практически полностью отжигаются к 800°C, трансформируясь в более высокотемпературные дефекты 594 нм и Н1а, и характерные, производные от А-, и В1- дефектов, азотно-вакансионные центры Н3 и Н4, соответственно.

3. Увеличении температуры отжига облученных нейтронами алмазов типа Ia в диапазоне 800-1100°C приводит к разрушению дефекта 594 нм, при одновременном образовании производных от А-, и В1, дефектов Н1b и Н1с, соответственно.

4. В кристаллах типа IaA, с преобладанием А-формы азота, рост Н2-дефектов в диапазоне температур отжига 1200-1500° С происходит синхронно с разрушением дефектов Н1а, что может быть связано с трансформацией азотной интерстиции в С-дефект, с последующей перезарядкой части Н3 – дефектов в отрицательное зарядовое состояние.

5. Пороговое значение произведения дозы «надепловых» нейтронов на суммарное содержание азота в кристалле, выше которого, при отжиге 1500° С за счет последовательной трансформации дефектов, в кристаллической решетке появляется около 4 ppm С-дефектов, составляет  $380 \cdot 10^{17}$  ppm×нейтронов/см<sup>2</sup>.

6. Линии 594 нм и Н1с в кристаллах типа IaB1, с преобладанием В1-формы азота, подвергаются такому же воздействию отжига как и линии 594 нм и Н1b в алмазах типа IaA, но при этом не возникает поглощения Н2 -, и Н4/Н5-дефектов.

7. Характерными для облучения нейтронами являются: а) система Н1g (~ 4444 см<sup>-1</sup> или ~ 2250 нм); б) дуплет узких линий поглощения (80К) при 638/643 нм; и в) система в ближнем ИК диапазоне с линией при 913 нм.

## Список литературы

1. Bradac, C., Gao, W., Forneris, J., Trusheim, M. E., & Aharonovich, I. // Quantum nanophotonics with group IV defects in diamond. *Nature Communications*. – 2019. – Vol. 10. – P. 1-13. <https://doi.org/10.1038/s41467-019-13332-w>.
2. Lenzini, F., Gruhler, N., Walter, N., & Pernice, W. H. P. Diamond as a platform for integrated quantum photonics. // *Advanced Quantum Technologies*. – 2018. – Vol. 1. – p 3-11.. <https://doi.org/10.1002/qute.201800061>.
3. Savvin A., Dormidonov A., Smetanina E., Mitrokhin V., Lipatov E., Genin D., Potanin S., Yelisseyev A., Vins V. NV<sup>-</sup> diamond laser. // *Nature communications*. – 2021. – Vol.12, 7118. <https://doi.org/10.1038/s41467-021-27470-7>.
4. Lipatov E., Genin D., Shulepov M, Vins V. Superluminescence in the phonon wing of the photoluminescence spectrum of NV centres in diamond optically pumped at  $\lambda = 532$  nm. // *Quantum Electronics*. – 2022. – Vol.52. – №5.- p. 465-468. DOI: 10.1070/QEL18044.
5. Genin D., Lipatov E., Shulepov M, Vins V., Yelisseyev A., Izmailov I., Savvin A., Dormidonov A. Microjoule-Range Diamond NV-Laser with Optical Pumping. // *Physica status solidi (RRL)* – Rapid Research Letters. – 2024.-Vol. 18.- p 2-18. DOI: 10.1002/pssr.202300062.
6. Rubinas O, Vorobyov V., Soshenko V., Bolshedvorskii S., Sorokin V., Smolyaninov A., Vins V., Yelisseyev A., Akimov A. Spin properties of NV centers in high-pressure, high-temperature grown diamond. // *J. Phys. Commun*. – 2018. – Vol.2.- p.115003. DOI: 10.48550/arXiv.1806.09816.
7. Rubinas O., Soshenko V., Cojocar I., Bolshedvorskii S., Vilyuzhanina P., Primak E., Drofa S., Kozodaev A., Vins V., Sorokin V., Smolyaninov A., Akimov A. Interaction of nitrogen-vacancy centers in diamond with a dense ensemble of carbon-13. // *AVS Quantum Sci.* – 2024.- Vol. 6. doi: 10.1116/5.0180456.
8. Tchernij S., Lüthmann T., Herzig T. et al. Single-Photon emitters in Lead-Implanted Single-Crystal diamond. // *ACS Photonics*. – 2018. – Vol. 5. – No 12. – P.4864–4871. <https://doi.org/10.1021/acsp Photonics.8b01013>.
9. Lüthmann T., John R., Wunderlich R., et al. Coulombdriven single defect engineering for scalable qubits and spin sensors in diamond. // *Nature*.



- ture Communications. – 2019. – Vol. 10. – P.1. <https://doi.org/10.1038/s41467-019-12556-0>.
10. Magyar, A., Hu, W., Shanley, T., Flatté, M. E., Hu, E., & Aharonovich, I. Synthesis of luminescent europium defects in diamond. // *Nature Communications*. – Vol 5. – p. 1. <https://doi.org/10.1038/ncomms4523>.
11. Orphal-Kobin L., Unterguggenberger K., Pregnolato T. et al. Optically coherent Nitrogen-Vacancy defect centers in diamond nanostructures. // *Physical Review X*. – 2023. – Vol. 13(1). <https://doi.org/10.1103/physrevx.13.011042>.
12. Терентьев С.А. Рентгеновская и алмазная оптика. Новые материалы и приборы для технологического прорыва. // *НАНО ИНДУСТРИЯ*. – т.13. – №3-4. – стр.97. DOI: 10.22184/1993-8578.2020.13.3-4.168.173.
13. Mansoor M, Czelej K, Eaton-Magaña S, Mansoor Me. et al. Engineering NV Centers via Hydrogen-Driven Defect Chemistry in CVD Diamonds for Quantum Applications: NVHx Dissociations into NV, Origin of 468nm Center, and Cause of Brown Coloration. //DOI: 10.48550/arXiv.2507.00300.
14. Хмельницкий Р.А. Оптические методы в геммологии алмаза». // *ООО Алмазный НТК, из-во «Перо»*. – 2025. – 152 стр. ISBN 978-5-00258-308-9.
15. А.Г. Бураченко, В.Г. Винс, Д.Е. Генин, А.П. Елисеев, Е.И. Липатов, О.И. Лыга, В.С. Рипенко, В.В. Чашин, М.А. Шулепов (2024) «Квантовый магнитометр на основе N2V центров в алмазе» *Патент РФ № 2 816 560*.
16. А.Г. Бураченко, В.Г. Винс, Д.Е. Генин, А.П. Елисеев, Е.И. Липатов, О.И. Лыга, В.С. Рипенко, В.В. Чашин, М.А. Шулепов (2024) «Квантовый магнитометр на основе алмазного лазера». *Патент РФ № 2 825 078*.
17. Винс В., Елисеев А., Старостенков М. Генерация и отжиг радиационных дефектов в алмазах, облученных электронами. // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. – 2011.- Том 8. - №1. - стр.66-79.
18. Vins V., Yelisseyev A., Lobanov S., Afonin D., Maksimov A., Blinkov A. APHT treatment of brown type Ia natural diamonds: dislocation movement or vacancy cluster destruction? // *Diamond & Related Materials*. – 2010. – Vol.19. – p.829-832. DOI: 10.1016/j.diamond.2010.02.010.
19. Yelisseyev A., Vins V., Lobanov S., Afonin D., Maksimov A., Blinkov A. Aggregation of Donor Nitrogen in Irradiated Ni-Containing Synthetic Diamonds. // *Journal of Crystal Growth*. – 2011.- Vol. 318. – p. 539-544. DOI: 10.1016/j.jcrysgro.2010.10.043.
20. Винс В., Елисеев А. Агрегация азота в синтетических алмазах с никелевыми и радиационными дефектами. // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. – 2011. – том 8. - №1. - стр.17-24.
21. Dobrinets I., Vins V., and Zaitsev A. HPHT-Treated Diamonds. // *Springer Berlin Heidelberg*. – 2013. – 257 p. DOI: 10.1007/978-3-642-37490-6.
22. Динс Д., Винйард Д. Радиационные эффекты в твердых телах. // М.: Иностран. Лит.. – 1960. – 243 стр.
23. Liggins S. Identification of point defects in treated single crystal diamond. // Thesis Submitted to the University of Warwick for the degree of Doctor of Philosophy. – 2010. <http://webcat.warwick.ac.uk/record=b2491628~S15>.
24. Vins V., Yelisseyev A., Smovzh D., Novopashin S. Optical properties of CVD single crystal diamonds before and after different post-growth treatments. // *Diamond & Related Materials*. – 2018. – Vol. 86. – p. 79-86. DOI: 10.1016/j.diamond.2018.04.022.
25. Vins V., Eliseev A. Effect of annealing at high pressures and temperatures on the defect-admixture structure of natural diamonds. // *Inorganic Materials: Applied Research*. – 2010. Vol.1. – No 4. – p.303 – 310. DOI: 10.1134/S2075113310040076.
26. Zaitsev A. Optical Properties of Diamond. // *A Data Handbook*. Berlin: Springer. – 2001. – 502 p. DOI: 10.1007/978-3-662-04548-0.
27. Massi L., Fritsch E., Collins A., Hainschwang T., Notari F. The “amber centres” and their relation to the brown colour in diamond. // *Diamond & Related Materials*. – 2005. – Vol.14. p. 1623–1629. DOI: 10.1016/j.diamond.2005.05.003.
28. Shiryayev A., Titkov S. Spatial distribution of “Amber” defects in diamond: Results of IR mapping. // *New Data Miner*. – 2018. – Vol.52. – p. 87–90.
29. Eaton-Magaña S., Moe K. Temperature effects on radiation stains in natural diamonds. // *Diamond & Related Materials*. – 2016. – Vol. 64. – P. 130–142. DOI: 10.1016/j.diamond.2016.02.009.

### Информация об авторах

Винс В.Г. – доктор физико-математических наук, директор ООО «ВЕЛМАН».

Елисеев А.П. – доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник Института геологии и минералогии им. В.С. Соболева СО РАН

### References

1. Bradac, C., Gao, W., Forneris, J., Trusheim, M. E., & Aharonovich, I. // Quantum nanophotonics with group IV defects in diamond. *Nature Communications*. – 2019. - Vol. 10. – P. 1-13. <https://doi.org/10.1038/s41467-019-13332-w>.
2. Lenzini, F., Gruhler, N., Walter, N., & Pernice, W. H. P. Diamond as a platform for integrated quantum photonics. // *Advanced Quantum Technologies*. – 2018. - Vol. 1. – p 3-11.. <https://doi.org/10.1002/qute.201800061>.
3. Savvin A., Dormidonov A., Smetanina E., Mitrokhin V., Lipatov E., Genin D., Potanin S., Yelisseyev A., Vins V. NV<sup>-</sup> diamond laser. // *Nature communications*. – 2021. – Vol.12, 7118. <https://doi.org/10.1038/s41467-021-27470-7>.
4. Lipatov E., Genin D., Shulepov M, Vins V. Superluminescence in the phonon wing of the photoluminescence spectrum of NV centres in diamond optically pumped at  $\lambda = 532$  nm. // *Quantum Electronics*. – 2022. - Vol.52. - №5.- p. 465-468. DOI: 10.1070/QEL18044.
5. Genin D., Lipatov E., Shulepov M, Vins V., Yelisseyev A., Izmailov I., Savvin A., Dormidonov A. Microjoule-Range Diamond NV-Laser with Optical Pumping. // *Physica status solidi (RRL) – Rapid Research Letters*. – 2024.-Vol. 18.- p 2-18. DOI: 10.1002/pssr.202300062.
6. Rubinas O, Vorobyov V., Soshenko V., Bolshedvorskii S., Sorokin V., Smolyaninov A., Vins V., Yelisseyev A. and Akimov A. Spin properties of NV centers in high-pressure, high-temperature grown diamond. // *J. Phys. Commun*. – 2018. – Vol.2.- p.115003. DOI: 10.48550/arXiv.1806.09816.
7. Rubinas O., Soshenko V., Cojocar I., Bolshedvorskii S., Vilyuzhanina P., Primak E., Drofa S., Kozodaev A., Vins V., Sorokin V., Smolyaninov A. and Akimov A. Interaction of nitrogen-vacancy centers in diamond with a dense ensemble of carbon-13. // *AVS Quantum Sci.*- 2024.- Vol. 6. doi: 10.1116/5.0180456.
8. Tchernij S., Lühmann T., Herzig T. et al. Single-Photon emitters in Lead-Implanted Single-Crystal diamond. // *ACS Photonics*. – 2018. - Vol. 5. - №12. - P.4864–4871.
9. Lühmann T., John R., Wunderlich R. et al. Coulombdriven single defect engineering for scalable qubits and spin sensors in diamond. // *Nature Communications*. – 2019. –Vol. 10. P.1. <https://doi.org/10.1038/s41467-019-12556-0>.
10. Magyar, A., Hu, W., Shanley, T., Flatté, M. E., Hu, E., & Aharonovich, I. Synthesis of luminescent europium defects in diamond. // *Nature Communications*. - Vol 5. – p. 1. <https://doi.org/10.1038/ncomms4523>.
11. Orphal-Kobin L., Unterguggenberger K., Pregolato T. et al. Optically coherent Nitrogen-Vacancy defect centers in diamond nanostructures. // *Physical Review X*. – 2023. - Vol. 13(1). <https://doi.org/10.1103/physrevx.13.011042>.
12. Terentyev S. (2020) X-ray and diamond optics. New materials and devices for a technological breakthrough. *NANO INDUSTRY*, v.13, no.3-4(97). (In Russ.) DOI: 10.22184/1993-8578.2020.13.3-4.168.173
13. Mansoor M, Czelej K, Eaton-Magaña S, Mansoor Me. et al.(2025) « Engineering NV Centers via Hydrogen-Driven Defect Chemistry in CVD Diamonds for Quantum Applications: NVHx Dissociations into NV, Origin of 468nm Center, and Cause of Brown Coloration» DOI: 10.48550/arXiv.2507.00300.
14. Khmelnitsky R.A. (2025) "Optical methods in diamond gemology." LLC Almazny NTK, from Pero, 152 pages. (In Russ.) ISBN 978-5-00258-308-9.
15. A.G. Burachenko, V.G. Vince, D.E. Genin, A.P. Eliseev, E.I. Lipatov, O.I. Lyga, V.S. Ripenko. V.V. Chashchin, M.A. Shulepov (2024) "Quantum magnetometer based on N2V centers in diamond" Russian Federation Patent No. 2 816 560. (In Russ.)
16. A.G. Burachenko, V.G. Vince, D.E. Genin, A.P. Eliseev, E.I. Lipatov, O.I. Lyga, V.S. Ripenko. V.V. Chashchin, M.A. Shulepov (2024) "Quantum magnetometer based on a diamond laser". Russian Federation Patent No. 2 825 078. (In Russ.)
17. Vins V., Yelisseyev A., Starostenkov M. Generation and annealing of radiation defects in diamonds irradiated with electrons. // *Fundamental*

Problems of Modern Materials Science. – 2011.- Vol. 8, No. 1, pp. 66-79. (In Russ.)

18. Vins V., Yelisseyev A., Lobanov S., Afonin D., Maksimov A., Blinkov A. APHT treatment of brown type Ia natural diamonds: dislocation movement or vacancy cluster destruction? // *Diamond & Related Materials*. – 2010. - Vol.19. -p. 829-832. DOI: 10.1016/j.diamond.2010.02.010.

19. Yelisseyev A., Vins V., Lobanov S., Afonin D., Maksimov A., Blinkov A. Aggregation of Donor Nitrogen in Irradiated Ni-Containing Synthetic Diamonds. // *Journal of Crystal Growth*. – 2011.- Vol. 318. - p. 539-544. DOI: 10.1016/j.jcrysgro.2010.10.043.

20. Vins V., Eliseev A. (2011) "Nitrogen Aggregation in Synthetic Diamonds with Nickel and Radiation Defects. // *Fundamental Problems of Modern Materials Science*. – 2011. - Vol. 8. - No. 1. -pp. 17–24. (In Russ.)

21. Dobrinets I., Vins V., and Zaitsev A. HPHT-Treated Diamonds. // *Springer Berlin Heidelberg*. – 2013. - 257 p. DOI: 10.1007/978-3-642-37490-6.

22. Deans D., Vineyard D.. Radiation effects in solids. // M.: Foreign. Lit. - 1960.- 243 pp.

23. Liggins S. Identification of point defects in treated single crystal diamond. // Thesis Submitted to the University of Warwick for the degree of Doctor of Philosophy. - 2010. <http://webcat.warwick.ac.uk/record=b2491628~S15>.

24. Vins V., Yelisseyev A., Smovzh D., Novopashin S. Optical properties of CVD single crystal diamonds before and after different post-growth treatments. // *Diamond & Related Materials*. –

2018. - Vol. 86. - p. 79-86. DOI: 10.1016/j.diamond.2018.04.022.

25. Vins V., Eliseev A. Effect of annealing at high pressures and temperatures on the defect-admixture structure of natural diamonds. // *Inorganic Materials: Applied Research*. – 2010. - Vol.1. - No 4. - p. 303 – 310. DOI: 10.1134/S2075113310040076.

26. Zaitsev A. Optical Properties of Diamond. // *A Data Handbook*. Berlin: Springer. – 2001. - 502 p. DOI: 10.1007/978-3-662-04548-0.

27. Massi L., Fritsch E., Collins A., Hainschwang T., Notari F. The “amber centres” and their relation to the brown colour in diamond. // *Diamond & Related Materials*. – 2005. – Vol.14. p. 1623–1629. DOI: 10.1016/j.diamond.2005.05.003.

28. Shiryayev A., Titkov S. Spatial distribution of “Amber” defects in diamond: Results of IR mapping. // *New Data Miner*. – 2018. – Vol.52. – p. 87–90.

29. Eaton-Magaña S., Moe K. Temperature effects on radiation stains in natural diamonds. // *Diamond & Related Materials*. - 2016. - Vol. 64. - P. 130–142. DOI: 10.1016/j.diamond.2016.02.009.

#### Information about the authors

1. V.G. Vins – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Director of VELMAN LLC.

2. A.P. Eliseev – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Leading Researcher at the V.S. Sobolev Institute of Geology and Mineralogy, Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences.

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.  
The authors declare that there is no conflict of interest.

Статья поступила в редакцию 21.11.2025; одобрена после рецензирования 23.02.2026; принята к публикации 02.03.2026.

The article was received by the editorial board on 21 Nov. 2025; approved after reviewing 23 Feb. 2026; accepted for publication 02 Mar. 2026.

Научная статья

1.3.8. Физика конденсированного состояния (физико-математические науки)

УДК 621.791.92:621.727:620.178

doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2026.01.002

### ЭЛЕКТРОННО-МИКРОСКОПИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ ПЕРЕХОДНОГО СЛОЯ «ПЛАЗМЕННОЕ ПОКРЫТИЕ БЫСТРОРЕЖУЩЕЙ СТАЛИ-ПОДЛОЖКА»

Ирина Викторовна Баклушина<sup>1\*</sup>, Виктор Евгеньевич Громов<sup>2</sup>, Юрий Федорович Иванов<sup>3</sup>,  
Игорь Юрьевич Литовченко<sup>4</sup>, Татьяна Павловна Гусева<sup>5</sup>, Сергей Андреевич Невский<sup>6</sup>

<sup>1,2,5,6</sup> Сибирский государственный индустриальный университет, ул. Кирова, 42, 654007, Новокузнецк, Россия,

<sup>3</sup> Институт сильноточной электроники СО РАН, пр. Академический, 2/3, 634055, Томск, Россия

<sup>4</sup> Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, пр. Академический, 2/4, 634055, Томск, Россия

<sup>1</sup> baklushina\_iv@sibsiu.ru, <https://orcid.org/0000-0003-4487-3260>

<sup>2</sup> gromov@physics.sibsiu.ru, <https://orcid.org/0000-0002-5147-5343>

<sup>3</sup> yufi55@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-8022-7958>

<sup>4</sup> litovchenko@spti.tsu.ru, <https://orcid.org/0000-0002-5892-3719>

<sup>5</sup> guseva\_tp@sibsiu.ru,

<sup>6</sup> nevskiy sergei@yandex.ru, <https://orcid.org/0000-0001-7032-9029>

**Аннотация.** Одной из важных проблем практического использования высокопрочных плазменных покрытий быстрорежущими сталями в среде азота является анализ структурно-фазовых состояний и свойств переходной зоны системы «покрытие-подложка», поскольку они во многом определяют преждевременное зарождение хрупких микротрещин в зоне контакта. Покрытия молибденовой и вольфрам-молибденовой стали находят в последнее время широкое применение вместо хорошо известных вольфрамовых (P18, P9) и вольфрам-молибденовых сталей с повышенным содержанием вольфрама (P6M5, P6Ф2К8М6 и другие). Это связано с необходимостью замены дорогого и дефицитного вольфрама на молибден, который оказывает подобное влияние на структуру и свойства быстрорежущих сталей. Проведены исследования структурно-фазовых состояний, морфологии, свойств и элементного состава переходной зоны контакта систем наплавленная быстрорежущая сталь марки М9 и P2М9 – подложка (сталь марки 30ХГСА) в исходном состоянии. Для системы «покрытие (быстрорежущая сталь P2М9) – подложка (сталь 30ХГСА)» в исходном состоянии переходная зона имеет мартенситную структуру с прослойками остаточного аустенита по границам пластин мартенсита. Выявлены частицы второй фазы наноразмерного (2 – 60 нм) диапазона: карбиды ванадия, молибдена, вольфрама и железа, локализованные на дислокациях, на границах и объеме пластин мартенсита. Для системы «покрытие (быстрорежущая сталь М9) – подложка (сталь 30ХГСА)» установлено, что формирование покрытия сопровождается созданием протяженного переходного слоя, который содержит  $\alpha$ -фазу,  $\gamma$ -фазу, карбиды сложного состава.

**Ключевые слова:** электронная микроскопия, покрытие, быстрорежущие стали марки М9 и P2М9, зона контакта, подложка, переходная зона

**Благодарности:** Работа выполнена при поддержке гранта Российского научного фонда № 23-19-00186, <https://rscf.ru/project/23-19-00186>

**Для цитирования:** Баклушина И.В., Громов В.Е., Иванов Ю.Ф., Литовченко И.Ю., Гусева Т.П., Невский С.А. Электронно-микроскопический анализ структуры и свойств переходного слоя «плазменное покрытие быстрорежущей стали-подложка» // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2026. Т. 23, № 1. С. 24–32. doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2026.01.002.

Original article

## ANALYSIS OF THE STRUCTURE AND PROPERTIES OF THE INTERFACE "PLASMA COATING OF HIGH-SPEED STEEL - SUBSTRATE"

Irina V. Baklushina<sup>1</sup>, Victor E. Gromov<sup>2</sup>, Yuri F. Ivanov<sup>3</sup>, Igor Yu. Litovchenko<sup>4</sup>,  
Tatyana P. Guseva<sup>5</sup>, Sergey A. Nevskii<sup>6</sup>

<sup>1,2,5,6</sup> Siberian State Industrial University, Kirov Str., 42, Novokuznetsk, 654007, Russia

<sup>3</sup>Institute of High Current Electronics SB RAS, Akademicheskii Pr., 2/3, Tomsk, 634055, Russia

<sup>4</sup>Institute of Strength Physics and Materials Science SB RAS Akademicheskii Pr., 2/4, Tomsk, 634055, Russia

<sup>1</sup> baklushina\_iv@sibsiu.ru, <https://orcid.org/0000-0003-4487-3260>

<sup>2</sup> gromov@physics.sibsiu.ru, <https://orcid.org/0000-0002-5147-5343>

<sup>3</sup> yufi55@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-8022-7958>

<sup>4</sup> litovchenko@spti.tsu.ru, <https://orcid.org/0000-0002-5892-3719>

<sup>5</sup> guseva\_tp@sibsiu.ru,

<sup>6</sup> nevskiy.sergei@yandex.ru, <https://orcid.org/0000-0001-7032-9029>

**Abstract.** One of the important problems of practical use of high-strength plasma coatings of high-speed steels in a nitrogen environment is the analysis of the structural-phase states and properties of the transition zone in the «coating-substrate» system, since it is these properties that largely determine the premature formation of brittle microcracks in the contact zone. Molybdenum and tungsten-molybdenum steel coatings have recently found wide application instead of the well-known tungsten (P18, P9) and tungsten-molybdenum steels with increased tungsten content (P6M5, P6F2K8M6 and others). This is due to the need to replace expensive and scarce tungsten with molybdenum, which has a similar effect on the structure and properties of high-speed steels. The studies of the structural-phase states, morphology, properties and elemental composition of the transition zone of contact of the systems of deposited high-speed steel grades M9 and P2M9 - substrate (steel grade 30KhGSA) in the initial state were carried out. For the system “coating (high-speed steel P2M9) – substrate (steel 30KhGSA)” in the initial state, the transition zone has a martensitic structure with layers of residual austenite along the boundaries of the martensite plates. Particles of the second phase in the nanoscale (2–60 nm) range were identified: vanadium, molybdenum, tungsten and iron carbides localized at dislocations, at the boundaries and in the volume of martensite plates. For the system “coating (high-speed steel M9) – substrate (steel 30KhGSA)”, it was established that the formation of the coating is accompanied by the creation of an extended transition layer, which contains the  $\alpha$ -phase,  $\gamma$ -phase, and carbides of complex composition.

**Keywords:** electron microscopy, coating, high-speed steel grades M9 and P2M9, contact zone, substrate, transition zone

**Acknowledgements:** The work was supported by the Russian Science Foundation grant No. 23-19-00186, <https://rscf.ru/project/23-19-00186>

**For citation:** Baklushina I.V., Gromov V.E., Ivanov Yu.F., Litovchenko I.Yu., Guseva T.P., Nevsky S.A. (2026). Electron microscopic analysis of the structure and properties of the transition layer "plasma coating of high-speed steel - substrate". *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 23(1), 24–32. (In Russ.). doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2026.01.002.

### Введение

Анализ повреждаемости деталей машин показывает, что их преждевременный выход из строя обусловлен главным образом процессами, протекающими на поверхности в зоне трения. При этом многие части деталей машин и оборудования выбраковываются вследствие небольшого износа рабочей поверхности. В связи с этим, актуальной является задача повышения эксплуатационных свойств поверхностных слоев деталей до более высокого

уровня, прежде всего способности сопротивляться различным видам изнашивания [1,2].

Восстановление изношенного при эксплуатации оборудования и придание специальных свойств поверхностям новых изделий достигается использованием технологии наплавки в защитной среде азота [3-8]. Покрытия, сформированные плазменным методом, имеют преимущества перед другими способами нанесения покрытий, поскольку наиболее полно

отвечают предъявляемым промышленностью требованиям как по экономической эффективности, так и по уровню достигнутых свойств.

При нанесении покрытий актуальной проблемой остается переходная зона системы «покрытие-подложка». Состояние переходной зоны является предметом тщательных исследований методом современного физического материаловедения [9,10], поскольку адгезионные и демпфирующие свойства этой зоны определяют сроки надежной эксплуатации изделия с наплавленным слоем. Информация о природе формирования демпфирующих и адгезионных свойств зоны контакта «покрытие-подложка» может быть получена из результатов исследования структурно-фазовых состояний и дефектной субструктуры переходной зоны. Однако на сегодняшний день в зарубежной и отечественной научной литературе имеется крайне небольшое число публикаций по данной тематике, что ограничивает перспективы практического применения наплавляемых покрытий.

За последнее столетие с момента создания первой быстрорежущей вольфрамовой стали были разработаны другие различные вольфрамовые и вольфраммолибденовые стали для конкретных задач машиностроительной, металлургической, горнодобывающей и других отраслей промышленности, вошедшие в каталоги и справочники промышленно развитых стран [11]. Созданные в последнее время молибденовые быстрорежущие стали привлекательны с экономической точки зрения (вольфрам более дорогой и дефицитный материал) и с более высокими функциональными свойствами при меньшем содержании легирующих элементов по сравнению с вольфрамовыми и вольфраммолибденовыми быстрорежущими сталями [12-15]. Целью настоящей работы являлось исследование структуры и свойств интерфейса систем «наплавка (стали Р2М9 и М9) / (сталь 30ХГСА) подложка», сформированной плазменным методом.

### Материал и методы исследования

Образцы для исследований были изготовлены плазменной наплавкой в среде азота нетокующей проволокой ПП-Р2М9 на сталь марки 30ХГСА. Химический состав стали 30ХГСА: 0,3 % С; 0,9 % Cr; 0,8 % Mn; 0,9 % Si. Химический состав стали Р2М9: 0,86 % С; 4,8 % Cr; 2,5 % W; 9,4 % Mo; 0,5 % V; 0,85 % Al;

0,08 % N; остальное железо. Для покрытия быстрорежущей молибденовой стали химический состав наплавленного слоя соответствует стали М9 по SAE-AISI М9 (Т11309) Molybdenum High-Speed Steel (вес. %): С - (1-1,1); Мо-8,85; Cr-3,57; Со-2,12; V-0,05; Si-1,12; Mn-0,56, Al-1,05, остальное – Fe. В качестве плазмообразующего газа использовали аргон высшего сорта (ГОСТ 10157-79) с расходом 6-8 л/мин; в качестве защитного газа использовали технически чистый азот (ГОСТ 9293-74) с расходом 20-22 л/мин. Режимы плазменной наплавки на установке УД-417 не отличались от описанных в работах [9,10].

Фазовый состав систем «покрытие - подложка» изучали методами рентгеноструктурного анализа. Использовали рентгеновский дифрактометр ДРОН-8Н, оснащенный параболическим зеркалом на первичном пучке и позиционно-чувствительным детектором Mythen 2R 1D. Структуру и элементный состав систем «покрытие - подложка» изучали методами сканирующей электронной микроскопии (прибор КУКУ-ЕМ6900 с термоэмиссионным вольфрамовым катодом и приставкой для микрорентгеноспектрального анализа элементного состава).

Исследования структуры и фазового состава наплавленного слоя и зоны контакта осуществляли методами сканирующей (прибор КУКУ-ЕМ6900, оснащенный системой энергодисперсионного микроанализа Aztec Live Lite Xplore 30 EDS) и просвечивающей дифракционной (прибор JEM2100) электронной микроскопии [16 – 18].

Метод микродифракционного анализа с привлечением темнопольной методики использовали для анализа фазового состава материала.

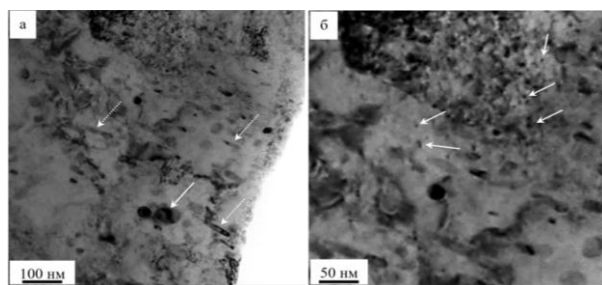
### Результаты и их обсуждение

При электронно-микроскопическом исследовании травленого шлифа наплавленного слоя стали Р2М9 выявили структуру каркасного типа, характеризующуюся наличием протяженных прослоек второй фазы, расположенных по границам зерен. В зоне контакта наплавленного слоя и подложки структура каркасного типа не формируется, что может свидетельствовать о взаимной диффузии элементов подложки и наплаваемого слоя. Выполненный микрорентгеноспектральный анализ элементного состава переходной зоны выявил обогащение подложки химическими элементами наплаваемого слоя.

Его результаты свидетельствуют об обогащении прилегающего слоя подложки атомами молибдена, а прилегающего слоя наплавки атомами кремния.

Выполненные исследования методами просвечивающей электронной дифракционной микроскопии, используя методы темнопольного анализа и индицирования микроэлектроннограмм показали, что переходная зона имеет мартенситную структуру. По границам пластин мартенсита располагаются протяженные прослойки остаточного аустенита.

Структура переходной зоны содержит частицы второй фазы (рис. 1), которые характеризуются разнообразными формами (пластинки, глобулы, сферы), размерами (от 2 до 60 нм и средним значением  $(25 \pm 5)$  нм, местом расположения (дислокации, границы зерен, кристаллов мартенсита и прослоек остаточного аустенита).



**Рисунок 1.** Электронно-микроскопическое изображение частиц второй фазы, присутствующих в структуре переходной зоны в состоянии после наплавки (исходное состояние). Стрелками указаны на (а) частицы глобулярной формы (сплошные стрелки) и частицы пластинчатой формы (прерывистые стрелки); на (б) – частицы сферической формы

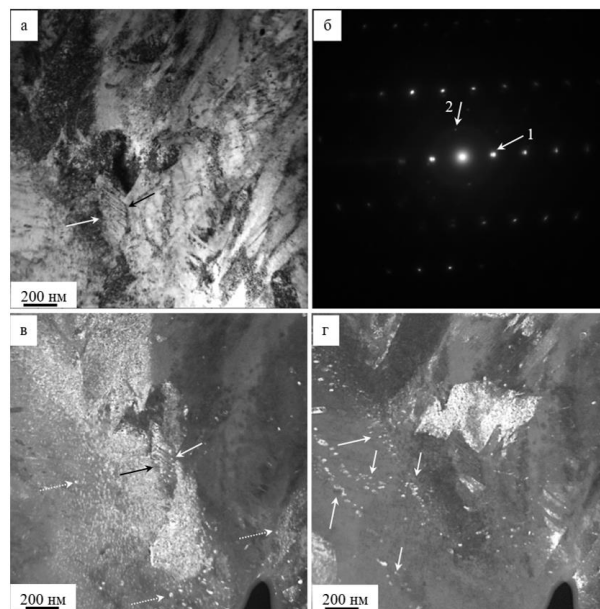
**Figure 1.** Electron microscopic image of the second phase particles present in the structure of the transition zone in the state after surfacing (initial state). The arrows indicate (a) globular-shaped particles (solid arrows) and plate-shaped particles (dashed arrows); (b) – spherical particles

Методами темнопольного анализа с последующим индицированием микроэлектроннограмм установлено, что наноразмерные частицы, формирующиеся на дислокациях, представлены карбидом ванадия (рис. 2, в, частицы указаны штриховыми стрелками); частицы, расположенные на границах пластин мартенсита, являются карбидами молибдена и вольфра-

ма (рис. 2, г, частицы указаны стрелками). Следует отметить присутствие в структуре переходной зоны зерен остаточного аустенита (рис. 2, а, в, зерно остаточного аустенита указано стрелками). В объеме зерен аустенита практически всегда наблюдается двойниковая структура, что свидетельствует о низкой величине энергии дефекта упаковки  $\gamma$ -фазы.

Результаты анализа структуры переходной зоны позволяют утверждать, что частицы пластинчатой формы, расположенные в объеме кристаллов мартенсита, являются карбидом железа (цементитом).

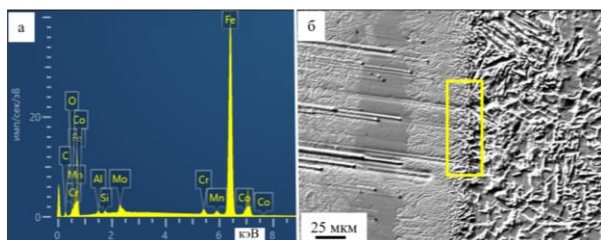
Характерное изображение энергетических спектров, полученных с интерфейса системы «покрытия (сталь М9)/(сталь 30ХГСА) подложка», приведено на рис. 3.



**Рисунок 2.** Электронно-микроскопическое изображение структуры переходной зоны в состоянии после наплавки (исходное состояние); а – светлое поле; б – микроэлектроннограмма; в, г – темные поля, полученные в рефлексах  $[110]\alpha\text{-Fe} + [002]\gamma\text{-Fe} + [012]\text{V}_2\text{C}$  (в) и  $[110]\alpha\text{-Fe} + [103]\text{MoC} + [101]\text{W}_2\text{C}$  (г); на (б) стрелками указаны рефлексы, в которых получены темные поля: 1 – для (в); 2 – для (г)

**Figure 2.** Electron microscopic image of the structure of the transition zone in the as-deposited state (initial state); a – bright field; b – microelectron diffraction pattern; c, d – dark fields obtained in the reflections  $[110]\alpha\text{-Fe} + [002]\gamma\text{-Fe} + [012]\text{V}_2\text{C}$  (c) and  $[110]\alpha\text{-Fe} + [103]\text{MoC} + [101]\text{W}_2\text{C}$  (d); in (b) the arrows indicate the reflections in which the dark fields were obtained: 1 – for (c); 2 – for (d)





**Рисунок 3.** Энергетические спектры (а), полученные методами микрорентгеноспектрального анализа переходного слоя (участок шлифа, выделенный на (б) прямоугольником) стали М9, наплавленной на сталь 30ХГСА.

**Figure 3.** Energy spectra (a) obtained by micro-X-ray spectral analysis of the transition layer (section of the section marked with a rectangle in (b)) of M9 steel deposited on 30KhGSA steel.

**Таблица 1.** Результаты микрорентгеноспектрального анализа покрытия М9.

**Table 1.** Results of micro-X-ray spectral analysis of the M9 coating.

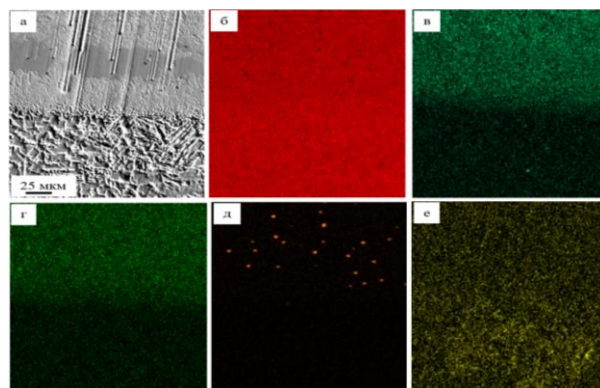
| Элемент | Покрyтия |       | Интерфейс (рис. 3, б) со стороны подложки |       | Интерфейс (рис. 3, б) со стороны покрытия |       |
|---------|----------|-------|-------------------------------------------|-------|-------------------------------------------|-------|
|         | Вес. %   | Ат. % | Вес. %                                    | Ат. % | Вес. %                                    | Ат. % |
| C       | 7,09     | 26,44 | 7,37                                      | 26,37 | 7,12                                      | 25,62 |
| O       | 0,0      | 0,0   | 1,22                                      | 3,28  | 1,2                                       | 3,23  |
| Al      | 1,28     | 2,13  | 0,58                                      | 0,93  | 0,28                                      | 0,45  |
| Si      | 0,19     | 0,3   | 0,33                                      | 0,51  | 0,34                                      | 0,52  |
| Cr      | 3,26     | 2,81  | 1,19                                      | 0,98  | 0,65                                      | 0,54  |
| Mn      | 0,51     | 0,41  | 1,02                                      | 0,8   | 1,08                                      | 0,85  |
| Fe      | 79,46    | 63,85 | 85,24                                     | 65,61 | 88,3                                      | 68,32 |
| Co      | 1,09     | 0,83  | 0,58                                      | 0,43  | 0,0                                       | 0,0   |
| Mo      | 7,12     | 3,22  | 2,47                                      | 1,11  | 1,03                                      | 0,46  |

Отчетливо видно (табл. 1), что кроме химических элементов проволоки, использованной при формировании наплавки, в переходном слое системы «наплавка/подложка» присутствуют атомы кислорода, что, по всей видимости, указывает на присутствие атомов кислорода на поверхности (в поверхностном слое) подложки (сталь 30ХГСА). Сопоставляя результаты, представленные в табл. 1, можно отметить снижение относительного содержания легирующих элементов (Al, Cr, Co, Mo) и увеличение содержания Si и Mn по мере приближения к переходному слою со стороны покрытия.

Визуализация распределения элементного состава системы «наплавка (М9) / (сталь 30ХГСА) подложка» приведена на рис. 4. Отчетливо видно, что атомы молибдена и хрома

сосредоточены, преимущественно, в наплавке, переходный слой обогащен атомами алюминия и кислорода, формирующих, по всей видимости, оксиды алюминия; слой стали 30ХГСА, прилегающий к переходному слою, обогащен атомами кислорода

Фазовый состав наплавки и переходного слоя изучали методами рентгенофазового анализа (рис. 5; табл. 2). Результаты, приведенные в табл. 2, свидетельствуют о формировании в наплавленном слое многофазной структуры, представленной  $\alpha$ -фазой (твердый раствор на основе ОЦК кристаллической решетки железа),  $\gamma$ -фазой (твердый раствор на основе ГЦК кристаллической решетки железа), карбидами сложного состава  $Me_{23}C_6$  и  $Me_6C$  и карбидом железа состава  $Fe_2C$ . Как и следовало ожидать, основной фазой является твердый раствор на основе  $\alpha$ -Fe (65 мас. %); в существенно меньшем количестве присутствует твердый раствор на основе  $\gamma$ -Fe (12 мас. %); относительное содержание карбидных фаз достигает 23 мас. %, при этом преобладающими являются карбиды сложного состава  $Me_{23}C_6$  и  $Me_6C$ . Следует отметить, что параметры кристаллических решеток  $\alpha$ - и  $\gamma$ -фаз (табл. 2) значительно превышают табличные значения параметров кристаллических решеток  $\alpha$ - и  $\gamma$ -Fe. (таблица 2).

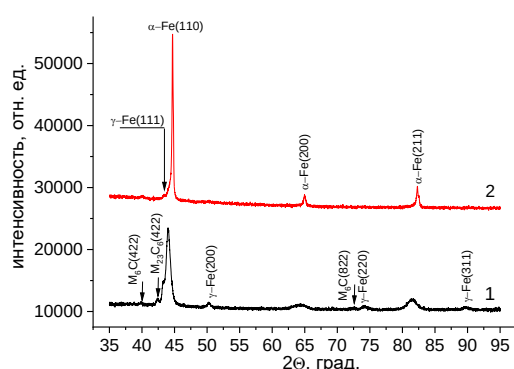


**Рисунок 4.** Карты распределения химических элементов переходного слоя; а – электронное изображение участка переходного слоя системы «наплавка / подложка»; б-е – изображения данного участка наплавки, полученные в характеристическом рентгеновском излучении атомов Fe (б), Mo (в), Cr (г), Al (д), O (е).

**Figure 4.** Maps of the distribution of chemical elements of the transition layer; а – electron image of the transition layer section of the “surface/substrate” system; б-е – images of this section of the surfacing obtained in the characteristic X-ray radiation of Fe (b), Mo (c), Cr (d), Al (d), O (e) atoms.



Следует отметить, что параметры кристаллических решеток  $\alpha$ - и  $\gamma$ -фаз (табл. 2) значительно превышают табличные значения параметров кристаллических решеток  $\alpha$ - и  $\gamma$ -Fe. Это указывает на формирование в наплавленном слое твердых растворов замещения и внедрения на основе железа. Основной фазой переходного слоя является, как и ожидалось,  $\alpha$ -фаза (твердый раствор на основе ОЦК кристаллической решетки железа), в небольшом количестве присутствует  $\gamma$ -фаза (твердый раствор на основе ГЦК кристаллической решетки железа) и карбид сложного состава  $Me_6C$  (таблица 2).



**Рисунок 5.** Фрагменты рентгенограмм покрытия М9 (1) и интерфейса системы «покрытие (М9)/(сталь 30ХГСА) подложка» (2).

**Figure 5.** Fragments of radiographs of the M9 coating (1) and the interface of the “coating (M9)/(30KhGSA steel) substrate” system (2).

**Таблица 2.** Расчетные данные, полученные из дифрактограмм, представленных на рисунке 5.

**Table 2.** Calculated data obtained from the diffraction patterns presented in Figure 5.

| Фаза                                             | Доля фазы, мас. % | Параметры решетки, Å | Размеры ОКР, нм |
|--------------------------------------------------|-------------------|----------------------|-----------------|
| наплавка                                         |                   |                      |                 |
| $\alpha$ -Fe                                     | 65                | $a = 2.887$          | 52              |
| $\gamma$ -Fe                                     | 12                | $a = 3.598$          | 34              |
| $Me_{23}C_6$                                     | 11                | $a = 10.466$         | 23              |
| $Me_6C$                                          | 7                 | $a = 11.002$         | 28              |
| $Fe_2C$                                          | 5                 | $a = 2.701$          |                 |
| система «наплавка (М9Ю)/(сталь 30ХГСА) подложка» |                   |                      |                 |
| $\alpha$ -Fe                                     | 92                | $a = 2.870$          | 43              |
| $\gamma$ -Fe                                     | 5                 | $a = 3.600$          | -               |
| $Me_6C$                                          | 3                 | -                    | -               |

Для покрытия стали М9 установлено, что структура подложки сформирована зернами перлита и зернами феррита (твердый раствор на основе  $\alpha$ -железа). Перлит имеет пластинчатую морфологию и сформирован чередующимися пластинками цементита и  $\alpha$ -железа.

В зернах переходного слоя наблюдается пластинчатая структура, что может свидетельствовать о мартенситной природе формирования структуры  $\alpha$ -фазы. По границам зерен наблюдаются протяженные прослойки, имеющие строение, характерное для эвтектического превращения, т.е. по границам зерен располагаются эвтектика пластинчатого типа.

Как отмечалось выше, переходный слой имеет пластинчатую структуру (рис. 6) Методами просвечивающей электронной дифракционной микроскопии установлено, что пластины сформированы сдвиговым механизмом и по морфологическому признаку могут быть идентифицированы как пластинчатый и пакетный мартенсит (рис. 6). По границам пластин и границам пакетов располагаются наноразмерные (15-32 нм) частицы карбида железа – цементит (рис. 6, в, частицы цементита указаны стрелками). Одновременно с этим вдоль границ кристаллов мартенсита располагаются протяженные прослойки остаточного аустенита (рис. 6, г).

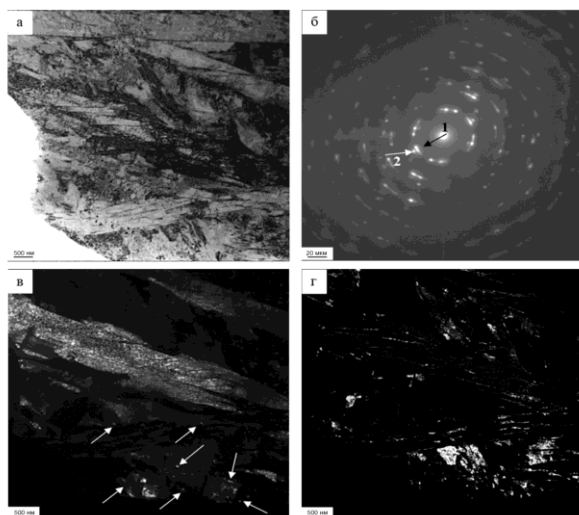
Таким образом, в процессе формирования наплавки в переходном слое формируется многофазная структура, представленная мартенситом, остаточным аустенитом и карбидами железа

## Закключение

Проведены электронно-микроскопические исследования структуры и фазового состава зоны контакта плазменной наплавки быстрорежущей стали марки Р2М9 на среднеуглеродистую сталь марки 30 ХГСА в исходном состоянии. В исходном состоянии выявлена мартенситная структура переходной зоны с прослойками остаточного аустенита, которая содержит наноразмерные карбиды ванадия, молибдена, вольфрама и железа глобулярной, пластинчатой и сферической форм.

Установлено, что формирование покрытия из стали М9 сопровождается созданием переходного слоя толщиной до 100 мкм. Показано, что основной фазой переходного слоя является  $\alpha$ -фаза (твердый раствор на основе ОЦК кри-

сталлической решетки железа), в небольшом количестве присутствует  $\gamma$ -фаза (твердый раствор на основе ГЦК кристаллической решетки железа) и карбиды сложного состава  $\text{Me}_6\text{C}$  и  $\text{Me}_{23}\text{C}_6$ , а также  $\text{MoC}$  и цементит. Установлено, что зона контакта наплавки и стали 30ХГСА не содержит микротрещин и микропор. Показано, что в зоне контакта структура стали 30ХГСА сохраняет феррито-перлитное состояние, однако наблюдается существенное (до 1,5-2,3 мкм) снижение размеров зерен феррита. Установлено, что переходный слой имеет закалочную структуру, представленную пластинами и пакетами мартенсита, прослойками остаточного аустенита и наноразмерными частицами цементита. Переходный слой, непосредственно примыкающий к наплавке, содержит протяженные прослойки эвтектики, сформированной  $\alpha$ -фазой и карбидами состава  $\text{M}_{23}\text{C}_6$  и  $\text{MoC}$ .



**Рисунок 6.** Электронно-микроскопическое изображение структуры интерфейса системы «наплавка (M9)/(сталь 30ХГСА) подложка»; а – светлое поле; б – микроэлектроннограмма; в, г – темные поля, полученные в рефлексах  $[110]\alpha\text{-Fe} + [121]\text{Fe}_3\text{C}$  (в) и  $[111]\gamma\text{-Fe}$  (г); на (б) стрелками указаны рефлекссы, в которых получены темные поля: 1 – для (в); 2 – (г); на (в) стрелками указаны частицы цементита.

**Figure 6.** Electron microscopic image of the interface structure of the “surfacing (M9)/(30KhGSA steel) substrate” system; a – bright field; b – microelectron diffraction pattern; c, d – dark fields obtained in reflections  $[110]\alpha\text{-Fe} + [121]\text{Fe}_3\text{C}$  (c) and  $[111]\gamma\text{-Fe}$  (d); in (b) the arrows indicate the reflections in which the dark fields were obtained: 1 – for (c); 2 – (d); in (c) the arrows indicate the cementite particles.

## Список литературы

1. Nefedev S.P., Vdovin K.N., Emelyushin A.N. Peculiarities of forming of the wear-resistant cast iron coating structure on steel 45 upon plasma-powder surfacing // *Materials Science Forum*. 2016. T.870. С. 141-148
2. Плазменное упрочнение поверхности: монография / Нефедьев С.П., Емелюшин А.Н. – Старый Оскол: ТНТ, 2021, 156с.
3. Darmawan W., Quesada J., Marchal R. Characteristics of laser melted AISI-T1 high speed steel and its wear resistance // *Surf. Eng.* 2007. V. 23. No. 2. P. 112 – 119.
4. Emelyushin A.N., Petrochenko E.V., Nefed'ev S.P. Investigation of the structure and impact-abrasive resistance of coatings of the Fe-C-Cr-Mn-Si system, additionally alloyed with nitrogen // *Welding International*. 2013. V. 27 №2. PP. 150-153.
5. Нефедьев С.П., Емелюшин А.Н. Влияние азота на формирование структуры и свойств плазменных покрытий типа 10P6M5 // *Вестник Югорского государственного университета*. 2021. №3(62). С. 33-45. DOI: 10.17816/byusu20210233-45
6. Мозговой И.В., Шнейдер Е.А. Наплавка быстрорежущей стали / Омск. Изд-во «ОмГТУ», 2016. 200с.
7. Ivanov Yu.F., Gromov V.E., Potekaev A.I., Guseva T.P., Chapaikin A.S., Vashchuk E.S., Romanov D.A. Structure and properties of R18U surfacing of high-speed steel after its high tempering // *Russian Physics Journal*. 2023. V.66. №7., November. PP. 731-739 DOI: 10.1007/s11182-023-02999-w
8. Rakhadilov B.K., Zhurerova L.G., Scheffler M., Khassenov A.K. Change in high temperature wear resistance of high speed steel by plasma nitriding // *Bulletin of the Karaganda University. Physics Series*. 2018. V. 3(91). PP. 59–65. EDN: KJWHYN.
9. Громов В.Е., Юрьев А.Б., Иванов Ю.Ф., Миненко С.С., Коновалов С.В. Электронно-микроскопическое исследование зоны контакта наплавка (быстрорежущая сталь - P2M9) – подложка (сталь 30ХГСА) // *Вестник СиБГИУ*, 2025. № 2(52). С. 3-8
10. Potekaev A.I., Gromov V.E., Yuriev A.B., Ivanov Yu.F., Kononov S.V., Minenko S.S., Semin A.P., Chapaikin A.S., Litovchenko I.Yu. Transition zone structure in the fast-cutting

surfaced layer – substrate system // Russian Physics Journal. 2024. V. 67. №8. PP. 1107-1113

11. Kremnev L.S. From High-Speed Tungsten Steel to High-Temperature Molybdenum Steel: A Century of High-Speed Steel. // Steel in Translation. 2009. V.39. №12 PP. 1111-1118

12. Кремнев Л.С., Онегина А.К., Виноградова Л.А. Особенности превращений, структуры и свойств молибденовых быстрорежущих сталей // Металловедение и термическая обработка металлов, 2009. №12(654) С. 13-19. EDN: KZSBKP

13. Кремнев Л.С. Теория легирования и создание на ее основе теплостойких инструментальных сталей и сплавов // МнТОМ. 2008. №11. С. 18-28. EDN: KVXKKF

14. Купалова И.К. Фазовый анализ и фазовый состав быстрорежущих сталей (обзор) // Заводская лаборатория. 1983. №1. С. 27-40

15. Вострецов Г.Н. Деформационная способность наплавленного теплостойкого металла типа Р2М8 при мартенситном превращении // Вестник Сибирского государственного промышленного университета. 2012. №1. С. 7-10

16. Carter C.B., Williams D.B. Transmission Electron Microscopy. - Berlin: Springer International Publishing, 2016. – 518 p.

17. Kumar C.S.S.R. Transmission Electron Microscopy. Characterization of Nanomaterials. – New York: Springer, 2014. – 717 p.

Egerton F.R. Physical Principles of Electron Microscopy. – Basel: Springer International Publishing, 2016. – 196 p.

### Информация об авторах

*И. В. Баклушина – аспирант кафедры естественнонаучных дисциплин им. проф. В.М. Финкеля, заместитель директора Института открытого образования Сибирского государственного промышленного университета.*

*В. Е. Громов – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой естественнонаучных дисциплин им. проф. В.М. Финкеля Сибирского государственного промышленного университета.*

*Ю. Ф. Иванов – доктор физико-математических наук, профессор, главный научный сотрудник Института Сильноточной электроники СО РАН.*

*И.Ю. Литовченко – доктор физико-математических наук, заведующий лабораторией материаловедения сплавов с памятью*

*формы, руководитель ЦКП «НАНОТЕХ» Института физики прочности и материаловедения СО РАН.*

*Т. П. Гусева соискатель кафедры естественнонаучных дисциплин им. проф. В.М. Финкеля Сибирского государственного промышленного университета.*

*С. А. Невский – доктор технических наук, доцент кафедры естественнонаучных дисциплин им. проф. В.М. Финкеля Сибирского государственного промышленного университета.*

### References

1. Nefedev, S.P., Vdovin, K.N., Emelyushin, A.N. (2016). Peculiarities of forming the wear-resistant cast iron coating structure on steel 45 upon plasma-powder surfacing. Materials Science Forum, 870, 141–148.

2. Nefedev, S.P., Emelyushin, A.N. (2021). Plasma Surface Hardening: Monograph. Stary Oskol: TNT, 156 p.

3. Darmawan, W., Quesada, J., Marchal, R. (2007). Characteristics of laser melted AISI-T1 high speed steel and its wear resistance. Surface Engineering, 23(2), 112–119.

4. Emelyushin, A.N., Petrochenko, E.V., Nefedev, S.P. (2013). Investigation of the structure and impact-abrasive resistance of coatings of the Fe-C-Cr-Mn-Si system, additionally alloyed with nitrogen. Welding International, 27(2), 150–153.

5. Nefedev, S.P., Emelyushin, A.N. (2021). Influence of nitrogen on the formation of structure and properties of plasma coatings type 10P6M5. Bulletin of Yugra State University, 3(62), 33–45. DOI: 10.17816/byusu20210233-45.

6. Mozgovoy, I.V., Shneider, E.A. (2016). Surfacing of High-Speed Steel. Omsk: Publishing House "OmskSTU", 200 p.

7. Ivanov, Yu.F., Gromov, V.E., Potekaev, A.I., Guseva, T.P., Chapaikin, A.S., Vashchuk, E.S., Romanov, D.A. (2023). Structure and properties of R18U surfacing of high-speed steel after its high tempering. Russian Physics Journal, 66(7), 731–739. DOI: 10.1007/s11182-023-02999-w.

8. Rakhadilov, B.K., Zhurero, L.G., Scheffler, M., Khassenov, A.K. (2018). Change in high temperature wear resistance of high speed steel by plasma nitriding. Bulletin of Karaganda University, Physics Series, 3(91), 59–65. EDN: KJWHYN.

9. Gromov, V.E., Yuryev, A.B., Ivanov, Yu.F., Minenko, S.S., Konovalov, S.V. (2025). Electron microscopy study of the contact zone between surfacing (high-speed steel R2M9) and substrate (steel 30KhGSA). *Bulletin of SibGIU*, 2(52), 3–8.
10. Potekaev, A.I., Gromov, V.E., Yuriev, A.B., Ivanov, Yu.F., Konovalov, S.V., Minenko, S.S., Semin, A.P., Chapaikin, A.S., Litovchenko, I.Yu. (2024). Transition zone structure in the fast-cutting surfaced layer–substrate system. *Russian Physics Journal*, 67(8), 1107–1113.
11. Kremnev, L.S. (2009). From high-speed tungsten steel to high-temperature molybdenum steel: a century of high-speed steel. *Steel in Translation*, 39(12), 1111–1118.
12. Kremnev, L.S., Onegina, A.K., Vinogradova, L.A. (2009). Features of transformations, structure, and properties of molybdenum high-speed steels. *Metallovedenie i Termicheskaya Obrabotka Metallov (Metal Science and Heat Treatment)*, 12(654), 13–19. EDN: KZSBKP.
13. Kremnev, L.S. (2008). Alloying theory and development of heat-resistant tool steels and alloys based on it. *MiTOM*, 11, 18–28. EDN: KVXKKF.
14. Kupalova, I.K. (1983). Phase analysis and phase composition of high-speed steels (review). *Zavodskaya Laboratoriya (Factory Laboratory)*, 1, 27–40.
15. Vostretsov, G.N. (2012). Deformation ability of deposited heat-resistant metal of type R2M8 under martensitic transformation. *Bulletin of Siberian State Industrial University*, 1, 7–10.
16. Carter, C.B., Williams, D.B. (2016). *Transmission Electron Microscopy*. Berlin: Springer International Publishing, 518 p.
17. Kumar, C.S.S.R. (2014). *Transmission Electron Microscopy. Characterization of Nanomaterials*. New York: Springer, 717 p.
18. Egerton, F.R. (2016). *Physical Principles of Electron Microscopy*. Basel: Springer International Publishing, 196 p.

### **Information about the authors**

*I. V. Baklushina – postgraduate student of the Department of Natural Sciences named after prof. V. M. Finkel, deputy director of the Institute of Open Education of the Siberian State Industrial University.*

*V. E. Gromov – doctor of physical and mathematical sciences, professor, head of the Department of Natural Sciences named after prof. V. M. Finkel of the Siberian State Industrial University.*

*Yu. F. Ivanov – doctor of physical and mathematical sciences, professor, chief researcher of the Institute of High-Current Electronics of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences.*

*I. Yu. Litovchenko – doctor of physical and mathematical sciences, head of the laboratory of materials science of shape memory alloys, head of the NANOTECH Shared Use Center of the Institute of Strength Physics and Materials Science of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences.*

*T. P. Guseva applicant of the Department of Natural Sciences named after prof. V. M. Finkel of the Siberian State Industrial University.*

*S. A. Nevsky – Doctor of Technical Sciences, Associate Professor of the Department of Natural Sciences named after Professor V. M. Finkel of the Siberian State Industrial University.*

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.  
The authors declare that there is no conflict of interest.

Статья поступила в редакцию 26.08.2025; одобрена после рецензирования 23.02.2026; принята к публикации 02.03.2026.

The article was received by the editorial board on 26 Aug. 2025; approved after reviewing 23 Feb. 2026; accepted for publication 02 Mar. 2026.

Научная статья

1.3.8. Физика конденсированного состояния (физико-математические науки)

УДК 538.9

doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2026.01.003

## МЕТОД ХАРТРИ-ФОКА ДЛЯ КРИСТАЛЛОВ С БАЗИСОМ ПСЕВДО-АТОМНЫХ ОРБИТАЛЕЙ

Алексей Болеславович Гордиенко<sup>1</sup>

<sup>1</sup>ФГБОУ «Кемеровский государственный университет», ул. Красная, 6, 650000, Кемерово, Россия

<sup>1</sup>gordi@kemsu.ru <https://orcid.org/0000-0001-7827-8692>

**Аннотация.** Рассматривается реализация расчетов электронной структуры кристаллов методом Хартри-Фока в приближении псевдопотенциала с использованием базиса локализованных, псевдо-атомных орбиталей (ПАО), включая особенности расчета матрицы обменного оператора, в том числе в смешанном базисе, учитывающим плоские волны (ПАО+ПВ), организацию вычислений для получения самосогласованного решения уравнений Хартри-Фока и последующего расчета зонной структуры, а также обсуждение результатов расчетов, выполненных для группы соединений  $A^{IV}$  (C, Si, Ge,  $\alpha$ -Sn), которые показали хорошее качественное и количественное согласие с результатами, полученными другими методами, в том числе полноэлектронными.

**Ключевые слова:** метод Хартри-Фока, точный обмен, псевдо-атомные орбитали, зонная структура.

---

**Для цитирования:** Гордиенко А.Б. Метод Хартри-Фока для кристаллов с базисом псевдо-атомных орбиталей // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2026. Т. 23, № 1. С. 33-42. doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2026.01.003.

---

Original article

## HARTREE-FOCK METHOD FOR CRYSTALS WITHIN THE BASIS OF PSEUDO-ATOMIC ORBITALS

Aleksei B. Gordienko<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Kemerovo State University, Krasnaya 6 st, Kemerovo, 650000, Russia

<sup>1</sup>gordi@kemsu.ru <https://orcid.org/0000-0001-7827-8692>

**Abstract.** The implementation is being considered for electronic structure calculations of crystals by the Hartree-Fock method in the pseudo-potential approximation using the basis of localized, pseudo-atomic orbitals (PAO), including the features of calculating the matrix of the exchange operator, within a mixed basis as well that takes into account the plane waves (PAO+PW), the arrangement of calculations to obtain a self-consistent solution of the Hartree-Fock equations and the subsequent calculation of the band structure, as well as a discussion of the results of calculations performed for the group of compounds  $A^{IV}$  (C, Si, Ge,  $\alpha$ -Sn), which demonstrated good qualitative and quantitative agreement with the results obtained by other methods, including all-electron as well.

**Keywords:** Hartree-Fock method, exact exchange, pseudo-atomic orbitals, band structure.

---

**For citation:** Gordienko A.B. (2026). Hartree-Fock method for crystals with the basis of pseudo-atomic orbitals. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedenia (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 23(1), 33-42. (In Russ.). doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2026.01.003.

---

## Введение

Метод Хартри-Фока (HF), как известно, является одним из ранних первопринципных (*ab-initio*) подходов к решению задачи описания свойств многоэлектронных систем, который и в настоящее время, в том числе как основа расширенных методов, широко используется для расчета электронной структуры атомов и молекул. Для кристаллов, как систем с пространственной периодичностью, применение метода HF исторически было более ограниченным, что связано не только с более сложной, чем в методе Хартри, математической структурой уравнений HF, но также и с дополнительным и очень заметным, по сравнению с системами конечного размера, увеличением трудоемкости вычислений за счет необходимости учета особенностей, обусловленных трансляционной симметрией. Большой вклад в решение первой из указанных проблем внес статистический  $X_\alpha$ -метод Слэтера [1], где нелокальный обменный оператор в одночастичных уравнениях был заменен приближенным, локальным выражением, зависящим только от электронной плотности, что в дальнейшем привело к формулировке строгого подхода, известного как теория функционала плотности [2, 3] (DFT) и который сейчас является наиболее популярным методом исследования электронной структуры кристаллов. В то же время, в рамках DFT остается открытым вопрос о форме обменно-корреляционного функционала, для которого пока что не существует универсального решения, а для большинства известных локальных (LDA), полулокальных (GGA, meta-GGA), форм, входящих в набор из порядка 400 функционалов [4], присутствует общая погрешность, обусловленная самодействием, что в случае кристаллов приводит к некорректным оценкам значений ширины запрещенной зоны и ряда других важных характеристик. Так как в методе HF вклад самодействия компенсируется полностью, то самая простая идея корректировки DFT состояла бы в том, чтобы использовать обменную часть функционала энергии в форме HF (точный обмен), а для электронных корреляций, которые в методе HF, наоборот, никак не учитываются, применять соответствующие выражения для энергий и потенциалов, разработанные в рамках DFT. Однако, как показано в [5], такой вариант не дает заметных улучшений и, даже с учетом градиентных по-

правок, приводит к погрешностям, выходящим за границы химической точности, так как указанное разделение является искусственным и не имеющим какого-либо строгого физического смысла [6]. Более эффективным является смешанный подход к построению выражения для функционала обменно-корреляционной энергии ( $E_{xc}$ ), предложенный также в работе [6] и основанный на строгой формуле адиабатической связи (*adiabatic connection*). Одной из форм таких гибридных функционалов является, например, однопараметрическое выражение [7]:

$$E_{xc} = E_{xc}^{DFT} + a_0(E_x^{HF} - E_{xc}^{DFT}) \quad (1)$$

где  $E_{xc}^{DFT}$  - обменно-корреляционная энергия в DFT,  $E_x^{HF}$  - обменная энергия в форме HF,  $a_0$  - параметр смешивания. Дальнейшее развитие идеи [6] привело к построению целого семейства гибридных функционалов, из которых наиболее известными являются B3LYP [8], PBE0 [9], HSE [10], а другие типы детально рассматриваются в обзоре [11].

Как следует из (1) и других, подобных выражений, основной вычислительной задачей и в методе HF, и методах DFT с гибридными функционалами, является расчет вкладов, обусловленных точным обменом и для периодических систем к настоящему времени разработано множество вариантов ее решения как в координатном, так и импульсном (обратном) пространстве. Методы первого типа представлены в [12-17], базис плоских волн (PW) используется в [18-27], линейаризованных присоединенных плоских волн (LAPW) в [28-31], линейных muffin-tin орбиталей (LMTO) в [32]. Как показывает анализ приведенных публикаций, задача реализации расчетов с точным обменом продолжает оставаться достаточно актуальной, что определяет цель настоящей работы, состоящую в разработке метода решения уравнений Хартри-Фока, который объединяет преимущества базиса локализованных функций в форме псевдо-атомных орбиталей (РАО) и стандартного для периодических систем базиса плоских волн.

## Методы: решение уравнений Хартри-Фока с базисом РАО.

Уравнения Хартри-Фока для периодических систем имеют вид

$$\left[ -\frac{1}{2}\nabla^2 + V_H[\rho; \mathbf{r}] + \hat{V}_x + V_Z \right] \psi_{n\mathbf{k}} = E_{n\mathbf{k}} \psi_{n\mathbf{k}}, \quad (2)$$

$$V_H[\rho; \mathbf{r}] = \int_{(\Omega)} \frac{\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}', \quad (3)$$

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{n\mathbf{k}} f_{n\mathbf{k}} |\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})|^2, \quad (4)$$

$$[\hat{V}_x \psi_{n\mathbf{k}}](\mathbf{r}) = -\frac{1}{2} \sum_{m\mathbf{q}} f_{m\mathbf{q}} \psi_{m\mathbf{q}}(\mathbf{r}) \int_{(\Omega)} \frac{\psi_{m\mathbf{q}}^*(\mathbf{r}') \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}', \quad (5)$$

где  $\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  – одночастичные функции,  $n\mathbf{k}$  – номер зоны и волновой вектор,  $V_H[\rho; \mathbf{r}]$  – кулоновский потенциал, создаваемый зарядом с плотностью  $\rho(\mathbf{r})$ ,  $V_Z$  – кулоновский потенциал ядер или, в случае метода псевдопотенциала, ионов,  $\Omega$  – объем кристалла,  $f_{n\mathbf{k}}$  – числа заполнения, суммирование в (4) выполняется по первой зоне Бриллюэна, а (5) определяет действие обменного оператора.

Решение уравнений HF (2)–(5) в методе линейной комбинации атомных орбиталей (LCAO) записывается в виде

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mu} C_{n\mathbf{k}\mu} \Phi_{\mathbf{k}\mu}(\mathbf{r}). \quad (6)$$

Базисные блоховские функции в (6) определены как

$$\Phi_{\mathbf{k}\mu}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{\mathbf{a}} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{a} + \boldsymbol{\tau}_i)} \varphi_{ilm}(\mathbf{r} - \mathbf{a} - \boldsymbol{\tau}_i), \quad (7)$$

где  $\mathbf{a}$  – вектор решетки,  $\boldsymbol{\tau}_i$  – положение атома  $i$  в элементарной ячейке кристалла,  $\varphi_{ilm}(\mathbf{r})$  – атомные орбитали, которые в настоящей работе имеют вид РАО [33–36],  $\mu \equiv (ilm)$  – объединенный индекс,  $lm$  – орбитальное и магнитное квантовые числа. Представление (6) для одночастичных функций приводит к обобщенной алгебраической задаче, для которой предварительным этапом является вычисление многоцентровых интегралов с атомными функциями и для кристаллов, как показано в [37, 38], очень эффективным является использование свойства периодичности функций  $\Phi_{\mathbf{k}\mu}$ , что позволяет представить их как Фурье-разложение по базису плоских волн

$$\Phi_{\mathbf{k}\mu}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{\mathbf{G}} e^{i(\mathbf{k} + \mathbf{G})\mathbf{r}} \Phi_{\mathbf{k}\mu}(\mathbf{G}), \quad (8)$$

$$\Phi_{\mathbf{k}\mu}(\mathbf{G}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \int_{(\Omega)} e^{-i(\mathbf{k} + \mathbf{G})\mathbf{r}} \Phi_{\mathbf{k}\mu}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \equiv \langle \mathbf{k} + \mathbf{G} | \Phi_{\mathbf{k}\mu} \rangle \quad (9)$$

Фурье-образы вычисляются достаточно легко, а вычисление матричных элементов в уравнении (1) сводится к суммированию рядов в обратном пространстве [37, 38], сходимость которых контролируется только одним параметром – числом плоских волн в разложении (8). Применение такой схемы к обменному оператору приводит к следующему выражению для соответствующего матричного элемента

$$\langle \Phi_{\mathbf{k}\mu} | \hat{V}_x | \Phi_{\mathbf{k}\nu} \rangle = \sum_{\mathbf{G}} \langle \Phi_{\mathbf{k}\mu} | \mathbf{k} + \mathbf{G} \rangle \langle \mathbf{k} + \mathbf{G} | \hat{V}_x | \Phi_{\mathbf{k}\nu} \rangle \quad (10)$$

и, таким образом, требует вычисления матрицы  $\hat{V}_x$  в смешанном базисе атомных орбиталей и плоских волн, что в работах, приведенных выше не рассматривалось, так как вычисления обычно выполнялись в "однородном" базисе.

Для вычисления смешанного матричного элемента в (10) рассмотрим действие обменного оператора на базисную функцию

$$[\hat{V}_x \Phi_{\mathbf{k}\nu}](\mathbf{r}) = -\frac{1}{2} \sum_{m\mathbf{q}} f_{m\mathbf{q}} \psi_{m\mathbf{q}}(\mathbf{r}) \int_{(\Omega)} \frac{\psi_{m\mathbf{q}}^*(\mathbf{r}') \Phi_{\mathbf{k}\nu}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}'. \quad (11)$$

Записывая парные функции как

$$\psi_{m\mathbf{q}}^*(\mathbf{r}) \Phi_{\mathbf{k}\nu}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{G}} Y_{m\mathbf{q}\nu\mathbf{k}}(\mathbf{G}) e^{i(\mathbf{k} - \mathbf{q} + \mathbf{G})\mathbf{r}}, \quad (12)$$

$$Y_{m\mathbf{q}\nu\mathbf{k}}(\mathbf{G}) = \frac{1}{\Omega_0} \int_{(\Omega_0)} e^{-i\mathbf{G}\mathbf{r}} u_{m\mathbf{q}}^*(\mathbf{r}) \Phi_{\mathbf{k}\nu}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (13)$$

$u_{m\mathbf{q}}(\mathbf{r})$  – периодическая часть  $\psi_{m\mathbf{q}}$ , определенная как

$$u_{m\mathbf{q}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} u_{m\mathbf{q}}(\mathbf{G}) e^{i\mathbf{G}\mathbf{r}}, \quad (14)$$

а  $\Omega_0$  – объем элементарной ячейки, соответственно, получим

$$[\hat{V}_x \Phi_{\mathbf{k}\nu}](\mathbf{r}) = -\frac{2\pi}{\Omega_0} \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{m\mathbf{q}} f_{m\mathbf{q}} u_{m\mathbf{q}}(\mathbf{r}) \times \sum_{\mathbf{G}} \frac{Y_{m\mathbf{q}\nu\mathbf{k}}(\mathbf{G})}{|\mathbf{k} - \mathbf{q} + \mathbf{G}|^2} e^{i(\mathbf{k} + \mathbf{G})\mathbf{r}} \quad (15)$$

Прямое использование формулы (15), будет очень неэффективным, так как при  $\mathbf{k} = \mathbf{q}$  и  $\mathbf{G} = 0$  это выражение содержит особенность, которая, хотя и является интегрируемой, но сильно замедляет сходимость сумм по  $\mathbf{q}$ . Метод исключения указанной особенности, который первоначально предложен в [39] и обобщен для произвольного типа решетки в [40], основан на использовании вспомогательной

функции, имеющей особенность, аналогичную (15). Тогда, отделяя в (15) сингулярное слагаемое аналогично [40], после несложных преобразований получим для (15) эквивалентное выражение

$$\begin{aligned} [\hat{V}_x \Phi_{kv}](\mathbf{r}) = & -\frac{2\pi}{\Omega_0} \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{m\mathbf{q} \neq \mathbf{k}} f_{m\mathbf{q}} u_{m\mathbf{q}}(\mathbf{r}) \times \\ & \times \sum_{\mathbf{G}} \frac{Y_{m\mathbf{q}\mathbf{k}}(\mathbf{G})}{|\mathbf{k} - \mathbf{q} + \mathbf{G}|^2} e^{i(\mathbf{k} + \mathbf{G})\mathbf{r}} - \\ & - \frac{2\pi}{\Omega_0} \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_m f_{m\mathbf{k}} u_{m\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \sum_{\mathbf{G} \neq 0} \frac{Y_{m\mathbf{k}\mathbf{k}}(\mathbf{G})}{|\mathbf{G}|^2} e^{i(\mathbf{k} + \mathbf{G})\mathbf{r}} + \\ & + \frac{2\pi}{\Omega_0} \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_m f_{m\mathbf{k}} u_{m\mathbf{k}}(\mathbf{r}) Y_{m\mathbf{k}\mathbf{k}}(\mathbf{0}) [\tilde{F} - F] e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}, \end{aligned} \quad (16)$$

где обозначено

$$\tilde{F} = \sum_{\mathbf{q} \neq 0} f(\mathbf{q}), \quad (17)$$

$$F = \frac{\Omega_0}{(2\pi)^3} \int_{(BZ)} f(\mathbf{q}) d\mathbf{q}, \quad (18)$$

В (17)-(18)  $f(\mathbf{q})$  – вспомогательная функция, имеющая при  $q \rightarrow 0$  особенность типа  $1/q^2$ . В настоящей работе для  $f(\mathbf{q})$  далее использовалась форма, предложенная в [40]

$$f_G(\mathbf{q}) = 4\pi^2 \left[ \frac{4 \sum_{j=1}^3 \mathbf{b}_j \sin \frac{\mathbf{q}\mathbf{a}_j}{2} \cdot \mathbf{b}_j \sin \frac{\mathbf{q}\mathbf{a}_j}{2} + 2 \sum_{j=1}^3 \mathbf{b}_j \sin \mathbf{q}\mathbf{a}_j \cdot \mathbf{b}_{j+1} \sin \mathbf{q}\mathbf{a}_{j+1} \right]^{-1} \quad (19)$$

где  $\mathbf{a}_j, \mathbf{b}_j$  – основные векторы трансляций в координатном и обратном пространстве, суммирование выполняется с учетом замены  $\mathbf{a}_4, \mathbf{b}_4 \rightarrow \mathbf{a}_1, \mathbf{b}_1$ , а интеграл по зоне Бриллюэна (18) вычислялся с использованием схемы, предложенной в [41]. Выражение (16) можно представить в более компактном виде, обозначая

$$\begin{aligned} \bar{Y}_{m\mathbf{q}\mathbf{k}}(\mathbf{G}) = & \frac{Y_{m\mathbf{q}\mathbf{k}}(\mathbf{G})}{|\mathbf{k} - \mathbf{q} + \mathbf{G}|^2} (1 - \delta_{\mathbf{k}\mathbf{q}}) + \\ & + \frac{Y_{m\mathbf{k}\mathbf{k}}(\mathbf{G})}{|\mathbf{G}|^2} (1 - \delta_{\mathbf{G}\mathbf{0}}) \delta_{\mathbf{k}\mathbf{q}} \\ & - Y_{m\mathbf{k}\mathbf{k}}(\mathbf{0}) [\tilde{F} - F] \delta_{\mathbf{G}\mathbf{0}} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{q}} \end{aligned} \quad (20)$$

Тогда

$$[\hat{V}_x \Phi_{kv}](\mathbf{r}) = -\frac{2\pi}{\Omega_0} \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \sum_{m\mathbf{q}} f_{m\mathbf{q}} u_{m\mathbf{q}}(\mathbf{r}) \bar{Y}_{m\mathbf{q}\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (21)$$

$$\bar{Y}_{m\mathbf{q}\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} \bar{Y}_{m\mathbf{q}\mathbf{k}}(\mathbf{G}) e^{i\mathbf{G}\mathbf{r}} \quad (22)$$

и смешанный матричный элемент в (10) окончательно запишется как

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k} + \mathbf{G} | \hat{V}_x | \Phi_{kv} \rangle = & -\frac{2\pi}{\Omega_0} \sum_{m\mathbf{q}} f_{m\mathbf{q}} \times \\ & \times \frac{1}{\Omega_0} \int_{(\Omega_0)} e^{-i\mathbf{G}\mathbf{r}} u_{m\mathbf{q}}(\mathbf{r}) \bar{Y}_{m\mathbf{q}\mathbf{k}}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \end{aligned} \quad (23)$$

С использованием полученных формул, а также обозначений для прямого и обратного Фурье-преобразования аналогично [27], общую схему вычислений матрицы обменного потенциала можно записать в следующем виде:

1. Вычисление  $u_{m\mathbf{q}}(\mathbf{r})$  и  $\Phi_{kv}(\mathbf{r})$

$$u_{m\mathbf{q}}(\mathbf{r}) = \text{FT}^{-1}[u_{m\mathbf{q}}(\mathbf{G})], \quad (24)$$

$$\Phi_{kv}(\mathbf{r}) = \text{FT}^{-1}[\Phi_{kv}(\mathbf{G})]. \quad (25)$$

2. Вычисление парной функции (12)

$$Y_{m\mathbf{q}\mathbf{k}}(\mathbf{G}) = \text{FT}[u_{m\mathbf{q}}^*(\mathbf{r}) \Phi_{kv}(\mathbf{r})]. \quad (26)$$

3. Вычисление  $Y_{m\mathbf{q}\mathbf{k}}(\mathbf{r})$

$$Y_{m\mathbf{q}\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \text{FT}^{-1}[Y_{m\mathbf{q}\mathbf{k}}(\mathbf{G})]. \quad (27)$$

4. Вычисление  $\langle \mathbf{k} + \mathbf{G} | \hat{V}_x | \Phi_{kv} \rangle$  (23)

$$\langle \mathbf{k} + \mathbf{G} | \hat{V}_x | \Phi_{kv} \rangle = -\frac{2\pi}{\Omega_0} \sum_{m\mathbf{q}} f_{m\mathbf{q}} \text{FT}[u_{m\mathbf{q}}(\mathbf{r}) \bar{Y}_{m\mathbf{q}\mathbf{k}}(\mathbf{r})]. \quad (28)$$

Таким образом, например в случае диэлектриков, для определения матрицы обменного потенциала необходимо выполнить  $5N_{occ}N_qN_\Phi$  Фурье-преобразований, где  $N_{occ}$ ,  $N_q$  и  $N_\Phi$  соответственно число занятых состояний, число точек  $\mathbf{q}$ -сетки в зоне Бриллюэна и размерность орбитального базиса.

В заключение настоящего раздела следует отметить некоторые особенности организации самосогласованного решения уравнений HF (2), а также последующего расчета зонной структуры. Первая задача, как и в других подобных работах, решалась с использованием двойного итерационного цикла, где вклады обменного потенциала обновляются во внешнем цикле, а одночастичные функции и электронная плотность во внутреннем. Расчет зонной структуры в методе HF также отличается по способу от аналогичного расчета в рамках DFT, где стандартной схемой являются вычисления с фиксированной электронной плотностью, когда одночастичные уравнения рассматриваются как линейные, а способ их решения для точек зоны Бриллюэна, которые, как правило, не входят в "самосогласованный" набор, фактически представляет собой интерполяционную схему.



Уравнения HF и для задачи расчета зонной структуры остаются нелинейными, интегро-дифференциальными, поэтому в этом случае также необходимо применение итерационных методов и в настоящей работе использовалась

схема с линейным смешиванием, представленная ранее в [28], при этом для получения решения с точностью для  $E_{nk}$  порядка  $10^{-8} \div 10^{-9}$  а.е. требовалось порядка 10-15 итераций.

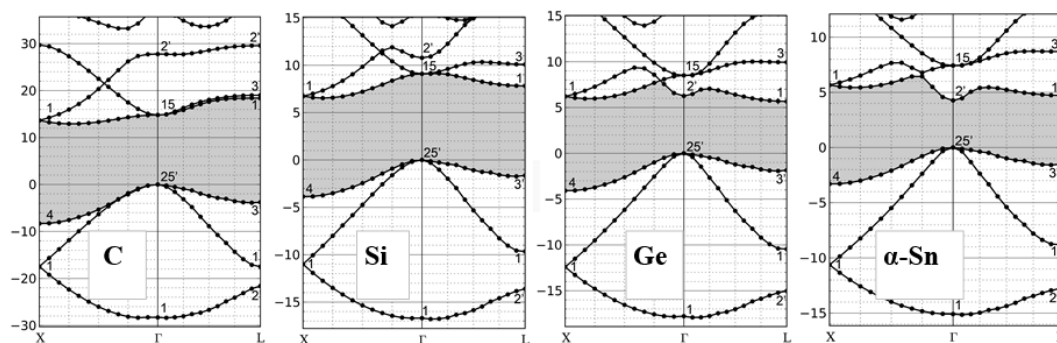


Рис.1. Зонная структура C, Si, Ge,  $\alpha$ -Sn, эВ

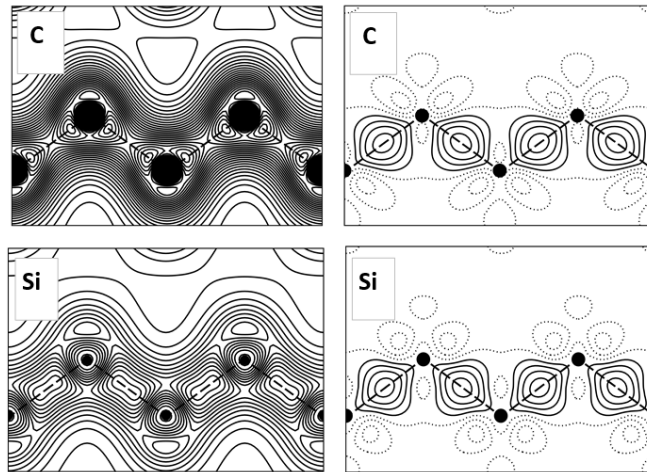
Fig.1. Band structure of C, Si, Ge,  $\alpha$ -Sn, eV

### 3. Результаты вычислений.

Для проверки схемы решения уравнений HF, представленной выше, были выполнены расчеты электронной структуры для ряда соединений  $A^{IV}$ ,  $A = C, Si, Ge, \alpha$ -Sn, со структурой алмаза. Вычисления проводились с базисом PAO, во всех случаях включающим *single*- и *double*- $\zeta$  функции *s*-, *p*- и *d*- типа, в разложениях базисных PAO, согласно (8) использовались плоские волны с энергиями от 20.25 до 121.0 Ry. Для описания электрон-ионного взаимодействия использовались сохраняющие норму, сепарабельные HGH-псевдопотенциалы [42]. Электронная плотность и обменный потенциал вычислялись с использованием метода специальных точек [43, 44], на сетке MP [44] размерностью  $6 \times 6 \times 6$  точек, которая вместе с компенсацией особенностей обеспечивает сходимость обменной энергии порядка  $10^{-4}$  а.е., [41]. Для расчета сингулярных интегралов (18) использовалась схема [41] с равномерной и сферической сетками размерности  $40 \times 40 \times 40$  и  $40 \times 40 \times 80$  соответственно.

Зонная структура  $A^{IV}$  показана на рис.1, где вершина валентной зоны совмещена с началом отсчета по шкале энергий (эВ), а цифрами обозначены символы неприводимых представлений группы  $O_h^7$ . Во всех случаях наблюдаются основные эффекты, характерные для расчетов методом HF: заметное, в сравнении с результа-

тами LDA и экспериментом, уширение валентной зоны, а также сильное увеличение ширины запрещенной зоны  $E_g$ , которое, увеличиваясь по ряду C, Si, Ge, достигает порядка 8.5 раз по отношению к соответствующим экспериментальным значениям. Для  $\alpha$ -Sn происходит и качественное изменение характера электронной структуры, которая приобретает вид, соответствующий прямозонному диэлектрику с шириной запрещенной зоны порядка 4.25 эВ, хотя  $\alpha$ -Sn является полуметаллом. В то же время, сравнение значений для основных энергетических интервалов, приведенных в Таблице 1, показывает достаточное хорошее согласие результатов, полученных в настоящей работе и работах других авторов. При этом наиболее близкими являются результаты полноэлектронного расчета методом LAPW [28], а для метода LMTO [32] значения всех интервалов оказываются несколько меньше, за исключением ширины валентной зоны, где наблюдается обратное. Данная особенность отмечалась в [28], где такой эффект объясняли использованием приближения атомных сфер и не самосогласованным способом вычислений, который, что можно отметить в дополнение к аргументам [28], основан не на прямом решении уравнений HF, а на применении теории возмущений, где в качестве исходного приближения использовались результаты расчетов в локальном приближении.



**Рис.2.** Полная валентная (слева) и разностная ( $\delta\rho = \rho^{\text{HF}} - \rho^{\text{LDA}}$ , справа) плотность в C и Si в плоскости [110] (сплошные линии –  $\delta\rho > 0$ , пунктирные –  $\delta\rho < 0$ )

**Fig.2.** Total valence (left) and difference ( $\delta\rho = \rho^{\text{HF}} - \rho^{\text{LDA}}$ , right) density in C and Si in the [110] plane (solid lines –  $\delta\rho > 0$ , dotted –  $\delta\rho < 0$ )

Таблица 1. Основные энергетические параметры электронной структуры  $A^{\text{IV}}$ , эВ. Значения в столбцах перечислены в порядке: настоящая работа, LAPW [28], LMTO [32], PP [28].

Table 1. The basis energetic parameters for electronic structure of  $A^{\text{IV}}$ , eV. The values in the columns are presented in the order : present work, LAPW [28], LMTO [32], PP [28]

|                                                    | C                                | Si                               | Ge                       | $\alpha\text{-Sn}$     |
|----------------------------------------------------|----------------------------------|----------------------------------|--------------------------|------------------------|
| $\Gamma_1^{\text{v}} - \Gamma_{25'}^{\text{v}}$    | 28.29<br>29.40<br>29.90<br>29.10 | 16.68<br>17.10<br>18.00<br>17.10 | 17.77<br>–<br>18.90      | 15.10<br>–<br>16.00    |
| $\Gamma_{25'}^{\text{v}} - \Gamma_{15}^{\text{c}}$ | 14.80<br>14.70<br>14.60<br>15.00 | 9.10<br>9.00<br>8.70<br>9.30     | 8.51<br>–<br>7.90<br>–   | 7.41<br>–<br>6.60<br>– |
| $\Gamma_{25'}^{\text{v}} - \Gamma_2^{\text{c}}$    | 27.78<br>24.50<br>23.70<br>24.80 | 10.78<br>10.60<br>9.30<br>11.00  | 6.26<br>–<br>4.30<br>–   | 4.25<br>–<br>2.60<br>– |
| $X_4^{\text{v}} - X_1^{\text{c}}$                  | 21.96<br>21.50<br>21.30<br>21.30 | 10.60<br>10.50<br>10.00<br>10.70 | 10.29<br>–<br>10.19<br>– | 8.85<br>–<br>8.10<br>– |
| $L_{3'}^{\text{v}} - L_1^{\text{c}}$               | 23.17<br>22.00<br>21.30<br>21.80 | 9.45<br>9.40<br>8.10<br>9.60     | 7.51<br>–<br>6.08<br>–   | 6.22<br>–<br>4.60<br>– |
| $E_{\text{g}}$                                     | 12.92<br>12.40                   | 6.55<br>6.30                     | 5.97<br>–                | 4.25<br>–              |
| Эксп. [32]                                         | 12.10<br>12.90<br>5.50           | 5.60<br>6.40<br>1.20             | 4.20<br>–<br>0.7         | 2.60<br>–<br>0.0       |

На рис.2 для кристаллов алмаза и кремния приведены карты распределений полной валентной, а также разностной  $\delta\rho = \rho^{\text{HF}} - \rho^{\text{LDA}}$  электронной плотности. Как видно, в первом случае картина визуально неотличима от "стандартной", которая получается, например, в LDA расчетах и содержит области значительной локализации заряда в окрестности атомов и на линиях тетраэдрических связей. В то же время, усиление локализирующего действия обменного потенциала HF в сравнении с его локальным вариантом (LDA), приводит к увеличению плотности заряда на линиях связи и появлению областей отрицательной  $\delta\rho$ , имеющих форму лепестков. При этом общая картина разностной плотности (рис.2), включая и мелкие детали, подобна приведенной в [28] для полно-электронного метода LAPW, а по абсолютной величине эффект перераспределения заряда также является сравнительно небольшим, на что указывают значения  $\delta\rho$ , которые в максимуме составляют в Si и C порядка  $0.008 \div 0.01$  а.е.<sup>-3</sup>, подтверждая известный вывод о близком подобии одночастичных функций в методах HF и DFT.

### Заключение.

1. В настоящей работе представлена и реализована схема расчета электронной структуры кристаллов методом Хартри-Фока с использованием базиса локализованных, псевдо-атомных функций. Как показали расчеты, выполненные для группы соединений  $A^{\text{IV}}$ , включая C, Si, Ge и  $\alpha$ -Sn, значения основных энергетических характеристик, общая форма и детали распределений плотности заряда находятся в очень хорошем согласии с аналогичными, но полученными, в том числе, с помощью полно-электронных методов.

### Список литературы

1. Слэтер Дж. Методы самосогласованного поля для молекул и твердых тел. М. Мир. 1978. 658 С.
2. Hohenberg P., Kohn W. Inhomogeneous Electron Gas // Phys. Rev. B. – 1964. – V. 136. – P. 864-871.
3. Kohn W., Sham L.J. Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects // Phys. Rev. – 1965. – V.140. – P. A1133-A1138.
4. Lehtola S., Steigemann C., Oliveira M.J.T., Marques M.A.L. Recent developments in libxc — A comprehensive library of functionals for density functional theory // SoftwareX. – 2018. – V.7. – P. 1-5.
5. Clementi E., Chakravorty S.J. A comparative study of density functional models to estimate molecular atomization energies // J. Chem. Phys. – 1990. – V.93. – P. 2591-2602.
6. Becke A.D. A new mixing of Hartree-Fock and local density functional theories // J. Chem. Phys. – 1993. – V.98. – P. 1372-1377.
7. Becke A.D. Density functional thermochemistry. IV. A new dynamical correlation functional and implications for exact exchange mixing // J. Chem. Phys. – 1996. – V.104. – P. 1040-1046.
8. Becke, A.D. Density functional thermochemistry. III. The role of exact exchange // J. Chem. Phys. – 1993. – V.98. – P. 5648-5652.
9. Perdew J. P., Ernzerhof M., Burke K. Rationale for mixing exact exchange with density functional approximations // J. Chem. Phys. – 1996. – V.105. – P. 9982-9985.
10. Heyd J., G. E. Scuseria G. E., Ernzerhof M. Hybrid functionals based on a screened Coulomb potential // J. Chem. Phys. – 2003. – V. 118. – P. 8207-8215.
11. Арбузников А.В. Гибридные обменно-корреляционные функционалы и потенциалы. Развитие концепции // Ж. Структ. Химии – 2007. – Т.48. – С. S5-S38
12. Dovesi R., Orlando R., Roetti C., Pisani C., Saunders V.R. The Periodic Hartree-Fock Method and Its Implementation in the Crystal Code // Phys. stat sol.(b) – 2000. – V.217. – P. 63-88.
13. Levchenko S.V., Ren X., Wieferink J., Johanni R., Rinke P., Blum V., Scheffler M. Hybrid functionals for large periodic systems in an all-electron, numeric atom-centered basis framework // Comput. Phys. Comm. – 2015. – V.192. – P. 60-69.
14. Fernández J.J., Tablero C., Wahnón P. Development and implementation of the exact exchange method for semiconductors using a localized basis set // Comput. Mat. Sci. 2003. – V.28. – P. 274-286.
15. Bussy A., Hutter J. Efficient periodic resolution-of-the-identity Hartree-Fock exchange method with k-point sampling and Gaussian basis sets // J. Chem. Phys. – 2024. – V.160. – P. 064116(1-12).
16. Boffi N., Jain M., Natan A. Efficient Computation of the Hartree-Fock Exchange in Real-Space with Projection Operators // J. Chem. Theory Comput. – 2016. – V.12. – P. 3614-3622.
17. Guidon M., Hutter J., Vondele V. Robust Periodic Hartree-Fock Exchange for Large-Scale Simulations Using Gaussian Basis Sets // J. Chem. Theory Comput. – 2009. – V.5. – P. 3010-3021.

18. Ohkoshi I. An ab initio Hartree-Fock pseudopotential approach to the ground-state properties of Si // *J. Phys. C: Solid State Phys.* – 1985. – V.18. – P. 5415-5427.
19. Lin L. Adaptively Compressed Exchange Operator // *J. Chem. Theory Comput.* – 2016. – V.12. – P. 2242-2249.
20. Carnimeo I., Baroni S., Gianozzi P. Fast hybrid density-functional computations using plane-wave basis sets // *Electron. Struct.* – 2019. – V.1. – P. 015009(1-10)
21. Duchemin I., Gygi F. A scalable and accurate algorithm for the computation of Hartree-Fock exchange // *Comput. Phys. Comm.* – 2010. – V.181. – P. 855-860.
22. Paier J., Marsman M., Hummer K., Kresse G., Gerber I.C., Ángyán J.G. Screened hybrid density functionals applied to solids // *J. Chem. Phys.* – 2006. – V.124. – P. 154709 (1-13).
23. Clark S.J., Robertson J. Screened exchange density functional applied to solids // *Phys. Rev. B* – 2010. – V.82. – P. 085208(1-11).
24. Holzwarth N.A.W., Xu X. Analysis of numerical methods for evaluating the Fock exchange integral in a plane-wave basis // *Phys. Rev. B* – 2011. – V.84. – P. 113102(1-4).
25. Sorouri A., Foulkes W.M.C., Hine N.D.M. Accurate and efficient method for the treatment of exchange in a plane-wave basis // *J. Chem. Phys.* – 2006. – V.124. – P. 064105(1-7).
26. Barnes T.A., Kurth T., Cerrier P., Wichmann N., Prendergast D., Kent P.R.C., Deslippe J. Improved treatment of exact exchange in Quantum ESPRESSO // *Comput. Phys. Comm.* – 2017. – V.214. – P. 52-58.
27. Chawla S., Voth G.A. Exact exchange in ab initio molecular dynamics: An efficient plane-wave based algorithm // *J. Chem. Phys.* – 1998. – V.108(12). – P. 4697-4700.
28. Massidda S., Posternak M., Baldareshi A. Hartree-Fock LAPW approach to the electronic properties of periodic systems // *Phys. Rev. B* – 1993. – V.48(8). – P. 5058-5068
29. Schlipf M., Betzinger M., Friedrich C., Ležaić M., Blügel S. HSE hybrid functional within the FLAPW method and its application to GdN // *Phys. Rev. B* – 2011. – V.84. – P. 125142 (1-11).
30. Betzinger M., Friedrich C., Blügel S. Hybrid functionals within the all-electron FLAPW method: Implementation and applications of PBE0 // *Phys. Rev. B* – 2010. – V.81. – P. 195117(1-13).
31. Redies M., Michalíček G., Bouaziz J., Terboven C., Müller M.S., Blügel S., Wortmann D. Fast All-Electron Hybrid Functionals and Their Application to Rare-Earth Iron Garnets // *Front. Matter.* 2022. – V.9. – P. 851458(1-11).
32. Svane A. Hartree-Fock band-structure calculations with the linear muffin-tin-orbital method: Application to C, Si, Ge, and  $\alpha$ -Sn // *Phys. Rev. B* – 1987. – V.35(11). – P. 5496-5502.
33. Jansen R.W., Sankey O.F. Ab initio linear combination of pseudo-atomic-orbital scheme for the electronic properties of semiconductors: Results for ten materials // *Phys. Rev. B* – 1987. – V.36(12). – P. 6520-6531.
34. Jansen R.W., Sankey O.F. Theory of relative native- and impurity-defect abundances in compound semiconductors and the factors that influence them // *Phys. Rev. B* – 1989. – V.39(5). – P. 3192-3206.
35. Гордиенко А.Б., Поплавной А.С. Расчет электронной структуры кристаллов в базисе псевдоорбиталей // *Изв. вузов. Физика.* – 1997. – т.40(1). – С.54-58
36. Gordienko A.B., Poplavnoi A.S. The Application of ab-initio Linear Combination of Pseudo-Atomic-Orbital Scheme for the Electronic Structure of Lithium Azide  $\text{LiN}_3$  // *Phys. stat. slo.(b)* – 1997. – V.202(2). – P. 941-949.
37. Zunger A., Cohen M. L. Self-consistent pseudopotential calculation of the bulk properties of Mo and W // *Phys. Rev. B* – 1979. – V.19(2). – P. 568-582.
38. Louie S., Ho K.-M., Cohen M. L. Self-consistent mixed-basis approach to the electronic structure of solids // *Phys. Rev. B* – 1979. – V.19(4). – P. 1774-1782.
39. Gygi F., Baldareshi A. Self-consistent Hartree-Fock and screened-exchange calculations in solids: Application to silicon // *Phys. Rev. B.* – 1986. – V.34. – P.4405-4408.
40. Carrier P., Rohra S., Görling A. General treatment of the singularities in Hartree-Fock and exact-exchange Kohn-Sham methods for solids // *Phys. Rev. B.* – 2007. – V.75. – P. 205126 (1-10).
41. Гордиенко А.Б., Коробко К.В. Вычисление сингулярных интегралов по зоне Бриллюэна // *Изв. вузов. Физика.* – 2024. – Вып. 67.(3) – С.82-89.
42. Hartwigsen C., Goedecker S., Hütter Relativistic separable dual-space Gaussian pseudopotentials from H to Rn // *J. Phys. Rev. B.* – 1998. – V.58(7), – P. 3641-3662.
43. Chadi D. J., Cohen M. L. Special Points in the Brillouin Zone // *Phys. Rev. B.* – 1973. – V. 8. – P. 5747-5753.
44. Monkhorst H. J., Pack J. D. Special points for Brillouin-zone integrations // *Phys. Rev. B.* – 1976. – V. 13. – P. 5188-5192.

#### **Информация об авторах**

*А. Б. Гордиенко - доктор физико-математических наук, профессор Кемеровского государственного университета.*

## References

- Slater J. C. Self-consistent Field for Molecules and Solids. 1974. New-York, McGraw-Hill. - 640 P.
- Hohenberg P., Kohn W. Inhomogeneous Electron Gas // *Phys. Rev. B.* - 1964. - V. 136. - P. 864-871.
- Kohn W., Sham L.J. Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects // *Phys. Rev.* - 1965. - V.140. - P. A1133-A1138.
- Lehtola S., Steigemann C., Oliveira M.J.T., Marques M.A.L. Recent Developments in libxc — A Comprehensive Library of Functionals for Density Functional Theory // *SoftwareX.* - 2018. - V.7. - P. 1-5.
- Clementi E., Chakravorty S.J. A Comparative Study of Density Functional Models to Estimate Molecular Atomization Energies // *J. Chem. Phys.* - 1990. - V.93. - P. 2591-2602.
- Becke A.D. A New Mixing of Hartree-Fock and Local Density Functional Theories // *J. Chem. Phys.* - 1993. - V.98. - P. 1372-1377.
- Becke A.D. Density Functional Thermochemistry. IV. A New Dynamical Correlation Functional and Implications for Exact Exchange Mixing // *J. Chem. Phys.* - 1996. - V.104. - P. 1040-1046.
- Becke, A.D. Density Functional Thermochemistry. III. The Role of Exact Exchange // *J. Chem. Phys.* - 1993. - V.98. - P. 5648-5652.
- Perdew J. P., Ernzerhof M., Burke K. Rationale for Mixing Exact Exchange with Density Functional Approximations // *J. Chem. Phys.* - 1996. - V.105. - P. 9982-9985.
- Heyd J., G. E. Scuseria G. E., Ernzerhof M. Hybrid Functionals Based on a Screened Coulomb Potential // *J. Chem. Phys.* - 2003. - V. 118. - P. 8207-8215.
- Arbuznikov, A.V. Hybrid Exchange Correlation Functionals and Potentials: Concept Elaboration // *J Struct Chem* - 2007. V.48 (Suppl 1). - S1-S31
- Dovesi R., Orlando R., Roetti C., Pisani C., Saunders V.R. The Periodic Hartree-Fock Method and Its Implementation in the Crystal Code // *Phys. stat sol.(b)* - 2000. - V.217. - P. 63-88.
- Levchenko S.V., Ren X., Wieferink J., Johanni R., Rinke P., Blum V., Scheffler M. Hybrid Functionals for Large Periodic Systems in an All-electron, Numeric Atom-centered Basis Framework // *Comput. Phys. Comm.* - 2015. - V.192. - P. 60-69.
- Fernández J.J., Tablero C., Wahnón P. Development and Implementation of the Exact Exchange Method for Semiconductors Using a Localized Basis Set // *Comput. Mat. Sci.* 2003. - V.28. - P. 274-286.
- Bussy A., Hutter J. Efficient Periodic Resolution-of-the-identity Hartree-Fock Exchange Method with k-point Sampling and Gaussian Basis Sets // *J. Chem. Phys.* - 2024. - V.160. - P. 064116(1-12).
- Boffi N., Jain M., Natan A. Efficient Computation of the Hartree-Fock Exchange in Real-Space with Projection Operators // *J. Chem. Theory Comput.* - 2016. - V.12. - P. 3614-3622.
- Guidon M., Hutter J., Vondede V. Robust Periodic Hartree-Fock Exchange for Large-Scale Simulations Using Gaussian Basis Sets // *J. Chem. Theory Comput.* - 2009. - V.5. - P. 3010-3021.
- Ohkoshi I. An ab initio Hartree-Fock Pseudopotential Approach to the Ground-state Properties of Si // *J. Phys. C: Solid State Phys.* - 1985. - V.18. - P. 5415-5427.
- Lin L. Adaptively Compressed Exchange Operator // *J. Chem. Theory Comput.* - 2016. - V.12. - P. 2242-2249.
- Carnimeo I., Baroni S., Gianozzi P. Fast Hybrid Density-functional Computations Using Plane-wave Basis Sets // *Electron. Struct.* - 2019. - V.1. - P. 015009(1-10)
- Duchemin I., Gygi F. A Scalable and Accurate Algorithm for the Computation of Hartree-Fock Exchange // *Comput. Phys. Comm.* - 2010. - V.181. - P. 855-860.
- Paier J., Marsman M., Hummer K., Kresse G., Gerber I.C., Ángyán J.G. Screened Hybrid Density Functionals Applied to Solids // *J. Chem. Phys.* - 2006. - V.124. - P. 154709 (1-13).
- Clark S.J., Robertson J. Screened Exchange Density Functional Applied to Solids // *Phys. Rev. B* - 2010. - V.82. - P. 085208(1-11).
- Holzwarth N.A.W., Xu X. Analysis of Numerical Methods for Evaluating the Fock Exchange Integral in a Plane-wave Basis // *Phys. Rev. B* - 2011. - V.84. - P. 113102(1-4).
- Sorouri A., Foulkes W.M.C., Hine N.D.M. Accurate and Efficient Method for the Treatment of Exchange in a Plane-wave Basis // *J. Chem. Phys.* - 2006. - V.124. - P. 064105(1-7).
- Barnes T.A., Kurth T., CARRIER P., Wichmann N., Prendergast D., Kent P.R.C., Deslippe J. Improved Treatment of Exact Exchange in Quantum ESPRESSO // *Comput. Phys. Comm.* - 2017. - V.214. - P. 52-58.
- Chawla S., Voth G.A. Exact Exchange in ab-initio Molecular Dynamics: An Efficient Plane-wave Based Algorithm // *J. Chem. Phys.* - 1998. - V.108(12). - P. 4697-4700.
- Massidda S., Posternak M., Baldareshi A. Hartree-Fock LAPW Approach to the Electronic Properties of Periodic Systems // *Phys. Rev. B* - 1993. - V.48(8). - P. 5058-5068
- Schlipf M., Betzinger M., Friedrich C., Ležaić M., Blügel S. HSE Hybrid Functional within the FLAPW Method and Its Application to

- GdN // Phys. Rev. B – 2011. – V.84. – P. 125142 (1-11).
30. Betzinger M., Friedrich C., Blügel S. Hybrid Functionals within the All-electron FLAPW Method: Implementation and Applications of PBE0 // Phys. Rev. B – 2010. – V.81. – P. 195117(1-13).
31. Redies M., Michalick G., Bouaziz J., Terboven C., Müller M.S., Blügel S., Wortmann D. Fast All-Electron Hybrid Functionals and Their Application to Rare-Earth Iron Garnets // Front. Matter. 2022. – V.9. – P. 851458(1-11).
32. Svane A. Hartree-Fock Band-Structure Calculations with the Linear Muffin-tin-orbital Method: Application to C, Si, Ge, and  $\alpha$ -Sn // Phys. Rev. B – 1987. – V.35(11). –P. 5496-5502.
33. Jansen R.W., Sankey O.F. Ab-initio Linear Combination of Pseudo-atomic-orbital Scheme for the Electronic Properties of Semiconductors: Results for Ten Materials // Phys. Rev. B – 1987. – V.36(12). –P. 6520-6531.
34. Jansen R.W., Sankey O.F. Theory of Relative Native- and Impurity-defect Abundances in Compound Semiconductors and the Factors That Influence Them // Phys. Rev. B – 1989. – V.39(5). –P. 3192-3206.
35. Gordienko A. B., Poplavnoi A.S. Calculation of the Electronic Structure of Crystals Using a Pseudoorbital Basis // Russian Physics Journal. – 1997. V. 40(1). –P. 47-50.
36. Gordienko A.B., Poplavnoi A.S. The Application of Ab-initio Linear Combination of Pseudo-Atomic-Orbital Scheme for the Electronic Structure of Lithium Azide  $\text{LiN}_3$  // Phys. stat. slo.(b) – 1997. –V.202(2). – P. 941-949.
37. Zunger A., Cohen M. L. Self-consistent Pseudopotential Calculation of the Bulk Properties of Mo and W // Phys. Rev. B – 1979. – V.19(2). – P. 568-582.
38. Louie S., Ho K.-M., Cohen M. L. Self-consistent Mixed-basis Approach to the Electronic Structure of Solids // Phys. Rev. B – 1979. – V.19(4). –P. 1774-1782.
39. Gygi F., Baldareshi A. Self-consistent Hartree-Fock and Screened-exchange Calculations in Solids: Application to Silicon // Phys. Rev. B. – 1986. –V.34. – P.4405-4408.
40. Carrier P., Rohra S., Görling A. General Treatment of the Singularities in Hartree-Fock and Exact-exchange Kohn-Sham Methods for Solids // Phys. Rev. B. – 2007. – V.75. – P. 205126 (1-10).
41. Gordienko A. B., Korobko K. V. Calculation of Singular Integrals over Brillouin Zone. // Izv. vusov, Fizika. – 2024. – V. 67.(3) –P.82-89. (in Russ.)
42. Hartwigsen C., Goedecker S., Hütter J. Relativistic Separable Sual-space Gaussian Pseudopotentials from H to Rn // J. Phys. Rev. B. – 1998. – V.58(7),– P. 3641-3662.
43. Chadi D. J., Cohen M. L. Special Points in the Brillouin Zone // Phys. Rev. B. – 1973. – V. 8. – P. 5747-5753.
44. Monkhorst H. J., Pack J. D. Special Points for Brillouin-zone Integrations // Phys. Rev. B. – 1976. – V. 13. – P. 5188–5192.

#### **Information about the authors**

*A. B. Gordienko - Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor of the Kemerovo State University.*

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.  
The authors declare that there is no conflict of interest.

Статья поступила в редакцию 22.12.2025; одобрена после рецензирования 23.02.2026; принята к публикации 02.03.2026.

The article was received by the editorial board on 22 Dec. 2025; approved after reviewing 23 Feb. 2026; accepted for publication 02 Mar. 2026.

Научная статья

1.3.8. Физика конденсированного состояния (физико-математические науки)

УДК 538.93

doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2026.01.004

## ЗОННАЯ СТРУКТУРА И ЭНЕРГИЯ СВЯЗИ В СОЕДИНЕНИЯХ $\text{Cu}_2\text{X}$ И $\text{AgCuX}$ ( $\text{X} = \text{S}, \text{Se}, \text{Te}$ )

Алиса Данисовна Давлетшина<sup>1</sup>, Роберт Асгатович Якшибаев<sup>2</sup>

<sup>1,2</sup>Кафедра общей физики, Уфимский университет науки и технологий, г. Уфа, Россия

<sup>1</sup>davletshinaalisa@rambler.ru, <https://orcid.org/0000-0001-7630-405X>

<sup>2</sup>yakshibaeva@uust.ru, <https://orcid.org/0000-0002-9120-3932>

**Аннотация.** В данной работе приведены результаты расчета зонной структуры, плотности состояний и энергии связи в бинарных халькогенидах меди  $\text{Cu}_2\text{X}$  и тройных халькогенидах меди и серебра  $\text{AgCuX}$  ( $\text{X} = \text{S}, \text{Se}, \text{Te}$ ) в высокотемпературной кубической фазе с использованием программного пакета BIOVIA Materials Studio DMol<sup>3</sup> и распределения электронной плотности с использованием программного пакета Quantum Espresso, которые основаны на теории функционала электронной плотности. Установлено, что зонная структура характеризуется  $p$ - $d$ - и  $s$ - $p$ -гибридизацией энергетических уровней металлов и халькогена. Бинарные халькогениды меди  $\text{Cu}_2\text{X}$  и тройные халькогениды меди и серебра  $\text{AgCuX}$  ( $\text{X} = \text{S}, \text{Se}, \text{Te}$ ) в высокотемпературной кубической фазе являются узкозонными полупроводниками. Тройные соединения имеют большую ширину запрещенной зоны, чем бинарные соединения.

Известно, что одним из факторов, влияющих на величину ионной проводимости, является энергия связи. Показано, что при анионном замещении  $\text{Te-Se-S}$  в соединениях  $\text{Cu}_2\text{X}$  и  $\text{AgCuX}$  происходит уменьшение энергии связи на пару ионов, что способствует переходу катионов в подвижное состояние и соответственно приводит к росту ионной проводимости.

**Ключевые слова:** халькогениды меди и серебра, зонная структура, гибридизация, электронная плотность, энергия связи.

**Благодарности:** работа выполнена в рамках государственного задания, соглашение № 075-03-2024-123/1 от 15.02.2024, тема № 324-21.

**Для цитирования:** Давлетшина А.Д., Якшибаев Р.А. Зонная структура и энергия связи в соединениях  $\text{Cu}_2\text{X}$  и  $\text{AgCuX}$  ( $\text{X} = \text{S}, \text{Se}, \text{Te}$ ) // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2026. Т. 23, № 1. С. 43-50. doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2026.01.004.

Original article

## BAND STRUCTURE AND BINDING ENERGY IN $\text{Cu}_2\text{X}$ AND $\text{AgCuX}$ ( $\text{X} = \text{S}, \text{Se}, \text{Te}$ ) COMPOUNDS

Alisa D. Davletshina<sup>1</sup>, Robert A. Yakshibaev<sup>2</sup>

<sup>1,2</sup>Department of General Physics, Ufa University of Science and Technology, Ufa, Russia

<sup>1</sup>davletshinaalisa@rambler.ru, <https://orcid.org/0000-0001-7630-405X>

<sup>2</sup>yakshibaeva@uust.ru, <https://orcid.org/0000-0002-9120-3932>

**Abstract.** This paper presents the results of calculating the band structure, density of states, and energy of binary chalcogenides  $\text{Cu}_2\text{X}$  and ternary copper and silver chalcogenides  $\text{AgCuX}$  ( $\text{X} = \text{S}, \text{Se}, \text{Te}$ ) in the high-temperature cubic phase using BIOVIA Materials Studio DMol<sup>3</sup>. The electron density distribution was calculated using the Quantum Espresso software, which are based on the theory of electronic density functional. It is established that the band structure is characterized by  $p$ - $d$  and  $s$ - $p$  hybridization of the energy levels of the metals and chalcogen. Binary copper chalcogenides  $\text{Cu}_2\text{X}$  and ternary copper and silver chalcogenides  $\text{AgCuX}$  ( $\text{X} = \text{S}, \text{Se}, \text{Te}$ ) in the high-

temperature cubic phase are narrow-bandgap semiconductors. Ternary compounds have a larger band gap than binary compounds.

It is known that one of the factors influencing the value of ionic conductivity is the binding energy. It has been shown that the anionic substitution of Te-Se-S in  $\text{Cu}_2\text{X}$  and  $\text{AgCuX}$  compounds results in a decrease in the binding energy per pair of ions, which promotes the transition of cations to a mobile state and, accordingly, leads to an increase in ionic conductivity.

**Keywords:** copper and silver chalcogenides, band structure, hybridization, electron density, binding energy.

**Acknowledgements:** the work was completed under a government contract, agreement № 075-03-2024-123/1 dated February 15, 2024, subject № 324-21

**For citation:** Davletshina A.D., Yakshibaev R.A. (2026). Band structure and binding energy in  $\text{Cu}_2\text{X}$  and  $\text{AgCuX}$  ( $\text{X} = \text{S}, \text{Se}, \text{Te}$ ) compounds. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 23(1), 43-50. (In Russ.). doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2026.01.004.

## Введение

Интерес к исследованию явлений электронного и ионного переноса в халькогенидах меди и серебра обусловлен тем, что они, обладая полупроводниковыми свойствами, являются перспективными термоэлектрическими материалами [1, 2]. Особенностью этих систем является то, что наряду с преимущественной электронной проводимостью в них наблюдается высокая ионная проводимость ( $\sim 1 \text{ ом}^{-1}\cdot\text{см}^{-1}$ ), обусловленная одновалентными катионами меди и серебра [3-7]. В настоящее время накоплен богатый экспериментальный материал по исследованию электронной и ионной проводимости [3-7], по исследованию явлений самодиффузии, химической диффузии и термодиффузии [5, 7-9]. Изучены фазовые соотношения в широком интервале составов и определены типы кристаллических структур, температурные интервалы их стабильности [6, 10-11].

Соединения  $\text{Ag}_{2-x}\text{Cu}_x\text{X}$  ( $\text{X} = \text{S}, \text{Se}, \text{Te}$ ) обладают простой кристаллической структурой, широкими областями растворимости в твердом состоянии и образуют стабильные соединения при эквимоллярных составах  $\text{Cu}$  и  $\text{Ag}$ . Эти особенности выдвигают их в число модельных систем при различных расчетах. Зонная структура бинарных халькогенидов исследована хорошо, но имеются значительные разногласия в результатах различных авторов [6, 12-13].

Зонная структура сплавов халькогенидов меди и серебра ( $\text{Cu}_2\text{X}-\text{Ag}_2\text{X}$ ) остается мало исследованной [14].

В данной работе представлены результаты расчета зонной структуры в соединениях  $\text{Cu}_2\text{X}$  и  $\text{AgCuX}$  ( $\text{X} = \text{S}, \text{Se}, \text{Te}$ ) в высокотемпературной кубической фазе с целью изучения ее трансформации с изменением состава по катионной и анионной подрешеткам. Также прове-

дены расчеты энергии связи и распределения электронной плотности.

## Методика расчета

Расчеты зонной структуры и энергии связи в исследуемых соединениях были проведены с использованием программного пакета BIOVIA Materials Studio DMol<sup>3</sup> [15], которая основана на теории функционала электронной плотности. При расчете обменно-корреляционные эффекты учитывались в meta-general-gradient-approximation (m-GGA) и general-gradient-approximation (GGA). Распределение электронной плотности было рассчитано с использованием программного пакета Quantum Espresso [16]. Значения  $k$ -точек обратной решетки задаются при помощи метода Монкхорста-Пака [17] на сетке  $2 \times 2 \times 2$ .

При расчетах для меди учитываются  $3d$ -,  $4s$ -электроны, для серебра –  $4d$ -,  $5s$ -, для серы –  $3s$ -,  $3p$ -, для селена –  $4s$ -,  $4p$ -, для теллура –  $5s$ -,  $5p$ -электроны.

Расчеты были проведены в высокотемпературной кубической фазе  $Fm\bar{3}m$  для  $\text{Cu}_2\text{X}$  и  $F\bar{4}3m$  для  $\text{AgCuX}$ .

Высокосимметричная кристаллическая структура была преобразована в симметрию  $P1$ , при которой точки первой зоны Бриллюэна имеют следующие значения:  $\Gamma$  (0 0 0),  $F$  (0 0,5 0),  $Q$  (0 0,5 0,5),  $Z$  (0 0 0,5),  $B$  (0,5 0 0) (рис. 1). Данное преобразование обусловлено тем, что суперионное состояние характеризуется отклонением катионов от равновесного положения.



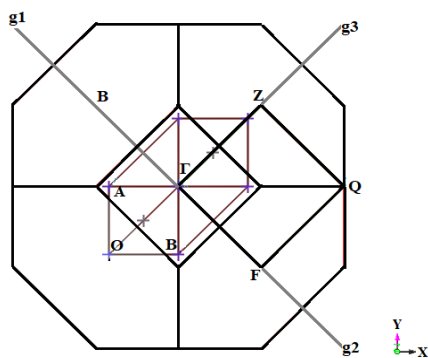


Рис. 1. Первая зона Бриллюэна для ГЦК структуры

Fig. 1. The 1<sup>st</sup> Brillouin zone of FCC structure

### Зонная структура

Рассмотрим результаты расчета зонной структуры и плотности электронных состояний в исследуемых соединениях с использованием функционала GGA RPBE (revised Perdew-Burke-Ernzerhof) (рис.2, 3).

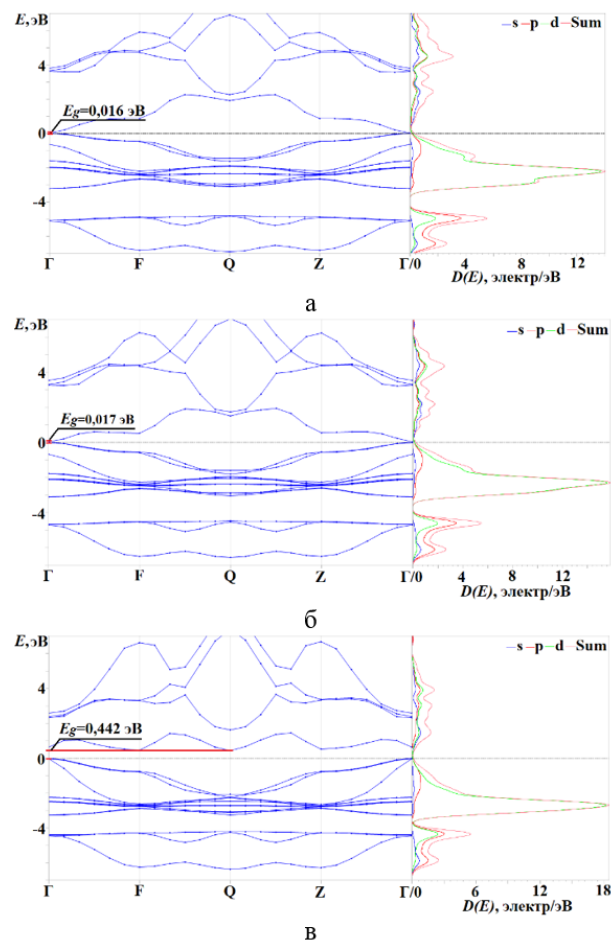
На рис. 2а приведена зонная структура и плотность электронных состояний сульфида меди. Энергия Ферми соответствует 0 эВ. Потолок валентной зоны и дно зоны проводимости находятся в точке  $\Gamma$ . Ширина запрещенной зоны  $E_g$  равна 0,016 эВ. Анализ парциальной и полной плотности состояний показывает, что потолок валентной зоны образован преимущественно 3d-состояниями меди с незначительным вкладом 3p-состояний серы. Максимальной плотности состояний на уровне энергии -2 эВ соответствуют 3d-состояния меди. Дно зоны проводимости образовано 4s-состояниями меди, а также 3p-состояниями серы.

Зонная структура  $\text{Cu}_2\text{Se}$  (рис. 2б) имеет на качественном уровне подобный характер зонной структуре  $\text{Cu}_2\text{S}$ . Ширина запрещенной зоны  $\text{Cu}_2\text{Se}$  равна 0,017 эВ. В случае  $\text{Cu}_2\text{Te}$  (рис. 2в) ширина запрещенной зоны равна 0,442 эВ. Потолок валентной зоны находится в точке  $\Gamma$ , а дно зоны проводимости в точке Q, т.е. теллурид меди является непрямозонным полупроводником.

Сравнение результатов расчета зонной структуры халькогенидов меди показывает, что при анионном замещении S-Se-Te изменяется ширина запрещенной зоны и для  $\text{Cu}_2\text{Te}$  ее величина на один порядок больше, чем для  $\text{Cu}_2\text{S}$  и  $\text{Cu}_2\text{Se}$ .

Полученные нами значения  $E_g$  (табл. 1) меньше, чем литературные данные, полученные экспериментально:  $\text{Cu}_2\text{S}$  имеет ширину за-

прещенной зоны 0,9-1,07 эВ [6],  $\text{Cu}_2\text{Se}$  – 1,1; 1,2 эВ [6] и  $\text{Cu}_2\text{Te}$  – 0,9-1,07 эВ [6].

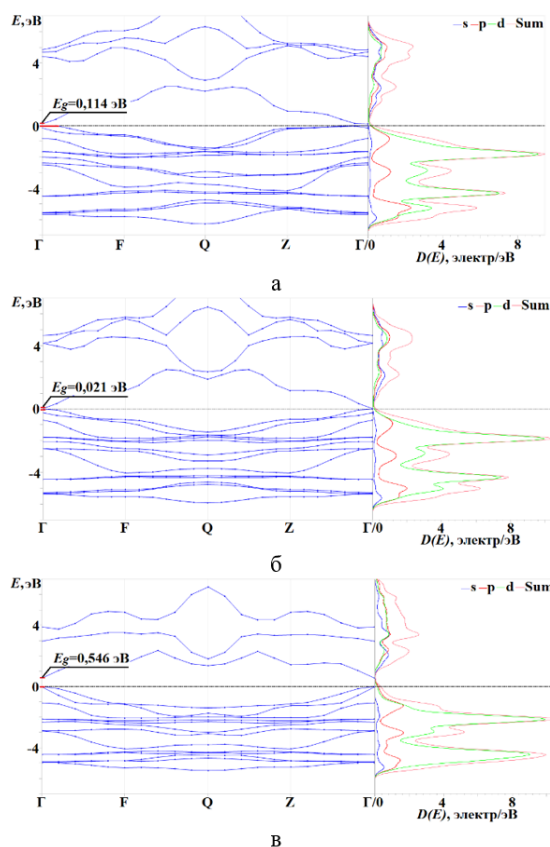
Рис. 2. Зонная структура халькогенидов меди  $\text{Cu}_2\text{S}$  (а),  $\text{Cu}_2\text{Se}$  (б) и  $\text{Cu}_2\text{Te}$  (в)Fig. 2. Band structure of copper chalcogenides  $\text{Cu}_2\text{S}$  (a),  $\text{Cu}_2\text{Se}$  (b) and  $\text{Cu}_2\text{Te}$  (c)

На рис. 3а приведена зонная структура и плотность состояний для  $\text{AgCuS}$ . Ширина запрещенной зоны  $E_g$  в данном случае равна 0,114 эВ. Потолок валентной зоны находится в направлении  $\Gamma$ -F, а дно зоны проводимости в точке  $\Gamma$ . Анализ парциальной и полной плотности состояний показывает, что потолок валентной зоны образован преимущественно 4d-состояниями серебра и 3d-состояниями меди с незначительным вкладом 3p-состояний серы.

Максимальной плотности состояний на уровне энергии -1,6 эВ соответствуют 3d-состояния меди, а на уровне энергии -4,1 эВ – 4d-состояния серебра. Дно зоны проводимости образовано 5s-состояниями серебра и 4s-состояниями меди, а также 3p-состояниями серы.

Для AgCuSe (рис. 3б) и AgCuTe (рис. 3в) расположение энергетических уровней подобно расположению энергетических уровней для AgCuS, но переход из валентной зоны в зону проводимости находится в точке Г.

Сравнение результатов расчета зонной структуры AgCuS, AgCuSe и AgCuTe (рис. 3) показывает, что при анионном замещении происходит изменение ширины запрещенной зоны. Ширина запрещенной зоны имеет наибольшее значение для AgCuTe, а наименьшее значение – для AgCuSe.



**Рис. 3.** Зонная структура халькогенидов меди и серебра AgCuS (а), AgCuSe (б) и AgCuTe (в)

**Fig. 3.** Band structure of copper and silver chalcogenides AgCuS (a), AgCuSe (b) and AgCuTe (c)

Для оценки зависимости зонной структуры от типа функционала также были проведены расчеты с использованием функционалов PBE (Perdew-Burke-Ernzerhof), PW91 (Perdew-Wang 1991) и MS0 (Made Simple Zero). Получено, что во всех случаях характер расположения энергетических уровней сохраняется, но при этом изменяется ширина запрещенной зоны (табл. 1).

**Таблица. 1.** Значения ширины запрещенной зоны при различных типах функционалов

**Table. 1.** The values of the band gap for different types of functional

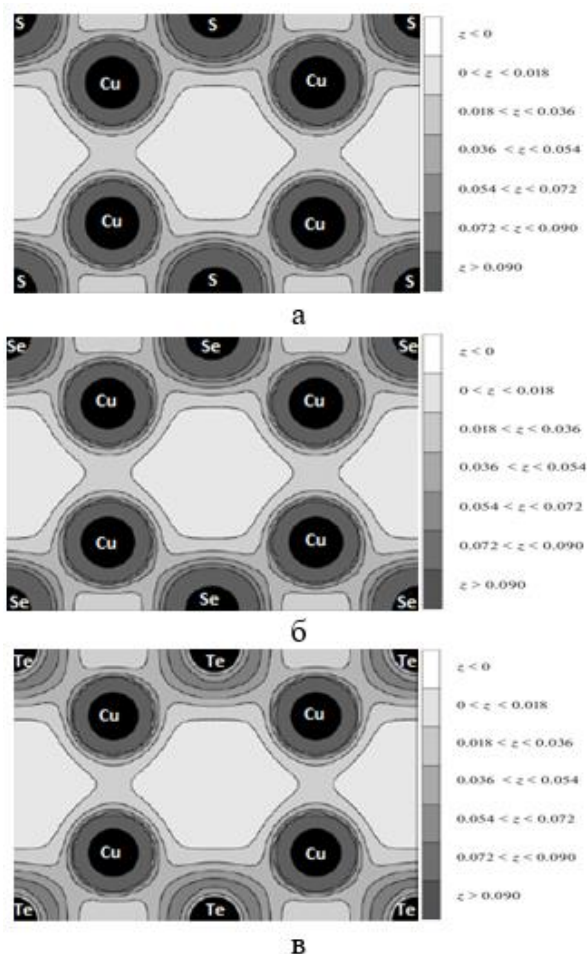
| $E_g$ , эВ         | GGA PBE | GGA RPBE | GGA PW91 | mGG A MS0 |
|--------------------|---------|----------|----------|-----------|
| Cu <sub>2</sub> S  | 0,014   | 0,016    | 0,014    | 0,016     |
| Cu <sub>2</sub> Se | 0,013   | 0,017    | 0,019    | 0,011     |
| Cu <sub>2</sub> Te | 0,304   | 0,442    | 0,320    | 0,302     |
| AgCuS              | 0,053   | 0,114    | 0,066    | 0,113     |
| AgCuSe             | 0,033   | 0,021    | 0,022    | 0         |
| AgCuTe             | 0,433   | 0,546    | 0,421    | 0,371     |

Сравнение зонных структур бинарных халькогенидов меди и тройных халькогенидов меди и серебра показывает, что замена половины катионов меди катионами серебра приводит к увеличению ширины запрещенной зоны и уменьшению ширины валентной зоны.

### Энергия связи

Рассмотрим результаты расчета распределения электронной плотности (рис. 4 и 5) и энергии связи (табл. 2) в халькогенидах Cu<sub>2</sub>X и AgCuX, рассчитанные с использованием функционала GGA RPBE.

На рис. 4 приведено распределение электронной плотности в Cu<sub>2</sub>X (X = S, Se, Te).

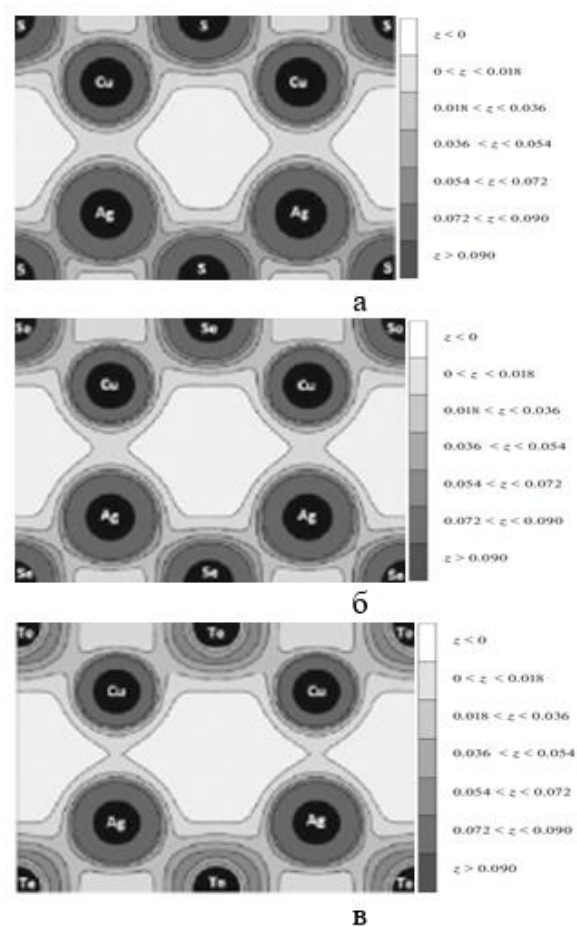


**Рис. 4.** Распределение электронной плотности в  $\text{Cu}_2\text{S}$  (а),  $\text{Cu}_2\text{Se}$  (б) и  $\text{Cu}_2\text{Te}$  (в)

**Fig. 4.** Electron density distributions in  $\text{Cu}_2\text{S}$  (a),  $\text{Cu}_2\text{Se}$  (b) and  $\text{Cu}_2\text{Te}$  (c)

При анионном замещении S-Se-Te в халькогенидах меди электронная плотность в направлении Cu-X практически не меняется, однако в направлении Cu-Cu область перекрытия электронных облаков незначительно уменьшается, что обусловлено увеличением ионного радиуса в ряду S (1,84 Å) – Se (1,98 Å) – Te (2,1 Å) [18].

Согласно распределению электронной плотности в  $\text{AgCuX}$  ( $\text{X} = \text{S}, \text{Se}, \text{Te}$ ) (рис. 5), при анионном замещении Te-Se-S электронная плотность в направлении Ag/Cu-X остается практически постоянной, однако при этом происходит увеличение перекрытия электронных облаков в направлении Ag-Cu.



**Рис. 5.** Распределение электронной плотности в  $\text{AgCuS}$  (а),  $\text{AgCuSe}$  (б) и  $\text{AgCuTe}$  (в)

**Fig. 5.** Electron density distributions in  $\text{AgCuS}$  (a),  $\text{AgCuSe}$  (b) and  $\text{AgCuTe}$  (c)

Энергия связи в соединениях  $\text{Cu}_2\text{X}$  и  $\text{AgCuX}$  представлена в табл. 2. Согласно полученным результатам расчета, в ряду S-Se-Te наибольшей энергией связи обладают теллуриды.

Сравнение полученных результатов с величиной ионной проводимости [3, 19, 20] показывает, что при замещении халькогена в ряду S-Se-Te происходит уменьшение ионной проводимости и в этом же направлении увеличивается энергия связи на пару ионов. Это мы связываем с увеличением степени ковалентности связи в ряду S-Se-Te.

**Таблица 2.** Энергия связи в соединениях AgCuX и величина ионной проводимости**Table 2.** Binding energy in AgCuX compounds and ionic conductivity

| Соединение         | $E_{св}$ , эВ/пару ионов | $\sigma_i$ , Ом <sup>-1</sup> см <sup>-1</sup> |
|--------------------|--------------------------|------------------------------------------------|
| Cu <sub>2</sub> S  | 16,11                    | 1,60 [19]                                      |
| Cu <sub>2</sub> Se | 17,23                    | 1,51 [19]                                      |
| Cu <sub>2</sub> Te | 19,03                    | 0,30 [19]                                      |
| AgCuS              | 18,39                    | 2,38 [3]                                       |
| AgCuSe             | 19,85                    | 2,04 [20]                                      |
| AgCuTe             | 21,72                    | 0,78 [20]                                      |

Увеличение энергии связи на пару ионов при анионном замещении S-Se-Te хорошо согласуется с литературными данными по степени ионности химической связи, оцененными по соотношению электроотрицательностей [6].

### Выводы

На основе анализа полученных результатов можно сделать следующие выводы:

- зонная структура халькогенидов меди и серебра характеризуется *p-d*- и *s-p*-гибридизацией энергетических уровней металлов и халькогена;
- данные соединения в высокотемпературной кубической фазе являются узкозонными полупроводниками;
- показано, что одним из факторов, влияющих на величину ионной проводимости, является энергия связи. При анионном замещении Te-Se-S в соединениях Cu<sub>2</sub>X AgCuX (X= S, Se, Te) происходит уменьшение энергии связи, что способствует переходу катионов в подвижное состояние и соответственно приводит к росту ионной проводимости.

### Список литературы

1. Deng Ph, Rabenbauer A., Vosseler K., Venturini J., Nilges T. AgCuS: a single material diode with fast switching times // Adv. Funct. Mater. 2023. V. 33. 2214882.

2. Liu F., Yu H., Fu J., Zhang X. Good thermoelectric performance and stability in copper sulfide synthesized by hydrothermal method and densified by HP technique // J. Mater Sci: Mater Electron. 2023. V. 34. 1163.

3. Kadrugulov R.F., Yakshibaev R.A., Khasanov M.A. Phase Relations, Ionic Conductivity and Diffusion in the Alloys of Cu<sub>2</sub>S and Ag<sub>2</sub>S Mixed Conductors // Ionics. 2001. V. 7. P. 156–160.

4. Yakshibaev R.A., Mukhamadeeva N.N., Kadrugulov R.F. Phase relations, ionic transport, and diffusion in the alloys of Ag<sub>2</sub>Te-Cu<sub>2</sub>Te mixed conductors // Phys. Stat. Solidi(a). 1990. V. 121. P. 111-117.

5. Ishikawa T., Miyatani S. Electronic and Ionic Conduction in Cu<sub>2-δ</sub>Se, Cu<sub>2-δ</sub>S and Cu<sub>2-δ</sub>(Se, S) // J. Phys. Soc. Japan. 1977. V. 42. P. 159-167.

6. Горбачев В.В. Полупроводниковые соединения  $A_2^I B^VI$ . М.: Металлургия, 1980. 132 с.

7. Абрикосов Н.Х., Банкина В.Ф., Порецкая Л.В., Скуднова Е.В., Чижевская С.Н., Полупроводниковые халькогениды и сплавы на их основе: М.: Наука, 1975. 220 с.

8. Becker K.D., Schmalzried H., von Wurb V. The chemical diffusion coefficient in (low temperature)  $\alpha$ -Ag<sub>2</sub>S determined by an electrochemical relaxation method // Solid State Ionics. 1983. V. 11. P. 213-219.

9. Bucur R.V., Berger R. Electrochemical potentiometric determination of the diffusion coefficient of copper in low digenite, a copper sulfide // Solid State Ionics. 1995. V. 76. P. 291-296.

10. Tsushiya Y. The diffuse X-ray scattering of silver-chalcogenide-type fast-ion conductors // J. Phys. C: Solid State Phys. 1986. V. 19. P. L637-L641.

11. Cava R.J., Reidinger F., Wuensch B.J. Mobile ion distribution and anharmonic thermal motion in fast ion conducting Cu<sub>2</sub>S // Solid State Ionics. 1981. V. 5. P. 501-504.

12. Shao Z.P., Shi C.L. First principles calculation of magnetic resonance properties of Cu<sub>2-δ</sub>X

( $\text{X} = \text{Se}, \text{S}, \text{Te}$ ) // Journal of Applied Mathematics and Physics. 2021. V. 9. № 6. P. 1245-1256.

13. Kikuchi H., Iyetomi H., Hasegawa A. Insight into the origin of superionic conductivity from electronic structure theory // J. Phys.: Condens. Matter. 1998. V. 10. P. 11439-11448.

14. Ismayilova N.A., Asadullayeva S.G., Kasumova E.K., Hidiyev Kh.A., Hashimova N.N., Guliyeva J.A. Electronic, optical and elastic properties of  $\text{AgCuS}$  // Chalcogenide Letters. 2024. V. 21 P. 493-498.

15. <https://biovia-materials-studio-2017.updatestar.com/>

16. <https://www.quantum-espresso.org/>

17. Monkhorst H.J., Pack J.D. Special points for Brillouin-zone integrations // Phys. Rev. B. 1976. V. 13. P. 188-5192.

18. Lide D.R. CRS Handbook of physics and chemistry: Taylor & Francis: CRC Press, 2007.

19. Иванов-Шиц А.К., Мурин И.В. Ионика твердого тела в 2 т. СПб.: Изд-во С.Пetersб. ун-та, 2010. 1000 с. 2 т.

20. Yakshibaev R.A., Balapanov M.Kh., Mukhamadeeva N.N., Akmanova G.R. Partial conductivity of cations of different kinds in the alloys of  $\text{Ag}_2\text{X}-\text{Cu}_2\text{X}$  ( $\text{X} = \text{Se}, \text{Te}$ ) mixed conductors, Phys. Status Solidi (A). 1989. V. 112. P. 97-100.

### Информация об авторах

*А.Д. Давлетишина* – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры общей физики, УУНУТ.

*Р.А. Якишбаев* – доктор физико-математических наук, профессор, профессор кафедры общей физики, УУНУТ

### References

1. Deng Ph, Rabenbauer A., Vosseler K., Venturini J., Nilges T.  $\text{AgCuS}$ : a single material diode with fast switching times // Adv. Funct. Mater. 2023. V. 33. 2214882.

2. Liu F., Yu H., Fu J., Zhang X. Good thermoelectric performance and stability in copper sulfide synthesized by hydrothermal method and densified by HP technique // J. Mater Sci: Mater Electron. 2023. V. 34. 1163.

3. Kadrgulov R.F., Yakshibaev R.A., Khasanov M.A. Phase Relations, Ionic Conductivity and Diffusion in the Alloys of  $\text{Cu}_2\text{S}$  and  $\text{Ag}_2\text{S}$  Mixed Conductors // Ionics. 2001. V. 7. P. 156-160.

4. Yakshibaev R.A., Mukhamadeeva N.N., Kadrgulov R.F. Phase relations, ionic transport, and diffusion in the alloys of  $\text{Ag}_2\text{Te}-\text{Cu}_2\text{Te}$  mixed conductors // Phys. Stat. Solidi(a). 1990. V. 121. P. 111-117.

5. Ishikawa T., Miyatani S. Electronic and Ionic Conduction in  $\text{Cu}_{2-\delta}\text{Se}$ ,  $\text{Cu}_{2-\delta}\text{S}$  and  $\text{Cu}_{2-\delta}(\text{Se}, \text{S})$  // J. Phys. Soc. Japan. 1977. V. 42. P. 159-167.

6. Gorbachev V.V. Pokuiprovodnikovye Soedineniya  $A_2^I B^{VI}$  (Semiconductor Compounds  $A_2^I B^{VI}$ ). M.: Metallurgiya, 1980.

7. Abrikosov N.Kh, Bankina V.F., Poretskaya L.V., Skudnova E.V., Chizhevskaya S.N. Pokuiprovodnikovye khal'kogenidy i splavy na ikh osnove (Chalcogenide Semiconductors and Related Alloys). M.: Nauka, 1975.

8. Becker K.D., Schmalzried H., von Wurb V. The chemical diffusion coefficient in (low temperature)  $\alpha\text{-Ag}_2\text{S}$  determined by an electrochemical relaxation method // Solid State Ionics. 1983. V. 11. P. 213-219.

9. Bucur R.V., Berger R. Electrochemical potentiometric determination of the diffusion coefficient of copper in low digenite, a copper sulfide // Solid State Ionics. 1995. V. 76. P. 291-296.

10. Tsushiya Y. The diffuse X-ray scattering of silver-chalcogenide-type fast-ion conductors // J. Phys. C: Solid State Phys. 1986. V. 19. P. L637-L641.

11. Cava R.J., Reidinger F., Wuensch B.J. Mobile ion distribution and anharmonic thermal motion in fast ion conducting  $\text{Cu}_2\text{S}$  // Solid State Ionics. 1981. V. 5. P. 501-504.

12. Shao Z.P., Shi C.L. First principles calculation of magnetic resonance properties of  $\text{Cu}_{2-\delta}\text{X}$  ( $\text{X} = \text{Se}, \text{S}, \text{Te}$ ) // *Journal of Applied Mathematics and Physics*. 2021. V. 9. № 6. P. 1245-1256.
13. Kikuchi H., Iyetomi H., Hasegawa A. Insight into the origin of superionic conductivity from electronic structure theory // *J. Phys.: Condens. Matter*. 1998. V. 10. P. 11439-11448.
14. Ismayilova N.A., Asadullayeva S.G., Kasumova E.K., Hidiyev Kh.A., Hashimova N.N., Guliyeva J.A. Electronic, optical and elastic properties of  $\text{AgCuS}$  // *Chalcogenide Letters*. 2024. V. 21 P. 493-498.
15. <https://biovia-materials-studio-2017.updatestar.com/>
16. <https://www.quantum-espresso.org/>
17. Monkhorst H.J., Pack J.D. Special points for Brillouin-zone integrations // *Phys. Rev. B*. 1976. V. 13. P. 188-5192.
18. Lide D.R. *CRS Handbook of physics and chemistry*: Taylor & Francis: CRC Press, 2007.
19. Ivanov-Shits A.K., Murin I.V. *Ionica tverdogo tela (Solid state ionics) v 2 t.* SPb.: Izd-vo S.Peterb. un-ta, 2010. 1000 p. 2 t.
20. Yakshibaev R.A., Balapanov M.Kh., Mukhamadeeva N.N., Akmanova G.R. Partial conductivity of cations of different kinds in the alloys of  $\text{Ag}_2\text{X}-\text{Cu}_2\text{X}$  ( $\text{X} = \text{Se}, \text{Te}$ ) mixed conductors, *Phys. Status Solidi (A)*. 1989. V. 112. P. 97–100.

#### ***Information about the authors***

*A.D. Davletshina - Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor of the Department of General Physics, UUS&T.*  
*R.A. Yakshibaev - Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professo, Associate Professor of the Department of General Physics, UUS&T.*

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.  
 The authors declare that there is no conflict of interest.

Статья поступила в редакцию 31.10.2025; одобрена после рецензирования 23.02.2026; принята к публикации 02.03.2026.

The article was received by the editorial board on 31 Oct. 2025; approved after reviewing 23 Feb. 2026; accepted for publication 02 Mar. 2026.

Научная статья

1.3.8. Физика конденсированного состояния (физико-математические науки)

УДК 536

doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2026.01.005

## ИЗУЧЕНИЕ СТРУКТУРЫ НЕЭКВИАТОМНЫХ СПЛАВОВ СИСТЕМЫ CoCrNi, ЛЕГИРОВАННЫХ Nb И Mn

Сергей Валерьевич Коновалов<sup>1</sup>, Владислав Константинович Дробышев<sup>2</sup>,  
Ирина Алексеевна Панченко<sup>3</sup>, Данил Александрович Бессонов<sup>4</sup>

<sup>1,2,3,4</sup>Сибирский государственный индустриальный университет, ул. Кирова, 42, 654006, Новокузнецк, Россия

<sup>1</sup> konovalov@sibsiu.ru, 0000-0003-4809-8660

<sup>2</sup> drobyshev\_v.k@mail.ru, 0000-0002-1532-9226

<sup>3</sup> panchenko.sibsiu@yandex.ru, 0000-0002-1631-9644

<sup>4</sup> dabess@yandex.ru, 0009-0006-6609-0688

**Аннотация.** Представлены результаты комплексного исследования структуры и элементного состава неэквивалентного среднеэнтропийного сплава системы CoCrNi, легированного ниобием (Nb) и марганцем (Mn), с номинальным составом Nb<sub>2</sub>Co<sub>40</sub>Cr<sub>14</sub>Ni<sub>40</sub>Mn<sub>4</sub>. Основной целью работы было экспериментальное подтверждение прогнозируемого однофазного состояния твердого раствора и анализ микроструктурных особенностей, формирующихся в процессе вакуумно-дуговой плавки. Для исследования сплава использован комплекс современных методов: рентгеноструктурный анализ, сканирующая электронная микроскопия с энергодисперсионной спектроскопией и просвечивающая электронная микроскопия. Методом: рентгеноструктурного анализа подтверждено, что сплав имеет гранецентрированную кубическую (ГЦК) решетку с параметром 3,568 Å. Установлено, что экспериментальный состав сплава незначительно отклоняется от номинального, а также выявлено наличие примесей железа и алюминия. Микроструктурный анализ выявил развитую дендритную структуру с распределением размера зерен в диапазоне 50–80 мкм. Элементное картирование продемонстрировало однородное распределение кобальта, хрома, никеля и марганца в матрице, в то время как ниобий проявляет склонность к сегрегации в междендритных областях, что объясняется его высокой температурой плавления и положительной теплотой смешения с другими компонентами. Исследования методом просвечивающей микроскопии на наноуровне подтвердили формирование однофазной ГЦК-матрицы с локальными обогащенными ниобием участками на границах зерен. Полученные результаты являются важным этапом в установлении корреляции «структура-свойства» в перспективных среднеэнтропийных сплавах и подтверждают возможность целенаправленного управления их микроструктурой за счет легирования.

**Ключевые слова:** среднеэнтропийные сплавы, CoCrNi-Nb-Mn, микроструктура, электронная микроскопия, дендритная структура, ГЦК-твёрдый раствор.

**Финансирование:** Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-49-00015, <https://rscf.ru/project/23-49-00015>.

**Для цитирования:** Коновалов С.В., Дробышев В.К., Панченко И.А., Бессонов Д.А. Изучение структуры неэквивалентных сплавов системы CoCrNi, легированных Nb и Mn // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2026. Т. 23, № 1. С. 51-59. doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2026.01.005.



Original article

**STUDY OF THE STRUCTURE OF NON-EQUIATOMIC ALLOYS OF THE CoCrNi SYSTEM ALLOYED WITH Nb AND Mn****Sergey V. Konovalov<sup>1</sup>, Vladislav K. Drobyshev<sup>2</sup>, Irina A. Panchenko<sup>3</sup>, Danil A. Bessonov<sup>4</sup>**<sup>1, 2, 3, 4</sup>Siberian State Industrial University, 42 Kirov St., Novokuznetsk, 654006, Russia<sup>1</sup> konovalov@sibsiu.ru, 0000-0003-4809-8660<sup>2</sup> drobyshev\_v.k@mail.ru, 0000-0002-1532-9226<sup>3</sup> panchenko.sibsiu@yandex.ru, 0000-0002-1631-9644<sup>4</sup> dabess@yandex.ru, 0009-0006-6609-0688

**Abstract.** The article presents the results of a comprehensive study of the structure and elemental composition of a nonequiatomic medium-entropy alloy of the CoCrNi system alloyed with niobium (Nb) and manganese (Mn), with a nominal composition of Nb<sub>2</sub>Co<sub>40</sub>Cr<sub>14</sub>Ni<sub>40</sub>Mn<sub>4</sub>. The main objective of the study was to experimentally confirm the predicted single-phase state of the solid solution and analyze the microstructural features formed during vacuum-arc melting. A set of modern methods was used to study the alloy: X-ray diffraction analysis, scanning electron microscopy with energy-dispersive spectroscopy, and transmission electron microscopy. The X-ray diffraction method confirmed that the alloy has a face-centered cubic (FCC) lattice with a parameter of 3.568 Å. The experimental alloy composition was found to deviate slightly from the nominal value, and the presence of iron and aluminum impurities was detected. Microstructural analysis revealed a developed dendritic structure with a grain size distribution in the range of 50–80 μm. Elemental mapping demonstrated a uniform distribution of cobalt, chromium, nickel, and manganese in the matrix, while niobium exhibits a tendency to segregate in interdendritic regions, which is explained by its high melting point and positive heat of mixing with other components. Nanoscale transmission microscopy studies confirmed the formation of a single-phase fcc matrix with localized niobium-rich regions at grain boundaries. The obtained results are an important step in establishing the structure-property correlation in promising medium-entropy alloys and confirm the possibility of targeted control of their microstructure through alloying.

**Keywords:** medium-entropy alloys, CoCrNi-Nb-Mn, microstructure, electron microscopy, dendritic structure, FCC solid solution.

**Funding:** The study was supported by the Russian Science Foundation grant No. 23-49-00015, <https://rscf.ru/project/23-49-00015>.

**For citation:** Konovalov S.V., Drobyshev V.K., Panchenko I.A., Bessonov D.A. (2026). Study of the structure of nonequiatomic alloys of the CoCrNi system alloyed with Nb and Mn. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 23(1), 51-59. (In Russ.). doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2026.01.005.

**Введение**

Создание сплавов, сохраняющих функциональность при экстремальных механических нагрузках, остается одной из наиболее значимых целей в области современного материаловедения [1]. Основная сложность заключается в необходимости обеспечения оптимального соотношения прочностных характеристик и пластичности в условиях широкого температурного диапазона, поскольку данные свойства обычно являются взаимоисключающими [2]. Существующее ограничение замедляет прогресс в стратегически важных отраслях, например, в производстве турбинных двигателей, для которых принципиально важна комбинация

устойчивости к значительным нагрузкам и сохранения деформационной способности [3, 4].

В последнее время в качестве возможного решения данной проблемы активно исследуются высоко- и среднеэнтропийные сплавы (ВЭС и СЭС). Данные материалы открывают перспективы для достижения нетипичного сочетания прочности и пластичности, отчасти благодаря своей термодинамической стабильности в высокотемпературной среде [5, 6]. Несмотря на это, ВЭС и СЭС имеют ряд недостатков, требующих проведения дополнительных изысканий и целенаправленной модификации для улучшения их эксплуатационных качеств [7, 8]. Большинство однофазных ОЦК-высокоэнтропийных сплавов и среднеэнтропийных сплавов демонстрируют прочность



(400–1000 МПа), но их пластичность при комнатной температуре часто ограничена деформациями менее 10% или даже ниже, что связано с доминированием скольжения дислокаций и склонностью к межзеренному разрушению [9–11].

Сплавы с гранцентрированной кубической (ГЦК) решеткой, такие как CoCrNiFeMn (сплав Кантора) или СЭС CoCrNi, характеризуются повышенной пластичностью и вязкостью разрушения, в том числе при криогенных температурах достигающей до 75%) [12, 13]. Это связано с их низкой энергией дефекта упаковки (ЭДУ), которая способствует активации дополнительных механизмов деформации — прежде всего механического двойникования, наряду с дислокационным скольжением [14, 15]. Также следует отметить, что деформационное двойникование подавляется при комнатных и более высоких температурах, что ведет к ослаблению эффекта дисперсионного упрочнения.

Расширение рабочего температурного интервала потенциально может быть достигнуто за счет целенаправленного изменения структуры методами упрочнения твердого раствора [16, 17] и дисперсионного упрочнения [18, 19]. Наиболее перспективной стратегией считается легирование ГЦК матрицы ниобием (Nb) классическими элементом для жаропрочных сплавов. Марганец введен для стабилизации ГЦК-фазы и снижения энергии дефектов упаковки, что способствует активации двойникования при деформации. Коллективом авторов [20] на основе термодинамического моделирования 194481 композиции системы Ni-Co-Cr-Mn-Nb был проведен целенаправленный поиск перспективных среднеэнтропийных сплавов. Используя критерии образования однофазных твердых растворов (с точностью прогнозирования 62–88%), из всего множества была отобрана 31 композиция. Среди них сплав Nb<sub>2</sub>Co<sub>40</sub>Cr<sub>14</sub>Ni<sub>40</sub>Mn<sub>4</sub> был идентифицирован как наиболее оптимальный.

Данный сплав продемонстрировал наибольший расчетный предел текучести (321 МПа при комнатной температуре), что объясняется оптимальным содержанием марганца (6 ат.%), атомный объем которого (12,6 Å<sup>3</sup>) существенно выше, чем у других элементов. Кроме того, сплав показал превосходную температурную стабильность.

Целью работы является комплексное исследование фазового состава, химической однородности и микроструктурных особенностей

среднеэнтропийного сплава Nb<sub>2</sub>Co<sub>40</sub>Cr<sub>14</sub>Ni<sub>40</sub>Mn<sub>4</sub>, полученного методом вакуумно-индукционной плавки, с применением рентгеноструктурного анализа, рентгенофлуоресцентной спектроскопии, оптической и сканирующей электронной микроскопии.

### Материал и методики исследования

Слитки были изготовлены методом литья в вакуумной печи в форме усеченного конуса (диаметры оснований 50 и 5 мм, высота 15 мм). Получение сплава проводили в медных водоохлаждаемых тиглях с использованием шихты из чистых металлов (Nb, Mn, Co, Ni, Cr). Для минимизации окисления атмосферу в камере дважды заполняли аргоном. Плавление осуществляли вольфрамовым электродом при параметрах тока 200–500 А и напряжения до 20 В. Изготовление сплава включало два вакуумных цикла: первый состоял из двукратной плавки с переворотом слитка, а второй — из четырехкратной. После начальных плавки для удаления образовавшегося черного нагара выполняли кратковременную продувку воздухом с последующей очисткой камеры и поверхностей слитков спиртом. Для обеспечения гомогенности расплава перед вторым циклом слиток устанавливали вертикально, а первую плавку в данном цикле проводили с полным перетеканием материала в горизонтальное положение. Охлаждение после каждой плавки длилось не менее 1 часа в атмосфере аргона.

Основной задачей изучения материалов, использованных в данном исследовании, было подтверждение однофазного состояния твердого раствора в полученных сплавах. Рентгеноструктурный анализ проводили на рентгеновском дифрактометре ДРОН-8Н. Ускоряющее напряжение на рентгеновской трубке составляло 40 кВ, а сила тока — 20 мА. Угловой диапазон (2θ) устанавливали от 30° до 100° с шагом сканирования 0.1° и временем экспозиции 5 с. Идентификацию фаз, качественный и количественный фазовый анализ и уточнение структурных параметров проводили с использованием программного пакета «КДА – Кристаллография и дифракционный анализ». Для исследования использовалось оборудование, позволяющее исследовать структуру на разных масштабах: оптическая микроскопия, сканирующая электронная микроскопия (СЭМ) и просвечивающая электронная микроскопия (ПЭМ). Структура и элементный состав образцов были

изучены с помощью сканирующего электронного микроскопа KYKY EM-6900, оснащенного энергодисперсионным рентгеновским спектрометром Oxford Xplore. СЭМ-анализ проводили при ускоряющем напряжении 25 кВ, токе накала 2,09 А и эмиссионном токе  $150 \times 10^{-6}$  А.

ПЭМ анализ проводили на просвечивающем электронном микроскопе, оснащенный приставкой для энергодисперсионной рентгеновской спектроскопии. Исследование проводили при ускоряющем напряжении 200 кВ, получая микродифракционные картины и проводя последующий анализ в темном поле. Этот процесс проводился при ускоряющем напряжении 6 кВ в течение 10–12 часов.

### Результаты исследования и их обсуждение

Методом рентгенофазового анализа, приведенного на рис. 1 подтверждено, что исследуемый литой сплав, демонстрирует рефлексы, соответствующие гранецентрированной кубической (ГЦК) решетке. Пики дифракции несколько уширены и асимметричны, что может указывать на следы второй ГЦК фазы. Параметр решетки исследуемого сплава составил 3,568 Å, а размер области когерентного рассея-

ния (ОКР) составил 41 нм. Проведенный рентгенофлуоресцентный анализ выявил отклонение прогнозируемого состава сплава  $\text{Nb}_2\text{Co}_{40}\text{Cr}_{14}\text{Ni}_{40}\text{Mn}_4$  от экспериментального: Nb – 2,35 ат.%, Co – 39,90 ат.%, Cr – 13,43 ат.%, Ni – 39,04 ат.%, Mn – 3,80 ат.%. Также в изготовленном сплаве присутствовали примеси Fe – 0,19 ат.% и Al – 1,29 ат.%.

На рис. 2 а представлена микроструктура среднеэнтропийного сплава  $\text{Nb}_2\text{Co}_{40}\text{Cr}_{14}\text{Ni}_{40}\text{Mn}_4$  в литом состоянии. Металлографическое исследование указывает на наличие развитой дендритной структуры, характерной для литых среднеэнтропийных сплавов. Распределение размера зерна (рис. 2б) имеет выраженную асимметричную форму, характерную для структур, формирующихся при направленном затвердевании.

Основная часть значений сосредоточена в диапазоне 50–80 мкм, где наблюдается максимальная доля измерений — до 8–9 % на интервал, пики вблизи 60–80 мкм подтверждают относительную однородность морфологии дендритных ячеек и стабильность условий кристаллизации в материале.

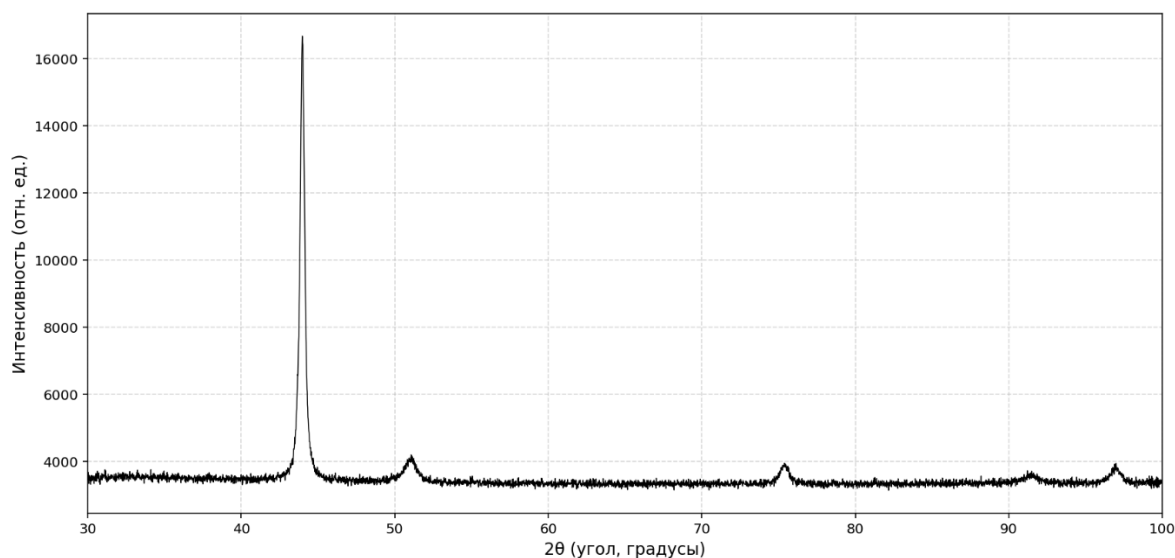


Рис. 1. Рентгенограмма сплава  $\text{Nb}_2\text{Co}_{40}\text{Cr}_{14}\text{Ni}_{40}\text{Mn}_4$

Fig. 1. X-ray diffraction pattern of  $\text{Nb}_2\text{Co}_{40}\text{Cr}_{14}\text{Ni}_{40}\text{Mn}_4$  alloy

При этом хвост распределения значений размера зерна смещён в область значений до 150–160 мкм, что свидетельствует о наличии зон с укрупнённой дендритной структурой. Подобная неоднородность может быть связана с

локальными изменениями теплового потока, колебаниями скорости кристаллизации или повышенной конвекцией расплава [21]. Распределение такого типа типично для литых среднеэнтропийных сплавов, полученных в условиях

вакуумно-индукционной плавки, где сочетание высокой чистоты расплава и интенсивного перемешивания приводит к конкуренции фронта

роста дендритов и формированию участков с различной степенью разупорядочения структуры [22].

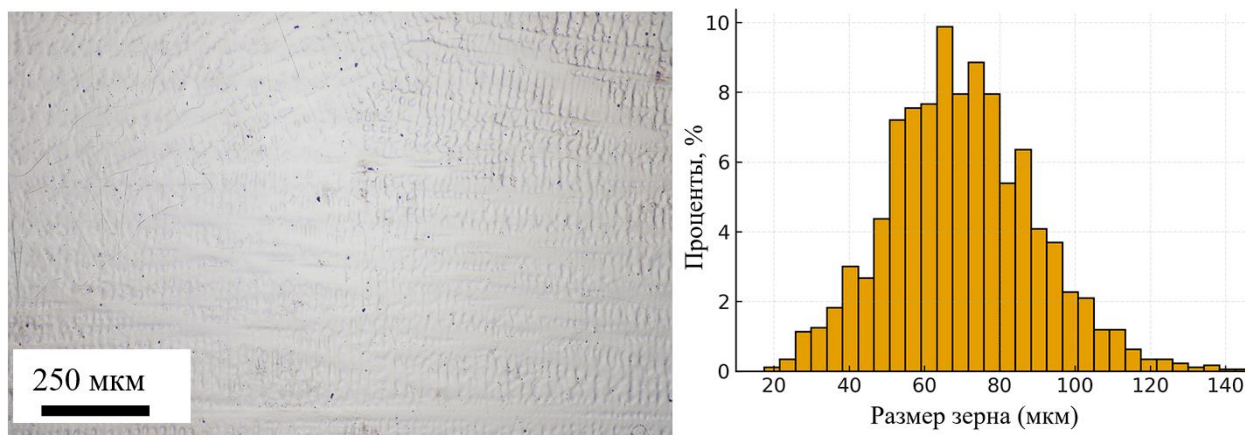


Рис.2. Микроструктура сплава  $Nb_2Co_{40}Cr_{14}Ni_{40}Mn_4$  и распределение зерен по размеру (б)

Fig. 2. Microstructure of the  $Nb_2Co_{40}Cr_{14}Ni_{40}Mn_4$  alloy (a) and grains size distribution (b)

На рисунке 3 представлено элементное картирование сплава  $Nb_2Co_{40}Cr_{14}Ni_{40}Mn_4$ , выполненное методом энергодисперсионной рентгеновской спектроскопии (ЭДС) в сочетании со сканирующей электронной микроскопией. Карты распределения демонстрируют однородное распределение Co, Cr, Ni и Mn в матрице, тогда как Nb концентрируется преимущественно в междендритных областях, что указывает на ограниченную растворимость ниобия в твердом растворе.

На рис. 3 представлено элементное картирование сплава  $Nb_2Co_{40}Cr_{14}Ni_{40}Mn_4$ , выполненное методом энергодисперсионной рентгеновской спектроскопии (ЭДС) в сочетании со сканирующей электронной микроскопией. Карты распределения демонстрируют однородное распределение Co, Cr, Ni и Mn в матрице, тогда как Nb концентрируется преимущественно в междендритных областях, что указывает на ограниченную растворимость ниобия в твердом растворе.

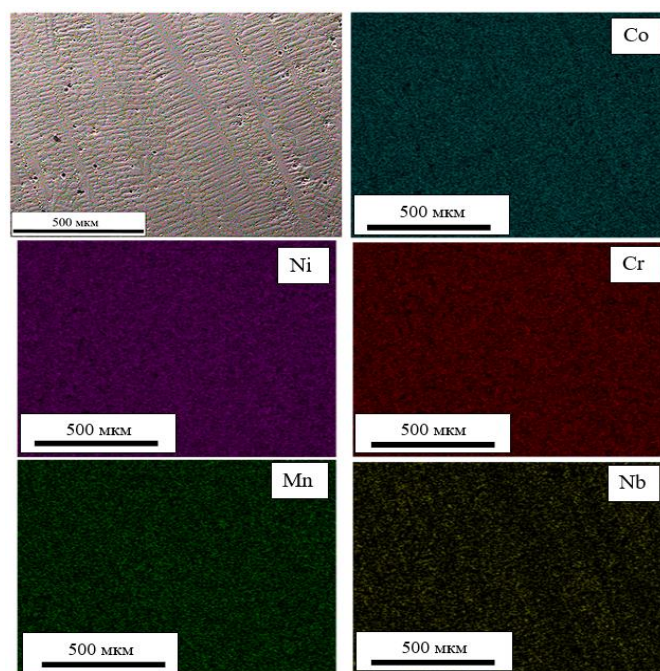


Рис. 3 – Элементное картирование сплава  $Nb_2Co_{40}Cr_{14}Ni_{40}Mn_4$ , где 1–8 – участки микрорентгеноспектрального сканирования

Fig. 3 – Elemental mapping of the  $Nb_2Co_{40}Cr_{14}Ni_{40}Mn_4$  alloy, where 1–8 are sections of micro-X-ray spectral scanning

Карты распределения элементов, полученные методом просвечивающей электронной микроскопии с использованием энергодисперсионного анализа приведены на рис. 4. На на-

ноуровне подтверждается формирование однофазной ГЦК-матрицы с локальными сегрегациями ниобия на границах зёрен и в приграничных областях. Равномерное распределение Co, Cr, Ni и Mn свидетельствует о высокой степени гомогенизации твёрдого раствора, достигнутой переплавкой в вакуумной печи. Ниобий является самым тугоплавким элементом ( $T_{пл} = 2468^\circ\text{C}$ ) в данном сплаве и имеет положительную теплоту смешения с другими компонентами (особенно с Co, Ni, Cr), что приводит к его отталкиванию в междендритные области во время кристаллизации. Это напрямую подтверждается данными микрорентгеноспектрального анализа элементного состава участков  $\text{Nb}_2\text{Co}_{40}\text{Cr}_{14}\text{Ni}_{40}\text{Mn}_4$ , приведенных в таблице 1, где содержание Nb колеблется от 1,50% до 2,96%. Марганец имеет более низкую температуру плавления ( $1246^\circ\text{C}$ ) и также может сегрегировать, хотя и менее выражено, чем Nb (разброс Mn от 3.75% до 4.17%).

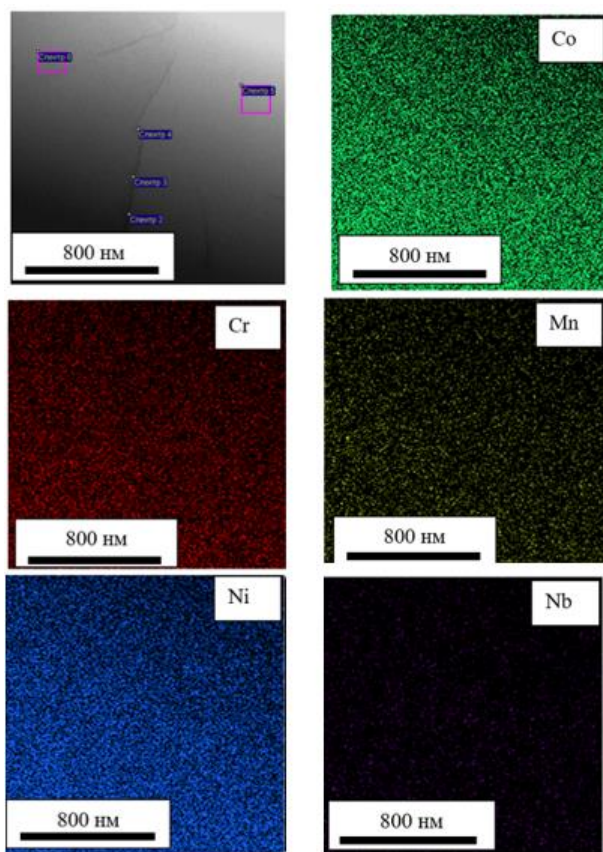


Рис. 4 – Карты распределения элементов, полученные с помощью просвечивающего электронного микроскопа

Fig. 4 – Element distribution maps obtained using a transmission electron microscope

Таблица 1. Результаты микрорентгеноспектрального анализа элементного состава участков  $\text{Nb}_2\text{Co}_{40}\text{Cr}_{14}\text{Ni}_{40}\text{Mn}_4$ , обозначенного цифрами на рис. 4

Table 1. Results of microgenospectral analysis of the elemental composition of the  $\text{Nb}_2\text{Co}_{40}\text{Cr}_{14}\text{Ni}_{40}\text{Mn}_4$  section, indicated by numbers in Fig. 4

| Спектр            | Cr    | Mn   | Co    | Ni    | Nb   |
|-------------------|-------|------|-------|-------|------|
| Суммарный         | 14.78 | 4.08 | 39.50 | 38.95 | 2.69 |
| 2                 | 15.22 | 4.17 | 39.41 | 38.71 | 2.48 |
| 3                 | 14.97 | 4.09 | 40.11 | 38.50 | 2.32 |
| 4                 | 14.77 | 4.14 | 40.40 | 38.21 | 2.48 |
| 5                 | 15.13 | 3.75 | 40.87 | 38.75 | 1.50 |
| 6                 | 14.24 | 4.10 | 39.41 | 39.29 | 2.96 |
| Среднее           | 14.85 | 4.05 | 39.95 | 38.74 | 2.41 |
| Станд. отклонение | 0.35  | 0.15 | 0.61  | 0.37  | 0.50 |
| Макс.             | 15.22 | 4.17 | 40.87 | 39.29 | 2.96 |
| Мин.              | 14.24 | 3.75 | 39.41 | 38.21 | 1.50 |

### Закключение

Проведенное исследование структуры и элементного состава среднеэнтропийного сплава  $\text{Nb}_2\text{Co}_{40}\text{Cr}_{14}\text{Ni}_{40}\text{Mn}_4$  позволило сделать следующие основные выводы:

1. Методом рентгеноструктурного анализа установлено, что литой сплав кристаллизуется в однофазной гранецентрированной кубической (ГЦК) структуре с параметром решетки  $3,568 \text{ \AA}$ . Незначительное уширение дифракционных пиков может указывать на наличие микрогетерогенности в структуре.
2. Металлографический анализ подтвердил формирование характерной для литых сплавов дендритной структуры. Распределение размера зерен является асимметричным с преобладающим диапазоном  $50\text{--}80 \text{ мкм}$ , что свидетельствует об относительно стабильных условиях кристаллизации.
3. Комплексный анализ элементного состава методами СЭМ/EDS и ПЭМ/EDS выявил общую гомогенность матрицы по основным компонентам (Co, Cr, Ni, Mn). Ключевой особенностью является сегрегация ниобия в междендритных областях и на границах зерен, что обусловлено его ограниченной растворимостью в ГЦК-решетке при кристаллизации, высоким температурой плавления и положительной теплотой смешения.

Установлено незначительное отклонение экспериментального состава от номинального,



а также наличие микропримесей, что, однако, не привело к образованию интерметаллидных фаз в объеме материала.

### Список литературы

1. Nutor R., Cao Q., Wei R., Su Q., Du G., Wang X., Li F., Zhang D., Jiang J. A dual-phase alloy with ultrahigh strength-ductility synergy over a wide temperature range // *Science Advances*. 2021. Vol. 7. DOI: 10.1126/sciadv.abi4404.
2. Chou T., Li W., Chang H., Cao B., Luan J., Huang J., Yang T. Suppressing temperature-dependent embrittlement in high-strength medium-entropy alloy via hetero-grain/precipitation engineering // *Scripta Materialia*. 2023. DOI: 10.1016/j.scriptamat.2023.115377.
3. Wen C., Shen H., Tian Y., Lou G., Wang N., Su Y. Accelerated discovery of refractory high-entropy alloys for strength-ductility co-optimization: An exploration in NbTaZrHfMo system by machine learning // *Scripta Materialia*. 2024. DOI: 10.1016/j.scriptamat.2024.116240.
4. Park H., Son S., Ahn S., Ha H., Kim R., Lee J., Joo H., Kim J., Kim H. Hyper-adaptor; Temperature-insensitive tensile properties of Ni-based high-entropy alloy a wide temperature range // *Materials Research Letters*. 2025. Vol. 13. DOI: 10.1080/21663831.2025.2457346.
5. Ma E., & Liu, C. Chemical inhomogeneities in high-entropy alloys help mitigate the strength-ductility trade-off // *Progress in Materials Science*. 2024. DOI: 10.1016/j.pmatsci.2024.101252.
6. Zhang C., Yu Q., Tang Y., Xu M., Wang H., Zhu C., Ell J., Zhao S., MacDonald B., Cao P., Schoenung J., Vecchio K., Reed R., Ritchie R., Lavernia E. Strong and Ductile FeNiCoAl-based High-Entropy Alloys for Cryogenic to Elevated Temperature Multifunctional Applications // *Acta Materialia*. 2022. DOI: 10.1016/j.actamat.2022.118449.
7. Kumar P., Kim S., Yu Q., Ell J., Zhang M., Yang Y., Kim J., Park H., Minor A., Park E., Ritchie R. Compressive vs. tensile yield and fracture toughness behavior of a body-centered cubic refractory high-entropy superalloy Al<sub>0.5</sub>Nb<sub>1.25</sub>Ta<sub>1.25</sub>TiZr at temperatures from ambient to 1200°C // *Acta Materialia*. 2022. DOI: 10.1016/j.actamat.2022.118620.
8. George E., Curtin W., Tasan C. High entropy alloys: A focused review of mechanical properties and deformation mechanisms // *Acta Materialia*. 2020. DOI: 10.1016/j.actamat.2019.12.015.
9. Tsuru T., Han S., Matsuura S., Chen Z., Kishida K., Iobzenko I., Rao S., Woodward C., George E., Inui H. Intrinsic factors responsible for brittle versus ductile nature of refractory high-entropy alloys // *Nature Communications*. 2024. Vol. 15. DOI: 10.1038/s41467-024-45639-8.
10. Gludovatz B., Ritchie R. Fracture properties of high-entropy alloys // *MRS Bulletin*. 2022. Vol. 47. DOI: 10.1557/s43577-022-00267-9.
11. Liu F., Liaw P., Zhang Y. Recent Progress with BCC-Structured High-Entropy Alloys // *Metals*. 2022. DOI: 10.3390/met12030501.
12. Bajpai S., MacDonald B., Rupert T., Hahn H., Lavernia E., Apelian D. Recent Progress in the CoCrNi Alloy System // *Materialia*. 2022. DOI: 10.1016/j.mtla.2022.101476.
13. Naeem M., He H., Zhang F., Huang H., Harjo S., Kawasaki T., Wang B., Lan S., Wu Z., Wang F., Wu Y., Lu Z., Zhang Z., Liu C., Wang X. Cooperative deformation in high-entropy alloys at ultralow temperatures // *Science Advances*. 2020. Vol. 6. DOI: 10.1126/sciadv.aax4002.
14. Zhao Y., Yang T., Tong Y., Wang J., Luan J., Jiao Z., Chen D., Yang Y., Hu A., Liu C., Kai J. Heterogeneous precipitation behavior and stacking-fault-mediated deformation in a CoCrNi-based medium-entropy alloy // *Acta Materialia*. 2017. Vol. 138. DOI: 10.1016/j.actamat.2017.07.029.
15. Fang Y., Chen Y., Chen B., Li S., Gludovatz B., Park E., Sheng G., Ritchie R., Yu Q. An in situ ambient and cryogenic transmission electron microscopy study of the effects of temperature on dislocation behavior in CrCoNi-based high-entropy alloys with low stacking-fault energy // *Applied Physics Letters*. 2021. DOI: 10.1063/5.0069086.
16. Wu C., Tsai P., Kuo C., Tsai C. Effect of Atomic Size Difference on the Microstructure and Mechanical Properties of High-Entropy Alloys // *Entropy*. 2018. Vol. 20. DOI: 10.3390/e20120967.
17. Вяродова А. В. The influence of chemical composition on solid solution and strain hardening of single crystals of fcc high-entropy alloys // *ФММ*. 2022. № 1. С. 15–23.
18. Dasari S., Jagetia A., Chang Y., Soni V., Gwalani B., Gorsse S., Yeh A., Banerjee R. Engineering multi-scale B2 precipitation in a heterogeneous FCC based microstructure to enhance the mechanical properties of a Al<sub>0.5</sub>Co<sub>1.5</sub>CrFeNi<sub>1.5</sub> high entropy alloy // *Journal of Alloys and Compounds*. 2020. Vol. 830. DOI: 10.1016/j.jallcom.2020.154707.

19. Li Z., Fu L., Peng J., Zheng H., Ji X., Sun Y., Shuo M., Shan A. Improving mechanical properties of an FCC high-entropy alloy by  $\gamma'$  and B2 precipitates strengthening // *Materials Characterization*. 2020. Vol. 159. DOI: 10.1016/j.matchar.2019.109989.

20. Осинцев К. А., Кузнецова В. А., Панова В. С., Коновалов С. В., Панченко И. А. Твердорастворное упрочнение ниобием и марганцем однофазных сплавов системы Ni-Co-Cr // *Физика металлов и металловедение*. 2026. (Принята в печать).

21. Tiwari S., Ghosh S. Orientation selection in alloy dendritic evolution during melt-pool solidification // *Computational Materials Science*. 2025. DOI: 10.1016/j.commatsci.2025.113664.

22. Wang Y., Jiao Z., Bian G., Yang H., He H., Wang Z., Liaw P., Qiao J. Dynamic tension and constitutive model in Fe40Mn20Cr20Ni20 high-entropy alloys with a heterogeneous structure // *Materials Science and Engineering: A*. 2022. Vol. 857. P. 144125. DOI: 10.1016/j.msea.2022.144125.

### Информация об авторах

*С.В. Коновалов – доктор технических наук, профессор, проректор по научной и инновационной деятельности Сибирского государственного индустриального университета*

*В.К. Дробышев – научный сотрудник лаборатории электронной микроскопии и обработки изображений Сибирского государственного индустриального университета;*

*И.А. Панченко – кандидат технических наук, заведующий лаборатории электронной микроскопии и обработки изображений Сибирского государственного индустриального университета;*

*Д.А. Бессонов – старший научный сотрудник Управления научных исследований Сибирского государственного индустриального университета.*

### References

1. Nutor, R., Cao, Q., Wei, R., Su, Q., Du, G., Wang, X., Li, F., Zhang, D., & Jiang, J. (2021). A dual-phase alloy with ultrahigh strength-ductility synergy over a wide temperature range. *Science Advances*, 7. <https://doi.org/10.1126/sciadv.abi4404>
2. Chou, T., Li, W., Chang, H., Cao, B., Luan, J., Huang, J., & Yang, T. (2023). Suppressing

temperature-dependent embrittlement in high-strength medium-entropy alloy via hetero-grain/precipitation engineering. *Scripta Materialia*. <https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2023.115377>

3. Wen, C., Shen, H., Tian, Y., Lou, G., Wang, N., & Su, Y. (2024). Accelerated discovery of refractory high-entropy alloys for strength-ductility co-optimization: An exploration in NbTaZrHfMo system by machine learning. *Scripta Materialia*.

<https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2024.116240>

4. Park, H., Son, S., Ahn, S., Ha, H., Kim, R., Lee, J., Joo, H., Kim, J., & Kim, H. (2025). Hyperadaptor; Temperature-insensitive tensile properties of Ni-based high-entropy alloy a wide temperature range. *Materials Research Letters*, 13. <https://doi.org/10.1080/21663831.2025.2457346>

5. Ma, E., & Liu, C. (2024). Chemical inhomogeneities in high-entropy alloys help mitigate the strength-ductility trade-off. *Progress in Materials Science*. <https://doi.org/10.1016/j.pmatsci.2024.101252>

6. Zhang, C., Yu, Q., Tang, Y., Xu, M., Wang, H., Zhu, C., Ell, J., Zhao, S., MacDonald, B., Cao, P., Schoenung, J., Vecchio, K., Reed, R., Ritchie, R., & Lavernia, E. (2022). Strong and ductile FeNiCoAl-based high-entropy alloys for cryogenic to elevated temperature multifunctional applications. *Acta Materialia*. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2022.118449>

7. Kumar, P., Kim, S., Yu, Q., Ell, J., Zhang, M., Yang, Y., Kim, J., Park, H., Minor, A., Park, E., & Ritchie, R. (2022). Compressive vs. tensile yield and fracture toughness behavior of a body-centered cubic refractory high-entropy superalloy Al0.5Nb1.25Ta1.25TiZr at temperatures from ambient to 1200°C. *Acta Materialia*. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2022.118620>

8. George, E., Curtin, W., & Tسان, C. (2020). High entropy alloys: A focused review of mechanical properties and deformation mechanisms. *Acta Materialia*. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2019.12.015>

9. Tsuru, T., Han, S., Matsuura, S., Chen, Z., Kishida, K., Iobzenko, I., Rao, S., Woodward, C., George, E., & Inui, H. (2024). Intrinsic factors responsible for brittle versus ductile nature of refractory high-entropy alloys. *Nature Communications*, 15. <https://doi.org/10.1038/s41467-024-45639-8>

10. Gludovatz, B., & Ritchie, R. (2022). Fracture properties of high-entropy alloys. *MRS Bulletin*, 47. <https://doi.org/10.1557/s43577-022-00267-9>

11. Liu, F., Liaw, P., & Zhang, Y. (2022). Recent progress with BCC-structured high-entropy alloys. *Metals*. <https://doi.org/10.3390/met12030501>
12. Bajpai, S., MacDonald, B., Rupert, T., Hahn, H., Lavernia, E., & Apelian, D. (2022). Recent progress in the CoCrNi alloy system. *Materialia*. <https://doi.org/10.1016/j.mtla.2022.101476>
13. Naeem, M., He, H., Zhang, F., Huang, H., Harjo, S., Kawasaki, T., Wang, B., Lan, S., Wu, Z., Wang, F., Wu, Y., Lu, Z., Zhang, Z., Liu, C., & Wang, X. (2020). Cooperative deformation in high-entropy alloys at ultralow temperatures. *Science Advances*, 6. <https://doi.org/10.1126/sciadv.aax4002>
14. Zhao, Y., Yang, T., Tong, Y., Wang, J., Luan, J., Jiao, Z., Chen, D., Yang, Y., Hu, A., Liu, C., & Kai, J. (2017). Heterogeneous precipitation behavior and stacking-fault-mediated deformation in a CoCrNi-based medium-entropy alloy. *Acta Materialia*, 138. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2017.07.029>
15. Fang, Y., Chen, Y., Chen, B., Li, S., Gludovatz, B., Park, E., Sheng, G., Ritchie, R., & Yu, Q. (2021). An in situ ambient and cryogenic transmission electron microscopy study of the effects of temperature on dislocation behavior in CrCoNi-based high-entropy alloys with low stacking-fault energy. *Applied Physics Letters*. <https://doi.org/10.1063/5.0069086>
16. Wu, C., Tsai, P., Kuo, C., & Tsai, C. (2018). Effect of atomic size difference on the microstructure and mechanical properties of high-entropy alloys. *Entropy*, 20. <https://doi.org/10.3390/e20120967>
17. Vyrodova, A. V. (2022). The influence of chemical composition on solid solution and strain hardening of single crystals of fcc high-entropy alloys [Original: ФММ]. *Physics of Metals and Metallography*.
18. Dasari, S., Jagetia, A., Chang, Y., Soni, V., Gwalani, B., Gorsse, S., Yeh, A., & Banerjee, R. (2020). Engineering multi-scale B2 precipitation in a heterogeneous FCC based microstructure to enhance the mechanical properties of a Al0.5Co1.5CrFeNi1.5 high entropy alloy. *Journal of Alloys and Compounds*, 830. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2020.154707>
19. Li, Z., Fu, L., Peng, J., Zheng, H., Ji, X., Sun, Y., Shuo, M., & Shan, A. (2020). Improving mechanical properties of an FCC high-entropy alloy by  $\gamma'$  and B2 precipitates strengthening. *Materials Characterization*, 159. <https://doi.org/10.1016/j.matchar.2019.109989>
20. Osintsev, K. A., Kuznetsova, V. A., Panova, V. S., Konovalov, S. V., & Panchenko, I. A. (in press). Solid-solution strengthening of single-phase Ni-Co-Cr system alloys with niobium and manganese [Original: Твердо-растворное упрочнение ниобием и марганцем однофазных сплавов системы Ni-Co-Cr]. *Physics of Metals and Metallography*.
21. Tiwari, S., & Ghosh, S. (2025). Orientation selection in alloy dendritic evolution during melt-pool solidification. *Computational Materials Science*. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2025.113664>
22. Wang, Y., Jiao, Z., Bian, G., Yang, H., He, H., Wang, Z., Liaw, P., & Qiao, J. (2022). Dynamic tension and constitutive model in Fe40Mn20Cr20Ni20 high-entropy alloys with a heterogeneous structure. *Materials Science and Engineering: A*, 857, 144125. <https://doi.org/10.1016/j.msea.2022.144125>

### Information about the authors

S.V. Konovalov – Doctor of Technical Sciences, Professor, Vice-Rector for Research and Innovation, Siberian State Industrial University

V.K. Drobyshev – Researcher, Laboratory of Electron Microscopy and Image Processing, Siberian State Industrial University;

I.A. Panchenko – Candidate of Technical Sciences, Head of the Laboratory of Electron Microscopy and Image Processing, Siberian State Industrial University;

D.A. Bessonov – Candidate of Technical Sciences, Senior Research Associate of the Department of Scientific Research, Siberian State Industrial University

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.  
The authors declare that there is no conflict of interest.

Статья поступила в редакцию 30.11.2025; одобрена после рецензирования 23.02.2026; принята к публикации 02.03.2026.

The article was received by the editorial board on 30 Nov. 2025; approved after reviewing 23 Feb. 2026; accepted for publication 02 Mar. 2026.

Научная статья

1.3.8. Физика конденсированного состояния (физико-математические науки)

УДК 539.2

doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2026.01.006

## ИССЛЕДОВАНИЕ ХАЛЬКОГЕННОЙ СВЯЗИ В СТРУКТУРЕ СЕЛЕНИТА НАТРИЯ $\text{Na}_2\text{SeO}_3$

Евфраксия Сейрановна Оганесян<sup>1†</sup>, Ольга Андреевна Маслова<sup>2</sup>,  
Сергей Александрович Безносюк<sup>3</sup>

<sup>1,2,3</sup>Алтайский государственный университет, пр. Ленина, 61, 656049, Барнаул, Россия

<sup>†</sup>oganesyan@mail.asu.ru, <https://orcid.org/0009-0009-6644-8477>

<sup>2</sup>maslova@chem.asu.ru, <https://orcid.org/0000-0003-3862-3687>

<sup>3</sup>bsa1953@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-4945-7197>

**Аннотация.** В статье представлено исследование нековалентных халькогенных связей  $\text{Se}\cdots\text{O}$  в кристаллической структуре селенита натрия ( $\text{Na}_2\text{SeO}_3$ ). Впервые синтезированный в 1889 году и исследованный с точки зрения кристаллической структуры лишь в начале 2000-х, селенит натрия до настоящего времени не подвергался детальному изучению нековалентных халькогенных связей. Проведен квантово-химический расчет (DFT с периодическими граничными условиями) кристалла селенита натрия по данным рентгеноструктурного анализа. Топологический анализ электронной плотности выявил три критические точки, соответствующие халькогенным взаимодействиям. В исследовании проанализированы геометрические параметры контактов  $\text{Se}\cdots\text{O}$ , характерные для халькогенных связей, и показано, что такие взаимодействия действительно присутствуют в структуре селенита натрия. Значения плотности полной электронной энергии  $H_b$  в критической точке слабо положительны, что говорит о нековалентном характере взаимодействия. Для подтверждения фильности участников взаимодействия проведен анализ сечения одноэлектронного потенциала (ОЕР). На сечении ОЕР связевой путь между атомами селена и кислорода проходит через поделенную пару атома селена, и неподеленную пару атома кислорода. Атом селена выступает в качестве электрофила, а кислород в качестве нуклеофила.

**Ключевые слова:** селенит натрия, халькогенные взаимодействия, нековалентные взаимодействия, теория функционала плотности, топологический анализ электронной плотности, одноэлектронный потенциал, компьютерное моделирование.

**Благодарности:** Финансирование поездки осуществлено по итогам конкурса "Академическая мобильность" из средств Эндаумент-фонда АлтГУ.

---

**Для цитирования:** Оганесян Е.С., Маслова О.А., Безносюк С.А. Исследование халькогенной связи в структуре селенита натрия  $\text{Na}_2\text{SeO}_3$  // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2026. Т. 23, № 1. С. 60-65. doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2026.01.006.

---



Original article

INVESTIGATION OF CHALCOGEN BONDING IN THE STRUCTURE OF SODIUM SELENITE  $\text{Na}_2\text{SeO}_3$ Evfpraksiia S. Oganessian<sup>1†</sup>, Olga A. Maslova<sup>2</sup>, Sergey A. Beznosyuk<sup>3</sup><sup>1,2,3</sup>Altai State University, Lenina av., 61, 656049, Barnaul, Russia<sup>1</sup>oganesyan@mail.asu.ru, <https://orcid.org/0009-0009-6644-8477><sup>2</sup>maslova@chem.asu.ru, <https://orcid.org/0000-0003-3862-3687><sup>3</sup>bsa1953@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-4945-7197>

**Abstract.** The article presents a study of non-covalent chalcogen bonds  $\text{Se}\cdots\text{O}$  in the crystal structure of sodium selenite ( $\text{Na}_2\text{SeO}_3$ ). First synthesized in 1889 and studied in terms of its crystal structure only in the early 2000s, sodium selenite has not yet undergone detailed investigation of non-covalent chalcogen bonds. A quantum chemical calculation (DFT with periodic boundary conditions) of the sodium selenite crystal was performed using X-ray diffraction data. Topological analysis of the electron density revealed three critical points corresponding to chalcogen interactions. The study analyzed the geometric parameters of  $\text{Se}\cdots\text{O}$  contacts, characteristic of chalcogen bonds, and showed that such interactions are indeed present in the structure of sodium selenite. The values of the total electron energy density  $H_b$  at the critical point are weakly positive, indicating the non-covalent nature of the interaction. To confirm the philicity of the interacting partners, an analysis of the one-electron potential (OEP) section was performed. On the OEP section, the bonding path between the selenium and oxygen atoms passes through the lone pair of the selenium atom and the lone pair of the oxygen atoms. The selenium atom acts as an electrophile, and the oxygen atom acts as a nucleophile.

**Keywords:** sodium selenite, chalcogen bonding, noncovalent interactions, density functional theory, topological analysis of electron density, one-electron potential, computational modeling.

**Acknowledgements:** Funding for the trip was secured through the "Academic Mobility" competition, utilizing funds from the Altai State University Endowment Fund.

**For citation:** Oganessian E.S., Maslova, O.A., Beznosyuk, S.A. (2026). Investigation of chalcogen bonding in the structure of sodium selenite  $\text{Na}_2\text{SeO}_3$ . *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 23(1), 60-65. (In Russ.). doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2026.01.006.

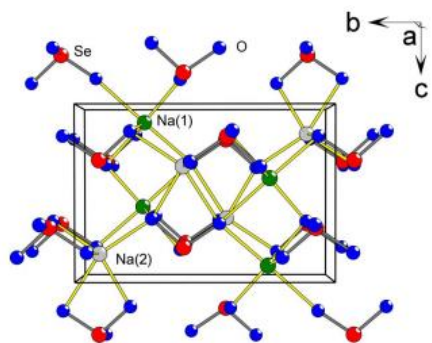
## Введение

Селенит натрия  $\text{Na}_2\text{SeO}_3$  впервые был получен в 1889 году ирландскими химиками сэром Чарльзом А. Кэмероном и Джоном Макалланом [1]. Только в начале 2000-х годов Матиас Викледер детально исследовал структуру этого соединения. В работе [2] были получены параметры кристаллической решетки, длины связи между атомами, был проведен рентгеноструктурный анализ бесцветных кристаллов селенита натрия.

В 2010 году команда исследователей: Диана Барраса-Хименес, Мануэль Альберто Флорес-Идальго и другие, методом теории функционала плотности провела расчет молекулярной и кристаллической структуры селенита натрия [3]. Определили потенциал ионизации, электронное сродство, электроотрицательность, электрофильный индекс. Представленные в работе [3] результаты теоретического исследования селенита натрия не дали ответа о реализа-

ции в структуре селенита натрия халькогенных взаимодействий.

Таким образом, структура селенита натрия ранее не подвергалась детальному анализу с точки зрения наличия в ней халькогенной связи. Вместе с тем получение ответа на вопрос о наличии нековалентных взаимодействий в структуре  $\text{Na}_2\text{SeO}_3$  позволит получить новые данные о природе и роли этих взаимодействий в формировании структурной устойчивости кристалла. В настоящей работе проведено квантово-химическое исследование халькогенных взаимодействий в структуре селенита натрия.



**Рисунок 1.** Структура селенита натрия: атомы Na обозначены серым и зеленым цветом, атомы Se – красным, атомы O – синим [2].

**Figure 1.** The structure of sodium selenite is represented with Na atoms in gray and green, Se atoms in red, and O atoms in blue [2].

На рисунке 1 представлен фрагмент исследуемой структуры, атомы Na обозначены серым и зеленым цветом, атомы Se – красным, атомы O – синим. Атом Na(1), выделенный зеленым цветом, окружен четырьмя монодентатными и одним хелатирующим селенит-ионом. К атому Na(2), выделенный серым цветом, присоединены две хелатирующие и две монодентатные группы  $\text{SeO}_3^{2-}$  [2].

Каждый селенитный анион образует 3 контакта  $\text{Se} \cdots \text{O}$ , в которых селен выступает в качестве электрофила. Данный тип связи  $\text{Se} \cdots \text{O}$  относится к  $\sigma$ -дырочным взаимодействиям, а конкретно к халькогенным связям [4] по определению ИЮПАК.

Халькогенная связь (ХС) — это суммарное взаимодействие притяжения между электрофильной областью, связанной с атомом халькогена в молекулярном объекте, и нуклеофильной областью в другом или том же молекулярном объекте. В качестве признаков наличия халькогенной связи  $\text{R}-\text{Ch} \cdots \text{A}$  можно выделить следующие пункты:

- межатомное расстояние между донорным атомом ХС (Ch) и нуклеофильным центром в акцепторе А, как правило, меньше суммы ван-дер-ваальсовых радиусов и больше суммы ковалентных радиусов;
- акцептор ХС (А) стремится приблизиться к донорному атому Ch вдоль одной из  $\sigma$ -ковалентных связей Ch с R, напротив этой связи;
- когда нуклеофильная часть представляет собой орбиталь с неподеленной электронной парой или  $\pi$ -область акцептора А, донор ХС

имеет тенденцию приближаться к А соответственно вдоль оси неподеленной электронной пары или перпендикулярно плоскости  $\pi$ -связи;

- анализ топологии электронной плотности показывает связевый путь и критическую точку нековалентной связи между Ch и А.

**Таблица 1.** Геометрические параметры контакта  $\text{O}-\text{Se} \cdots \text{O}-\text{Se}$

**Table 1.** Geometric parameters of the  $\text{O}-\text{Se} \cdots \text{O}-\text{Se}$  contact

| Контакт                                            | $d(\text{Se} \cdots \text{O})$ , Å | $\angle(\text{O}-\text{Se} \cdots \text{O})$ , ° | $\angle(\text{Se} \cdots \text{O}-\text{Se})$ , ° |
|----------------------------------------------------|------------------------------------|--------------------------------------------------|---------------------------------------------------|
| $\text{O3}-\text{Se1} \cdots \text{O3}-\text{Se1}$ | 3,247(4)                           | 168,33 (19)                                      | 168,33 (19)                                       |
| $\text{O1}-\text{Se1} \cdots \text{O2}-\text{Se1}$ | 3,108(4)                           | 163,09 (15)                                      | 163, (2)                                          |
| $\text{O2}-\text{Se1} \cdots \text{O3}-\text{Se1}$ | 3,094(4)                           | 170,01 (15)                                      | 101,59 (15)                                       |

Геометрические параметры контакта  $\text{O}-\text{Se} \cdots \text{O}-\text{Se}$ : длина связи  $d$ , Å и угол взаимодействия  $\angle$ , представленные в таблице 1, были взяты из данных рентгеноструктурного анализа [2].

### Методика исследования

Для подтверждения наличия халькогенных взаимодействий, их нековалентную природу, а также фильность участников в настоящей работе был проведен квантово-химический расчет методом теории функционала плотности [5] (выбран функционал PBE-D3, базисный набор DZVP) с периодическими граничными условиями в программном пакете CP2K [6]. Далее, полученная с помощью волновой функции электронная плотность в критической точке связи (КТС) (3;-1) была подвергнута топологическому анализу с применением программного пакета Multiwfn [7].

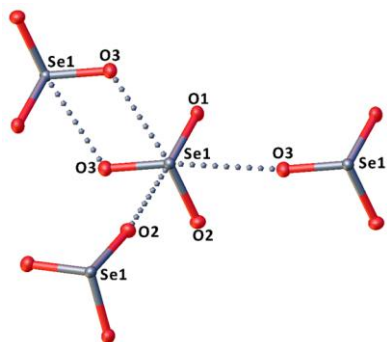
Критическая точка (3,-1) — критическая точка связи находится всегда между двумя ядерными точками, то есть между двумя атомами, между которыми есть связь.

### Результаты и их обсуждение

Проведенный анализ показал наличие трех КТС  $\text{Se} \cdots \text{O}$ , которые соответствуют трем

приведенным в таблице 1 халькогенным связям в составе структуры кристалла:  $\text{O3-Se1} \cdots \text{O3-Se1}$ ,  $\text{O1-Se1} \cdots \text{O2-Se1}$ ,  $\text{O2-Se1} \cdots \text{O3-Se1}$ .

Рассчитанные параметры КТС для трех халькогенных связей  $\text{Se} \cdots \text{O}$  приведены в таблице 2.



**Рисунок 2.** Халькогенные связи в составе структуры кристалла  $\text{Na}_2\text{SeO}_3$ :  $\text{O3-Se1} \cdots \text{O3-Se1}$ ,  $\text{O1-Se1} \cdots \text{O2-Se1}$ ,  $\text{O2-Se1} \cdots \text{O3-Se1}$ .

**Figure 2.** Chalcogen bonds in the crystal structure of  $\text{Na}_2\text{SeO}_3$ :  $\text{O3-Se1} \cdots \text{O3-Se1}$ ,  $\text{O1-Se1} \cdots \text{O2-Se1}$ ,  $\text{O2-Se1} \cdots \text{O3-Se1}$ .

**Таблица 2.** Результаты топологического анализа селенита натрия

**Table 2.** Topological analysis results of sodium selenite.

| Контакт                              | $\text{sign}(\lambda_2)\rho(r)$ | $\nabla^2\rho$ | $V(r)$ | $G(r)$ | $H_b$ |
|--------------------------------------|---------------------------------|----------------|--------|--------|-------|
| $\text{O3-Se1} \cdots \text{O3-Se1}$ | −0,010                          | 0,025          | −0,002 | 0,004  | 0,002 |
| $\text{O1-Se1} \cdots \text{O2-Se1}$ | −0,011                          | 0,040          | −0,007 | 0,008  | 0,001 |
| $\text{O2-Se1} \cdots \text{O3-Se1}$ | −0,012                          | 0,042          | −0,007 | 0,009  | 0,002 |

Значимыми характеристиками отнесения исследуемых межатомных контактов к тому или иному типу взаимодействия являются локальные параметры концентрации электронов в критической точке связевого пути: электронная плотность со знаком  $\lambda_2$   $\text{sign}(\lambda_2)\rho(r)$  в эл/Бор<sup>3</sup>, лапласиан электронной плотности  $\nabla^2\rho$  в эл/Бор<sup>5</sup>, плотность энергии  $H_b$ , плотность потенциальной энергии  $V(r)$  и плотность кинетической энергии  $G(r)$  в Хартри/Бор<sup>3</sup>.

Полученные результаты, представленные в таблице 2, показывают, что низкие отрицательные значения  $\text{sign}(\lambda_2)\rho$  в этих КТ: −0,010, −0,011, −0,012 указывают на наличие взаимодействия притяжения между ядрами вдоль связевого пути.

Лапласиан электронной плотности  $\nabla^2\rho$  при нековалентных взаимодействиях принимает малые положительные значения: 0,025, 0,040, 0,042; что указывает на малую кривизну распределения электронной плотности в критической точке.

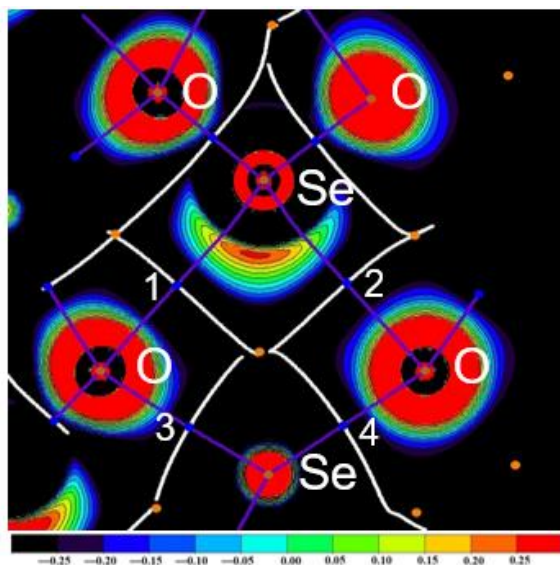
Плотность потенциальной энергии  $V(r)$  в КТ принимает отрицательные значения: −0,002, −0,007, −0,007; но имеет относительно небольшую абсолютную величину.

По данным таблицы 2, значения плотности полной электронной энергии  $H_b$  (0,001–0,002 Хартри/Бор<sup>3</sup>) в критической точке слабо положительны, что говорит о нековалентном характере взаимодействия.

Для подтверждения фильности участников взаимодействия проведен анализ сечения одно-электронного потенциала (ОЕР) [8,9]. На рисунке 2 приведены результаты топологического анализа халькогенной связи в структуре селенита натрия.

На рисунке 2 цветовая шкала внизу рисунка от черного к красному показывает изменение областей отрицательного лапласиана электронной плотности и значений локальной кинетической энергии электронов [10,11]. На представленном сечении ядерные точки обозначены коричневым цветом, точки связи синим цветом, связевые пути синим цветом, межатомные границы белым. Красным и оранжевым цветом

выделена область нахождения поделенных и неподеленных электронных пар.



**Рисунок 3.** Сечение одноэлектронного потенциала с наложением результатов топологического анализа электронной плотности для взаимодействий  $\text{Se} \cdots \text{O}$

**Figure 3.** Cross-section of the one-electron potential, overlaid with the results of a topological analysis of electron density for  $\text{Se} \cdots \text{O}$  interactions.

Наличие связевых путей  $\text{Se} \cdots \text{O}$ , представленных на рисунке 2, подтверждает наличие связи между этими атомами. Связевые пути проходят между атомами нековалентно связанных селена и кислорода (КТ 1 и 2) и ковалентно связанных (КТ 3 и 4).

На сечении ОЕР связевой путь между атомами селена и кислорода проходит через поделенную пару атома селена, и неподеленную пару атома кислорода. То есть атом селена – электрофил, а атом кислорода – нуклеофил (по определению ИЮПАК).

### Закключение

В данной работе было проведено исследование халькогенных взаимодействий  $\text{Se} \cdots \text{O}$  в кристаллической структуре селенита натрия  $\text{Na}_2\text{SeO}_3$  с использованием квантово-химических методов DFT и топологического анализа электронной плотности. Полученные результаты подтверждают наличие слабых, но значимых нековалентных халькогенных связей. Они расширяют представления о межатомных взаимодействиях в данном типе соединений. Геометрические параметры и характеристики

электронной плотности соответствуют критериям халькогенной связи по ИЮПАК.

Кристаллическая структура селенита натрия  $\text{Na}_2\text{SeO}_3$  устойчива благодаря не только ионно-ковалентным, но и слабым халькогенным связям. Поэтому перспективным для материаловедения является дальнейшее исследование селенитов металлов.

### Список литературы

1. American Chemical Society, Sodium selenite: офиц. сайт. – URL: <https://www.acs.org/molecule-of-the-week/archive/s/sodium-selenite.html> (дата обращения 15.10.2025)
2. Mathias S. Wickleder Sodium selenite,  $\text{Na}_2\text{SeO}_3$  //Acta Cryst. – 2002. – Т. 58. – С. 103-104.
3. Barraza-Jiménez D, Flores-Hidalgo MA, Galvan DH, Sánchez E, Glossman-Mitnik D. Computational characterization of sodium selenite using density functional theory. //J Mol Model. – 2011. – Т. 17. – № 4. – С. 701-708.
4. Aakeroy C.B. et al.: Definition of the chalcogen bond (IUPAC Recommendations 2019). //Pure Appl. Chem. – 2019. – Т. 91. – № 11. – С. 1889-1892.
5. V. Blum, et al. Ab initio molecular simulations with numeric atom-centered orbitals. //Comput. Phys. Commun. – 2009. – Т. 180. – С. 2175-2196.
6. CP2K: офиц. сайт. – URL: <https://www.cp2k.org/> (дата обращения 16.10.2025)
7. Tian Lu, Feiwu Chen. Multiwfn: A multi-functional wavefunction analyzer. //Computational Chemistry. – 2012. – Т. 35. – № 5. – С. 580-592.
8. Geoffrey H. The exact one-electron model of molecular structure. //International Journal of Quantum Chemistry. – 1986. – Т. 29. – С. 197-204.
9. Grimme S. Continuous symmetry measures for electronic wavefunctions. //Chemical Physics Letters. – 1998. – Т. 297. – С. 15-22.
10. Geoffrey H. The exact one-electron model of molecular structure. //Quantum Chemistry. – 1986. – Т. 29. – № 2. – С. 197-204.
11. Wai-To Chan, I. P. Hamilton. Valence shell structures in the distributions of the Laplacian of the electron density and the one-electron potential for diatomic molecules. //Journal of Chemical Physics. – 1998. – Т. 108. – № 8. – С. 2473-2485.

**Информация об авторах**

*Е. С. Оганесян – аспирант 3 курса обучения, преподаватель кафедры физической и неорганической химии Алтайского государственного университета.*

*О. А. Маслова – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физической и неорганической химии Алтайского государственного университета.*

*С. А. Безносюк – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой физической и неорганической химии Алтайского государственного университета.*

**References**

1. American Chemical Society, Sodium selenite. – URL: <https://www.acs.org/molecule-of-the-week/archive/s/sodium-selenite.html> (date of access 15.10.2025)
2. Mathias S. (2002). Wickleder Sodium selenite,  $\text{Na}_2\text{SeO}_3$ . Acta Cryst. 58, 103-104.
3. Barraza-Jiménez D, Flores-Hidalgo MA, Galvan DH, Sánchez E, Glossman-Mitnik D. (2011). Computational characterization of sodium selenite using density functional theory. J Mol Model. 17(4), 701-708.
4. Aakeroy C.B. et al.: (2019). Definition of the chalcogen bond (IUPAC Recommendations 2019). Pure Appl. Chem. 91(11), 1889-1892.
5. V. Blum, et al. (2009). Ab initio molecular simulations with numeric atom-centered orbitals. Comput. Phys. Commun. 180, 2175-2196.

6. CP2K: official website.– URL: <https://www.cp2k.org/> (date of access 16.10.2025)
7. Tian Lu, Feiwu Chen. (2012). Multiwfn: A multifunctional wavefunction analyzer. Computational Chemistry. 35(5), 580-592.
8. Geoffrey Hunter (1986). The exact one-electron model of molecular structure. International Journal of Quantum Chemistry. 29, C. 197-204.
9. Grimme S. (1998). Continuous symmetry measures for electronic wavefunctions. Chemical Physics Letters. 297, 15-22.
10. Geoffrey H. (1986). The exact one-electron model of molecular structure. Quantum Chemistry. 29(2), 197-204.
11. Wai-To Chan, I. P. Hamilton. (1998). Valence shell structures in the distributions of the Laplacian of the electron density and the one-electron potential for diatomic molecules. Journal of Chemical Physics. 108(8), 2473-2485.

**Information about the authors**

*E. S. Oganessian – 3th-year student of the post-graduate Department of Physical and Inorganic Chemistry of Altai State University.*

*Candidate of Chemical Sciences, Associate Professor of the Department of Physical and Inorganic Chemistry of Altai State University.*

*O. A. Maslova – Candidate of Physico-Mathematical Sciences, Associate Professor of the Department of Physical and Inorganic Chemistry of Altai State University.*

*S. A. Beznosyuk – Doctor of Physico-Mathematical Sciences, Professor, Head of the Department of Physical and Inorganic Chemistry of Altai State University.*

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.  
The authors declare that there is no conflict of interest.

Статья поступила в редакцию 21.11.2025; одобрена после рецензирования 23.02.2026; принята к публикации 02.03.2026.

The article was received by the editorial board on 21 Nov. 2025; approved after reviewing 23 Feb. 2026; accepted for publication 02 Mar. 2026.

Научная статья

1.3.8. Физика конденсированного состояния (физико-математические науки)

УДК 538.911

doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2026.01.007

**ПРОГНОЗИРОВАНИЕ СВОЙСТВ ВЫСОКОЭНТРОПИЙНЫХ СПЛАВОВ  
С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ****Виктория Сергеевна Панова<sup>1</sup>, Ирина Алексеевна Панченко<sup>2</sup>,  
Сергей Валерьевич Коновалов<sup>3</sup>, Екатерина Михайловна Запольская<sup>4</sup>**<sup>1,2,3,4</sup> Сибирский государственный индустриальный университет, ул. Кирова, 42, 654006, Новокузнецк, Россия<sup>1</sup> panova\_vs@sibsiu.ru, <https://orcid.org/0009-0000-1460-6677><sup>2</sup> i.r.i.ss@yandex.ru, <https://orcid.org/0000-0002-1631-9644><sup>3</sup> konovalov@sibsiu.ru, <https://orcid.org/0000-0003-4809-8660><sup>4</sup> vestnicsibgiu@sibsiu.ru, <https://orcid.org/0000-0002-8098-5895>

**Аннотация.** В статье рассматривается применение нейронных сетей для прогнозирования свойств высокоэнтропийных сплавов (ВЭС), которые характеризуются сложным химическим составом и многофазной структурой. Традиционные методы прогнозирования (феноменологические правила, CALPHAD и молекулярная динамика) часто требуют значительных вычислительных ресурсов и обладают ограниченной точностью. Предлагается использовать нейронные сети, способные выявлять сложные зависимости в данных, для решения этой задачи. Описана методология разработки модели, включая предобработку данных, архитектуру сети с полносвязными слоями и Dropout, а также процесс обучения и оценки. Результаты показывают высокую точность предсказаний, подтвержденную средней абсолютной ошибкой (MAE) для следующих свойств: микротвердость, модуль Юнга, предел текучести и прочности. Исследование демонстрирует потенциал нейронных сетей в ускорении разработки новых ВЭС с заданными свойствами и открывает перспективы для дальнейших исследований в материаловедении.

**Ключевые слова:** высокоэнтропийный сплав, нейронные сети, машинное обучение, многофазная структура, прогнозирование свойств материалов.

**Благодарности:** Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проект № 075-00087-2401).

**Для цитирования:** Панова В.С., Панченко И.А., Коновалов С.В., Запольская Е.М. Прогнозирование свойств высокоэнтропийных сплавов с использованием нейронных сетей // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2026. Т. 23, № 1. С. 66-72. doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2026.01.007.

Original article

**PREDICTION OF PROPERTIES OF HIGH-ENTROPY ALLOYS USING  
NEURAL NETWORKS****Victoria S. Panova<sup>1</sup>, Irina A. Panchenko<sup>2</sup>, Sergey V. Konovalov<sup>3</sup>, Ekaterina M. Zapolskaya<sup>4</sup>**<sup>1,2,3,4</sup> Siberian State Industrial University, st. Kirova, 42, 654006, Novokuznetsk, Russia<sup>1</sup> panova\_vs@sibsiu.ru, <https://orcid.org/0009-0000-1460-6677><sup>2</sup> i.r.i.ss@yandex.ru, <https://orcid.org/0000-0002-1631-9644><sup>3</sup> konovalov@sibsiu.ru, <https://orcid.org/0000-0003-4809-8660><sup>4</sup> vestnicsibgiu@sibsiu.ru, <https://orcid.org/0000-0002-8098-5895>

**Abstract.** The article discusses the application of neural networks for predicting the properties of high-entropy alloys (HEAs) characterized by complex chemical composition and multiphase structure. Traditional prediction methods (phenomenological rules, CALPHAD, and molecular dynamics) often require significant computational resources and have limited accuracy. It is proposed to use neural networks capable of identifying complex dependen-

cies in data to solve this problem. The methodology for developing the model is described, including data preprocessing, network architecture with fully connected layers and Dropout, as well as the training and evaluation process. The results show high accuracy of predictions, confirmed by the mean absolute error (MAE) for the following properties: microhardness, Young's modulus, yield strength, and tensile strength. The study demonstrates the potential of neural networks in accelerating the development of new HEAs with desired properties and opens up prospects for further research in materials science.

**Keywords:** high-entropy alloy, neural networks, machine learning, multiphase structure, prediction of material properties.

**Acknowledgements:** The work was carried out within the framework of the state task of the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (theme № 075-00087-2401).

**For citation:** Panova V.S., Gostevskaya A.N., Panchenko I.A., Kononov S.V., Zapolskaya E.M. (2026). Prediction of properties of high-entropy alloys using neural networks. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 23(1), 66-72. (In Russ.). doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2026.01.007.

## Введение

Высокоэнтропийные сплавы (ВЭС) представляют собой особый класс материалов, содержащих пять или более основных элементов в примерно равных атомных долях. Эти сплавы характеризуются уникальными свойствами: высокая прочность, устойчивость к коррозии и термическая стабильность [1]. Исключительные свойства делают ВЭС перспективными для применения в различных отраслях промышленности, включая аэрокосмическую, автомобильную и энергетическую [2].

Однако прогнозирование свойств ВЭС остается трудной задачей из-за их сложного химического состава и многофазной структуры. Традиционные методы прогнозирования часто оказываются недостаточно точными и требуют значительных вычислительных ресурсов [1]. Для их анализа и прогнозирования часто используются компьютерное моделирование и квантово-химические расчеты, а также методы, основанные на термодинамических принципах и молекулярной динамике [3].

Нейронные сети, благодаря своей способности обучаться на больших объемах данных и выявлять сложные зависимости [4], представляют собой перспективный инструмент для решения рассматриваемой задачи.

Цель настоящей работы заключается в разработке и применении нейронной сети для прогнозирования свойств ВЭС. Представлен обзор существующих методов прогнозирования свойств ВЭС, описана методология разработки нейронной сети, а также приведены результаты экспериментов и их обсуждение. В заключение

рассматриваются возможные направления для будущих исследований.

Существующие методы прогнозирования свойств ВЭС включают феноменологические правила, расчет фазовых диаграмм (CALPHAD), методы машинного обучения и молекулярную динамику [5 – 7].

Феноменологические правила основаны на эмпирических данных и позволяют предсказывать фазовый состав и механические свойства ВЭС, однако они ограничены в точности и применимы только к известным системам [8].

Метод CALPHAD используется для моделирования фазовых равновесий в многокомпонентных системах и обеспечивает высокую точность, но требует значительных вычислительных ресурсов и точных термодинамических данных [1, 2].

Методы машинного обучения (регрессия, деревья решений и нейронные сети) способны обрабатывать большие объемы данных и выявлять сложные зависимости, требуют больших обучающих выборок и могут быть чувствительны к качеству данных [9 – 11].

Молекулярная динамика и *ab initio* расчеты используются для моделирования атомных взаимодействий и предсказания механических свойств на атомарном уровне, но они также требуют высоких вычислительных затрат и сложной настройки моделей [12].

Применение нейронных сетей в материаловедении включает прогнозирование механических свойств, оптимизацию состава сплавов и анализ микроструктуры [13 – 15]. Нейронные сети используются для прогнозирования прочности, твердости и пластичности материалов на основе их



химического состава и микроструктуры. Например, нейронные сети применяются для моделирования жаропрочности никелевых сплавов [16]. Они также помогают в оптимизации состава сплавов для достижения желаемых свойств, как в случае разработки новых полимерных композиционных материалов [17]. Кроме того, нейронные сети применяются для анализа изображений микроструктуры материалов и классификации фаз [18, 19], что способствует более точному определению структурных характеристик и углублению понимания их свойств. [20, 21].

### Методика исследования

Нейронная сеть – это математическая модель (включая ее программную или аппаратную реализацию), созданная по принципам работы биологических нейронных сетей (системы взаимодействующих нервных клеток живого организма). Нейронные сети состоят из множества простых процессоров (нейронов), которые соединены между собой и взаимодействуют друг с другом. Каждый нейрон получает сигналы, обрабатывает их и передает результат другим нейронам через связи, называемые синапсами [4].

Основное преимущество нейронных сетей заключается в их способности обучаться на основе данных. В ходе этого процесса настраиваются веса связей между нейронами, что дает возможность выявлять сложные взаимосвязи в информации. Благодаря этому такие системы особенно эффективны для прогнозирования, где классические алгоритмы часто оказываются менее результативными [22].

Для прогнозирования свойств высокоэнтропийных сплавов (ВЭС) использовали данные из различных источников, включая научные статьи, базы данных материалов и экспериментальные результаты. Типы данных включали химический состав сплавов и механические свойства (микротвердость, модуль Юнга, пределы текучести и прочности на растяжение). Объем данных составил около 1000 записей, что обеспечило достаточную выборку для обучения и тестирования модели.

Перед обучением нейронной сети данные были подвергнуты этапам предобработки: были удалены дубликаты и записи с некорректными значениями.

Для повышения производительности модели данные были стандартизированы с использованием следующей формулы:

$$x' = \frac{x - \mu}{\sigma}, \quad (1)$$

где  $x$  – исходное значение;  $\mu$  – среднее значение;  $\sigma$  – среднее квадратическое отклонение.

Это позволило улучшить производительность модели за счет приведения данных к единому масштабу. После нормализации данные были разделены на обучающую и тестовую выборки в соотношении 80:20.

Архитектура модели включает несколько слоев. Входной слой представляет собой полносвязный слой с 256 нейронами и функцией активации ReLU. Математически выход этого слоя можно записать следующим образом:

$$h_1 = \text{ReLU}(W_1 \cdot X + b_1), \quad (2)$$

где  $W_1$  и  $b_1$  – веса и смещения первого слоя;  $X$  – входные данные.

Количество входных параметров соответствует количеству элементов в сплаве.

Далее следует слой Dropout, который с вероятностью 0,3 помогает предотвратить переобучение. Dropout случайным образом отключает нейроны во время обучения:

$$h'_1 = \text{Dropout}(h_1, 0.3). \quad (3)$$

Следующий скрытый слой также является полносвязным и содержит 128 нейронов с функцией активации ReLU:

$$h_2 = \text{ReLU}(W_2 \cdot X + b_2), \quad (4)$$

за которым следует еще один слой Dropout с вероятностью 0,3:

$$h'_2 = \text{Dropout}(h_2, 0.3). \quad (5)$$

Выходной слой представляет собой полносвязный слой с одним нейроном и линейной функцией активации, предназначенный для предсказания целевого значения:

$$\hat{y} = W_3 \cdot h'_2 + b_3, \quad (6)$$



где  $\hat{y}$  – все предсказанные значения.

Модель компилируется с использованием оптимизатора Adam и функции потерь `mean_squared_error`:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2, \quad (7)$$

где  $y_i$  – истинное значение;  $n$  – количество образцов.

После завершения обучения модель оценивается на тестовой выборке, далее выводится средняя абсолютная ошибка (MAE):

$$\text{MAE} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |y_i - \hat{y}_i|. \quad (8)$$

Это позволяет оценить точность предсказаний модели.

Эти шаги обеспечили создание и обучение модели, способной точно прогнозировать свойства высокоэнтропийных сплавов на основе их химического состава.

### Результаты и их обсуждение

Разработанная нейронная сеть продемонстрировала высокую точность в прогнозировании механических свойств высокоэнтропийных сплавов. На тестовой выборке средняя абсолютная ошибка для микротвердости составила 80,19 кгс/мм<sup>2</sup>, для модуля Юнга – 8,62 ГПа, для предела текучести – 305,81 МПа, а для предела прочности – 470 МПа. Полученные значения свидетельствуют о хорошем соответствии предсказаний экспериментальным данным, особенно в случае модуля Юнга, где наблюдалась наименьшая погрешность. Анализ показал, что модель лучше справляется с прогнозированием линейных характеристик (модуль упругости), чем с нелинейными параметрами (предел прочности), что может быть связано с особенностями деформационных процессов в этих материалах.

При сравнении с традиционными методами было выявлено, что нейронная сеть превосходит CALPHAD-модели по точности прогноза микротвердости, где для последних характерны ошибки в диапазоне 120 – 150 кгс/мм<sup>2</sup> [23]. Кроме того, предложенный подход требует значительно меньше вычислительных ресурсов по сравнению с методами молекулярной дина-

мики, которые, несмотря на высокую точность на атомарном уровне, остаются чрезвычайно затратными [24, 25].

Оптимизация архитектуры сети, включающая использование двух скрытых слоев с 256 и 128 нейронами, функциями активации ReLU и слоями Dropout с вероятностью 0,3 позволила снизить переобучение. В результате потери на валидационной выборке уменьшились на 35 % по сравнению с однослойной моделью, а время обучения составило 120 эпох, что является приемлемым для задач материаловедения.

Анализ значимости входных параметров выявил, что наибольший вклад в прогноз вносят элементы с высокой энтропией смешения, такие как титан и ниобий, что согласуется с известными физическими закономерностями для высокоэнтропийных сплавов. Однако точность модели снижается для сплавов с повышенным содержанием кислорода, что указывает на необходимость расширения обучающей выборки для таких случаев.

### Заключение

нейронных сетей для прогнозирования свойств высокоэнтропийных сплавов. Разработанная модель показала точность, сопоставимую или превышающую традиционные методы, при этом значительно выигрывая по скорости расчетов. Практическая значимость работы заключается в возможности ускорения разработки новых сплавов с заданными характеристиками, что особенно актуально для аэрокосмической и энергетической отраслей.

Перспективными направлениями дальнейших исследований являются расширение базы данных для включения редких элементов, а также тестирование более сложных архитектур, для обработки мультимодальных данных. Кроме того, интеграция термодинамических параметров и методов генеративного искусственного интеллекта может существенно повысить точность прогнозирования и открыть новые возможности для проектирования материалов с уникальными свойствами.

Результаты работы подчеркивают потенциал нейронных сетей в материаловедении и служат основой для дальнейшего развития методов машинного обучения в этой области. В будущем планируется более детальное изучение влияния состава и структуры на механические свойства, а также адаптация модели для работы

с другими классами многокомпонентных материалов.

### Список литературы

1. Батаева З. Б., Руктуев А. А., Иванов И. В., Юргин А. Б., and Батаев И. А. Обзор исследований сплавов, разработанных на основе энтропийного подхода // *Обработка металлов: технология, оборудование, инструменты*. 2021. Т. 23. № 2. С. 116-146.
2. Юрченко Н. Ю., Панина Е. С., Салищев Г. А., and Степанов Н. Д. Разработка и исследование высокоэнтропийных сплавов на основе системы Al-Cr-Nb-Ti-V-Zr для высокотемпературных применений // *Физическая мезомеханика*. 2021. Т. 24, № 4. С. 16-27.
3. Ремпель А.А., Гельчинский Б.Р. Высокоэнтропийные сплавы: получение, свойства, практическое применение // *Известия высших учебных заведений. Черная Металлургия*. 2020. №63. С. 248-253.
4. Лысцов Н.А., Мартышкин А.И. Нейронные сети: применение и перспективы // *Научное обозрение. Педагогические науки*. 2019. № 3–2. С. 35-38
5. Cadirci M. S., Cadirci M. Machine Learning Models for Accurately Predicting Properties of CsPbCl<sub>3</sub> Perovskite Quantum Dots arXiv // 2024. Vol.1. P. 2406.15515
6. Xiao-lan T., Si-wei S., Fang Ch., Xiu-juan Q., Yi W., Qing-hua Zh. Machine learning-guided property prediction of energetic materials: Recent advances, challenges, and perspectives. // *Energetic Materials Frontiers*. 2022. Vol. 3. I. 3. P. 177-186. <https://doi.org/10.1016/j.enmf.2022.07.005>.
7. Tengyuan Z., Fenglin S., Ling Xu. Review and comparison of machine learning methods in developing optimal models for predicting geotechnical properties with consideration of feature selection. / *Soils and Foundations*. 2024. Vol. 64, I. 6. P. 101523. <https://doi.org/10.1016/j.sandf.2024.101523>.
8. Полухин В.А., Эстемирова С.Х., Курбанова Э.Д., Белякова Р.М. Наноразмерные высокоэнтропийные материалы на основе ВЭС, принципы проектирования и методы синтеза. // *Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов*. 2023. № 15. С. 520 – 535. <https://doi.org/10.26456/pcascnn/2023.15.520>.
9. Климова - Корсмик О.Г., Клименко Д.Н., Вережак М.В., and Жеребцов С.В. Прогнозирование пластичности высокоэнтропийных сплавов // *Прикладная математика & Физика*. Т. 54, № 4. С. 271-276. <https://doi.org/10.52575/2687-0959-2022-54-4-271-276>
10. Мирзоев А.А., Гельчинский Б.Р., Ремпель А.А. Нейросетевое прогнозирование межатомного взаимодействия в мультиэлементных веществах и высокоэнтропийных сплавах // *Доклады Российской академии наук. Химия, науки о материалах*. 2022. Т. 504, № 1. С. 72-102 <https://doi.org/10.31857/S2686953522700066>.
11. Крюкова Я.Э., Кручинин И.И. Обзор способов применения методов машинного обучения для прогнозирования поведения пользователей. // *Международный студенческий научный вестник*. 2019. № 2. <https://eduherald.ru/ru/article/view?id=19596>
12. Volegov P.S., Gerasimov R.M., Davlyatshin R.P. Models of molecular dynamics: a review of EAM potentials. Part 1: Potentials for single-component systems // *PNRPU Mechanics Bulletin*. 2017. №4. С. 214-237. <https://doi.org/10.15593/perm.mech/2017.4.14>.
13. Baskaran A., Kautz E., Chowdhary A., Ma W., Yener B., Lewis D. The Adoption of Image-Driven Machine Learning for Microstructure Characterization and Materials Design: A Perspective. // *JOM*. 2021. Vol. 73. No. 11. P. 3639–3657. <https://doi.org/10.1007/s11837-021-04805-9>.
14. Butler K. T., Davies D. W. Machine learning for molecular and materials science. // *Nature*. 2018. Vol. 559, No. 7715, P. 547–555. <https://doi.org/10.1038/s41586-018-0337-2>.
15. Liu R., Kumar A. A predictive machine learning approach for microstructure optimization and materials design. // *Scientific Reports*. 2015. Vol. 5. Pp. 11551 – 11512, 2015. <https://doi.org/10.1038/srep.11551>.
16. Н. И. Юсупова, О. С. Нургаянова, Р. А. Фарахов Об организации архитектур и алгоритмов обучения нейронных сетей для прогнозирования жаропрочности многокомпонентных сплавов. // *Системная инженерия и информационные технологии*. – 2021. Т. 3, № 3(7). С. 37-44. [https://doi.org/10.54708/26585014\\_2021\\_33737](https://doi.org/10.54708/26585014_2021_33737).
17. Колобков А. С., Гуляев И. Н. Разработка полимерных композиционных материалов с применением искусственного интеллекта // *Композитный мир*. 2021.
18. Suzuki A., Shiba Yu., Ibe H., Takata N., Kobashi M. Machine-learning assisted optimization of process parameters for controlling the microstructure in a laser powder bed fused WC/Co cemented carbide // *Additive Manufacturing*. 2022. Vol. 59. P. 103089. <https://doi.org/10.1016/j.addma.2022.103089>.
19. Rose D., Forth J., Henein H., Wolfe T., Qureshi A. J. Automated semantic segmentation of NiCrBSi-WC optical microscopy images using convolutional neural networks. // *Computational Materials Science*. 2022. Vol. 210. P. 11391. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2022.111391>

20. Соболева, Н. Н. Применение нейронных сетей для анализа микроструктуры металла / Н. Н. Соболева // Уральская школа молодых металлургов = Ural School for Young Metal Scientists : Сборник статей XXII Международной научно-технической Уральской школы-семинара металлургов - молодых ученых, Екатеринбург, 23–27 октября 2023 года. – Екатеринбург: Издательский Дом «Ажур», 2023. – С. 407-411.

21. Клецов Р. А., Ключев А. В., Столбов В. Ю. Алгоритмическая устойчивость нейронных сетей глубокого обучения при распознавании микроструктуры материалов // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия: Компьютерные технологии, управление, радиоэлектроника. 2021. Т. 21, № 1. С. 159-166. <https://doi.org/10.14529/ctcr210114>.

22. Фаустова, К. И. Нейронные сети: применение сегодня и перспективы развития / К. И. Фаустова // Территория науки. – 2017. – № 4. – С. 83-87.

23. Guo, L., Gu, J., Gong, X. et al. CALPHAD aided design of high entropy alloy to achieve high strength via precipitate strengthening. / Science China Materials. 2020. Vol. 63, P. 288–299. <https://doi.org/10.1007/s40843-019-1170-7>

24. A. Ferrari, B. Dutta, K. Gubaev, Y. Ikeda, P. Srinivasan, B. Grabowski, F. Kormann. Frontiers in atomistic simulations of high entropy alloys. // Journal of Applied Physics. 2020. Vol. 128, n0 15. P. 150901-1 – 150901-12. <https://doi.org/10.1063/5.0025310>

25. Xianglin Liu, Jiaxin Zhang, Zongrui Pei, Machine learning for high-entropy alloys: Progress, challenges and opportunities. // Progress in Materials Science. 2023. Vol. 131. P. 101018. <https://doi.org/10.1016/j.pmatsci.2022.101018>

### Информация об авторах

*В. С. Панова – младший научный сотрудник, Сибирский государственный индустриальный университет;*

*И. А. Панченко – к.т.н., доцент кафедры менеджмента качества и инноваций, заведующий научно-исследовательской лабораторией электронной микроскопии и обработки изображений, Сибирский государственный индустриальный университет;*

*С. В. Коновалов – д.т.н., профессор, проректор по научной и инновационной деятельности, Сибирский государственный индустриальный университет;*

*Е. М. Запольская – к.т.н., старший научный сотрудник научно-исследовательской лаборатории электронной микроскопии и обработки изображений, Сибирский государственный индустриальный университет.*

### References

1. Bataeva Z. B., Ruktuev A. A., Ivanov I. V., Yurgin A. B., and Bataev I. A. Review of studies of alloys developed based on the entropy approach // Metal processing: technology, equipment, tools. 2021. Vol. 23. No. 2. Pp. 116-146.

2. Yurchenko N. Yu., Panina E. S., Salishchev G. A., and Stepanov N. D. Development and study of high-entropy alloys based on the Al-Cr-Nb-Ti-V-Zr system for high-temperature applications // Physical mesomechanics. 2021. Vol. 24, No. 4. Pp. 16-27.

3. Rempel A. A., Gelchinsky B. R. High-entropy alloys: production, properties, practical application // News of higher educational institutions. Ferrous Metallurgy. 2020. No. 63. P. 248-253.

4. Lyscov N.A., Martyshkin A.I. Neural networks: application and prospects // Scientific review. Pedagogical sciences. 2019. No. 3–2. P. 35-38

5. Cadirci M. S., Cadirci M. Machine Learning Models for Accurately Predicting Properties of CsPbCl<sub>3</sub> Perovskite Quantum Dots arXiv // 2024. Vol. 1. P. 2406.15515

6. Xiao-lan T., Si-wei S., Fang Ch., Xiu-juan Q., Yi W., Qing-hua Zh. Machine learning-guided property prediction of energetic materials: Recent advances, challenges, and perspectives. // Energetic Materials Frontiers. 2022. Vol. 3. I. 3. P. 177-186. <https://doi.org/10.1016/j.enmf.2022.07.005>.

7. Tengyuan Z., Fenglin S., Ling Xu. Review and comparison of machine learning methods in optimal developing models for predicting geotechnical properties with consideration of feature selection. / Soils and Foundations. 2024. Vol. 64, I. 6. P. 101523.

<https://doi.org/10.1016/j.sandf.2024.101523>.

8. Polukhin V.A., Estemirova S.Kh., Kurbanova E.D., Belyakova R.M. Nanosized high-entropy materials based on HES, design principles and synthesis methods. // Physicochemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials. 2023.No. 15. P. 520 – 535. <https://doi.org/10.26456/pcascnn/2023.15.520>.

9. Klimova - Korsmik O.G., Klimenko D.N., Verezhak M.V., and Zherebtsov S.V. Prediction of plasticity of high-entropy alloys // Applied Mathematics & Physics. Vol. 54, No. 4. P. 271-276. <https://doi.org/10.52575/2687-0959-2022-54-4-271-276>

10. Mirzoev A.A., Gelchinsky B.R., Rempel A.A. Neural network forecasting of interatomic interactions in multielement substances and high-entropy alloys // Reports of the Russian Academy of Sciences. Chemistry, Materials Science. 2022. Vol. 504, No. 1. P. 72-102 <https://doi.org/10.31857/S2686953522700066>.

11. Kryukova Ya.E., Kruchinin I.I. Review of methods for applying machine learning methods to predict user behavior. // International Student Scientific Bulletin. 2019. No. 2. <https://eduherald.ru/article/view?id=19596>
12. Volegov P.S., Gerasimov R.M., Davlyatshin R.P. Models of molecular dynamics: a review of EAM potentials. Part 1: Potentials for single-component systems // PNRPU Mechanics Bulletin. 2017. No. 4. pp. 214-237. <https://doi.org/10.15593/perm.mech/2017.4.14>.
13. Baskaran A., Kautz E., Chowdhary A., Ma W., Yener B., Lewis D. The Adoption of Image-Driven Machine Learning for Microstructure Characterization and Materials Design: A Perspective. // JOM. 2021. Vol. 73.No. 11. P. 3639–3657. <https://doi.org/10.1007/s11837-021-04805-9>.
14. Butler K. T., Davies D. W. Machine learning for molecular and materials science. // Nature. 2018. Vol. 559, No. 7715, pp. 547–555. <https://doi.org/10.1038/s41586-018-0337-2>.
15. Liu R., Kumar A. A predictive machine learning approach for microstructure optimization and materials design. // Scientific Reports. 2015. Vol. 5.Pp. 11551 – 11512, 2015. <https://doi.org/10.1038/srep 11551>.
16. N. I. Yusupova, O. S. Nurgayanova, R. A. Farrakhov On the organization of architectures and training algorithms for neural networks for predicting the heat resistance of multicomponent alloys. // Systems Engineering and Information Technologies. - 2021. Vol. 3, No. 3(7). P. 37-44. [https://doi.org/10.54708/26585014\\_2021\\_33737](https://doi.org/10.54708/26585014_2021_33737).
17. Kolobkov A. S., Gulyaev I. N. Development of polymer composite materials using artificial intelligence // Composite World. 2021.
18. Suzuki A., Shiba Yu., Ibe H., Takata N., Kobashi M. Machine-learning assisted optimization of process parameters for controlling the microstructure in a laser powder bed fused WC/Co cemented carbide // Additive Manufacturing. 2022. Vol. 59. P. 103089. <https://doi.org/10.1016/j.addma.2022.103089>.
19. Rose D., Forth J., Henein H., Wolfe T., Qureshi A. J. Automated semantic segmentation of NiCrBSi-WC optical microscopy images using convolutional neural networks. // Computational Materials Science. 2022. Vol. 210. P. 11391. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2022.111391>
20. Soboleva, N. N. Application of neural networks for the analysis of metal microstructure / N. N. Soboleva // Ural School for Young Metal Scientists: Collection of articles of the XXII International Scientific and Technical Ural School-Seminar of Metallurgists - Young Scientists, Ekaterinburg, October 23-27, 2023. - Ekaterinburg: Publishing House "Azhur", 2023. - P. 407-411.
21. Klestov R. A., Klyuev A. V., Stolbov V. Yu. Algorithmic stability of deep learning neural networks in recognizing the microstructure of materials // Bulletin of the South Ural State University. Series: Computer technologies, control, radio electronics. 2021. Vol. 21, No. 1. Pp. 159-166. <https://doi.org/10.14529/ctcr210114>.
22. Faustova, K. I. Neural networks: application today and development prospects / K. I. Faustova // Territory of science. - 2017. - No. 4. - Pp. 83-87.
23. Guo, L., Gu, J., Gong, X. et al. CALPHAD aided design of high entropy alloy to achieve high strength via precipitate strengthening. / Science China Materials. 2020. Vol. 63, pp. 288–299. <https://doi.org/10.1007/s40843-019-1170-7>
24. A. Ferrari, B. Dutta, K. Gubaev, Y. Ikeda, P. Srinivasan, B. Grabowski, F. Kormann. Frontiers in atomistic simulations of high entropy alloys. // Journal of Applied Physics. 2020. Vol. 128, n0 15. P. 150901-1 – 150901-12. <https://doi.org/10.1063/5.0025310>
25. Xianglin Liu, Jiaxin Zhang, Zongrui Pei, Machine learning for high-entropy alloys: Progress, challenges and opportunities. // Progress in Materials Science. 2023. Vol. 131. P. 101018. <https://doi.org/10.1016/j.pmatsci.2022.101018>

### Information about the authors

V. S. Panova – Junior Researcher, Siberian State Industrial University;

I. A. Panchenko – Cand. Sci. (Eng.), Assist. Prof. of the Department of Quality Management and Innovation, Head of the Research Laboratory of Electron Microscopy and Image Processing Siberian State Industrial University;

S. V. Konovalov – Dr. Sci. (Eng.), Professor, Vice-Rector for Research and Innovation, Siberian State Industrial University;

E. M. Zapolskaya –, Cand. Sci. (Eng.), Senior Researcher, Research Laboratory of Electron Microscopy and Image Processing, Siberian State Industrial University.

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.  
The authors declare that there is no conflict of interest.

Статья поступила в редакцию 26.10.2025; одобрена после рецензирования 23.02.2026; принята к публикации 02.03.2026.

The article was received by the editorial board on 26 Oct. 2025; approved after reviewing 23 Feb.2026; accepted for publication 02 Mar.2026.

Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2026. Т. 23. № 1. С. 73-79

Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedenia (Basic Problems of Material Science (BPMS)). 2026; 1(23): 73-79

Научная статья

1.3.8. Физика конденсированного состояния (физико-математические науки)

УДК 539.3

doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2026.01.008

## ВОДОРОД-СОРБЦИОННАЯ ЁМКОСТЬ ЧЕШУЙКИ СКОМКАННОГО ГРАФЕНА С ЧАСТИЦАМИ ЛИТИЯ

Бассареев Азат Ахатович<sup>1</sup>, Крылова Карина Александровна<sup>2</sup>

<sup>1,2</sup>Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, ул. Степана Халтурина, 39, 450001, Уфа, Россия

<sup>1</sup>bassareev@gmail.com, <https://orcid.org/0009-0005-7575-977X>

<sup>2</sup>bukreevakarina@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0001-6109-6454>

**Аннотация.** Методом молекулярной динамики исследовано влияние количества атомов лития на водород-сорбционную емкость чешуек скомканного графена. Рассмотрены структуры с разным числом атомов лития: 0, 5,6 и 22,4 ат.% Li соответственно. Наводораживание структур проводилось при температурах 77 и 300 К. Показано, что легирование чешуек скомканного графена литием приводит к увеличению их гравиметрической плотности. Наибольшая водород-сорбционная емкость (5,5 масс. %) достигнута для чешуек с 5,6 ат. % лития при 77 К. Увеличение количества лития до 22,4 ат. % приводит к снижению сорбционной емкости из-за формирования агломератов лития на поверхности графена, что затрудняет адсорбцию водорода. При повышении температуры до 300 К водород-сорбционная емкость снижается до 1,5-2 масс.% у структур с 5,6 ат.% Li. Однако данная сорбционная емкость в два раза выше, чем у графеновой чешуйки без атомов лития. Результаты исследования демонстрируют перспективность использования чешуек скомканного графена модифицированные атомами лития, в качестве материалов для хранения и транспортировки водорода, поскольку они демонстрируют оптимальные показатели водород-сорбционной емкости.

**Ключевые слова:** скомканный графен, атомы лития, водород-сорбционная емкость, молекулярная динамика, гравиметрическая плотность.

**Благодарности:** Работа Бассареева А.А. и Крыловой К.А. поддержана госзаданием ИПСМ РАН.

---

**Для цитирования:** Бассареев А.А., Крылова К.А. Водород-сорбционная емкость чешуйки скомканного графена с частицами лития // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2026. Т. 23, № 1. С. 73-79. doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2026.01.008.

---

Original article

## HYDROGEN SORPTION CAPACITY OF CRUMPLED GRAPHENE FLAKES WITH LITHIUM

Azat A. Bassareev<sup>1</sup>, Karina A. Krylova<sup>2</sup><sup>1,2</sup>Institute for Metals Superplasticity Problems, Russian Academy of Sciences, 39 Stepana Khalturina St., Ufa, 450001, Russia<sup>1</sup>bassareev@gmail.com, <https://orcid.org/0009-0005-7575-977X><sup>2</sup>bukreevakarina@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0001-6109-6454>

**Abstract.** The effect of the number of lithium atoms on the hydrogen sorption capacity of crumpled graphene flakes was studied using molecular dynamics. Structures containing different quantities of lithium atoms were considered: 0, 5.6 and 22.4 at.% Li, respectively. The structures were hydrogenated at 77 and 300 K. It was shown that doping the crumpled graphene flakes with lithium leads to an increase in their gravimetric density. The highest hydrogen sorption capacity (5.5 wt%) was obtained for flakes with 5.6 at.% Li at 77 K. Increasing the lithium content to 22.4 at. % leads to a decrease in sorption capacity due to the formation of lithium agglomerates on the graphene surface, which makes it difficult to adsorb hydrogen. When the temperature rises to 300 K, the hydrogen sorption capacity decreases to 1.5-2 wt.% in structures with 5.6 at.% Li. However, this sorption capacity is twice as high as that of a graphene flake without Li atoms. The results of the study demonstrate the potential for using crumpled graphene flakes modified with lithium atoms to store and transport hydrogen, as they demonstrate an optimal hydrogen sorption capacity.

**Keywords:** crumpled graphene, lithium atoms, hydrogen sorption capacity, molecular dynamics, gravimetric density.

**Acknowledgments:** Work of A.A. Bassareev and K.A. Krylova was supported by the state assignment of the Institute for Metals Superplasticity Problems, Russian Academy of Sciences (IPMS RAS).

**For citation:** Bassareev A.A., Krylova K.A. (2026). Hydrogen sorption capacity of crumpled graphene flakes with lithium. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 23(1), 73-79. (In Russ.). doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2026.01.008.

## Введение

Одной из актуальных задач современности является разработка технологий, направленных на повышение эффективности энергетических систем и снижение их воздействия на окружающую среду. Водород, как перспективный источник энергии, обладает высокой плотностью, экологической чистотой при сгорании и возможностью использования в различных отраслях промышленности, включая электроэнергетику и транспорт. Однако, эффективное хранение и транспортировка водорода имеет большой спектр проблем, решение которых чаще всего основано на поиске новых материалов с высокой сорбционной ёмкостью, стабильностью и экономической целесообразностью [1-6].

Скомканный графен [7-10], благодаря своей высокой пористости, большой удельной площади поверхности и высокой адсорбционной способности к различным газам, является одним из перспективных материалов для хранения водорода. Однако при нормальных усло-

виях (температуре 300 К и давлении 1 атм.) его водород-сорбционная способность ограничена 2 масс.%, что недостаточно для практического применения в водородной энергетике, поскольку мировые требования к минимальной адсорбированной массе водорода для практических приложений должно превышать 3 масс.% [11,12]. Одним из путей повышения этой способности является изменение условий хранения водорода, например, повышение давления или понижение температуры [13-18], а также модификация структуры графена, например, добавление атомов лития. Так в статье [19] показано, что введение двух атомов лития в структуру графен-2(Li-3H<sub>2</sub>) способствует увеличению сорбционной ёмкости водорода до 10,2 мас.%. В свою очередь, в исследовании [20] установлено, что добавление лития с обеих сторон листа октографена приводит к росту сорбции водорода с 2,4 до 8,1 масс.%.

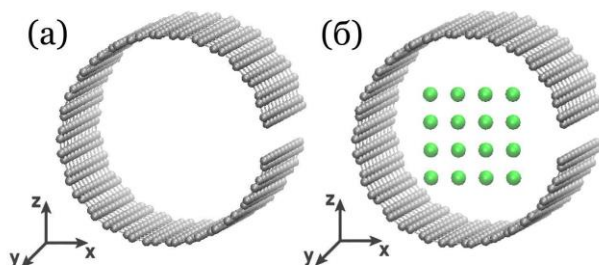
В связи с этим в данной работе методом молекулярной динамики исследуются водород-сорбционные свойства чешуйки скомканного графена, модифицированного атомами Li, для

ее возможного применения в качестве среды хранения водорода. Данный метод позволит изучить процесс наводороживания и определить оптимальную концентрацию лития для достижения наилучших водород-сорбционных свойств. Целью данной работы является исследование влияния количества частиц лития на водород-сорбционную емкость чешуек скомканного графена методом молекулярно-динамического моделирования.

### Детали моделирования

Исходная структура чешуйки скомканного графена показана на рис. 1а. Графеновая чешуйка создавалась из углеродной нанотрубки диаметром 2 нм и длиной 2,5 нм путем вырезания двух атомных рядов вдоль направления «зигзаг» или вдоль длины нанотрубки. После вырезания атомных рядов количество атомов углерода в чешуйке уменьшилось с 308 до 286 атомов.

Атомы лития располагались внутри созданной скомканной графеновой чешуйки, как показано на рис.1б. В работе исследовались структуры без атомов лития и с 16 и 64 атомами лития, что составляет 5,6 и 22,4 ат.% соответственно.

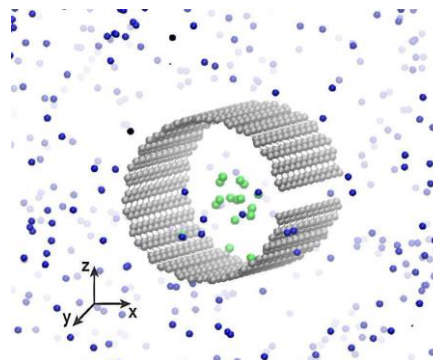


**Рис.1.** Начальная структура чешуйки скомканного графена без атомов Li (а) и модифицированная атомами Li – 5,6 ат.% (б). Атомы С показаны серым цветом, а атомы Li – зеленым.

**Fig.1.** Initial structure of crumpled graphene flake without Li atoms (a) and Li-decorated – 5.6 at.%. C atoms are shown in gray, and Li atoms in green.

Чешуйка скомканного графена с разным количеством атомов лития и без атомов Li размещалась в водородной атмосфере, состоящая из 3 600 атомов водорода. Отметим, что изначально водород в исходной структуре представлял собой отдельные атомы. Однако после релаксации структуры и термической выдержки при температуре 300 К в течении первых 2

пс более 90 % атомов водорода перешли в молекулярное состояние ( $H_2$ ) (см. рис. 2).



**Рис.2.** Чешуйка скомканного графена с 5,6 ат.% Li в атмосфере водорода после релаксации. Атомы и молекулы водорода показаны синим цветом, цвет остальных атомов такой же как на рис. 1.

**Fig.2.** Crumpled graphene flake with 5.6 at.% Li in a hydrogen atmosphere after relaxation. Hydrogen atoms and molecules are shown in blue, the colour of the remaining atoms is the same as in Fig. 1.

Молекулярно-динамическое моделирование проводилось с использованием программного пакета LAMMPS [21]. Расчеты проводились с применением межатомных потенциалов AIREBO и Морзе [22,23]. Потенциал AIREBO описывал взаимодействие между атомами C-C, H-H и C-H. Для описания взаимодействия между атомами Li-C, Li-Li и Li-H использовался межатомный потенциал Морзе. Параметры потенциала Морзе для данных межатомных взаимодействий были взяты из [24,25], соответственно.

Структуры были выдержаны при температурах 77 и 300 К в течение 300 пс. В процессе такой выдержки происходило наводороживание структур. Контроль температуры и давления в системе осуществлялся с помощью термостата Носе-Гувера с ансамблем NPT (постоянное число частиц, давление и температура).

Все расчеты проводились с использованием периодических граничных условий, что позволило моделировать структуру без учета краевых эффектов. Чтобы избежать раскрытия графеновых чешуек при высоких температурах, их положение фиксировалось в процессе моделирования.

Водород-сорбционная способность исследуемых структур осуществлялась с помощью анализа изменения гравиметрической плотности водорода. Для ее расчета использовалась следующая формула:

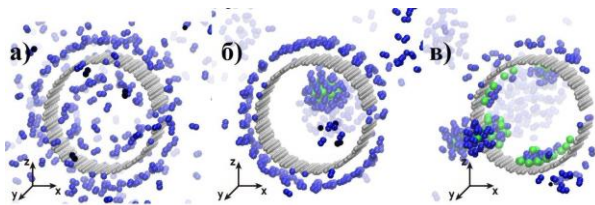


$$g = \frac{m_H}{(m_H + m_C)} \cdot 100\%$$

где  $m_H$  - адсорбируемые атомы водорода, а  $m_C$  - атомы углерода. Анализ изменения гравиметрической плотности проводился с использованием собственных программных пакетов. Визуализация структуры выполнялась с помощью программы Visual Molecular Dynamics [26].

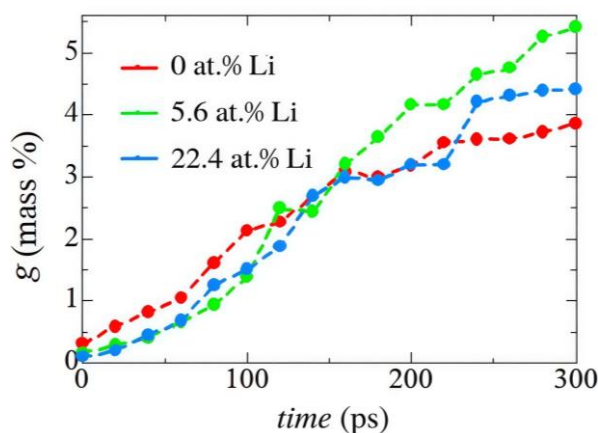
### Результаты и их обсуждение

На рис. 3 представлены структуры чешуек скомканного графена с различным количеством атомов лития после выдержки при температуре 77 К в течение 300 пс. В случае чешуйки без лития (рис. 3а) водород адсорбируется на поверхности графена за счет слабых сил Ван-дер-Ваальса, а также проникает во внутреннюю полость чешуйки. Добавление 5,6 ат.% Li (рис. 3б) приводит к адсорбции водорода как на поверхности графеновой чешуйки, так и внутри структуры на частице Li. Отметим, что атомы лития сформировали внутри графеновой чешуйки агломерат, который стал центром адсорбции атомов водорода во внутренней полости чешуйки. При этом с самой чешуйкой агломерат лития не связан, а в процессе выдержке более 300 пс агломерат из структуры графена не выходит. При увеличении количества лития до 22,4 ат.% (рис. 3в) атомы лития распределяются по внутренней поверхности чешуйки графена более однородно, что приводит к снижению адсорбции водорода на внешней поверхности из-за экранирования активных сорбционных центров графена. При этом внутри чешуйки графена атомов водорода осаждается не много. Большая часть адсорбированного водорода находится на внешней поверхности чешуйки графена.



**Рис.3.** Чешуйки скомканного графена с разным количеством атомов лития: (а) 0, (б) 5,6 и (в) 22,4 ат.% после выдержки при 77 К в течение 300 пс.

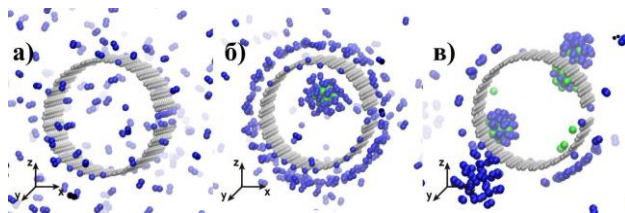
**Fig.3.** Crumpled graphene flakes with Li atoms: (a) 0, (b) 5.6 and (c) 22.4 at.% after exposure at 77 K for 300 ps.



**Рис.4.** Зависимость гравиметрической плотности чешуек скомканного графена с разным количеством атомов лития от времени выдержки при 77 К.

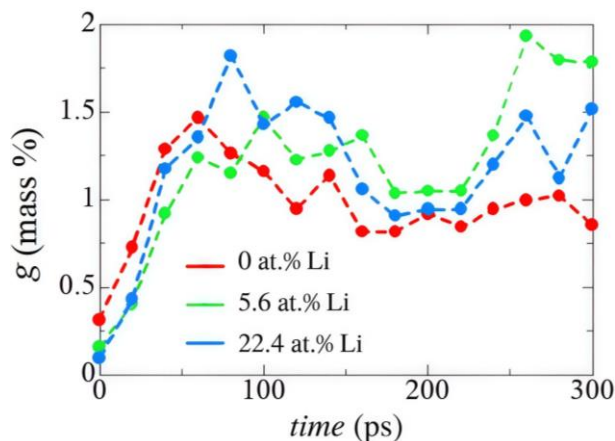
**Fig.4.** Gravimetric density of crumpled graphene flakes with lithium atoms as a function of time at 77 K.

На рис.4 показаны кривые зависимости гравиметрической плотности водорода от времени выдержки при 77 К для различных структур. Наибольшая гравиметрическая плотность достигается для чешуйки с 5,6 ат. % лития и составляет около 5,5 масс.%. При 22,4 ат.% лития наблюдается снижение  $g$  до 4,3 масс.%. Это связано с тем, что избыточное количество лития частично блокирует доступ водорода к углеродной матрице, снижая эффективность адсорбции. Наименьшая гравиметрическая плотность у чешуйки без лития – около 3,8 масс.%.



**Рис.5.** Чешуйки скомканного графена с разным количеством атомов лития: (а) 0, (б) 5,6 и (в) 22,4 ат.% после выдержки при 300 К в течение 300 пс.

**Fig.5.** Crumpled graphene flakes with lithium atoms: (a) 0, (b) 5.6 and (c) 22.4 at.% after exposure at 300 K for 300 ps.

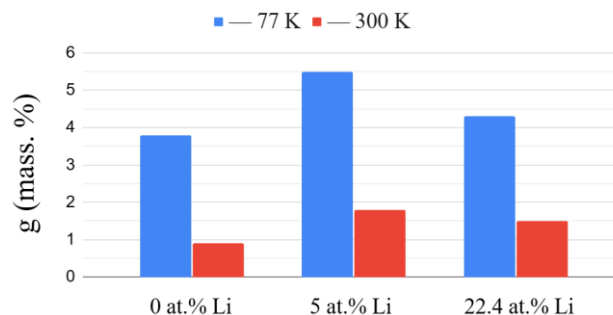


**Рис.6.** Зависимость гравиметрической плотности чешуек скомканного графена с разным количеством атомов лития от времени выдержки при 300 К.

**Fig.6.** Gravimetric density of crumpled graphene flakes with lithium atoms as a function of time at 300 K.

При повышении температуры до 300 К (рис.5) наблюдается значительное снижение адсорбции водорода на чешуйке без лития из-за разрушения слабых межмолекулярных взаимодействий. Гравиметрическая плотность в этом случае снижается до 0,9 масс.%(см. рис.6). Однако модификация структуры графена атомами лития способствует удержанию водорода внутри структуры за счет образования более прочных связей между литием и водородом. Для чешуйки с 5,6 ат.% лития гравиметрическая плотность при 300 К составляет около 1,8 масс.%(рис. 6), что в два раза превышает показатель для чешуйки без лития. При 22,4 ат.% лития гравиметрическая плотность достигает 1,5 масс.%.

Сравнительный анализ гравиметрической плотности чешуек с 16 атомами лития при различных температурах представлен на рис. 7. При 77 К гравиметрическая плотность в три раза выше, чем при 300 К, что обусловлено более эффективной физической адсорбцией водорода при низких температурах. Максимальная сорбционная емкость 5,5 масс.% достигается у чешуйки скомканного графена модифицированного 5,6 ат.% Li после выдержки при 77 К в течение 300 пс. Тем не менее, даже при 300 К легирование литием позволяет значительно повысить сорбционную емкость по сравнению с чистым графеном.



**Рис.7.** Диаграмма зависимости гравиметрической плотности чешуек скомканного графена с атомами лития после выдержки при 77 и 300 К в течение 300 пс.

**Fig.7.** Gravimetric density of crumpled graphene flakes with lithium atoms after exposure at 77 and 300 K for 300 ps.

### Выводы

Таким образом, с помощью молекулярно-динамического моделирования изучено влияние количества атомов лития на водород-сорбционную емкость чешуек скомканного графена. На основании полученных результатов установлено, что легирование чешуек скомканного графена литием приводит к увеличению их гравиметрической плотности. Наибольшая гравиметрическая плотность, достигающая 5,5 масс.%, наблюдалась у чешуек с 5,6 ат.% лития после выдержки при 77 К в течение 300 пс.

Температура оказывает существенное влияние на процесс наводороживания: при 77 К водород-сорбционная емкость выше во всех случаях, что связано с эффективной адсорбцией водорода на углеродной поверхности за счет слабых сил Ван-дер-Ваальса. При повышении температуры до 300 К тепловые флуктуации разрушают эти взаимодействия, приводя к снижению сорбционной емкости чешуек. Однако легирование литием способствует повышению адсорбции водорода в структуре за счет образования более прочных связей между атомами лития и водородом. В результате гравиметрическая плотность чешуек с 5,6 ат.% лития при 300 К на 50% выше, чем у структур без атомов Li.

Полученные результаты демонстрируют перспективность использования чешуек скомканного графена, легированных литием, в качестве материалов для хранения водорода. Оптимальное содержание лития и выбор температурных условий позволяют существенно повысить водород-сорбционную емкость, что важно для разработки эффективных и энергоемких систем хранения водорода.

## Список литературы

1. Xie Z., Jin Q., Su G., Lu W. A review of hydrogen storage and transportation: progresses and challenges. // *Energies*. 2024. V. 17, №16. P. 4070.
2. Patel S.K.S., Gupta R.K., Rohit M.V., Lee J.K. Recent developments in hydrogen production, storage, and transportation: challenges, opportunities, and perspectives. // *Fire*. 2024. V. 7, №7. P. 233.
3. Tarkowski, R.; Uliasz-Misiak, B.; Tarkowski, P. Storage of hydrogen, natural gas, and carbon dioxide—Geological and legal conditions. *Int. J. Hydrogen Energy* 2021, 46, 20010–20022.
4. Crabtree, G. W., Dresselhaus, M. S., & Buchanan, M. V. (2004). The hydrogen economy. *Physics Today*, 57(12), 39–44.
5. Züttel, A., Remhof, A., Borgschulte, A., & Friedrichs, O. (2010). Hydrogen: the future energy carrier. *Philosophical Transactions of the Royal Society A*, 368(1923), 3329–3342.
6. Tarasov, B. P., Lototsky, M. V., & Yartys, V. A. (2008). Hydrogen storage in magnesium-based hydrides.
7. Xia, J., Chen, F., Li, J., & Tao, N. (2009). Measurement of the quantum capacitance of graphene. *Nature Nanotechnology*, 4(8), 505–509.
8. Cranford S.W., Buehler M.J. Packing efficiency and accessible surface area of crumpled graphene. // *Physical Review B*. 2011. V. 84, №20. P. 205451.
9. Leão M.B., Bordin J.R., de Matos C.F. Specific surface area versus adsorptive capacity: an application view of 3D graphene-based materials for the removal of emerging water pollutants. // *Water, Air, & Soil Pollution*. 2023. V. 234. P. 136.
10. Liu, S., Wang, A., Li, Q., Wu, J., Chiu, K., Huang, J., & Luo, J. (2018). Crumpled graphene balls: Stabilized dendrite-free lithium metal anodes. *Joule*, 2(1), 1–3.
11. Schlapbach L., Züttel A. Hydrogen-storage materials for mobile applications. // *Nature*. 2001. V. 414. P. 353–358.
12. Züttel A. Materials for hydrogen storage. // *Materials Today*. 2003. V. 6, №9. P. 24–33.
13. Jain V., Kandasubramanian B. Functionalized graphene materials for hydrogen storage. // *Journal of Materials Science*. 2020. V. 55, №6. P. 1865–1903.
14. Tozzini, V., Pellegrini, V. "Prospects for hydrogen storage in graphene." *Physical Chemistry Chemical Physics*, 15.1 (2013): 80–89.
15. Hirscher, M., Panella, B. "Nanostructures for hydrogen storage." *Journal of Alloys and Compounds*, 404–406 (2005): 399–401.
16. Züttel, A. "Hydrogen storage methods." *Naturwissenschaften*, 91(4), 157–172 (2004).
17. Dillon, A.C., Heben, M.J. "Hydrogen storage using carbon adsorbents: past, present and future." *Applied Physics A*, 72.2 (2001): 133–142.
18. Apkadirova N.G., Krylova K.A., Baimova J.A. Effect of external pressure on the hydrogen storage capacity of a graphene flake: molecular dynamics // *Lett. Mater.* 2022. V. 12(4s). P. 445–450.
19. Alekseeva O.K., Pushkareva I.V., Pushkarev A.S., Fateev V.N. Graphene and graphene-like materials for hydrogen energy. // *Reviews*. 2020. V. 15. P. 273–300.
20. Rekha B., Seenithurai S., Pandyan R.K. High capacity hydrogen storage in Li decorated octagraphene—a first principles study. // *Nano Hybrids and Composites*. 2017. V. 17. P. 131–139.
21. Plimpton S.J. Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics // *Journal of Computational Physics*. 1995. V. 117. P. 1–19.
22. Stuart S.J., Tutein A.B., Harrison J.A. A reactive potential for hydrocarbons with intermolecular interactions. // *Journal of Chemical Physics*. 2000. V. 112, №14. P. 6472–6486.
23. Morse P.M. Diatomic molecules according to the wave mechanics. II. Vibrational levels. // *Physical Review*. 1929. V. 34, №1. P. 57–64.
24. Galashev, A., Ivanichkina, K., Katin, K., & Maslov, M. (2019). Computational study of lithium intercalation in silicene channels on a carbon substrate after nuclear transmutation doping. *Computation*, 7(4), 60.
25. Qiang, W. C., & Dong, S. H. (2007). Arbitrary l-state solutions of the rotating Morse potential through the exact quantization rule method. *Physics Letters A*, 363(3), 169–176.
26. Humphrey, W., Dalke, A., & Schulten, K. (1996). VMD: Visual molecular dynamics. *Journal of Molecular Graphics*, 14(1), 33–38.

## Информация об авторах

А. А. Бассареев – аспирант первого курса Института проблем сверхпластичности металлов РАН.

К. А. Крылова – кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник Института проблем сверхпластичности металлов РАН.

## References

1. Xie Z., Jin Q., Su G., Lu W. A review of hydrogen storage and transportation: progresses and challenges. // *Energies*. 2024. V. 17, №16. P. 4070.
2. Patel S.K.S., Gupta R.K., Rohit M.V., Lee J.K. Recent developments in hydrogen production, storage, and transportation: challenges, opportuni-

- ties, and perspectives. // *Fire*. 2024. V. 7, №7. P. 233.
3. Tarkowski, R.; Uliasz-Misiak, B.; Tarkowski, P. Storage of hydrogen, natural gas, and carbon dioxide—Geological and legal conditions. *Int. J. Hydrogen Energy* 2021, 46, 20010–20022.
  4. Crabtree, G. W., Dresselhaus, M. S., & Buchanan, M. V. (2004). The hydrogen economy. *Physics Today*, 57(12), 39–44.
  5. Züttel, A., Remhof, A., Borgschulte, A., & Friedrichs, O. (2010). Hydrogen: the future energy carrier. *Philosophical Transactions of the Royal Society A*, 368(1923), 3329–3342.
  6. Tarasov, B. P., Lototsky, M. V., & Yartys, V. A. (2008). Hydrogen storage in magnesium-based hydrides.
  7. Xia, J., Chen, F., Li, J., & Tao, N. (2009). Measurement of the quantum capacitance of graphene. *Nature Nanotechnology*, 4(8), 505–509.
  8. Cranford S.W., Buehler M.J. Packing efficiency and accessible surface area of crumpled graphene. // *Physical Review B*. 2011. V. 84, №20. P. 205451.
  9. Leão M.B., Bordin J.R., de Matos C.F. Specific surface area versus adsorptive capacity: an application view of 3D graphene-based materials for the removal of emerging water pollutants. // *Water, Air, & Soil Pollution*. 2023. V. 234. P. 136.
  10. Liu, S., Wang, A., Li, Q., Wu, J., Chiu, K., Huang, J., & Luo, J. (2018). Crumpled graphene balls: Stabilized dendrite-free lithium metal anodes. *Joule*, 2(1), 1–3.
  11. Schlapbach L., Züttel A. Hydrogen-storage materials for mobile applications. // *Nature*. 2001. V. 414. P. 353–358.
  12. Züttel A. Materials for hydrogen storage. // *Materials Today*. 2003. V. 6, №9. P. 24–33.
  13. Jain V., Kandasubramanian B. Functionalized graphene materials for hydrogen storage. // *Journal of Materials Science*. 2020. V. 55, №6. P. 1865–1903.
  14. Tozzini, V., Pellegrini, V. "Prospects for hydrogen storage in graphene." *Physical Chemistry Chemical Physics*, 15.1 (2013): 80–89.
  15. Hirscher, M., Panella, B. "Nanostructures for hydrogen storage." *Journal of Alloys and Compounds*, 404–406 (2005): 399–401.
  16. Züttel, A. "Hydrogen storage methods." *Naturwissenschaften*, 91(4), 157–172 (2004).
  17. Dillon, A.C., Heben, M.J. "Hydrogen storage using carbon adsorbents: past, present and future." *Applied Physics A*, 72.2 (2001): 133–142.
  18. Apkadirova N.G., Krylova K.A., Baïmova J.A. Effect of external pressure on the hydrogen storage capacity of a graphene flake: molecular dynamics // *Lett. Mater.* 2022. V. 12(4s). P. 445–450.
  19. Alekseeva O.K., Pushkareva I.V., Pushkarev A.S., Fateev V.N. Graphene and graphene-like materials for hydrogen energy. // *Reviews*. 2020. V. 15. P. 273–300.
  20. Rekha B., Seenithurai S., Pandyan R.K. High capacity hydrogen storage in Li decorated octagraphene—a first principles study. // *Nano Hybrids and Composites*. 2017. V. 17. P. 131–139.
  21. Plimpton S.J. Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics // *Journal of Computational Physics*. 1995. V. 117. P. 1–19.
  22. Stuart S.J., Tutein A.B., Harrison J.A. A reactive potential for hydrocarbons with intermolecular interactions. // *Journal of Chemical Physics*. 2000. V. 112, №14. P. 6472–6486.
  23. Morse P.M. Diatomic molecules according to the wave mechanics. II. Vibrational levels. // *Physical Review*. 1929. V. 34, №1. P. 57–64.
  24. Galashev, A., Ivanichkina, K., Katin, K., & Maslov, M. (2019). Computational study of lithium intercalation in silicene channels on a carbon substrate after nuclear transmutation doping. *Computation*, 7(4), 60.
  25. Qiang, W. C., & Dong, S. H. (2007). Arbitrary l-state solutions of the rotating Morse potential through the exact quantization rule method. *Physics Letters A*, 363(3), 169–176.
  26. Humphrey, W., Dalke, A., & Schulten, K. (1996). VMD: Visual molecular dynamics. *Journal of Molecular Graphics*, 14(1), 33–38.

#### Information about the authors

A. A. Bassareev is a first-year postgraduate student at the Institute for Metals Superplasticity Problems of the Russian Academy of Sciences.  
K. A. Krylova – PhD in Physical and Mathematical Sciences, Senior Researcher at the Institute for Metals Superplasticity Problems of the Russian Academy of Sciences.

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.  
The authors declare that there is no conflict of interest.

Статья поступила в редакцию 23.10.2025; одобрена после рецензирования 23.02.2026; принята к публикации 02.03.2026.

The article was received by the editorial board on 23 Oct. 2025; approved after reviewing 23 Feb.2026; accepted for publication 02 Mar. 2026.

Научная статья

1.3.8. Физика конденсированного состояния (физико-математические науки)

УДК 538.913; 539.8

doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2026.01.009

## **ЭНЕРГООБМЕН ВНУТРИ СВЕРХЗВУКОВЫХ КРАУДИОН-ФОКУСОННЫХ ПАР В 3D КОМПЬЮТЕРНОЙ МОДЕЛИ КРИСТАЛЛА Cu**

**Николай Николаевич Медведев<sup>1†</sup>, Михаил Дмитриевич Старостенков<sup>2</sup>,  
Сергей Владимирович Дмитриев<sup>3,4</sup>, Павел Васильевич Захаров<sup>5</sup>**

<sup>1</sup> Бийский технологический институт (филиал) ФГБОУ ВО «Алтайский государственный технический университет им. Ползунова», ул. Трофимова, 27, 65933, Бийск, Россия

<sup>2</sup> Алтайский государственный технический университет им. Ползунова, пр. Ленина, 46, 656038, Барнаул, Россия

<sup>3</sup> Институт проблем сверхпластичности металлов Российской академии наук, ул. Степана Халтурина, 39, 450001, Уфа, РБ, Россия.

<sup>4</sup> Национальный исследовательский Томский государственный университет, пр. Ленина, 36, 634050, Томск, Россия.

<sup>5</sup> Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, ул. Политехническая, 29, 195251, Санкт-Петербург, Россия

<sup>†</sup> nmm42@rambler.ru<sup>†</sup>, <https://orcid.org/0000-0002-6040-6323>

<sup>2</sup> genphys@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-6326-7613>

<sup>3</sup> dmitriev.sergey.v@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-6410-1594>

<sup>4</sup> zakharovpvl@rambler.ru, <https://orcid.org/0000-0002-6410-1594>

**Аннотация.** Методом молекулярной динамики с использованием модифицированного потенциала Морзе рассмотрен вопрос о взаимодействии краудиона и фокусона внутри краудион-фокусонной пары в модельном кристалле меди. Показано, что два атома, находящиеся друг от друга на некотором расстоянии в одном плотноупакованном ряду и запущенные с одной скоростью, на порядок и более превышающей пороговую скорость образования пары Френкеля, образуют краудион-фокусонную пару, внутри которой в процессе движения происходит обмен энергией.

Сначала краудион перемещаясь со сверхзвуковой скоростью оставляет за собой след из атомов с более высокой потенциальной энергией по сравнению с той, что была у них до его прохождения. Фокусон, движущийся вслед за краудионом ускоряется относительно краудиона за счёт потенциальной энергии атомов следа, догнав краудион, он передаёт ему часть своей кинетической энергии. После чего происходит увеличение расстояния между краудионом и фокусом до первоначального. Затем фокусон снова догоняет краудион и передаёт ему энергию. Эти процессы повторяются несколько раз до полной остановки краудиона. Благодаря такому взаимодействию краудион-фокусонная пара перемещается за заметно большее расстояние в кристалле по сравнению с одиночным краудионом. Характер взаимодействия краудиона и движущегося за ним фокусона даёт основание считать эту пару единым целым – неким тандемом.

**Ключевые слова:** метод молекулярной динамики, фокусон, краудион, n-краудион, краудион-фокусонная пара, кристаллическая решётка.

---

**Для цитирования:** Медведев Н.Н., Старостенков М.Д., Дмитриев С.В., Захаров П.В. Энергообмен внутри сверхзвуковых краудион-фокусонных пар в 3D компьютерной модели кристалла Cu // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2026. Т. 23, № 1. С. 80-87. doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2026.01.009.

---



Original article

## ENERGY EXCHANGE INSIDE SUPERSONIC CROWDION-FOCUSON PAIRS IN 3D COMPUTER MODEL OF Cu CRISTAL

Nikolay N. Medvedev<sup>1†</sup>, Mikhail D. Starostenkov<sup>2</sup>, Sergey V. Dmitriev<sup>3,4</sup>, Pavel V. Zakharov<sup>5</sup>

<sup>1</sup>Biysk Technological Institute (branch) of the Altay State Technical University, Trofimov St. Biysk, 659305, Russia

<sup>2</sup>I.I. Polzunov Altai State Technical University, Lenin Pr., 46, Barnaul, 656038, Russia

<sup>3</sup>Institute for Metals Superplasticity Problems of RAS, Khalturin Str., 39, Ufa, 450001, Russia

<sup>4</sup>National Research Tomsk State University, 36 Lenin Av., Tomsk, 634050, Russia

<sup>5</sup>Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, Politeknicheskaya Str., 29, St. Petersburg, 195251, Russia

<sup>†</sup>nnm42@rambler.ru<sup>†</sup>, <https://orcid.org/0000-0002-6040-6323>

<sup>2</sup>genphys@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-6326-7613>

<sup>3</sup>dmitriev.sergey.v@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-6410-1594>

<sup>4</sup>zakharovpvl@rambler.ru, <https://orcid.org/0000-0002-6410-1594>

**Abstract.** By the method of molecular dynamics using the modified Morse potential, the question of the interaction of crowdion and focuson inside the crowdion-focuson pair in a model copper crystal is considered. It is shown that two atoms located at some distance from each other in one tightly packed row and launched at the same speed, an order of magnitude or more exceeding the threshold rate of formation of a Frenkel pair, form a crowdion-focuson pair, inside which energy is exchanged during movement.

At first, the crowdion, moving at supersonic speed, leaves a trail of atoms with a higher potential energy compared to what they had before it passed. The focuson moving after the crowdion accelerates relative to the crowdion due to the potential energy of the trace atoms, catching up with the crowdion, it transfers part of its kinetic energy to it. Then there is an increase in the distance between the crowdion and the focuson to the original. Then the focuson again catches up with the crowdion and transfers energy to it. These processes are repeated several times until the crowdion is completely stopped. Due to this interaction, the crowdion-focus pair moves a noticeably greater distance in the crystal compared to a single crowdion. The nature of the interaction of the crowdion and the focuson moving behind it gives reason to consider this pair as a single whole - a kind of tandem

**Keywords:** molecular dynamics method, focuson, crowdion, n-crowdion, crowdion-focuson pair, crystal lattice.

**For citation:** Medvedev, N. N., Starostenkov, M. D., Dmitriev S.V., Zakharov P.V. (2026). Energy exchange inside supersonic crowdion-focuson pair in 3D computer model of Cu crystal. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 23(1), 80-87. (In Russ.). doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2026.01.009.

### Введение

Краудиион - это локальное сгущение атомов в плотноупакованном ряду, вызванное междоузельным атомом [1-3]. Этот дефект кристаллической решётки, обладая большой подвижностью, играет заметную роль в переносе массы и энергии в неравновесных процессах. Прежде всего в таких как термическое воздействие на металлы и сплавы [4], их пластическая деформация [5], радиационное облучение поверхности кристалла [6-11].

Относительно недавно была предложена и развита концепция n-краудииона [12 - 18]. Этот дефект образуется не одним, а несколькими междоузельными атомами, находящимися в одном плотноупакованном ряду. Он также обладает высокой подвижностью и рассматрива-

ется как один из механизмов, вызывающих эффект дальнего действия, и эффект «малых доз» [19], например, в ионно-имплантированных металлических материалах [20, 21].

Как нетрудно видеть, процессы, в которых фигурируют краудиионы довольно часто рассматриваются в современной научной литературе. Тематика, связанная с краудиионами на протяжении многих лет остаётся актуальной.

Фокусоны – это эстафетная передача импульса налетевшей частицы атомам кристалла с фокусировкой импульса вдоль плотноупакованного ряда [22 - 24]. Этому эффекту, несмотря на давность момента его открытия практически не уделяется внимания в современных научных публикациях. Из публикаций, посвящённых фокусонам следовало, что атомы, передающие импульс своим соседям вдоль плот-

ноупакованного ряда не обладают достаточной энергией для образования пары Френкеля – вакансии и краудиона.

В работе [25] показано, что фокусоны могут играть не менее важную роль чем краудионы в процессах массопереноса. Переносят энергию выше пороговой образования пары Френкеля; порождаются краудионом и при этом существуют в паре с впереди движущимся краудионом.

Настоящая публикация является продолжением работы [25]. Данная статья посвящена взаимодействию фокусона и краудиона внутри образованной ими пары.

### Методы

Для изучения процесса обмена энергией между фокусомом и краудионом внутри краудион – фокусонной пары, методом молекулярной динамики был построен расчётный блок моделирующий 3D кристалл меди размером  $84 \times 12 \times 9$  частиц.

Взаимодействие между атомами осуществлялось посредством модифицированного потенциала Морзе, к которому был добавлен отталкивающий потенциал Борна-Майера. Необходимость модификации потенциала Морзе вызвана тем, что при больших кинетических энергиях он занижает диаметры молекул.

$$U(r) = D\beta(\beta e^{-2ar} - 2e^{-ar}) + \frac{cDa_0}{\delta} \exp\left(-\delta \frac{(r-a_0)}{a_0}\right) \quad (1)$$

$$\begin{cases} \frac{1}{2} \sum_{i=1}^z \eta_i U_{V=V_0} = E_s \\ \frac{1}{2} \sum_{i=1}^z \eta_i \left( \frac{\partial U}{\partial V} \right)_{V=V_0} = 0 \\ -V_0 \left( \frac{\partial P_s}{\partial V} \right)_{x=0} = K_0 \\ \frac{1}{3} + \frac{V}{2} \cdot \left( \frac{\partial^2 (P_s \cdot V^{\frac{2}{3}})}{\partial V^2} \right) / \left( \frac{\partial (P_s \cdot V^{\frac{2}{3}})}{\partial V} \right) = -\gamma_0, \end{cases} \quad (2)$$

В формуле (1)  $r$ -расстояние между атомами;  $a_0$  - минимальное расстояние между атомами в невозмущённом кристалле;  $c = 1 \text{ \AA}^{-1}$  - размерный коэффициент, который в дальнейшем изложении опущен. Все коэффициенты (1) находятся из системы уравнений (2), где  $\eta_i$  - число атомов в  $i$  - координационной сфере;  $z$  - количество учитываемых сфер;  $E_s$  - энергия сублимации атомов кристалла при нуле Кель-

вин;  $K_0$  - объёмный модуль упругости;  $P_s$  - давление изоэнтропического сжатия;  $V_0$  и  $V$  - удельные объёмы в начальном и деформированном состояниях;  $\gamma_0$  - постоянная Грюнайзена.

Последнее уравнение в системе (2) необходимо для нахождения  $\delta$ , и следует из формулы Дугдала – Мак – Дональда с учётом равенств между первым и вторыми производными от изоэнтропической зависимости давления при  $V = V_0$  и изотермической, при нуле Кельвин [26, 27]. Подробности о том, из каких соображений получена система (2) и о том, какие получают уравнения для расчёта коэффициентов потенциала (1) можно найти в работе [28].

Используемый потенциал не является универсальным и предназначен только для моделирования процессов столкновения атомов обладающих большой кинетической энергией внутри кристалла.

В начальный момент времени температура ячейки задавалась равной нулю. На границы расчётной ячейки накладывались периодические условия.

Параметры потенциала Морзе были следующими,  $D = 0.459 \text{ эВ}$ ,  $\alpha = 0.393 \text{ \AA}^{-1}$ ,  $\beta = 0.496$ ,  $a = 3.6 \text{ \AA}$ ,  $\delta = 14.74$ . Визуализировалась одна из плоскостей (111) кристалла Си имеющего ГЦК решётку.

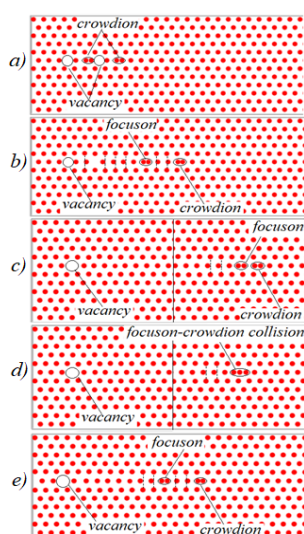
### Результаты и обсуждения

Для рассмотрения процессов взаимодействия краудиона и фокусона внутри краудион-фокусонной пары в компьютерных экспериментах двум соседним атомам, находящимся в одном плотноупакованном ряду и на некотором расстоянии друг от друга сообщалась одинаковая по модулю и по направлению скорость. Расстояние варьировалось в пределах от 2 до 10 межатомных расстояний, скорость от  $100 \text{ \AA/ps}$  до  $150 \text{ \AA/ps}$ . Для данного потенциала и рассматриваемого ГЦК кристалла Си пороговая скорость образования пары Френкеля, приблизительно,  $68 \text{ А/пс}$ . (что соответствует  $\approx 29 \text{ эВ}$ ).

Наблюдалось следующее развитие событий. Как и ожидалось [25], сначала распространялись два краудиона (см. рис.1 а)), затем один из них рекомбинировал с вакансией и превратился в фокусон. На рис.1 б) уже фокусон и краудион, первый движется вслед за вторым. При этом расстояние между ними постоянно



сокращалось см. рис.1 b), c). Через некоторое время фокусон догнал краудион и передал ему часть своего импульса. Этот момент показан на рис.1 d). После чего краудион удалялся от фокусона на расстояние, которое было между атомами, инициирующими краудион-фокусонную пару в начальный момент времени см. рис.1 e). Затем процесс повторялся. Фокусон снова догонял краудион, передавал ему свой импульс, отставал от него, снова догонял и так повторялось до полной остановки краудиона.

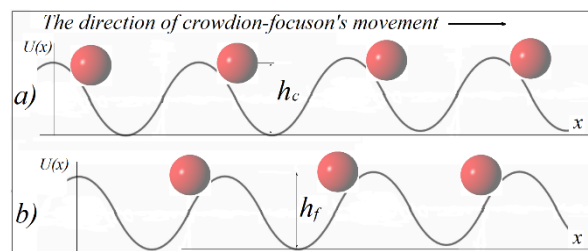


**Рис.1.** Процесс образования краудион-фокусонной пары и процесс их взаимодействия. Начальная скорость атомов 150 А/пс. Первоначальное расстояние между атомами, которым сообщили скорость вдоль плотноупакованного ряда – 3 межатомных расстояния; а) движение двух краудионов; б) движение краудион-фокусонной пары; в) сближение краудиона и фокусона до одного межатомного расстояния; д) столкновение фокусона и краудиона; е) фокусон отстал от краудиона до исходного расстояния. Вертикальная линия – место соединения двух частей изображения расчётного блока. Вертикальная пунктирная линия – перевал потенциала Пайерлса-Набарро

**Fig.1:** The process of formation of a crowdion-focuson pair and the process of their interaction. The initial velocity of the atoms is 150 А/пс. The initial distance between atoms that began to move at the same speed along a tightly packed series is 3 interatomic distances; а) movement of two crowdions; б) movement of the crowdion-focuson pair; в) convergence of crowdion and focuson to one interatomic distance; д) collision of focuson and crowdion; е) the focuson lagged behind the crowdion to the original distance. The vertical line is the junction of two parts of the image of the calculation

unit. Vertical dotted line - Peierls-Nabarro potential pass.

В результате в первом и во втором случае атомы следа обладают потенциальной энергией, зависящей от величин  $h_c$  и  $h_f$  соответственно см. рис. 2.



**Рис.2.** Позиции атомов в потенциальном поле плотноупакованного ряда сразу после прохождения а) краудиона; б) фокусона.

Параметры  $h_f$  и  $h_c$  характеризующие потенциальную энергию атомов в следе краудиона и фокусона соответственно.

**Fig.2:** The positions of the atoms in the potential field of the close-packed series immediately after passing а) the crowdion; б) focuson. The  $h_f$  and  $h_c$  parameters characterizing the potential energy of the atoms in the trail of crowdion and focuson, respectively.

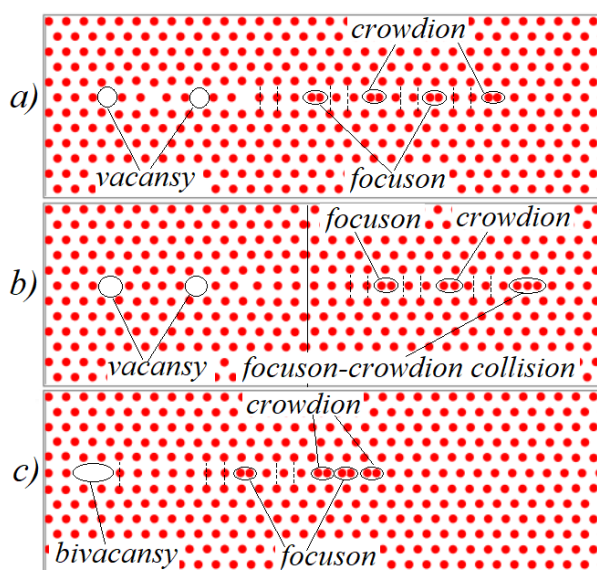
Возможно три случая, когда  $h_c > h_f$ ,  $h_c < h_f$  и  $h_c \approx h_f$ . Очевидно, что если  $h_c > h_f$ , то фокусон будет разгоняться, за счёт потенциальной энергии атомов следа краудиона. Если же  $h_c < h_f$ , то фокусон следующий за краудионом будет отставать от него.

Ясно, что краудион при движении постоянно теряет свою энергию, в том числе сообщая потенциальную энергию атомам своего следа и соответственно частично передаёт часть своей рассеянной энергии фокусону. Фокусон в свою очередь догнав краудион передаёт ему часть своего импульса и энергии, т.е. в процессе движения они постоянно обмениваясь энергией образуют нечто единое целое, тандем.

В рассматриваемом случае выполняется неравенство  $h_c > h_f$ , поэтому скорость фокусона выше чем у краудиона.

Если запустить в одном направлении не пару, а четвёрку атомов, находящихся на некотором расстоянии друг от друга, то фокусон движется быстрее краудиона только если они инициированы первой парой атомов. Инициированные второй парой атомов фокусон и

краудион со временем отдаляются друг от друга, за счёт отставания фокусона, либо движутся на некотором относительно постоянном расстоянии друг от друга. Иллюстрацией этого случая является рис.3. На рис.3 а) позиции вакансий, краудионов и фокусонов почти сразу после запуска четвёрки атомов. На рис. 3 б) показано столкновение фокусона и краудиона инициированных первой двойкой атомов. Фокусон и краудион инициированные второй парой атомов не сближаются.



**Рис.3.** Процесс образования двух краудион-фокусонных пар и процесс взаимодействия краудионов и фокусонов внутри этих пар.

а) инициация двух краудион-фокусонных пар; б) столкновение фокусона и краудиона первой пары, дистанция между краудионом и фокусом во второй паре; в) отставание фокусона от своего краудиона во второй краудион-фокусонной паре. Начальная скорость атомов 140 А/пс. Начальное расстояние между атомами а), б) 3 межатомных расстояния; в) 0 межатомных расстояний.

**Fig.3:** The process of formation of two crowdion-focson pairs and the process of interaction of crowdions and foci within these pairs. а) initiation of two crowdion-focsons pairs; б) collision of focson and crowdion of the first pair, distance between crowdion and focson in the second pair; в) the lag of the focson from its crowdion in the second crowdion-focson pair. Initial atom velocity 140 А/ps. Initial distance between atoms а), б) 3 interatomic distances; в) 0 interatomic distances.

Если запустить четвёрку атомов плотноупакованного ряда которая состоит из ближайших соседей, то в отличие от предыдущего

случая фокусон во второй паре отстаёт от своего краудиона см. рис.3 в).

Возвращаясь к вопросу об обмене энергией между движущимися солитонами ситуация на рис. 3 б) в) наталкивает на мысль что энергию от впереди движущегося краудиона может получать не только следующий за ним фокусон, но и следующий за ним краудион. Эту гипотезу мы намерены проверить в будущем.

Очевидно также, что краудион-фокусонная пара, обменивающаяся энергией, является единым целым или нужно признать, что краудион имеет возможность возвращать рассеянную им энергию, что противоречит законам термодинамики

### Заключение

Методом молекулярной динамики с использованием модифицированного потенциала Морзе показано, что два атома, находящиеся друг от друга на некотором расстоянии в одном плотноупакованном ряду и запущенные с одной скоростью, на порядок и более превышающей пороговую скорость образования пары Френкеля, образуют краудион-фокусонную пару, внутри которой в процессе движения происходит обмен энергией.

Краудион перемещаясь со сверхзвуковой скоростью оставляет за собой атомы в плотноупакованном ряду с более высокой потенциальной энергией по сравнению с той, что была у них до его прохождения. Фокусон, за счёт этой потенциальной энергии ускоряется относительно краудиона. Передав часть своего импульса краудиону, фокусон отстаёт от краудиона до стартового расстояния. Затем он снова догоняет его передаёт ему часть своей кинетической энергии. Эти процессы повторяются несколько раз до полной остановки краудиона. В этих процессах краудион и фокусон представляют собой нечто единое целое – тандем.

### Список литературы

1. Markidonov A.V., Starostenkov M.D., Potekatev A.I., Kalugina V.V., Medvedev N.N., Neverova T.I., Barchuk A.A. The Behavior of Crowdions and Their Complexes in Weakly States of Materials // Russian Physics Journal. - 2012 – V. 54. (11). P. 1241-1248.
2. Медведев Н.Н., Старостенков М.Д., Маркидонов А.В., Захаров П.В. Фокусирую-

- щиеся и краудионные столкновения атомов в трёхмерной модели упорядоченного сплава CuAu со сверхструктурой  $L_{11}$  // Перспективные Материалы. – 2011. - №12 – С. 321 – 326.
3. Iskandarov A.M., Dmitriev S.V., Medvedev N.N., Zakharov P.V., Crowdion Mobility and Self Focusing in 3D and 2D Nickel // Computational Materials Science. – 2009. V.47(2). P 429-431.
4. Mehrer H., Diffusion in Solids / Springer-Verlag, Berlin 2007. 645 p.
5. Indenbom V.L. Interstitial (crowdion) mechanism of plastic deformation and failure // JETP Lett. – 1970. – V.12. – P. 369–371.
6. Pokropivny V.V., Skorokhod V.V., Pokropivny A.V. Adhesive phenomena at the alpha-Fe inter-face during nanoindentation, stretch and shock // Model. Simul. Mater. Sc. – 1997. – 5. – P. 579.
7. Нацик В.Д., Смирнов С.Н. Дислокации и краудионы в двумерных кристаллах. Часть III: пластическая деформация кристалла как результат перемещения дефектов и их взаимодействие с полем напряжений // Физика Низких Температур – 2016 – Т. 42 (3) – С. 268-282.
8. Kiritani M. Similarity and difference between fcc, bcc and hcp metals from the view point of point defect cluster formation // J. Nucl. Mater. – 2000. – 276. – P. 41.
9. Salehinia I., Bahr D.F. The impact of a variety of point defects on the inception of plastic deformation in dislocation free metals // Scripta Mater. – 2012. – 66. – P. 339.
10. Kononenko V.G., Bogdanov V.V., Turenko A.N., Volosyuk M.A., Volosyuk A.V. // Probl. At. Sci. Tech. – 2016. – 104. – P. 15.
11. Korbel A., Bochniak W. Stratified plastic flow in metals // Int. J. Mech. Sci. – 2017. – 128. – P. 269.
12. Медведев Н.Н., Старостенков М.Д., Корзникова Е.А., Дмитриев С.В., Многочастичные краудионные столкновения // ФПСМ. – 2016. – Т. 13. - № 3. – С. 321-325
13. Dmitriev S.V., Medvedev N.N., Chetverikov A.P., Zhou K., Velarde M.G. Highly Enhanced Transport by Supersonic N-Crowdions // Phys. Status Solidi - RRL. – 2017. – V.11. – P. 1700298.
14. Korznikova E., Sunagatova I., Bayazitov A., Semenov A., Dmitriev S. Effect of interatomic potentials on mass transfer by supersonic 2-crowdions // Letters on Materials. – 2019. – V.9. – P. 386–390.
15. Bayazitov A.M., Dmitriev S.V., Zakharov P.V., Shepelev I.A., Fomin S.Y., Korznikova E.A. Features of mass transfer by N-crowdions in fcc Ni3Al lattice // IOP Conference Series: Mater. Sci. Eng. – 2019. – P. 012033.
16. Korznikova E.A., Shepelev I.A., Chetverikov A.P., Dmitriev S.V., Fomin S.Y., Zhou K. Dynamics and Stability of Subsonic Crowdion Clusters in 2D Morse Crystal // J. Exp. Theor. Phys. – 2018. – V.127. – P. 1009–1015.
17. Shepelev I.A., Korznikova E.A., Bachurin D.V., Semenov A.S., Chetverikov A.P., Dmitriev S.V. Supersonic crowdion clusters in 2D Morse lattice // Phys. Lett. A. – 2020. – V.384. – P. 126032.
18. Сунгатова И.Р., Семёнов А.С., Баязитов А.М., Корзникова Е.А. Динамика сверхзвуковых 2-краудионов в нелинейных двумерных решетках // ФПСМ. – 2019. – Т.16, №4. С 482 – 488.
19. Мамонтов А.П., Чернов И.П. Эффект малых доз ионизирующего излучения. – М.: Энергоатомиздат, 2001. - 286 с.
20. Диденко А.Н., Шаркеев Ю.П., Козлов Э.В., Рябчиков А.И. Эффекты дальнего действия в ионно-имплантированных металлических материалах. / НТЛ, Томск - 2004. - 326 с.
21. Psakh'e S.G., Zol'nikov K.P., Kadyrov R.I., Rudenski G.E., Sharkeev Yu.P. The Possibility of forming Soliton-Like Pulses During Implantation // Technical Physics Letters. - 1999. - V. 25 (3). - P. 209 -211.
22. Silsbee R.H. Focusing in Collision Problems in Solids // Journal of Applied Physics. – 1957. – V.28 (11) – P. 1246 – 1250.
23. Гарбер Р.И., Федоренко А.И. Фокусировка атомных столкновений в кристаллах // УФН. – 1964. – Т. 83 (3). – С 185 -432.
24. Wehner G. K. Sputtering of Metal Single Crystals by Ion Bombardment // Journal of Applied Physics, 1955. – V. 26. (8) – P. 1056-1057.
25. Медведев Н.Н., Старостенков М.Д., Дмитриев С.В., Сверхзвуковые краудион-фокусонные тандемы в 3D компьютерной модели кристалла Cu // Фундаментальные проблемы современного материаловедения (в печати).
26. Зельдович Я.Б., Райзер Ю.П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений / Физматгиз, Москва 1963. 632 с.

27. Попов А.Г., Бородай В.Э., О построении уравнений состояния твёрдых тел с использованием потенциалов межатомного взаимодействия // Изв. Вуз. Физика. - 2005 Т. 48 (3). – С.3 - 8.

28. Медведев Н.Н., Старостенков М.Д., Шайхутдинова Т.А. Модификация потенциала Морзе для моделирования взаимодействия атомов, обладающих высокой энергией // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2011. – Т.8 (1). – С. 99 – 104.

### Информация об авторах

*Н. Н. Медведев – доктор физико-математических наук, профессор Бийского технологического института.*

*М. Д. Старостенков – доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник, профессор Алтайского государственного технического университета им. И.И. Ползунова.*

*С.В. Дмитриев – доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник института проблем сверхпластичности металлов РАН; профессор Национального исследовательского Томского государственного университета.*

*П. В. Захаров – доктор физико-математических наук, доцент, профессор кафедры физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.*

### References

1. Markidonov A.V., Starostenkov M.D., Potekatev A.I., Kalugina V.V., Medvedev N.N., Neverova T.I., Barchuk A.A. The Behavior of Crowdions and Their Complexes in Weakly States of Materials // Russian Physics Journal. - 2012 – V. 54. (11). P. 1241-1248.
2. Medvedev N.N., Starostenkov M. D., Markidonov A.V., Zakharov P.V. (2011) Self-focusing and crowding collisions of atoms in a three-dimensional model of an ordered CuAu alloy with superstructure L<sub>11</sub> // Perspektivnye Materialy (Promising materials). – №12 – P. 321 – 326. (In Russ.).
3. Iskandarov A.M., Dmitriev S.V., Medvedev N.N., Zakharov P.V., Crowdion Mobility and Self Focusing in 3D and 2D Nickel // Computational Materials Science. – 2009. V.47(2). P 429-431.
4. Mehrer H., Diffusion in Solids / Springer-Verlag, Berlin 2007. 645 p.
5. Indenbom V.L. Interstitial (crowdion) mechanism of plastic information and failure // JETP Lett. – 1970. – V.12. – P. 369–371.
6. Pokropivny V.V., Skorokhod V.V., Pokropivny A.V. Adhesive phenomena at the alpha-Fe inter-face during nanoindentation, stretch and shock // Model. Simul. Mater. Sc. – 1997. – 5. – P. 579.
7. Natsik V.D., Smirnov S.N. Dislocations and crowdions in two-dimensional crystals. Part III: Plastic deformation of the crystal as a result of defect movement and defect interaction with the field of elastic stresses // Physica nizkikh temperatur (Physics of Low Temperatures). – 2016. – V. 42 (3) – P. 268 - 282.
8. Kiritani M. Similarity and difference between fcc, bcc and hcp metals from the view point of point defect cluster formation // J. Nucl. Mater. – 2000. – 276. – P. 41.
9. Salehinia I., Bahr D.F. The impact of a variety of point defects on the inception of plastic deformation in dislocation free metals // Scripta Mater. – 2012. – 66. – P. 339.
10. Kononenko V.G., Bogdanov V.V., Turenko A.N., Volosyuk M.A., Volosyuk A.V. // Probl. At. Sci. Tech. – 2016. – 104. – P. 15.
11. Korbel A., Bochniak W. Stratified plastic flow in metals // Int. J. Mech. Sci. – 2017. – 128. – P. 269.
12. Medvedev N.N., Starostenkov M.D., Korznikova E.A., Dmitriev S.V. (2016) Multi-particle crowdion collisions // Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS)). 13, 321–325. (In Russ.).
13. Dmitriev S.V., Medvedev N.N., Chetverikov A.P., Zhou K., Velarde M.G. Highly Enhanced Transport by Supersonic N-Crowdions // Phys. Status Solidi - RRL. – 2017. – V.11. – P. 1700298.
14. Korznikova E., Sunagatova I., Bayazitov A., Semenov A., Dmitirev S. Effect of interatomic potentials on mass transfer by supersonic 2-crowdions // Letters on Materials. – 2019. – V.9. – P. 386–390.
15. Bayazitov A.M., Dmitriev S.V., Zakharov P.V., Shepelev I.A., Fomin S.Y., Korznikova E.A. Features of mass transfer by N-crowdions in fcc

- Ni3Al lattice // IOP Conference Series: Mater. Sci. Eng. – 2019. – P. 012033.
16. Korznikova E.A., Shepelev I.A., Chetverikov A.P., Dmitriev S.V., Fomin S.Y., Zhou K. Dynamics and Stability of Subsonic Crowdion Clusters in 2D Morse Crystal // J. Exp. Theor. Phys. – 2018. – V.127. – P. 1009–1015.
17. Shepelev I.A., Korznikova E.A., Bachurin D.V., Semenov A.S., Chetverikov A.P., Dmitriev S.V. Supersonic crowdion clusters in 2D Morse lattice // Phys. Lett. A. – 2020. – V.384. – P. 126032.
18. Sungatova I.R., Semenov A.S., Bajazitov A.V., Korznikova E.A. (2019) Dynamics of Supersonic 2-Crowdions in Nonlinear Two-Dimensional Lattices // Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedenia (Basic Problems of Material Science (BPMS)). 16, 482–488. (In Russ.).
19. Mamontov A.P., Chernov I. P. Effect of small doses of ionizing radiation //Energoatomizdat, 2001. – 286 p. (In Russ.).
20. Didenko A.N., Shakreev Jy.P., Kozlov E. V., Диденко А.Н., Шаркеев Ю.П., Козлов Э.В., Рябчиков А.И. Long-range effects in ion-implanted metal materials. / NTL, Tomsk - 2004. - 326 p. (in Russ.).
21. Psakh'e S.G., Zol'nikov K.P., Kadyrov R.I., Rudenski G.E., Sharkeev Yu.P. The Possibility of forming Soliton-Like Pulses During Implantation // Technical Physics Letters. - 1999. - V. 25 (3). - P. 209 -211.
22. Silsbee R.H. Focusing in Collision Problems in Solids // Journal of Applied Physics. – 1957. – V.28 (11) – P. 1246 – 1250.
23. Garber R.I., Fedorenko A.I. Focusing of atomic collisions in crystals // Phys. Usp. – 1964. – V. 7 (4). – P. 479 – 507.
24. Wehner G. K. Sputtering of Metal Single Crystals by Ion Bombardment // Journal of Applied Physics, 1955. – V. 26. (8) – P. 1056-1057.
25. Medvedev N.N., Starostenkov M.D., Dmitriev S.V., Zakharov P.V., Supertonic crowdion-focuson complexes in 3D computer model of Cu crystal. Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedenia (Basic Problems of Material Science (BPMS)), article in press.
26. Zel'dovich Ya.B., Raizer Yu.P. Physics of Shock Waves and High-Temperature Hydrodynamic Phenomena / Dover Publications, INC. Mineola, New York 2002. 896 p.
27. Popov A.G., Borodai V.E. On the Construction of Equations of State For Solids with the Use of Interatomic Interaction Potentials // Russian Physics Journal. – 2005 V. 48 (7). – P. 665 – 670.
28. Medvedev N.N., Starostenkov M.D., Shaihutdinova T.A. Modification of the Morse potential to simulate the interaction of atoms with high energy // Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedenia (Basic Problems of Material Science (BPMS)). – 2011. – T.8 (1). – C. 99 – 104. (In Russ.).

#### Information about the authors

N. N. Medvedev – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor of the Biysk Technological Institute (branch) of the Altai State Technical University.

M. D. Starostenkov – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Chief Researcher, Professor, I.I. Polzunov Altai State Technical University.

S.V. Dmitriev – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Chief Researcher, Institute for Metals Superplasticity Problems of Russian Academy of Sciences; National Research Tomsk State University.

P. V. Zakharov – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor, Professor of the Department of Physics, St. Petersburg Polytechnic University.

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.  
The authors declare that there is no conflict of interest.

Статья поступила в редакцию 28.01.2026; одобрена после рецензирования 23.02.2026; принята к публикации 02.03.2026.

The article was received by the editorial board on 28 Jan.2026; approved after reviewing 23 Feb.2026; accepted for publication 02 Mar.2026.



Научная статья

1.3.8. Физика конденсированного состояния (физико-математические науки)

УДК 620.174

doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2026.01.010

**МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА  $\text{Ti}_3\text{Al}$ , АРМИРОВАННОГО ФУЛЛЕРЕНОМ  $\text{C}_{60}$ , ПРИ ОДНООСНОЙ ДЕФОРМАЦИИ РАСТЯЖЕНИЯ: МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ****Александр Сергеевич Нарсеев<sup>1</sup>, Устина Ильдусовна Янковская<sup>2</sup>,  
Артем Владимирович Маркидонов<sup>3</sup>, Михаил Дмитриевич Старостенков<sup>4</sup>,  
Павел Васильевич Захаров<sup>5</sup>**<sup>1, 2, 5</sup> Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, ул. Политехническая, д.29 литера Б, вн. тер. г. муниципальный округ Академическое, 195251, г. Санкт-Петербург, Россия.<sup>3</sup> Кузбасский гуманитарно-педагогический институт Кемеровского государственного университета, ул. Циолковского, 23, 654041, Новокузнецк, Россия<sup>3</sup> Сибирский государственный индустриальный университет, ул. Кирова, 42, 654006, Новокузнецк, Россия<sup>4</sup> Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова, пр. Ленина, 46, 656038, Барнаул, Россия<sup>1</sup> narseev.as@mail.ru<sup>2</sup> zalaevau@gmail.com (ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-6434-0747>)<sup>3</sup> markidonov\_artem@mail.ru (ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-4566-528X>)<sup>4</sup> genphys@mail.ru, (ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-6326-7613>)<sup>5</sup> zaharov\_pv@spbstu.ru (ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-6410-1594>)

**Аннотация.** В данном исследовании представлено моделирование металлматричного композита  $\text{Ti}_3\text{Al}$ , армированного фуллеренами. Моделирование выполнялось с использованием методов молекулярной динамики (MD simulation), а расчёты проводились на суперкомпьютере СПбПУ. Методы молекулярной динамики были использованы для анализа поведения материала на атомном уровне с учётом межчастичных взаимодействий. Для более точного описания этих взаимодействий применялся гибридный потенциал (hybrid potential). Было проведено сравнение механических свойств «чистого» материала и композита, армированного фуллеренами, а также дополнительное сравнение с армированными материалами, содержащими разное количество вакансий. Оценивались такие характеристики, как предел текучести, временное сопротивление растяжению (ultimate tensile strength), деформация и нагрузка разрушения. Деформация прикладывалась вдоль кристаллографического направления, соответствующего индексу Миллера [100]. Для армирования в центр расчётной ячейки помещался фуллерен  $\text{C}_{60}$ . Результаты показали снижение механических свойств как в армированном материале, так и в материале с повышенной концентрацией вакансий. Уменьшение временного сопротивления растяжению в обоих случаях объясняется рядом факторов. В первую очередь, фуллерен проявлял благоприятное поведение при деформации сжатия, но оказывал негативное влияние при деформации растяжения из-за своих геометрических ограничений. Вакансии способствовали образованию дислокаций, что приводило к ускоренному разрушению металлической матрицы. Экспериментальные условия, в частности периодические граничные условия (periodic boundary conditions), наложенные на модель, также играли существенную роль. Полученные результаты показывают, что как дефектные структуры, так и армирующие элементы критически влияют на механические свойства материала.

**Ключевые слова:** металлматричный композит, титан-алюминид, армирование фуллеренами, моделирование методом молекулярной динамики, механические свойства, гибридный потенциал, периодические граничные условия, поведение при деформации, деформация растяжения, деформация сжатия, механизмы разрушения материала, межатомные взаимодействия, вычислительное материаловедение, фуллерен.

**Благодарности.** Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-22-20038 (<https://rscf.ru/project/24-22-20038/>) и гранта Санкт-Петербургского научного фонда № 24-22-20038.

Для цитирования: Нарсеев А.С., Янковская У.И., Маркидонов А.В., Старостенков М.Д., Захаров П.В. Оценка механических свойств  $\text{Ti}_3\text{Al}$ , армированного фуллереном  $\text{C}_{60}$ , при одноосной деформации растяжения: исследование методом молекулярной динамики // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2026. Т. 23, № 1. С. 88-95. doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2026.01.010.

Original article

## MECHANICAL PROPERTIES OF $Ti_3Al$ REINFORCED WITH $C_{60}$ FULLERENE UNDER UNIAXIAL TENSILE DEFORMATION: MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION

Alexander S. Narseev<sup>1</sup>, Ustina I. Yankovskaya<sup>2</sup>, Artem V. Markidonov<sup>3</sup>, Michael D. Starostenkov<sup>4</sup>, Pavel V. Zakharov<sup>5</sup>

<sup>1, 2, 5</sup> Peter the Great St.Petersburg Polytechnic University, 195251, Saint Petersburg, Russia

<sup>3</sup>Kuzbass Humanitarian-Pedagogical Institute of Kemerovo State University 23 Tsiolkovsky St., 654041, Novokuznetsk, Russia

<sup>3</sup>Siberian State Industrial University 42 Kirova St., 654006, Novokuznetsk, Russia

<sup>4</sup>Polzunov Altai State Technical University 46 Lenin Ave., 656038, Barnaul, Russia

<sup>1</sup> narseev.as@mail.ru

<sup>2</sup> zalaevau@gmail.com (ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-6434-0747>)

<sup>3</sup> markidonov\_artem@mail.ru (ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-4566-528X>)

<sup>4</sup> genphys@mail.ru, (ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-6326-7613>)

<sup>5</sup> zaharov\_pv@spbstu.ru (ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-6410-1594>)

**Abstract.** This study presents a simulation of a  $Ti_3Al$  metal-matrix composite reinforced with fullerenes. The simulation was performed using molecular dynamics methods, followed by calculations on the SPbPU supercomputer. Molecular dynamics techniques were employed to model the material's behavior at the atomic level, accounting for interparticle interactions. A hybrid potential was used for a more accurate description of these interactions. A comparison was made between the mechanical properties of the "pure" material and the fullerene-reinforced composite, with additional comparisons involving reinforced materials containing varying numbers of vacancies. Evaluated characteristics included yield strength, ultimate tensile strength, strain, and fracture load. Deformation was applied along the crystal direction corresponding to the [100] Miller index. For reinforcement, a  $C_{60}$  fullerene was placed at the center of the simulation cell. The results demonstrated a reduction in mechanical properties in both the reinforced material and the material with increased vacancy concentration. The decrease in ultimate tensile strength in both cases was attributed to several factors. Primarily, the fullerene exhibited favorable behavior under compressive strain but had a detrimental effect under tensile strain due to its dimensional constraints. Vacancies facilitated dislocation formation, leading to accelerated failure of the metallic matrix. The experimental conditions, particularly the periodic boundary constraints imposed on the model, also played a significant role. The findings indicate that both defect structures and reinforcing elements critically influence the mechanical properties of the material.

**Keywords:** metal-matrix composite (MMC), titanium aluminide ( $Ti_3Al$ ), fullerene reinforcement ( $C_{60}$ ), molecular dynamics (MD) simulation, mechanical properties hybrid potential, periodic boundary conditions, deformation behavior, tensile strain, compressive strain, material failure mechanisms, interatomic interactions, computational materials science, fullerene

**Acknowledgments.** The study was supported by the Russian Science Foundation grant No. 24-22-20038 (<https://rscf.ru/project/24-22-20038/>) and the St. Petersburg Science Foundation grant No. 24-22-20038.

**For citation:** Narseev A.S., Yankovskaya U.I., Markidonov A.V., Starostenkov M.D., Zakharov P.V. (2026). Evaluation of mechanical properties of  $C_{60}$ -fullerene reinforced  $tial$  under uniaxial tensile deformation: a molecular dynamics study. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 23(1), 88-95. (In Russ.). doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2026.01.010.

### Введение

Возрастающие требования к современным конструкционным материалам способствуют поиску новых решений. Одним из них является применение металломатричных композиционных материалов [1-6]. По своим свойствам они зачастую превосходят «чистые» металлы, обладая повышенной прочностью, термостойкостью, электропроводимостью, устойчивостью к коррозии и т.д.

Интересны для рассмотрения металлы на основе интерметаллических соединений в комбинации с низкоразмерными углеродными наноструктурами. С развитием технологий в сфере производства такие материалы все более прочно входят в промышленность [7, 8]. Рассматриваемый нами  $Ti_3Al$  известен благодаря своим прочностным характеристикам в сочетании с низкой плотностью, как следствие – легкостью. Рабочие температуры данного материала – 600 – 800 °C, что позволяет использовать



его в зонах повышенной температуры при производстве реактивных двигателей, компонентов турбин и гиперзвуковых летательных аппаратах [9]. В данной статье мы рассмотрим характеристики композита на основе  $\text{Ti}_3\text{Al}$ , его механические и структурные характеристики при одноосной деформации растяжения при различных температурах, ниже температуры плавления, рассмотрим изменение механических характеристик при армировании фуллереном  $\text{C}_{60}$  и при наличии дефектных структур в виде вакансий. Важно рассмотреть фундаментальные принципы зарождения дефектных структур в различных условиях и их вклад в характеристики композитов.

Механические характеристики композита рассмотрены нами при различном проценте вакансий в моделях (0.25%, 0.5%, 1%) при температуре 300 К методами молекулярной динамики. Экспериментальные методы исследования материалов не позволяют детально рассмотреть кинетику процессов на молекулярном уровне. С развитием суперкомпьютеров и увеличением вычислительных мощностей изучение многих явлений перешло в виртуальную среду. Молекулярная динамика считается общепринятым дополнением к экспериментам и широко используется в качестве вспомогательного инструмента для прогнозирования и оценки лабораторных изменений.

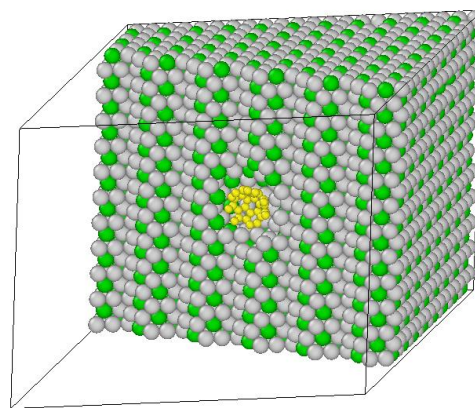
В данной работе мы впервые рассчитали эти характеристики для данного материала в комбинации с фуллереном в широком спектре условий моделирования. Акцентируем внимание, что фуллерены как армирующий элемент эффективно работают при сжатии, мы же рассматриваем именно растяжение. Это важно с позиции понимания поведения материала при таких нагрузках и изучения механизмов разрушения.

### Материалы и методы

Для исследования механических свойств  $\text{Ti}_3\text{Al}$ , армированного фуллереном  $\text{C}_{60}$ , при одноосном растяжении было использовано молекулярно-динамическое (МД) моделирование. Этот метод предоставляет атомистический подход, позволяющий исследовать процессы на атомном уровне, такие как зарождение дислокаций, фазовые превращения и межфазные взаимодействия, которые играют ключевую роль в

механизме деформации металлматричных нанокомпозитов.

Все расчёты проводились с использованием пакета LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator) [10]. Начальная модель создавалась при помощи AtomsK. Число атомов в модели составило 10654. Взаимодействия между ними в матрице  $\text{Ti}_3\text{Al}$  описывались с помощью потенциала Терсова. Для описания ковалентных связей между атомами углерода в фуллерене  $\text{C}_{60}$  использовался потенциал адаптивного межмолекулярного реактивного эмпирического порядка связей (AIREBO)



**Рис.1.** Модель композита  $\text{Ti}_3\text{Al}$  с фуллереном  $\text{C}_{60}$  до растяжения

**Fig. 1.** Model  $\text{Ti}_3\text{Al}$

Модель (Рис.1) представляла собой монокристаллическую ячейку  $\text{Ti}_3\text{Al}$  с гексагональной структурой  $\text{DO}_{19}$ , в центре которой размещался фуллерен  $\text{C}_{60}$ . Периодические граничные условия применялись по всем направлениям для имитации объемного состояния материала. Система была предварительно релаксирована методом минимизации энергии, а затем подвергнута термодинамическому равновесию в ансамбле NPT при температуре 300 К и нулевом внешнем давлении с использованием термостата и баростата Носе–Гувера. Одноосное растяжение проводилось вдоль кристаллографического направления  $[1010]$  при постоянной инженерной скорости деформации  $10^{12} \text{ с}^{-1}$  в ансамбле NVT. В течение деформации регистрировались атомные траектории, напряжения и структурные изменения. Для расчёта тензора напряжений на атомарном уровне использова-

лась формализм вирильного напряжения, что позволило получить такие характеристики, как модуль Юнга, предел текучести и предел прочности при растяжении.

Анализ и визуализация атомных конфигураций выполнялись с использованием программы OVITO [11]. Локальные механизмы деформации, такие как движение дислокаций, фазовые превращения и разрушение интерфейса, отслеживались с помощью модификатора Dislocation analysis (DXA). Предложенная модель позволяет проанализировать влияние фуллеренов  $C_{60}$  на механические свойства интерметаллического соединения  $Ti_3Al$ , устанавливая взаимосвязь между атомарными механизмами и макроскопическими характеристиками прочности.

Модели с вакансиями в металлической матрице создавались с использованием стандартных средств LAMMPS, путем удаления заданного процента атомов по псевдослучайному алгоритму из общего массива частиц. Это позволило создать реалистичные модели с точечными дефектными структурами.

## Методика расчета

Механические напряжения рассчитываются на основе уравнения (1):

$$\sigma(r) = \frac{1}{\Omega} \sum_i \left( -m_i u_i \otimes u_i + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} r_{ij} \otimes f_{ij} \right) \quad (1)$$

где  $\Omega$  – общий объем;  $m_i$  – масса атома  $i$ ;  $u_i$  – скорость  $i$ -го атома;  $r_{ij}$  – расстояние между векторами положения  $r_i$  и  $r_j$  атомов  $i$  и  $j$ , соответственно;  $f_{ij}$  – межатомная сила, действующая на атом  $i$  со стороны атома  $j$ .  $\Omega$  рассчитывается в равновесном состоянии, а общий объем композита  $Ti_3Al$  рассчитывается как сумма объемов интерметаллида с отверстием и фуллереном. Моделирование растяжения проводилось до тех пор, пока деформация  $\varepsilon$  не достигнет предельных значений (около 60 %). Расчеты проводились в рамках канонического ансамбля NVT при температуре 300 К, с шагом по времени 0,5 фс.

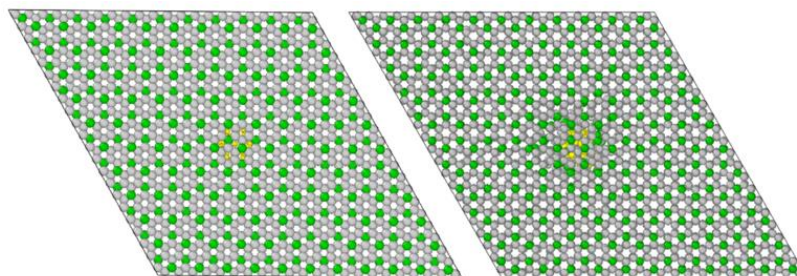


Рис. 2. Модель до(а) и после(б) релаксации.

Fig. 2. Model before (a) and after (b) relaxation

Каждая модель предварительно подвергалась релаксации. Данные процесс необходим для снятия первичных напряжений при введении дефектов в структуру и/или армирующего элемента в виде фуллерена  $C_{60}$ . Визуализация модели до и после релаксации представлена на рисунке 2. Это приводит к первоначальным смещениям атомов и некоторому разупорядочению структуры вблизи фуллерена. В дальнейшем данные позиции являются местом зарождения дислокаций.

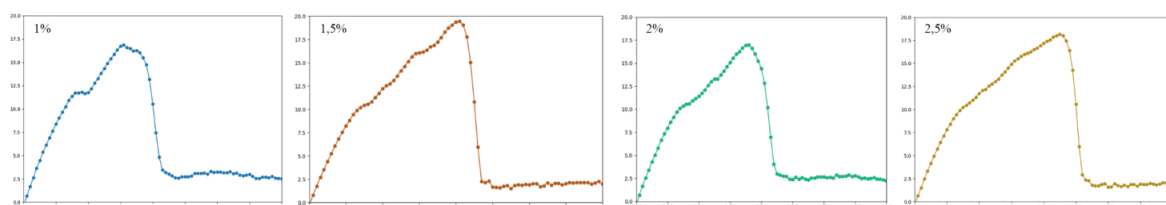
Для проведения описанной методики расчета применялись ресурсы суперкомпьютерного центра «Политехнический». Расчет таких задач является достаточно трудоемким процессом в

силу большого количества частиц в модели и необходимости моделирования процесса растяжения с учетом реальных скоростей деформации материалов. Для реализации поставленных задач по расчету кривых деформации использовалось 3 вычислительных узла гетерогенного вычислительного кластера «Торнадо», каждый по 56 ядер. Данные вычислительные ресурсы позволили рассчитать каждую кривую деформации за 10 часов, что является приемлемым при решении такого масштаба задач.

### Результаты и анализ

В рамках данного исследования были проведены молекулярно-динамические расчёты для оценки механических свойств композита  $\text{Ti}_3\text{Al}$ , армированного фуллеренами  $\text{C}_{60}$ , при одноосном растяжении. Особое внимание было уделено влиянию различных концентраций

вакансий (от 1% до 3,5% с шагом 0,5%) на поведение материала под нагрузкой. На Рис.3 представлены основные результаты в виде зависимости напряжения от деформации для серий моделей с различным содержанием вакансий.



**Рис. 3.** Зависимости «напряжение-деформация» для моделей с разным числом вакансий: 1% (а), 1.5% (б), 2% (с), 2.5% (д)

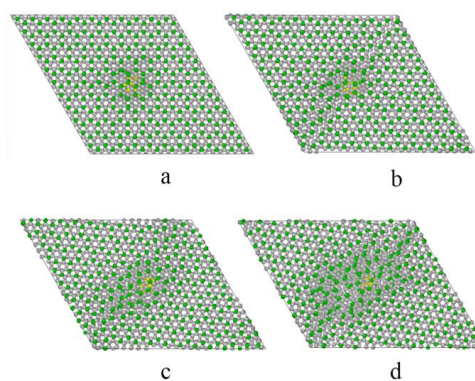
**Fig. 3.** Stress-strain dependencies for models with varying vacancy concentrations: 1% (a), 1.5% (b), 2% (c), 2.5% (d)

Оценка результатов моделирования происходила согласно ГОСТу 1497-84 [12]. Анализ полученных кривых показывает, что начальный линейный участок всех зависимостей имеет схожий наклон, что указывает на сравнительно стабильный модуль упругости независимо от концентрации вакансий на ранней стадии деформации. Это свидетельствует о том, что упругое поведение материала в начальной стадии нагружения слабо зависит от дефектности структуры, даже не смотря на большой процент вакансий. В этом случае доминирующее влияние оказывает сама металлическая матрица.

Максимальное напряжение (предел прочности) варьируется в зависимости от концентрации вакансий. Наиболее высокая прочность наблюдается для образца с концентрацией вакансий 1.5% от числа атомов металлической матрицы, при этом пиковое напряжение достигает ~19.5 ГПа при относительной деформации около 0.21. С увеличением содержания вакансий прочность материала имеет тенденцию к снижению. Однако вплоть до 3% вакансий она превышает значение для бездефектного образца. И только при концентрации вакансий 3.5% пиковое напряжение уменьшается до ~16 ГПа, что чуть меньше кристалла без дефектов. Полученные результаты подтверждают известные данные об упрочнении материалов путем внедрения дефектов. В данном случае важную роль играет фуллерен, как дополнительный стопор для движения дислокационных сегментов (рис.4).

Предельная нагрузка разрушения, аналогично пределу прочности, изменялась не линейно, так при 1.5% и 2.5% вакансий имелись

пики упрочнения. Это связано с формированием дефектных структур вблизи фуллерена, препятствующих движению дислокационных сегментов, в виде дислокационных замков. У модели с 1% вакансий переход к пластичному разрушению происходит через зону текучести ( $\sigma_{\text{тек}} = 11.7$  ГПа), также как и для образцов без внедренных дефектных структур. При дальнейшем деформировании материала в нем начинаются необратимые изменения, важно учитывать этот параметр при практическом использовании  $\text{Ti}_3\text{Al}$  с фуллереном.



**Рис.4.** Процесс деформации композита с 1% вакансий, величина деформации: а) 0.04, б) 0.13 в) 0.15 д) 0.17

**Рис.4.** Deformation process of the composite with 1% vacancies, strain values: (a) 0.04, (b) 0.13, (c) 0.15, (d) 0.17

Особенности поведения после достижения пикового напряжения указывают на характер разрушения материала. Для образцов с меньшей концентрацией вакансий разрушение происходит более резко, что указывает на более хрупкий характер излома. В то же время при увеличении числа вакансий наблюдается более сглаженное падение напряжения, что может свидетельствовать о переходе от хрупкого к более пластичному разрушению, связанного с возможной релаксацией и перераспределением напряжений в дефектной структуре посредством движения образованных дислокаций.

Дополнительно стоит отметить, что присутствие фуллеренов оказывает частично армирующий эффект на структуру  $Ti_3Al$ , повышая как прочностные характеристики, так и пластичность по сравнению с неармированным  $Ti_3Al$ , что согласуется с данными из работ [13, 14]. Введение вакансий до 2.5% может оказывать дальнейший упрочняющий эффект и приводить к большей пластичности композита. Однако дальнейшее увеличение числа вакансий нивелирует этот эффект, приводя к деградации механических свойств. Расположение вакансий и фуллерена в материале может различным образом влиять на движение дислокаций, что не позволяет точно предсказать что произойдет при армировании: упрочнение или разупрочнение. Этот вопрос является открытым и будет рассмотрен в последующих работах.

Таким образом, результаты моделирования демонстрируют, что оптимизация концентрации вакансий является значимым фактором в разработке фуллерен-усиленных интерметаллических композитов  $Ti_3Al$  с заданными механическими свойствами. Можно отметить, что наилучшие характеристики достигаются при 1.5 процентном содержании вакансий. Прочностные характеристики нелинейно зависят от данного параметра. Это связано со сложностью и частичной случайностью процесса разрушения. На образование дислокаций в разной степени влияют различные параметры и в некоторых случаях вакансии создают в окружающей решётке растягивающие напряжения, что влияет на более удалённые атомы, которые тоже смещаются для восстановления равновесия. Упрочнение также происходит за счёт появления на границах субзёрен различных видов дислокаций. Это создаёт условия для упрочнения металла за счёт легирования границ зёрен

путем формирования новых интерметаллических фаз (интерметаллидное упрочнение) [15].

## Выводы

Результаты данного исследования позволяют получить сведения о механических свойствах композитов армированных фуллеренами, что может помочь в разработке новых высокоэффективных материалов для различных областей применения. Учет влияния точечных дефектов позволяет прогнозировать изменения свойств таких композитов, например, при радиационном или ином высокоинтенсивном воздействии на материал. Значимость исследования в сочетании с другими работами на данную тему заключается в возможности оптимизации свойств материала путем подбора оптимального расположения, типа и процентного содержания фуллерена при нагрузке растяжения, что приведет к созданию новых композитных материалов с заданными механическими свойствами.

## Список литературы

1. K. Shirvanimoghaddam, S. U. Hamim, M. Karbalaee Akbari, S. M. Fakhrhoseini, H. Khayyam, A. H. Pakseresht, E. Ghasali, M. Zabet, K. S. Munir, S. Jia, J. P. Davim, and M. Naebe, "Carbon fiber reinforced metal matrix composites: Fabrication processes and properties," *Compos. Part A Appl. Sci. Manuf.*, vol. 92, pp. 70-96, Jan. 2017. doi: 10.1016/j.compositesa.2016.10.032
2. A. Nieto, A. Agarwal, D. Lahiri, A. Bisht, and S. R. Bakshi, *Carbon Nanotubes: Reinforced Metal Matrix Composites*, 2nd ed. CRC Press, 2021. Online. Available: <https://doi.org/10.1201/9780429299582>
3. S. R. Bakshi, D. Lahiri, and A. Agarwal, "Carbon nanotube reinforced metal matrix composites—a review," *Int. Mater. Rev.*, vol. 55, no. 1, pp. 41-64, 2010. doi: 10.1179/095066009X12572530170543 <https://pubs.aip.org/aip/adv/article/8/8/085317/563839>
4. S. Mileiko, "Carbon-Fibre/Metal-Matrix Composites: A Review," *J. Compos. Sci.*, vol. 6, no. 10, p. 297, 2022. doi: 10.3390/jcs6100297.
5. U. I. Yankovskaya, E. A. Korznikova, S. D. Korpusova, and P. V. Zakharov, "Mechanical Properties of the Pt-CNT Composite under Uniaxial Deformation: Tension and Compression," *Mate-*



rials, vol. 16, no. 11, p. 4140, 2023. doi: 10.3390/ma16114140.

6. J. Cao, F. Li, Q. Yang, K. Zhan, Z. Yang, Z. Wang, and B. Zhao, "A review on interfacial structure optimization and its mechanism on the properties of carbon reinforced metal-matrix composites," *Composite Interfaces*, vol. 30, no. 5, pp. 543–583, 2023. doi: 10.1080/09276440.2023.2179248.

7. L. Zhao, W. Zheng, Y. Hu, et al., "Heterostructured metal matrix composites for structural applications: a review," *J. Mater. Sci.*, vol. 59, pp. 9768–9801, 2024. doi: 10.1007/s10853-023-09300-x.

8. <https://mst.elsevierpure.com/en/publications/the-effect-of-microalloying-b-on-the-high-temperature-mechanical->

9. P. Plimpton, *Journal of Computational Physics*, 117(1), 1–19 (1995). doi: 10.1006/jcph.1995.1039

10. A. Stukowski, *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 18(1), 015012 (2010). doi: 10.1088/0965-0393/18/1/015012

11. GOST 1497-84, "Methods for testing metals and alloys. Hardness testing methods," Moscow: Gosstandart, 1984.

12. I. A. Evdokimov, R. R. Khayrullin, R. Kh. Bagramov, S. A. Perfilov, A. A. Pozdnyakov, V. V. Aksenonkov, and B. A. Kulnitskiy, "Nanostructured strain-hardened aluminum-magnesium alloys modified by C60 fullerene obtained by powder metallurgy. Part 2. The effect of magnesium concentration on physical and mechanical properties," *Powder Metallurgy and Functional Coatings*, vol. 2020, no. 4, pp. 76–84. (In Russ.), 2020. doi: 10.17073/1997-308X-2020-4-76-84.

13. A. S. Erturk, Y. O. Yildiz, and M. Kirca, "Mechanical behavior of a novel carbon-based nanostructured aluminum material," *Comput. Mater. Sci.*, vol. 144, pp. 193–209, Mar. 2018. doi: 10.1016/j.commat.2017.12.033

14. P. Li, Y. Chen, X. Liu, X. H. Wang, F. R. Chen, Z. X. Qi, G. Zheng, H. G. Xiang, and G. Chen, "Strengthening in gradient TiAl alloys," *Journal of Materials Science & Technology*, vol. 166, pp. 98–105, Dec. 2023. doi: 10.1016/j.jmst.2023.04.067

## Информация об авторах

А.С. Нарсеев – лаборант-исследователь кафедры физики Санкт-Петербургского политехнического университета.

У.И. Янковская – аспирант Алтайского государственного технического университета, старший преподаватель кафедры высшей математики Санкт-Петербургского политехнического университета.

А.В. Маркидонов – доктор физико-математических наук, доцент, заведующий кафедрой информатики и вычислительной техники им. В.К. Буторина Кузбасского гуманитарно-педагогического института Кемеровского государственного университета; профессор кафедры прикладной математики и информатики Сибирского государственного индустриального университета.

М.Д. Старостенков – доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник, профессор Алтайского государственного технического университета им. И.И. Ползунова

П.В. Захаров – доктор физико-математических наук, директор института физики и математики Санкт-Петербургского политехнического университета.

## References

1. K. Shirvanimoghaddam, S. U. Hamim, M. Karbalaee Akbari, S. M. Fakhrehoseini, H. Khayyam, A. H. Pakseresht, E. Ghasali, M. Zabet, K. S. Munir, S. Jia, J. P. Davim, and M. Naebe, "Carbon fiber reinforced metal matrix composites: Fabrication processes and properties," *Compos. Part A Appl. Sci. Manuf.*, vol. 92, pp. 70–96, Jan. 2017. doi: 10.1016/j.compositesa.2016.10.032
2. Nieto, A. Agarwal, D. Lahiri, A. Bisht, and S. R. Bakshi, *Carbon Nanotubes: Reinforced Metal Matrix Composites*, 2nd ed. CRC Press, 2021. Online. Available: <https://doi.org/10.1201/9780429299582>
3. S. R. Bakshi, D. Lahiri, and A. Agarwal, "Carbon nanotube reinforced metal matrix composites—a review," *Int. Mater. Rev.*, vol. 55, no. 1, pp. 41–64, 2010. doi: 10.1179/095066009X12572530170543
4. S. Mileiko, "Carbon-Fibre/Metal-Matrix Composites: A Review," *J. Compos. Sci.*, vol. 6, no. 10, p. 297, 2022. doi: 10.3390/jcs6100297.
5. U. I. Yankovskaya, E. A. Korznikova, S. D. Korpusova, and P. V. Zakharov, "Mechanical Prop-

erties of the Pt-CNT Composite under Uniaxial Deformation: Tension and Compression," *Materials*, vol. 16, no. 11, p. 4140, 2023. doi: 10.3390/ma16114140.

6. J. Cao, F. Li, Q. Yang, K. Zhan, Z. Yang, Z. Wang, and B. Zhao, "A review on interfacial structure optimization and its mechanism on the properties of carbon reinforced metal-matrix composites," *Composite Interfaces*, vol. 30, no. 5, pp. 543–583, 2023. doi: 10.1080/09276440.2023.2179248.

7. L. Zhao, W. Zheng, Y. Hu, et al., "Hetero-structured metal matrix composites for structural applications: a review," *J. Mater. Sci.*, vol. 59, pp. 9768–9801, 2024. doi: 10.1007/s10853-023-09300-x.

8. <https://mst.elsevierpure.com/en/publications/the-effect-of-microalloying-b-on-the-high-temperature-mechanical->

9. P. Plimpton, *Journal of Computational Physics*, 117(1), 1–19 (1995). doi: 10.1006/jcph.1995.1039

10. A. Stukowski, *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 18(1), 015012 (2010). doi: 10.1088/0965-0393/18/1/015012

11. GOST 1497-84, "Methods for testing metals and alloys. Hardness testing methods," Moscow: Gosstandart, 1984.

12. I. A. Evdokimov, R. R. Khayrullin, R. Kh. Bagramov, S. A. Perfilov, A. A. Pozdnyakov, V. V. Aksenonkov, and B. A. Kulnitskiy, "Nanostructured strain-hardened aluminum-magnesium alloys modified by  $C_{60}$  fullerene obtained by powder metallurgy. Part 2. The effect of magnesium concentration on physical and mechanical properties," *Powder Metallurgy and Functional Coatings*, vol. 2020, no. 4, pp. 76–84. (In Russ.), 2020. doi: 10.17073/1997-308X-2020-4-76-84.

13. A. S. Erturk, Y. O. Yildiz, and M. Kirca, "Mechanical behavior of a novel carbon-based nanostructured aluminum material," *Comput. Mater. Sci.*, vol. 144, pp. 193–209, Mar. 2018. doi: 10.1016/j.commatsci.2017.12.033

P. Li, Y. Chen, X. Liu, X. H. Wang, F. R. Chen, Z. X. Qi, G. Zheng, H. G. Xiang, and G. Chen, "Strengthening in gradient TiAl alloys," *Journal of Materials Science & Technology*, vol. 166, pp. 98–105, Dec. 2023. doi: 10.1016/j.jmst.2023.04.067

### Information about the authors

A.S. Narseev – laboratory assistant-researcher of the Department of Physics of the St. Petersburg Polytechnic University.

U.I. Yankovskaya – postgraduate student of the Altai State Technical University, senior lecturer of the Department of Higher Mathematics of the St. Petersburg Polytechnic University.

A.V. Markidonov – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor, Head of the Department of Informatics and Computer Engineering named after V.K. Butorin, Kuzbass Humanitarian Pedagogical Institute, Kemerovo State University; Professor of the Department of Applied Mathematics and Informatics, Siberian State Industrial University.

M.D. Starostenkov – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Chief Researcher, Professor, I.I. Polzunov Altai State Technical University

P.V. Zakharov – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Director of the Institute of Physics and Mathematics of the St. Petersburg Polytechnic University.

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.  
The authors declare that there is no conflict of interest.

Статья поступила в редакцию 04.04.2026; одобрена после рецензирования 23.02.2026; принята к публикации 02.03.2026.

The article was received by the editorial board on 04 Feb. 2026; approved after reviewing 23 Feb. 2026; accepted for publication 02 Mar. 2026.

Научная статья

1.3.8. Физика конденсированного состояния (физико-математические науки)

УДК 539.22

doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2026.01.011

## **О ЛОКАЛИЗАЦИИ ЭНЕРГИИ В КВАДРАТНОЙ РЕШЕТКЕ $\beta$ -ФПУЦ ПРИ СТОЛКНОВЕНИИ ДВИЖУЩИХСЯ ДИСКРЕТНЫХ БРИЗЕРОВ**

**Дарья Михайловна Наумова<sup>1</sup>, Евгений Константинович Наумов<sup>1</sup>,  
Дилмурод Собир углы Холмуродов<sup>2</sup>, Сергей Владимирович Дмитриев<sup>3</sup>**

<sup>1</sup>Институт физики молекул и кристаллов, Уфимский федеральный исследовательский центр РАН, пр. Октября, 71, 450054, Уфа, Россия

<sup>2</sup>Каршинский государственный университет, ул. Кучабаг, 17, 180119, Карши, Узбекистан

<sup>3</sup>Институт математики с вычислительным центром, Уфимский федеральный исследовательский центр РАН, пр. Октября, 71, 450054, Уфа, Россия

<sup>1</sup>naumova.darya.m@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0001-6569-243X>

<sup>2</sup>naumovek@kristallcom.ru, <https://orcid.org/0000-0002-0320-2797>

<sup>3</sup>dilmu.xolmu@mail.ru

<sup>4</sup>dmitriev.sergey.v@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-6744-4445>

**Аннотация.** Интерес к нелинейным колебаниям решетки вызван, с одной стороны, наличием в природе и технике периодических в пространстве дискретных систем, а с другой стороны тем, что во многих областях применения они могут подвергаться высокоамплитудным воздействиям, когда начинает проявляться нелинейная природа связей между частицами. Важным эффектом нелинейности в дискретных периодических структурах является возможность существования пространственно локализованных колебаний большой амплитуды, которые получили название "дискретные бризеры" (ДБ) (или внутренние локализованные моды). Колебания, локализованные на дефектах, могут быть реализованы и в случае линейных взаимодействий, однако ДБ существуют в бездефектных решетках, но только за счет их нелинейности. В работе представлено компьютерное моделирование столкновения движущихся ДБ, которые испускаются от двух пар колеблющихся атомов, находящихся в плотноупакованных рядах в квадратной решетке с потенциалом -ФПУЦ (Ферми-Паста-Улама-Цингу). Две пары вынужденно колеблющихся атомов могут находиться в одном плотноупакованном ряду или со сдвигом на несколько рядов. В первом случае наблюдаются лобовые столкновения ДБ, в других случаях ДБ взаимодействуют, двигаясь в параллельных плотноупакованных рядах. Описаны основные сценарии сталкивающихся движущихся ДБ в такой решетке, а также проведен расчёт максимальной энергии решетки в момент столкновения ДБ. При проведении вышеописанных расчетов удалось показать, что взаимодействующие ДБ повышают максимальную энергию атомов в системе в зоне их столкновения. Повышенная энергия атомов, наблюдаемая при столкновении ДБ, может облегчать преодоление потенциальных барьеров, связанных со структурными перестройками.

**Ключевые слова:** дискретные бризеры, квадратная решетка, сценарии столкновения, максимальная энергия решетки, колеблющаяся пара атомов, потенциал Ферми-Паста-Улама-Цингу

**Благодарности:** Работа Дмитриева С.В. выполнена в рамках Государственного задания Института математики с вычислительным центром УФИЦ РАН.

---

**Для цитирования:** Наумова Д.М., Наумов Е.К., Холмуродов Д.С., Дмитриев С.В. О локализации энергии в квадратной решетке  $\beta$ -ФПУЦ при столкновении движущихся дискретных бризеров // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2026. Т. 23, № 1. С. 96-105. doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2026.01.011.

---



Original article

## ON ENERGY LOCALIZATION IN THE $\beta$ -FPUT SQUARE LATTICE DURING COLLISIONS OF MOVING DISCRETE BREATHERS

Darya M. Naumova<sup>1</sup>, Evgeny K. Naumov<sup>1</sup>, Dilmurod S. Kholmurodov<sup>2</sup>, Sergey V. Dmitriev<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Institute of Molecule and Crystal Physics, Ufa Federal Research Centre of RAS, Oktyabrya Pr., 71, Ufa, 450054, Russia

<sup>2</sup> Karshi State University, Kuchabag St., 17, 180119, Karshi, Uzbekistan

<sup>3</sup> Institute of Mathematics with computing center, Ufa Federal Research Centre of RAS, Oktyabrya Pr., 71, Ufa, 450054, Russia

<sup>1</sup>naumova.darya.m@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0001-6569-243X>

<sup>2</sup>naumovek@kristallcom.ru, <https://orcid.org/0000-0002-0320-2797>

<sup>3</sup>dilmu.xolmu@mail.ru

<sup>4</sup>dmitriev.sergey.v@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-6744-4445>

**Abstract.** Interest in nonlinear lattice vibrations is driven, on the one hand, by the existence of spatially periodic discrete systems in nature and technology, and on the other hand, by the fact that in many applications they can be subjected to high-amplitude impacts, which reveal the nonlinear nature of interparticle couplings. An important effect of nonlinearity in discrete periodic structures is the possibility of the existence of spatially localized oscillations of large amplitude, which are called "discrete breathers" (DBs) (or intrinsic localized modes). Oscillations localized at defects can also be realized in the case of linear interactions, but DBs exist in defect-free lattices, but only due to their nonlinearity. This paper presents a computer simulation of the collision of moving DBs emitted by two pairs of oscillating atoms located in the close-packed rows in a square lattice with a Fermi-Pasta-Ulam-Tsingou (FPU) potential. Two pairs of forced oscillating atoms can be located in the same close-packed row or shifted by several rows. In the first case, head-on collisions of discrete breathers are observed; in other cases, discrete breathers interact while moving in parallel close-packed rows. The main scenarios for colliding moving discrete breathers in such a lattice are described, and the maximum lattice energy at the moment of discrete breather collision is calculated. The calculations described above demonstrated that interacting discrete breathers increase the maximum energy of atoms in the system in the collision zone. The increased atomic energy observed during discrete breather collisions can facilitate overcoming potential barriers associated with structural rearrangements.

**Keywords:** discrete breathers, square lattice, collision scenarios, maximum lattice energy, vibrating pair of atoms, Fermi-Pasta-Ulam-Tsingou potential

**Acknowledgements:** The work of S.V. Dmitriev was carried out within the framework of the State assignment of the Institute of Mathematics with the Computing Center of the Ufa Federal Research Center of RAS.

**For citation:** Naumova D.M., Naumov E.K., Kholmurodov D.S., Dmitriev S.V. (2026). On energy localization in the  $\beta$ -FPUT square lattice during collisions of moving discrete breathers. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 23(1), 96-105. (In Russ.). doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2026.01.011.

### Введение

Интерес к нелинейным колебаниям решетки возрос в последние десятилетия после открытия возможности существования локализованных в пространстве колебаний большой амплитуды, называемых дискретными бризерами (ДБ) [1–6]. Для существования ДБ необходимы два условия - дискретность и нелинейность среды. Дискретность обеспечивает ограниченность спектра малоамплитудных колебаний решетки, а нелинейность даёт возможность частоте колебаний ДБ выйти из этого спектра. Колебаясь на частоте вне спектра малоамплитудных колебаний, ДБ не затрачивает свою

энергию на их возбуждение и, теоретически, в отсутствии возмущений, может существовать вечно.

На ДБ может быть локализована энергия порядка нескольких эВ [7], кроме того, перемещаясь по кристаллической решетке, ДБ способны транспортировать её [8–20]. Эта локализованная энергия может привести к модификации дефектов [21], помочь в преодолении порога миграции дефектов [22, 23] или понизить потенциальный барьер испарения атома с поверхности кристалла [24]. ДБ способны аккумулировать и переносить электрический заряд, что объясняет появление электрического тока в кристаллах, не имеющих свободных зарядов

[25–28]. Важно, что названные выше эффекты нелинейности являются общими и проявляются в нелинейных решетках любой размерности, хотя имеются определённые аспекты, связанные с размерностью решетки. Это говорит о возможности изучения многих эффектов нелинейности на примере относительно простых решеток, где физическая суть явления проявляется наиболее ярко.

Большую роль в физике конденсированного состояния и в физике нелинейных явлений сыграли двумерные решетки. Квадратная решетка использовалась для изучения ферромагнетизма [29], при изучении нелинейных возбуждений в кристалле слюды [30], нелинейной локализации энергии в фотонных кристаллах [31].

Данная работа является продолжением работы [32] и методика моделирования процессов полностью совпадает с представленной в этой работе.

Отметим работы [33–36], где методом молекулярной динамики и теоретико-группового анализа изучаются условия существования различных типов дискретных бризеров в ОЦК-решётке дальнедействующими межатомными взаимодействиями и обсуждается вопрос выбора потенциала, что концептуально близко к рассматриваемой в работе проблеме локализации энергии в дискретных нелинейных решетках.

### Цель и задачи работы

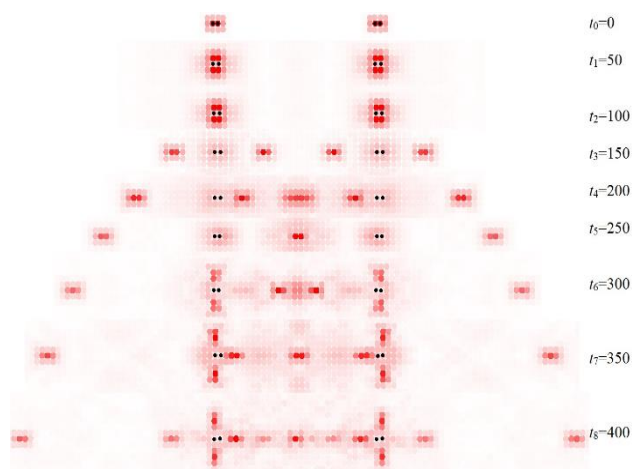
Цель проведенной работы заключается в изучении сталкивающихся движущихся ДБ в квадратной решетке с дальнедействующим потенциалом  $\beta$ -ФПУЦ.

Задачами же такого исследования являются:

1. Описание различных сценариев столкновения движущихся ДБ. В ходе проведенного исследования рассматривались различные сценарии столкновения движущихся ДБ, испускаемых от двух разных пар колеблющихся атомов, находящихся в одном плотноупакованном ряду решетки на некотором расстоянии друг от друга, а также со смещением колеблющихся пар в соседние атомные ряды.

Расчёт максимальной энергии решетки в момент столкновения ДБ, испускаемых двумя парами колеблющихся атомов, находящихся в

одном плотноупакованном ряду решетки на некотором расстоянии друг от друга.



**Рис. 1.** Сценарий столкновения движущихся ДБ, в котором колеблющиеся пары атомов находятся в одном плотноупакованном ряду решетки на расстоянии 30 межатомных расстояний друг от друга.

**Fig. 1.** Scenario of a collision of moving DBs, in which the vibrating pairs of atoms are located in one close-packed row of the lattice at a distance of 30 interatomic distances from each other.

### Основные сценарии сталкивающихся движущихся ДБ в квадратной решетке с дальнедействующим потенциалом $\beta$ -ФПУЦ

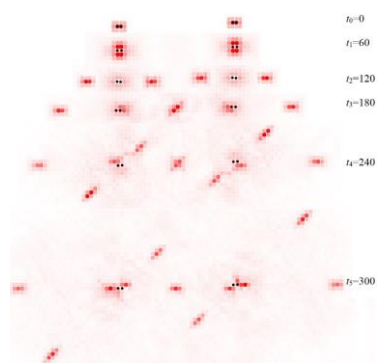
На Рис. 1 представлен сценарий, в котором колеблющиеся пары атомов находятся в одном плотноупакованном ряду решетки на расстоянии 30 межатомных расстояний друг от друга. Движущиеся ДБ, испускаемые от колеблющихся пар, следуют навстречу друг к другу, что приводит к их столкновению. Параметры вынужденных колебаний соответствуют следующим значениям: амплитуда  $A=0,07$ , частота  $\omega=1,006\omega_{\max}$ , начальный момент времени  $t_0=0$ , шаг по времени  $\Delta t=50$ . Атомы, совершающие вынужденные колебания, показаны черным, остальные атомы – градацией цвета от белого (нулевая полная энергия атома) до красного (максимальная по всем атомам энергия).

Тогда для представленного Рис. 1 верно, что движущиеся ДБ начинают испускаться при моменте времени  $t_3=150$ , позже столкнувшись при  $t_3=200$  их энергии сливаются посередине между парами вынужденно колеблющихся атомов. Интерес вызывает так же тот факт, что энергии, сливавшиеся посередине между пара-

ми вынужденно колеблющихся атомов так или иначе взаимодействуют до конца проведенного нами исследования. Так же примечателен тот факт, что в момент времени равный  $t_6=300$ , под действием поля энергии другой колеблющейся пары на каждой из рассматриваемых нами колеблющихся пар происходит эффект испускания ДБ новой симметрии, которые раньше не наблюдались при рассмотрении подобных моделей, а именно - горизонтальных ДБ.

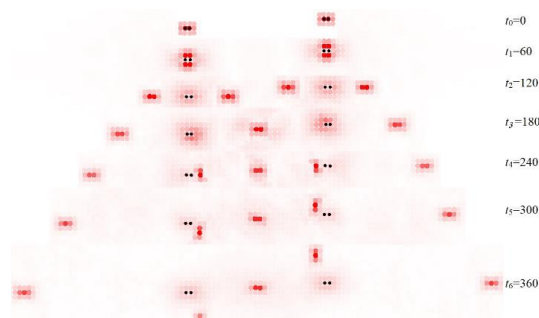
На Рис. 2 представлен сценарий столкновения движущихся ДБ, в котором колеблющиеся пары атомов, расположены со смещением на один горизонтальный ряд решетки и на расстоянии 30 межатомных расстояний друг от друга. Параметры вынужденных колебаний соответствуют приведенным к Рис. 1, за исключением шага по времени, который равен  $\Delta t=60$ .

Из Рис. 2 видно, что движущиеся ДБ начинают излучаться в момент времени  $t_2=120$ , а затем, столкнувшись при  $t_3=180$ , формируют локализованную область повышенной энергии в середине между парами вынужденно колеблющихся атомов. После столкновения наблюдается длительное взаимодействие слитых ДБ с повышенной энергией, сохраняющееся вплоть до завершения расчёта. Особый интерес представляет момент времени  $t_4=240$ , когда под действием энергетического поля, создаваемого ДБ, излучёнными другой вынужденно колеблющейся парой, происходит генерация ранее не наблюдавшихся в данной модели диагональных ДБ, отличающихся иной симметрией.



**Рис. 2.** Сценарий столкновения движущихся ДБ, в котором колеблющиеся пары атомов расположены со смещением на один горизонтальный ряд решетки и на расстоянии 30 межатомных расстояний друг от друга.

**Fig. 2.** A collision scenario of moving DBs in which the vibrating pairs of atoms are located with a shift of one horizontal row of the lattice and at a distance of 30 interatomic distances from each other.



**Рис. 3.** Сценарий столкновения движущихся ДБ, в котором колеблющиеся пары атомов, расположены со смещением на два горизонтальных ряда решетки и на расстоянии 30 межатомных расстояний друг от друга

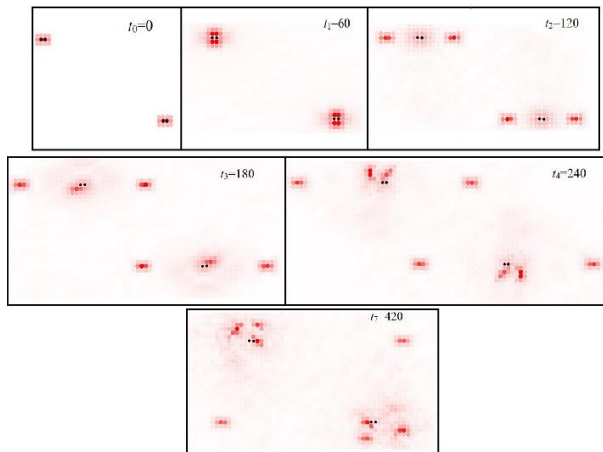
**Fig. 3.** A collision scenario of moving databases is considered, in which vibrating pairs of atoms are located with a shift of two horizontal rows of the lattice and at a distance of 30 interatomic distances from each other.

На Рис. 3 представлен сценарий столкновения движущихся ДБ, в котором колеблющиеся пары атомов, расположены со смещением на один горизонтальный ряд решетки и на расстоянии 30 межатомных расстояний друг от друга. Параметры вынужденных колебаний соответствуют приведенным к Рис. 1, за исключением шага по времени, который равен  $\Delta t=60$ .

Тогда для представленного Рис. 3 верно, что движущиеся ДБ начинают испускаться при моменте времени  $t_2=120$ , позже столкнувшись при  $t_3=180$  их энергии сливаются посередине между парами вынужденно колеблющихся атомов. Как и ранее заметно, что энергии, сливавшиеся посередине между парами вынужденно колеблющихся атомов так или иначе взаимодействуют до конца проведенного нами исследования. Так же примечателен тот факт, что в момент времени равный  $t_4=240$  под действием поля энергии другой колеблющейся пары на каждой из рассматриваемых нами колеблющихся пар происходит эффект испускания ДБ направленных горизонтально, но в отличии от Рис. 1 лишь в одном направлении.

В сценариях столкновения, когда движущиеся ДБ испускаются от пары атомов расположенных со смещением на три и больше горизонтальных рядов решетки и на расстоянии 30 межатомных расстояний друг от друга наблюдается следующее. ДБ проходят друг рядом с другом, не взаимодействуя между собой, однако под действием поля энергии другой колеблющейся пары на каждой из рассматриваемых

нами колеблющихся пар теряется симметрия испускания движущихся ДБ. Результатом потери симметрии становится испускание хаотичных движущихся ДБ. Для большего понимания картины, описанного нами взаимодействия представим сценарий столкновения, движущихся ДБ испускающихся от пары атомов, расположенных со смещением на тридцать горизонтальных рядов решетки и на расстоянии 30 межатомных расстояний друг от друга. Такой сценарий представлен на Рис. 4.



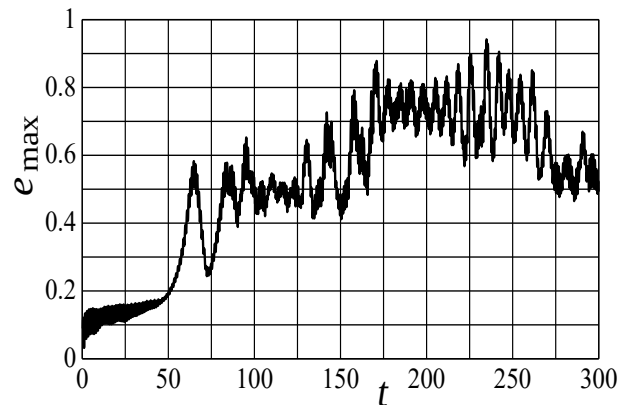
**Рис. 4.** Сценарий столкновения движущихся ДБ, в котором колеблющиеся пары атомов, расположены со смещением на два горизонтальный ряд решетки и на расстоянии 30 межатомных расстояний друг от друга.

**Fig. 4.** A collision scenario of moving DBs in which oscillating pairs of atoms are displaced by thirty horizontal rows of the lattice and are 30 interatomic distances apart.

Тогда для представленного на Рис. 4 случая верно, что движущиеся ДБ начинают испускаться в момент времени  $t_2=120$ , а позже, при  $t_3=180$ , испущенные ДБ проходят параллельно друг другу не взаимодействуя. При  $t_4=240$  наблюдается эффект, в котором на каждую рассматриваемую колеблющуюся пару начинает оказывать действие излучение мало-амплитудных волн от другой колеблющейся пары. Результатом такого влияния становится окончательная потеря симметрии испускающихся ДБ при  $t_7=420$ , как относительно самой пары колеблющихся атомов, так и относительно двух пар, задействованных в исследовании.

### Расчёт максимальной энергии атомов решетки в момент столкновения ДБ

Изучим эволюцию максимальной по всем атомам энергии  $e_{\max}$  для случая, когда две пары атомов, совершающих вынужденные колебания, находятся в одном атомном ряду на расстоянии 20 межатомных расстояний друг от друга. Выберем следующие параметры вынужденных колебаний: амплитуда  $A=0,09$  и частота  $\omega=1,017\omega_{\max}$ . На Рис. 5 показана зависимость  $e_{\max}$  от времени  $t$ . На Рис. 6 показан транспорт энергии от атомов, совершающих вынужденные колебания, в решетку. Атомы, совершающие вынужденные колебания, показаны черным, остальные атомы – градацией цвета от белого (нулевая полная энергия атома) до красного (максимальная по всем атомам энергия).

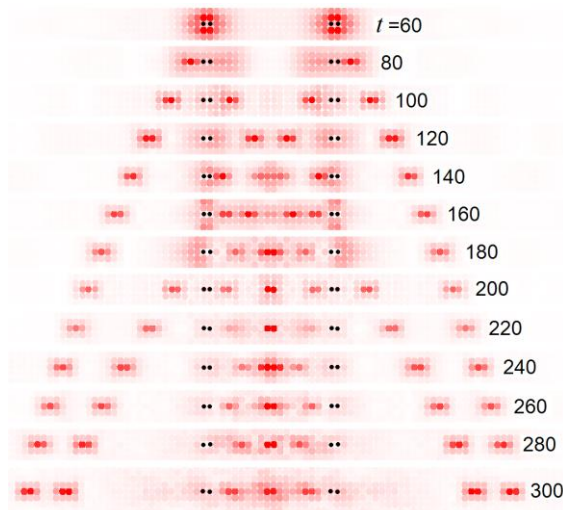


**Рис. 5.** Зависимость максимальной по всем атомам энергии  $e_{\max}$  от времени.

**Fig. 5.** Dependence of the maximum over all atoms energy  $e_{\max}$  on time.

Как видно из Рис. 5,  $e_{\max}$  сначала растет, а затем начинает осциллировать на уровне энергии примерно равной 0,5, и осцилляции на этом уровне продолжаются примерно до  $t=125$ . Далее опять наблюдается рост максимальной энергии атомов и выход на новый уровень максимальной энергии, равной примерно 0,75. Начиная с  $t=250$ , максимальная энергия в системе начинает падать.





**Рис. 6.** Транспорт энергии в решетке от двух пар атомов, совершающих вынужденные колебания по гармоническому закону с амплитудой  $A=0,09$  и частотой  $\omega=1,017\omega_{max}$ . Атомы, совершающие вынужденные колебания, показаны черным, остальные атомы – градацией цвета от белого (нулевая полная энергия) до красного (максимальная по всем атомам энергия).

**Fig. 6.** Energy transport in the lattice from two pairs of atoms undergoing forced oscillations according to a harmonic law with an amplitude of  $A=0.09$  and a frequency of  $\omega=1.017\omega_{max}$ . The atoms undergoing forced oscillations are shown in black, while the remaining atoms are colored from white (zero total energy) to red (maximum energy among all atoms).

Как видно из Рис. 6,  $e_{max}$  сначала растет, а затем начинает осциллировать на уровне энергии примерно равной 0,5, и осцилляции на этом уровне продолжаются примерно до  $t=125$ . Далее опять наблюдается рост максимальной энергии атомов и выход на новый уровень максимальной энергии, равной примерно 0,75. Начиная с  $t=250$ , максимальная энергия в системе начинает падать. Такое изменение максимальной энергии во времени можно объяснить глядя на Рис. 6. Уровень энергии  $e_{max} = 0,5$  соответствует ситуации, когда в системе движутся невзаимодействующие ДБ. Первая пара ДБ образуется при  $t=80$ , они разбегаются влево и вправо от пар атомов, совершающих вынужденные колебания. Вторая пара ДБ образуется при  $t=100$ , причем, эти ДБ движутся навстречу друг другу между парами вынужденно колеблющихся атомов. Эти атомы встречаются примерно при  $t=140$ , когда на Рис. 6 отмечается рост максимальной энергии. Далее происходит

испускание ДБ как в стороны от вынужденно колеблющихся атомов, так и в пространство между ними. Все большее число ДБ начинает сливаться посередине между парами вынужденно колеблющихся атомов, что приводит к выходу максимальной энергии на уровень 0,75. При  $t > 250$  испускание энергии от вынужденно движущихся атомов теряет симметрию и ДБ начинают рассеивать свою энергию, что приводит к понижению  $e_{max}$ . Таким образом, можно сделать вывод, что взаимодействующие ДБ повышают максимальную энергию атомов в системе.

### Заключение

В соответствии с целью работы проведено изучение сталкивающихся движущихся ДБ в квадратной решетке с дальнедействующим потенциалом  $\beta$ -ФПУЦ. Результаты исследования приведены ниже:

1. Описаны основные сценарии столкновения движущихся ДБ. Исходя из анализа таких сценариев можно заключить, что результатом столкновения движущихся ДБ является образование ДБ новых симметрий ранее не наблюдавшихся в рассмотренной модели. Так же необходимо отметить влияние малоамплитудных волн, исходящих от колеблющейся пары, которые со временем начинают оказывать действие на другие колеблющиеся пары. Результатом такого влияния является потеря симметрии испускающихся ДБ, как относительно самой пары колеблющихся атомов, так и относительно других пар.

Проведен расчёт максимальной энергии решетки в момент столкновения ДБ, испускаемых двумя парами колеблющихся атомов, находящихся в одном плотноупакованном ряду решетки на расстоянии 20 межатомных расстояний друг от друга. При проведении такого расчета удалось показать, что взаимодействующие ДБ повышают максимальную энергию атомов в системе в зоне их столкновения. Напомним, что расчет проведен на базе модели с дальнедействующим потенциалом  $\beta$ -ФПУЦ. Таким образом, исходя из представленных нами сценариев столкновения движущихся ДБ и на основе утверждения о том, что ДБ повышают максимальную энергию атомов в системе в зоне их столкновения, заключаем, что в дальнейших работах необходимо провести рассмот-

рение сценариев столкновения движущихся ДБ от пары колеблющихся атомов на базе модели с дальнедействующим потенциалом Морзе. Результатом столкновения ДБ в решетке Морзе может стать появление дефектов решетки, например, пар Френкеля – вакансии-междоузлия.

### Список литературы

1. Dolgov A. S. On localization of oscillations in nonlinear crystal structure / A. S. Dolgov // *Sov. Phys. Solid State*. – 1986. – т. 28. – с. 907.
2. Sievers A. J. Intrinsic localized modes in anharmonic crystals / A. J. Sievers, S. Takeno // *Physical Review Letters*. – 1988. – т. 61, № 8. – с. 970-973.
3. Flach S. Discrete breathers - Advances in theory and applications / S. Flach, A. V. Gorbach // *Physics Reports*. – 2008. – т. 467, № 1. – с. 1-116.
4. Discrete breathers in crystals / S. V. Dmitriev, E. A. Korznikova, J. A. Baimova, M. G. Velarde // *Physics-Uspekhi*. – 2016. – т. 59, № 5. – с. 446-461
5. Page J. B. Asymptotic solutions for localized vibrational modes in strongly anharmonic periodic systems / J. B. Page // *Phys. Rev. B*. – 1990. – т. 41, № 11. – с. 7835-7838.
6. Flach S. Discrete breathers / S. Flach, C. R. Willis // *Physics Reports*. – 1998. – т. 295, № 5. – с. 181-264.
7. Dubinko V. I. Reaction-rate theory with account of the crystal anharmonicity / V. I. Dubinko, P. A. Selyshchev, J. F. Archilla // *Phys. Rev. E*. – 2011. – т. 83. – с. 041124.
8. Kistanov A. A. Properties of moving discrete breathers in a monoatomic two-dimensional crystal / A. A. Kistanov, A. S. Semenov, S. V. Dmitriev // *Journal of Experimental and Theoretical Physics*. – 2014. – т. 119, № 4. – с. 766-771.
9. Moving discrete breathers in bcc metals V, Fe and W / R. T. Murzaev, A. A. Kistanov, V. I. Dubinko, D. A. Terentyev, S. V. Dmitriev // *Comp. Mater. Sci*. – 2015. – т. 98. – с. 88.
10. Marin J. L. Localized moving breathers in a 2D hexagonal lattice / J. L. Marin, J. C. Eilbeck, F. M. Russell // *Phys. Lett. A*. – 1998. – т. 248, № 2-4. – с. 225-229.
11. Properties of moving discrete breathers in beryllium / O. V. Bachurina, R. T. Murzaev, A. S. Semenov, E. A. Korznikova, S. V. Dmitriev // *Phys. Solid State*. – 2018. – т. 60. – с. 989.
12. Кистанов А.А., Семенов А.С., Дмитриев С.В. О задании начальных условий для моделирования движущихся дискретных бризеров в моноатомном двумерном кристалле // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. – 2014. – Т. 11. – № 2. – С. 223-227.
13. Кистанов А.А., Семенов А.С. Столкновение движущихся дискретных бризеров в двумерном моноатомном кристалле // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. – 2014. – Т. 11. – № 2. – С. 241-244.
14. Кистанов А.А., Семенов А.С., Мурзаев Р.Т., Дмитриев С.В. Неподвижные и движущиеся дискретные бризеры в ГПУ металле Co // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. – 2014. – Т. 11. – № 3. – С. 322-325.
15. Кистанов А.А., Семенов А.С., Мурзаев Р.Т., Дмитриев С.В. Взаимодействие движущихся дискретных бризеров в ГПУ металле Mg // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. – 2014. – Т. 11. – № 4-2. – С. 572-577.
16. Семенов А.С., Корзникова Е.А., Дмитриев С.В. Дискретные бризеры с жестким и мягким типом нелинейности в одномерной цепочке с дальнедействующим морзевским взаимодействием // *Письма о материалах*. – 2015. – Т. 5. – № 1 (17). – С. 11-14.
17. Семёнова М.Н., Семёнов А.С., Бебихов Ю.В., Рябов Д.С., Чечин Г.М., Рахматуллина Ж.Г., Корзникова Е.А., Дмитриев С.В. Некоторые характеристики одномерных делокализованных нелинейных колебательных мод треугольной решетки с морзевским взаимодействием // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. – 2018. – Т. 15. – № 2. – С. 257-264.
18. Smenov A.S., Bebikhov Yu.V., Kistanov A.A. Simulation of energy transport in crystal with NaCl structure assisted by discrete breathers // *Letters on Materials*. – 2017. – Т. 7. – № 2 (26). – С. 77-80.
19. Семенов А.С., Фомин С.Ю., Жоу К., Соболева Э.Г. Дискретный бризер с жестким типом нелинейности в двумерном биатомном кристалле // *Письма о материалах*. – 2017. – Т. 7. – № 3 (27). – С. 327-331.
20. Семенов А.С., Мурзаев Р.Т., Кистанов А.А., Бебихов Ю.В. Исследование дискретных бризеров в ГПУ металлах бериллии и цирконии // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. – 2015. – Т. 12. – № 1. – С. 26-30.

21. Long range annealing of defects in germanium by low energy plasma ions / J. F. Archilla, S. M. Coelho, F. D. Aurret, V. I. Dubinko, V. Hizhnyakov // *Physica D*. – 2015. – т. 297. – с. 56.
22. Interaction of propagating discrete breathers with a vacancy in a twodimensional crystal / A. A. Kistanov, S. V. Dmitriev, A. S. Semenov, V. I. Dubinko, D. A. Terentev // *Technical Physics Letters*. – 2014. – т. 40, № 8. – с. 657-661.
23. Interaction of discrete breathers with primary lattice defects in bcc Fe / D. A. Terentyev, A. V. Dubinko, V. I. Dubinko, S. V. Dmitriev, E. E. Zhurkin, M. V. Sorokin // *Model. Simul. Mater. Sc.* – 2015. – т. 23, № 2. – с. 085007.
24. Surface discrete breathers in Pt3Al intermetallic alloy / P. V. Zakharov, E. A. Korznikova, S. V. Dmitriev, E. G. Ekomasov, K. Zhou // *Surf. Sci.* – 2019. – т. 679, № 2. – с. 1.
25. Velarde M. G. Thermal solitons and solitons in 1D anharmonic lattices up to physiological temperature / M. G. Velarde, W. Ebeling, A. P. Chetverikov // *Int. J. Bifurc. Chaos*. – 2008. – т. 18. – с. 3815.
26. Velarde M. G. From polaron to soliton: The addition of nonlinear elasticity to quantum mechanics and its possible effect upon electric transport / M. G. Velarde // *J. Comput. Appl. Math.* – 2010. – т. 233. – с. 1432.
27. Discrete-breather-assisted charge transport along DNA-like molecular wires / A. P. Chetverikov, W. Ebeling, V. D. Lakhno, M. G. Velarde // *Phys. Rev. E*. – 2019. – т. 100. – с. 052203.
28. Chetverikov A. P. Nonlinear soliton-like excitations in two-dimensional lattices and charge transport / A. P. Chetverikov, W. Ebeling, M. G. Velarde // *Eur. Phys. J.: Special Topics*. – 2013. – т. 222. – с. 2531.
29. Hema P. Quasi discreteness analysis of a two dimensional ferromagnetic spin system / P. Hema, M. M. Latha // *Chinese Journal of Physics*. – 2023. – т. 82. – с. 75-88.
30. Bajars J. Two-dimensional mobile breather scattering in a hexagonal crystal lattice. / J. Bajars, C. Eilbeck, B. J. Leimkuhler // *Physical review E*. – 2021. – т. 103, № 2-1. – с. 022212.
31. McGurn A. R. Transmission through Kerr media barriers within waveguides: Device applications / A. R. McGurn. – 2011.
32. Bebikhov Y.V., Naumov E.K., Semenova M.N., Dmitriev S.V. Discrete breathers in a  $\beta$ -FPUT square lattice from in-band external driving // *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*. – 2024. – Т. 132. – С. 107897.
33. Бебихов Ю.В., Семенова М.Н., Рябов Д.С., Ксион Д. О возможности существования дискретных бризеров различных типов в ОЦК решетке с дальнодействием // *Materials. Technologies. Design*. – 2024. – т. 6. – № 4. – с. 41.
34. Семёнова М.Н., Бебихов Ю.В., Якушев И.А., Семёнов А.С. Разработка программы для выбора потенциала взаимодействия частиц в кристаллической решетке металлов // *Materials. Technologies. Design*. – 2024. – т. 6. – с. 99.
35. Семёнова М.Н., Бебихов Ю.В., Наумов Е.К., Дмитриев С.В. Моделирование стационарных и осциллирующих дискретных бризеров в биатомном кристалле типа CsCl // *Вестник Северо-Восточного федерального университета им. М.К. Аммосова*. – 2025. – Т. 22. – № 4 (102). – С. 67-78.
36. Бебихов Ю.В., Семёнова М.Н., Абдуллина Д.У., Наумов Е.К., Дмитриев С.В. Дискретные бризеры в трехмерной решетке с потенциалом Ферми-Паста-Улама-Цингоу // *Вестник Северо-Восточного федерального университета им. М.К. Аммосова*. – 2024. – Т. 21. – № 3. – С. 39-49.

### Информация об авторах

*Д.М. Наумова* – аспирант Института физики молекул и кристаллов Уфимского федерального исследовательского центра РАН, младший научный сотрудник Института физики молекул и кристаллов Уфимского федерального исследовательского центра РАН

*Е.К. Наумов* – кандидат физико-математических наук, младший научный сотрудник Института физики молекул и кристаллов Уфимского федерального исследовательского центра РАН

*Д.С. Холмуродов* – кандидат педагогических наук, преподаватель кафедры Технологического образования Каршинского государственного университета

*С.В. Дмитриев* – доктор физико-математических наук, профессор, научный сотрудник Института математики с вычислительным центром Уфимского федерального исследовательского центра РАН



## References

1. Dolgov A. S. On localization of oscillations in nonlinear crystal structure / A. S. Dolgov // *Sov. Phys. Solid State*. – 1986. – vol. 28. – p. 907.
2. Sievers A. J. Intrinsic localized modes in anharmonic crystals / A. J. Sievers, S. Takeno // *Physical Review Letters*. – 1988. – vol. 61, № 8. – p. 970-973.
3. Flach S. Discrete breathers - Advances in theory and applications / S. Flach, A. V. Gorbach // *Physics Reports*. – 2008. – vol. 467, № 1. – p. 1-116.
4. Discrete breathers in crystals / S. V. Dmitriev, E. A. Korznikova, J. A. Baimova, M. G. Velarde // *Physics–Uspekhi*. – 2016. – vol. 59, № 5. – p. 446-461.
5. Page J. B. Asymptotic solutions for localized vibrational modes in strongly anharmonic periodic systems / J. B. Page // *Phys. Rev. B*. – 1990. – vol. 41, no. 11. – p. 7835-7838.
6. Flach S. Discrete breathers / S. Flach, C. R. Willis // *Physics Reports*. – 1998. – vol. 295, № 5. – p. 181-264.
7. Dubinko V. I. Reaction-rate theory with account of the crystal anharmonicity / V. I. Dubinko, P. A. Selyshchev, J. F. Archilla // *Phys. Rev. E*. – 2011. – vol. 83. – p. 041124.
8. Kistanov A. A. Properties of moving discrete breathers in a monoatomic two-dimensional crystal / A. A. Kistanov, A. S. Semenov, S. V. Dmitriev // *Journal of Experimental and Theoretical Physics*. — 2014. – vol. 119, № 4. – p. 766-771.
9. Moving discrete breathers in bcc metals V, Fe and W / R. T. Murzaev, A. A. Kistanov, V. I. Dubinko, D. A. Terentyev, S. V. Dmitriev // *Comp. Mater. Sci*. – 2015. – vol. 98. – p. 88.
10. Marin J. L. Localized moving breathers in a 2D hexagonal lattice / J. L. Marin, J. C. Eilbeck, F. M. Russell // *Phys. Lett. A*. – 1998. – vol. 248, № 2-4. – p. 225-229.
11. Properties of moving discrete breathers in beryllium / O. V. Bachurina, R. T. Murzaev, A. S. Semenov, E. A. Korznikova, S. V. Dmitriev // *Phys. Solid State*. – 2018. – vol. 60. – p. 989.
12. Kistanov A.A., Semenov A.S., Dmitriev S.V. On Setting Initial Conditions for Simulating Moving Discrete Breathers in a Two-Dimensional Monatomic Crystal // *Fundamental Problems of Modern Materials Science*. – 2014. – Vol. 11. – No. 2. – Pp. 223-227.
13. Kistanov A.A., Semenov A.S. Collision of Moving Discrete Breathers in a Two-Dimensional Monatomic Crystal // *Fundamental Problems of Modern Materials Science*. – 2014. – Vol. 11. – No. 2. – Pp. 241-244.
14. Kistanov A.A., Semenov A.S., Murzaev R.T., Dmitriev S.V. Stationary and moving discrete breathers in hcp Co metal // *Fundamental problems of modern materials science*. – 2014. – Vol. 11. – No. 3. – Pp. 322-325.
15. Kistanov A.A., Semenov A.S., Murzaev R.T., Dmitriev S.V. Interaction of moving discrete breathers in hcp Mg metal // *Fundamental problems of modern materials science*. – 2014. – Vol. 11. – No. 4-2. – Pp. 572-577.
16. Semenov A.S., Korznikova E.A., Dmitriev S.V. Discrete breathers with hard and soft types of nonlinearity in a one-dimensional chain with long-range Morse interaction // *Letters on materials*. – 2015. – Vol. 5. – No. 1 (17). – Pp. 11-14.
17. Semenova M.N., Semenov A.S., Bebikhov Yu.V., Ryabov D.S., Chechin G.M., Rakhmatullina Zh.G., Korznikova E.A., Dmitriev S.V. Some characteristics of one-dimensional delocalized nonlinear vibrational modes of a triangular lattice with Morse interaction // *Fundamental problems of modern materials science*. – 2018. – Vol. 15. – No. 2. – Pp. 257-264.
18. Semenov A.S., Bebikhov Yu.V., Kistanov A.A. Simulation of energy transport in a crystal with NaCl structure assisted by discrete breathers // *Letters on Materials*. – 2017. – Vol. 7. – No. 2 (26). – Pp. 77-80.
19. Semenov A.S., Fomin S.Yu., Zhou K., Soboleva E.G. Discrete breather with hard nonlinearity in a two-dimensional biatomic crystal // *Letters on materials*. – 2017. – Vol. 7. – No. 3 (27). – Pp. 327-331.
20. Semenov A.S., Murzaev R.T., Kistanov A.A., Bebikhov Yu.V. Study of discrete breathers in hcp metals beryllium and zirconium // *Fundamental problems of modern materials science*. – 2015. – Vol. 12. – No. 1. – Pp. 26-30.
21. Long range annealing of defects in germanium by low energy plasma ions / J. F. Archilla, S. M. Coelho, F. D. Aurret, V. I. Dubinko, V. Hizhnyakov // *Physica D*. – 2015. – vol. 297. – p. 56.
22. Interaction of propagating discrete breathers with a vacancy in a twodimensional crystal / A. A. Kistanov, S. V. Dmitriev, A. S. Semenov, V. I. Dubinko, D. A. Terentev // *Technical Physics Letters*. – 2014. – vol. 40, № 8. – p. 657-661.
23. Interaction of discrete breathers with primary lattice defects in bcc Fe / D. A. Terentyev, A. V. Dubinko, V. I. Dubinko, S. V. Dmitriev, E. E. Zhurkin, M. V. Sorokin // *Model. Simul. Mater. Sc.* – 2015. – vol. 23, № 2. – p. 085007.

24. Surface discrete breathers in Pt3Al inter-metallic alloy / P. V. Zakharov, E. A. Korznikova, S. V. Dmitriev, E. G. Ekomasov, K. Zhou // *Surf. Sci.* – 2019. – vol. 679, № 2. – p. 1.
25. Velarde M. G. Thermal solitons and solec-trons in 1D anharmonic lattices up to physiological temperature / M. G. Velarde, W. Ebeling, A. P. Chetverikov // *Int. J. Bifurc. Chaos.* – 2008. – vol. 18. – p. 3815.
26. Velarde M. G. From polaron to solelectron: The addition of nonlinear elasticity to quantum mechanics and its possible effect upon electric transport / M. G. Velarde // *J. Comput. Appl. Math.* – 2010. – vol. 233. – p. 1432.
27. Discrete-breather-assisted charge transport along DNA-like molecular wires / A. P. Chetverikov, W. Ebeling, V. D. Lakhno, M. G. Velarde // *Phys. Rev. E.* – 2019. – vol. 100. – p. 052203.
28. Chetverikov A. P. Nonlinear soliton-like excitations in two-dimensional lattices and charge transport / A. P. Chetverikov, W. Ebeling, M. G. Velarde // *Eur. Phys. J.: Special Topics.* – 2013. – vol. 222. – p. 2531.
29. Hema P. Quasi discreteness analysis of a two dimensional ferromagnetic spin system / P. Hema, M. M. Latha // *Chinese Journal of Physics.* – 2023. – vol. 82. – p. 75-88.
30. Bajars J. Two-dimensional mobile breather scattering in a hexagonal crystal lattice. / J. Bajars, C. Eilbeck, B. J. Leimkuhler // *Phys. Rev. E.* – 2021. – vol. 103, no. 2-1. – p. 022212.
31. McGurn A. R. Transmission through Kerr media barriers within waveguides: Device applications / A. R. McGurn. – 2011.
32. Bebikhov Y.V., Naumov E.K., Semenova M.N., Dmitriev S.V. Discrete breathers in a  $\beta$ -FPUT square lattice from in-band external driving // *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation.* – 2024. – vol. 132. – p. 107897.
33. Bebikhov Yu.V., Semenova M.N., Ryabov D.S., Ksion D. On the Possibility of Existence of Discrete Breathers of Various Types in a Long-Action BCC Lattice // *Materials. Technologies. Design.* – 2024. – Vol. 6. – No. 4. – Pp. 41.
34. Semenova M.N., Bebikhov Yu.V., Yakushev I.A., Semenov A.S. Development of a Program for Selecting the Interaction Potential of Particles in the Crystal Lattice of Metals // *Materials. Technologies. Design.* – 2024. – Vol. 6. – Pp. 99.
35. Semenova M.N., Bebikhov Yu.V., Naumov E.K., Dmitriev S.V. Modeling of stationary and oscillating discrete breathers in a biatomic crystal of the CsCl type // *Bulletin of the North-Eastern Federal University M.K. Ammosova.* – 2025. – T. 22. – No. 4 (102). – Pp. 67-78.
36. Bebikhov Yu.V., Semyonova M.N., Abdullina D.U., Naumov E.K., Dmitriev S.V. Discrete breathers in a three-dimensional lattice with the Fermi-Pasta-Ulama-Tsingou potential // *Bulletin of the North-Eastern Federal University M.K. Ammosova.* – 2024. – T. 21. – No. 3. – Pp. 39-49.

#### Information about the authors

*D.M. Naumova is a graduate student at the Institute of Molecule and Crystal Physics, Ufa Federal Research Center, Russian Academy of Sciences, and a junior researcher at the Institute of Molecule and Crystal Physics, Ufa Federal Research Center, Russian Academy of Sciences.*

*E.K. Naumov is a Candidate of physical and mathematical sciences, a junior researcher at the Institute of Molecule and Crystal Physics, Ufa Federal Research Center, Russian Academy of Sciences.*

*D.S. Kholmurodov – PhD in Pedagogical Sciences, Lecturer at the Department of Technological Education at Karshi State University*

*S.V. Dmitriev is a Doctor of physical and mathematical sciences, Professor, Research Fellow at the Institute of Mathematics with a Computing Center of the Ufa Federal Research Center of the Russian Academy of Sciences*

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.  
The authors declare that there is no conflict of interest.

Статья поступила в редакцию 15.12.2025; одобрена после рецензирования 23.02.2026; принята к публикации 02.03.2026

The article was received by the editorial board on 15 Dec. 2025; approved after reviewing 23 Feb. 2026; accepted for publication 02 Mar. 2026.

Научный обзор

1.3.8. Физика конденсированного состояния (физико-математические науки)

УДК 620.22

doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2026.01.012

## ОБЗОР ТЕХНОЛОГИЙ И ПЕРВЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ В ОБЛАСТИ ЭЛЕКТРОИМПУЛЬСНОЙ ОБРАБОТКИ МЕТАЛЛОВ И СПЛАВОВ НА ОСНОВЕ ЭФФЕКТА ЭЛЕКТРОПЛАСТИЧНОСТИ

Мария Николаевна Семёнова<sup>1†</sup>, Юрий Владимирович Бебихов<sup>2</sup>,  
Владимир Павлович Татаринов<sup>3</sup>, Павел Семенович Татаринов<sup>4</sup>,  
Илья Анатольевич Якушев<sup>5</sup>, Дина Ураловна Абдуллина<sup>6</sup>, Александр Сергеевич Семёнов<sup>7</sup>,  
Сергей Владимирович Дмитриев<sup>8</sup>

<sup>1,2,3,4,5</sup> Политехнический институт (филиал) ФГАОУ ВО «Северо-Восточный федеральный университет им. М.К. Аммосова» в г. Мирном, ул. Ойунского, д. 14, 678170, Мирный, Россия

<sup>6,7,8</sup> Институт физики молекул и кристаллов ФГБУН «Уфимский федеральный исследовательский центр РАН», пр. Октября, д. 71, 450054, Уфа, Россия

<sup>7</sup> Западно-Якутский научный центр Академии наук Республики Саха (Якутия), ул. Тихонова, д. 5, корп. 1, 678170, Мирный, Россия

<sup>8</sup> ФГБОУ ВО «Уфимский государственный нефтяной технический университет», ул. Космонавтов, д. 1, 450062, Уфа, Россия

<sup>†</sup> mariya\_semyonova86@mail.ru<sup>†</sup>, <https://orcid.org/0000-0002-7298-0226>

<sup>2</sup> bebikhov.yura@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-8366-4819>

<sup>3</sup> vovatatarinov@bk.ru, <https://orcid.org/0009-0002-0074-677X>

<sup>4</sup> paveltatarinov@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-7430-8591>

<sup>5</sup> yakushevilya@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-2539-7334>

<sup>6</sup> abdullina.dina-u@net.ugatu.su, <https://orcid.org/0000-0001-6196-6093>

<sup>7</sup> sash-alex@yandex.ru, <https://orcid.org/0000-0001-9940-3915>

<sup>8</sup> dmitriev.sergey.v@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-6744-4445>

**Аннотация.** Электропластичность – это повышение деформируемости металла при снижении действующих напряжений во время пропускания через него импульсного электрического тока. Это явление, открытое ещё в 1969 году советским учёным Олегом Троицким, позволяет снизить энергозатраты по сравнению с традиционными методами горячей деформации, так как электрический ток оказывает локальное воздействие именно в зоне деформации, не вызывая значительного нагрева всего объёма образца. Электроимпульсная обработка металлов и сплавов, основанная на электропластическом эффекте, нашла широкое применение в разных отраслях промышленности. Электропластический эффект чаще всего объясняется совместным воздействием тепловых и атермических эффектов, а также воздействием магнитного поля. Целью данного обзора был анализ работ по открытию и изучению электропластического эффекта, объяснению и приведению примеров электроимпульсной обработки металлов и сплавов, рассмотрению областей применения, таких как заклеивание трещин контактным и бесконтактным способами, растворение включений и модификация структуры, а также описание первых работ и начинаний авторского коллектива в области физических основ энергосберегающей технологии формоизменения металлов на основе эффекта электропластичности. Были рассмотрены первые полученные результаты, связанные с исследованиями прироста деформации растяжения для меди и алюминия при повторяющихся импульсах тока. Представлены программы для ЭВМ и патенты на изобретение в области автоматизации работы лабораторной установки для исследования эффекта электропластичности. Показаны результаты экспериментальных исследований влияния импульсов электрического тока на эффект пружинения пластин из титанового сплава. Апробированы подходы к определению параметров самовосстановления усталостных трещин с помощью электрического импульса. Произведено моделирование процесса разряда конденсаторной батареи через образец в виде медной проволоки. Также показаны перспективы продолжения исследований в области бесконтактной электроимпульсной обработки металлов и сплавов и улучшения их коррозионных свойств.

**Ключевые слова:** электропластический эффект, электроимпульсная обработка, деформация, микроструктура, дефекты, трещины, коррозия, импульсный ток, металлы, сплавы, компьютерное моделирование.

**Благодарности:** Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-22-00690, <https://rscf.ru/project/25-22-00690/>

**Для цитирования:** Семёнова М.Н., Бебихов Ю.В., Татаринов В.П., Татаринов П.С., Якушев И.А., Абдуллина Д.У., Семёнов А.С., Дмитриев С.В. Обзор технологий и первых результатов в области электроимпульсной обработки металлов и сплавов на основе эффекта электропластичности // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. 2026. Т. 23. № 1. С. 106-123. doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2026.01.012.

Review article

## REVIEW OF TECHNOLOGY AND FIRST RESULTS IN THE FIELD OF ELECTROPULSED TREATMENT OF METALS AND ALLOYS BASED ON THE ELECTROPLASTICITY EFFECT

Maria N. Semenova<sup>1†</sup>, Yuri V. Bebikhov<sup>2</sup>, Vladimir P. Tatarinov<sup>3</sup>, Pavel S. Tatarinov<sup>4</sup>,  
Ilya A. Yakushev<sup>5</sup>, Dina U. Abdullina<sup>6</sup>, Alexander S. Semenov<sup>7</sup>, Sergey V. Dmitriev<sup>8</sup>

<sup>1,2,3,4,5</sup> Polytechnic Institute (branch) in Mirny, Ammosov North-Eastern Federal University, Oyunskego str., 14, 678170, Mirny, Russia

<sup>6,7,8</sup> Institute of Molecule and Crystal Physic, Ufa Federal Research Center of the Russian Academy of Sciences, Oktyabrskaya Ave., 71, 450054, Ufa, Russia

<sup>7</sup> Western Yakut Scientific Center, Academy of Sciences of the Republic of Sakha (Yakutia), Tikhonova str., 5/1, 678170, Mirny, Russia

<sup>8</sup> Ufa State Petroleum Technological University, Kosmonavtov str., 1, 450062, Ufa, Russia

<sup>†</sup> mariya\_semyonova86@mail.ru<sup>†</sup>, <https://orcid.org/0000-0002-7298-0226>

<sup>2</sup> bebikhov.yura@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-8366-4819>

<sup>3</sup> vovatatarnov@bk.ru, <https://orcid.org/0009-0002-0074-677X>

<sup>4</sup> paveltatarinov@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-7430-8591>

<sup>5</sup> yakushevilya@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-2539-7334>

<sup>6</sup> abdullina.dina-u@net.ugatu.su, <https://orcid.org/0000-0001-6196-6093>

<sup>7</sup> sash-alex@yandex.ru, <https://orcid.org/0000-0001-9940-3915>

<sup>8</sup> dmitriev.sergey.v@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-6744-4445>

**Abstract.** Electroplasticity is an increase in the deformability of a metal with a reduction in the applied stresses during the passage of a pulsed electric current. This phenomenon, discovered in 1969 by Soviet scientist Oleg Troitsky, reduces energy consumption compared to traditional hot deformation methods, as the electric current exerts a localized effect precisely in the deformation zone, without causing significant heating of the entire sample. Electric pulse machining of metals and alloys, based on the electroplastic effect, has found wide application in various industries. The electroplastic effect is most often explained by the combined effects of thermal and athermal effects, as well as the influence of a magnetic field. The purpose of this review was to analyze works on the discovery and study of the electroplastic effect, explain and provide examples of electropulse processing of metals and alloys, consider areas of application such as contact and contactless crack healing, inclusion dissolution, and structural modification, as well as describe the initial work and initiatives of the authors' team in the field of the physical foundations of energy-saving technology for metal forming based on the electroplasticity effect. The first results obtained related to studies of the increment of tensile strain for copper and aluminum under repeated current pulses were considered. Computer programs and patents for inventions in the field of automation of a laboratory setup for studying the electroplasticity effect are presented. The results of experimental studies of the effect of electric current pulses on the springback effect of titanium alloy plates are presented. Approaches to determining the parameters of self-healing of fatigue cracks using an electric pulse are tested. The process of discharging a capacitor bank through a copper wire sample is simulated. Prospects for continued research in the field of contactless electropulse machining of metals and alloys and improving their corrosion properties are also highlighted.

**Keywords:** electroplastic effect, electropulse treatment, deformation, microstructure, defects, cracks, corrosion, pulsed current, metals, alloys, computer modeling.

**Acknowledgements:** The study was supported by the Russian Science Foundation grant No. 25-22-00690, <https://rscf.ru/en/project/25-22-00690/>

**For citation:** Semenova M.N., Bebikhov Yu.V., Tatarinov V.P., Tatarinov P.S., Yakushev I.A., Abdullina D.U., Semenov A.S., Dmitriev S.V. (2026). Review of technology and first results in the field of electropulsed treatment of metals and alloys based on the electroplasticity effect. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 23(1), 106-123. (In Russ.). doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2026.01.012.

## Введение

Физические основы энергосберегающей технологии формоизменения металлов на основе эффекта электропластичности (электропластической деформации) заключаются в снижении сопротивления металла пластической деформации под действием электрического тока. Это явление, открытое ещё в 1969 году советским учёным Олегом Троицким, позволяет снизить энергозатраты по сравнению с традиционными методами горячей деформации, так как электрический ток оказывает локальное воздействие именно в зоне деформации, не вызывая значительного нагрева всего объёма заготовки [1-3].

Эффект электропластичности обусловлен несколькими факторами: локальный нагрев металла в местах скопления дефектов кристаллической решётки, что облегчает их движение и перестройку; направленное движение электронов («электронный ветер»), которое оказывает дополнительное воздействие на дислокации в металле; электромагнитные силы, возникающие при прохождении тока, способствуют перемещению атомов в кристаллической решётке. В результате металл становится более пластичным и менее хрупким, что позволяет снизить усилия деформации на 20÷40%, что даёт возможность использовать менее мощное оборудование и повышает стойкость инструмента [4-6].

Для реализации эффекта электропластичности при обработке металлов давлением должны выполняться следующие условия: заготовка должна находиться под механическими напряжениями выше предела текучести; импульсный ток низкого напряжения (20÷25 В) и высокой плотности должен подаваться непосредственно в зону деформации; форма импульсов должна быть прямоугольная или трапециевидная; длительность импульсов составлять примерно  $10^{-4}$  с, чтобы не возникал значительный сопутствующий нагрев; амплитудная плотность тока должна быть достаточно большая (не менее  $10^5 \div 10^6$  А/см<sup>2</sup>); частота импульсов тока должна составлять, как правило,  $10^2 \div 10^3$  Гц, чтобы все участки быстро движущейся сквозь зону деформации заготовки успевали подвергаться действию тока [7-9].

Технология электропластической деформации применяется в различных областях промышленности: в металлургии – для улучшения пластичности труднодеформируемых сплавов при прокатке, волочении, прессовании; в ма-

шиностроении – для изготовления деталей сложной формы, особенно из высокопрочных материалов; при видах обработки металлов и сплавов, которые связаны с удалением части материала заготовки, например, при резке, проточке, фрезеровании, сверлении; при выполнении технологических операций для неразъёмного и разъёмного соединения нескольких деталей из одинакового или различных материалов [10, 11].

Энергоэффективность процесса электропластической деформации обусловлена тем, что электрический ток оказывает локальное воздействие именно в зоне деформации, что позволяет снизить энергозатраты на 30÷50% по сравнению с традиционными методами горячей деформации [12].

## 1. Открытие и изучение электропластического эффекта

Электропластичность – это повышение деформируемости металла при снижении действующих напряжений во время пропускания через него импульсного электрического тока. Электропластический эффект (ЭЭ) в металлах был открыт Троицким О.А. в 1969 году при воздействии одиночных импульсов тока плотности  $10^3$  А/мм<sup>2</sup> и длительностью  $10^{-4}$  секунд во время деформации растяжения и сжатия кристалла цинка [13].

На графике (рис. 1) в виде первичной диаграммы растяжения показаны первые результаты экспериментальных исследований Троицкого. Видно, что после упругой области наблюдаются скачки деформации, возрастающие по своей величине с ростом напряжения на клеммах разрядного устройства.

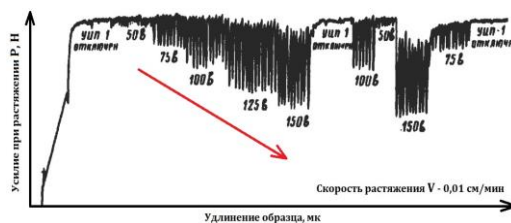


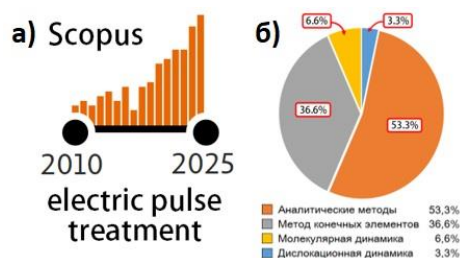
Рис. 1. Диаграмма растяжения монокристаллов цинка (взято из [13])

Fig. 1. Stress-strain diagram of zinc single crystals (taken from [13])

Величина таких деформационных скачков свидетельствует о значительном приращении пластической деформации в момент прохождения импульса тока.

Существуют две гипотезы, пытающиеся объяснить ЭЭ: теория электронного ветра; эффект неоднородного выделения джоулева тепла.

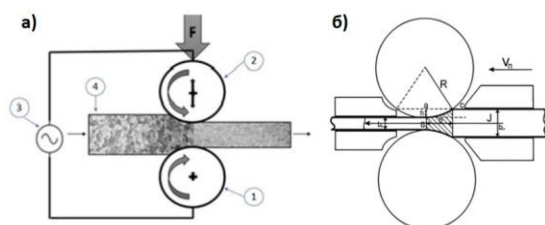
На левой диаграмме (рис. 2, а) виден рост числа публикаций в МБД Scopus по электропластичности за последние годы [14]. Это говорит о повышении интереса к данной теме. На соседней диаграмме (рис. 2, б) показано распределение частоты использования различных методов исследования ЭЭ.



**Рис. 2.** Анализ публикаций по электропластичности в МБД Scopus

**Fig. 2.** Analysis of publications on electroplasticity in the Scopus

ЭЭ наиболее эффективен в среднем и мелком металлургическом переделе, поскольку быстропеременный ток выталкивается на поверхность металла (скин-эффект). Его применение рекомендовано для таких технологических процессов, как волочение, прокатка, штамповка и др., где толщина обрабатываемого металла невелика [15]. На рисунке 3 показаны схемы подвода тока при прокатке [16].

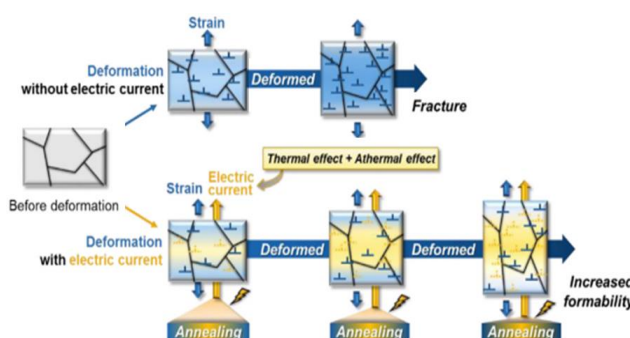


**Рис. 3.** Схема подвода тока при прокатке: (а) от валика 1 к валику 2, (б) скользящие контакты (взято из [16])

**Fig. 3.** The current supply scheme for rolling: (a) from roll 1 to roll 2, (b) sliding contacts (taken from [16])

## 2. Объяснение и примеры электроимпульсной обработки

На структурной схеме (рис. 4) наглядно показана деформация без протекания электрического тока и с ним. Сверху наблюдается увеличение внутреннего напряжения, деформация и разрушение. Снизу же наблюдаем термический и атермический эффект, деформацию при серии импульсов и увеличение формоустойчивости [17].

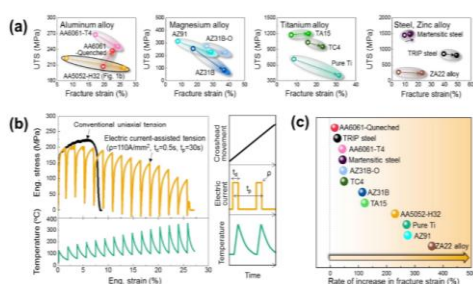


**Рис. 4.** Схематическое изображение электропластичности, показывающее, как электрический ток влияет на микроструктуру и механическое поведение во время пластической деформации (взято из [17])

**Fig. 4.** Schematic illustration of electroplasticity, indicating how electric current affects the microstructure and mechanical behavior during plastic deformation (taken from [17])

На рисунке 5 (а) показаны графические зависимости предела прочности на растяжение от деформации для различных сплавов: алюминиевых, магниевых, титановых и чистого титана, стальных и цинкового. После электроимпульсной обработки (ЭИО), параметры которой показаны на рисунке 5 (б), на рисунке 5 (с) наблюдается увеличение деформации до разрушения практически для всех образцов.





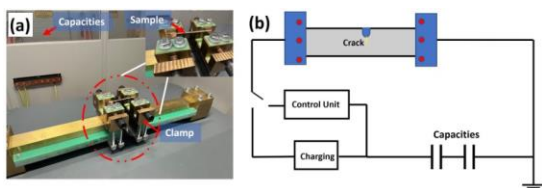
**Рис. 5.** (а) Сравнение деформации при разрушении и предела прочности при растяжении; (б) Инженерные кривые напряжение-деформация и выбранные электрические условия (плотность электрического тока = 110 А/мм²); (с) Скорость увеличения деформации при разрушении при приложении электрического тока в одноосном испытании на растяжение (взято из [17])

**Fig. 5.** (a) Comparison of fracture strain and ultimate tensile strength, (b) Engineering stress-strain curves and selective electrical condition (electric current density = 110 A/mm²), (c) Rate of increase in fracture stain by applying electric current in uniaxial tensile test (taken from [17])

### 3. Области применения

#### 3.1. Залечивание трещин контактным и бесконтактным способами

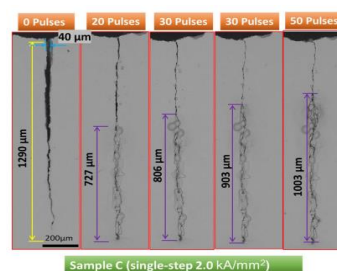
В работе [18] показаны результаты залечивания трещин контактным подведением тока. На рисунке 6 показана установка для электроимпульсной обработки (а) и её принципиальная схема (б).



**Рис. 6.** Установка для электроимпульсной обработки контактным способом (а) и её принципиальная схема (б) (взято из [18])

**Fig. 6.** Installation for electric pulse processing by contact method (a) and its basic diagram (b) (taken from [18])

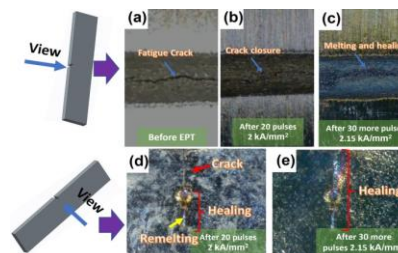
На рисунке 7 представлены изображения, полученные с помощью сканирующего электронного микроскопа (СЭМ), показывающие изменения характеристик усталостной трещины до и после ЭИО в зависимости от количества импульсов при средних плотностях тока.



**Рис. 7.** Изображения СЭМ в режиме обратного рассеяния, показывающие изменения характеристик усталостных трещин до и после ЭИО в зависимости от количества импульсов при средних плотностях тока (взято из [18])

**Fig. 7.** SEM-backscattered images showing the changes in fatigue crack characteristics before and after EPT as a function of the number of pulses at medium current densities (taken from [18])

На рисунке 8 приведены изображения, полученные с помощью цифрового микроскопа, показывающие усталостную трещину, рассматриваемую с двух сторон надреза в образце.

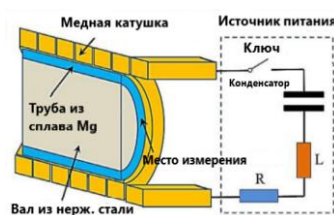


**Рис. 8.** Изображения, полученные с помощью цифрового микроскопа, показывающие усталостную трещину, рассматриваемую с двух сторон надреза в образце: (а) до ЭПТ (б, д) после 20 импульсов с плотностью тока 2 кА/мм² (с, е) после еще 30 импульсов с плотностью тока 2,15 кА/мм² (взято из [18])

**Fig. 8.** Images taken by digital microscope showing the fatigue crack viewing from both sides of the notch in sample: (a) before EPT (b, d) after 20 pulses with a current density of 2 kA/mm² (c, e) after 30 more pulses with a current density 2.15 kA/mm² (taken from [18])

В работах [19, 20] показаны результаты залечивания трещин токами Фуко (бесконтактным способом). Механизм залечивания заключается в концентрации тока в вершине трещины. На рисунке 9 показана схема ЭИО, где трубчатые образцы были закреплены на валу из нержавеющей стали внутри медной катушки.

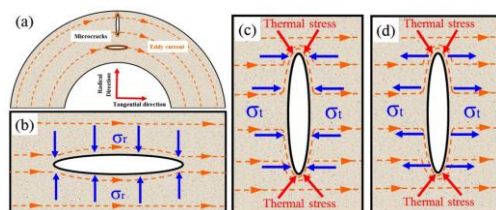




**Рис. 9.** Схема ЭИО при заживлении трещин бесконтактным способом (взято из [19])

**Fig. 9.** Scheme of EPT for healing cracks using a contactless method (taken from [19])

На рисунке 10 (а) показаны две микротрещины: одна радиальная, другая тангенциальная, расположенные на поперечном сечении. На рисунке 10 (b) видно распределение напряжений вокруг тангенциальной микротрещины, а на (c) и (d) распределение напряжений вокруг радиальной микротрещины в схеме внутреннего и внешнего воздействия.

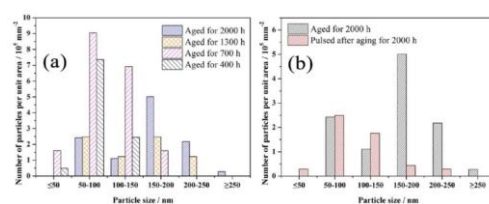


**Рис. 10.** (а) Радиальные и тангенциальные микротрещины на поперечном сечении; (b) Распределение напряжений вокруг тангенциальной микротрещины; (c, d) Распределение напряжений вокруг радиальной микротрещины в схеме внутреннего и внешнего воздействия (взято из [20])

**Fig. 10.** (a) Radial and tangential microcracks on the cross section; (b) Stress distribution around the tangential microcrack; (c, d) Stress distribution around the radial microcrack in the scheme of internal and external influences (taken from [20])

### 3.2. Растворение включений и модификация структуры

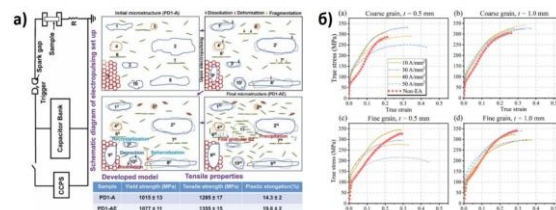
В работе [21] (рис. 11) показаны результаты ЭИО для растворения включений в твердом растворе. Как испытания на погружение, так и электрохимические испытания показали положительный сдвиг потенциала коррозии и снижение плотности тока коррозии, вызванные электроимпульсной обработкой, а также улучшение коррозионной стойкости.



**Рис. 11.** Распределение количества и размеров осадков при различных условиях обработки: (а) термическая обработка с различной продолжительностью и (б) электроимпульсная обработка (взято из [21])

**Fig. 11.** Number and size distributions of precipitates under different treatment conditions: (a) aging treatment with different durations and (b) electropulsing treatment (taken from [21])

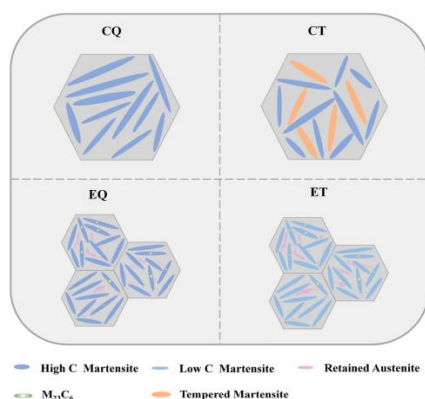
В работе [22] (рис. 12, а) показаны результаты ЭИО дуплексной стали для её упрочнения и улучшения пластичности, что можно наблюдать на кривых напряжения-деформации (рис. 12, б). При испытаниях на растяжение фольги AZ31 получены различные размеры и толщина зерна.



**Рис. 12.** а) Схема установки для электроимпульсной обработки и физическая модель различных микроструктур; б) Кривые напряжение-деформация (взято из [22])

**Fig. 12.** а) Schematic of the electropulsing setup and Physical model of different microstructures; б) Stress-strain curves (taken from [22])

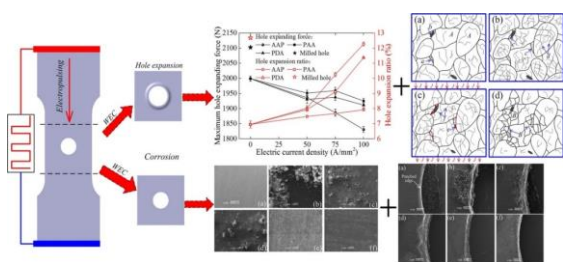
В работе [23] (рис. 13) произведено индуцирование образования остаточного аустенита после электроимпульсной обработки для улучшения свойств AISI 420 стали, а именно нержавеющая сталь AISI 420 со сверхвысокой прочностью (1720 МПа) и удлинением 7,9 % была получена методом электроимпульсного закалывания. После электроимпульсного закалывания с последующим отпуском объемная доля аустенита увеличилась с 4,4 % до 11,8 %.



**Рис. 13.** Схематическое изображение эволюции микроструктур при различных видах термической обработки (взято из [23])

**Fig. 13.** Schematic diagram of the evolution of different heat treatment microstructures (taken from [23])

В работе [24] (рис. 14) применена электроимпульсная обработка для улучшения коррозионных свойств алюминиевого сплава 2024Т4. Экспериментальные результаты показали, что улучшение растяжимости кромок зависит от способа применения электроимпульсной обработки и плотности электрического тока. Установлено, что коррозионная стойкость штампованных деталей после обработки электроимпульсами повышается, причем степень улучшения коррозионной стойкости становится более заметной с увеличением времени обработки электроимпульсами.



**Рис. 14.** Схема процесса подготовки и процесса коррозионного погружения штампованной детали, влияние режимов применения электроимпульсного воздействия и ЭДС на максимальную силу расширения отверстия (взято из [24])

**Fig. 14.** The schematic diagram of preparation process and immersion corrosion process of punched part, effect of patterns of applying electropulsing and ECDs on the maximum hole expanding force (taken from [24])

Таким образом, было отмечено, что применение электроимпульсной обработки металлов

и сплавов является весьма перспективным научным направлением для дальнейшего более детального изучения, в результате чего начаты собственные исследования коллективом авторов.

#### 4. Обзор первых полученных результатов

Целью первых исследований являлось экспериментальное изучение влияния импульсного тока высокой плотности различной длительности на деформацию медных и алюминиевых проволочных образцов для последующей разработки теоретического фундамента электростимулированной обработки металлов давлением. Основными задачи стали: определение нагрева образцов в зависимости от заряда конденсатора; экспериментальное изучение эффекта электропластичности на медных и алюминиевых проводах, растягиваемых мертвым грузом; анализ влияния повторяющихся импульсов при заданном растягивающем напряжении. Первой совместной работой стало написание обзорной статьи [25].

Предпосылками для научного сотрудничества в области изучения электропластического эффекта между ИФМК УФИЦ РАН и МПТИ (ф) СВФУ послужило наличие опыта и компетенций в области разработки силовых частей различных лабораторных установок, т.к. на кафедре «Электроэнергетики и автоматизации промышленного производства» МПТИ (ф) СВФУ в 2020-2022 годах велись работы по изучению шаровой молнии, а точнее её лабораторного аналога – гатчинского разряда [26-29]. В последствии между институтами было подписано соглашение о сотрудничестве.

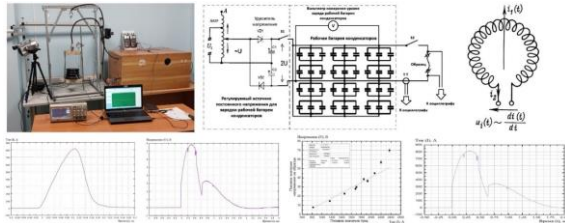


**Рис. 15.** Результаты изучения лабораторного аналога шаровой молнии (взято из [26, 28])

**Fig. 15.** Results of a study of a laboratory analogue of ball lightning (taken from [26, 28])

Первые работы, связанные с электропластичностью, на кафедре ЭиАПП МПТИ (ф) СВФУ начались со сбора лабораторной установки. Первые эксперименты относились к

изучению электрических параметров [30], а именно влиянию величины и длительности импульса тока, величины напряжения и электроёмкости, численного и компьютерного моделирования (рис. 16).

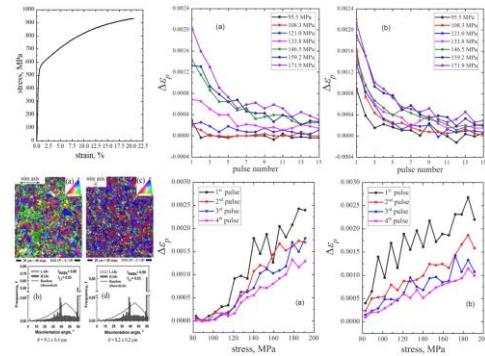


**Рис. 16.** Первая установка для изучения электропластичности и её силовая схема, а также результаты измерения тока большой величины с помощью пояса Роговского (взято из [30])

**Fig. 16.** The first setup for studying electroplasticity and its power circuit, as well as the results of measuring high current using a Rogowski coil (taken from [30])

Первыми результатами [31] стали измерения мгновенной деформации образцов из медной проволоки диаметром 1 и 2 мм в состоянии поставки и после отжига. Измерения проводились для различной скорости деформации на стадии установившейся ползучести и для различных значений напряжения на конденсаторной батарее. Образец имел длину 400 мм, испытания проходили при комнатной температуре. Во всех случаях нагрев образцов за счёт прохождения импульса тока был незначительным и не превышал 40°C. В результате исследований было отмечено близкое к линейному увеличение удлинения с ростом напряжения на конденсаторе, а также с некоторым ускорением данной зависимости для больших напряжений (140 и 160 В). Увеличение скорости деформации ползучести с  $\varepsilon=10^{-5}$  до  $\varepsilon=5 \cdot 10^{-5} \text{ с}^{-1}$  привело примерно к четырехкратному увеличению скачка деформации, вызванного импульсом тока.

В работе [32, 33] нами использовалась медь М1, имеющая предел текучести 125 МПа. На рисунке 17 (слева сверху) показана диаграмма растяжения медной проволоки. Длина образцов составляла 350 мм. Микроструктура медной проволоки показана в левой нижней части рисунка 17, где (а) и (с) карты распределения ориентации зерен, (b) и (d) распределение границ зерен в зависимости от угла разориентации.

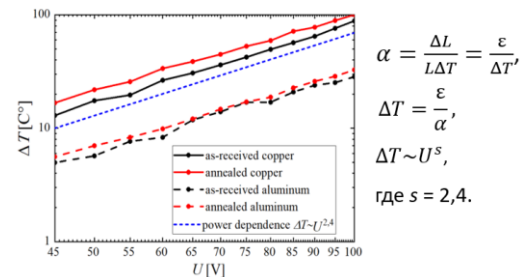


**Рис. 17.** Диаграмма растяжения медной проволоки, её микроструктура и графики увеличения пластической деформации при растяжении (взято из [32])

**Fig. 17.** Tensile stress–strain diagram of copper wire, its microstructure, and graphs of plastic strain increase under tension (taken from [32])

На графиках (рис. 17) справа сверху показано увеличение пластической деформации при растяжении в зависимости от количества электрических импульсов при разных значениях фиксированного растягивающего напряжения. Снизу видна зависимость приращения пластической деформации при растяжении от напряжения. На рисунках (а) показаны результаты для проволоки в состоянии поставки, а на (b) – в отожжённом состоянии.

В работах [34–36] нами помимо медных образцов, также использовались образцы из алюминия. Была определена зависимость изменения температуры образцов меди и алюминия от напряжения на батарее конденсаторов (рис. 18). Синяя пунктирная линия показывает степенную зависимость  $\Delta T$  от  $U$ . Изменение температуры рассчитывалось через коэффициент теплового расширения.

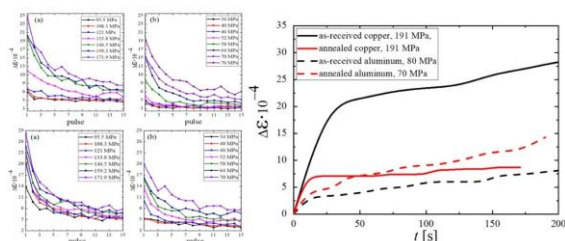


**Рис. 18.** График зависимости изменения температуры образцов меди и алюминия от напряжения на батарее конденсаторов (взято из [34])

**Fig. 18.** Graph of the dependence of the temperature change of copper and aluminum samples on the voltage on the capacitor bank (taken from [34])

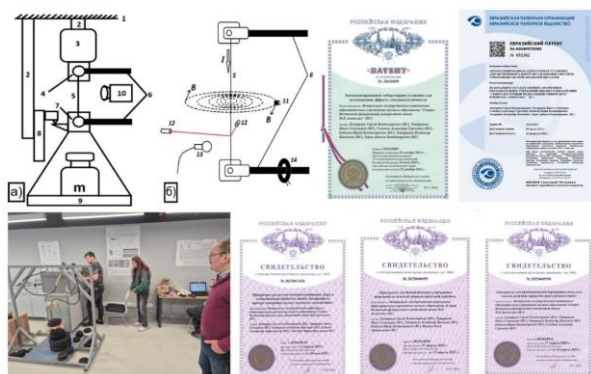


На следующих графиках (рис. 19) показан прирост деформации растяжения для Cu (а) и Al (б) при повторяющихся импульсах тока, в исходном и отожжённом состояниях, соответственно. Также справа на рисунке 19 показана зависимость для скорости ползучести образцов после импульса электрического тока.



**Рис. 19.** Графики зависимости прироста деформации растяжения для Cu (а) и Al (б), зависимость для скорости ползучести образцов после импульса электрического тока (взято из [34])

**Fig. 19.** Graphs of the increase in tensile strain for Cu (a) and Al (b), dependence for the creep rate of samples after an electric current pulse (taken from [34])



**Рис. 20.** Схемы автоматизированной лабораторной установки: а) механическая часть, б) расположение датчиков (взято из [42]); отпечатки патентов и свидетельств на программы для ЭВМ

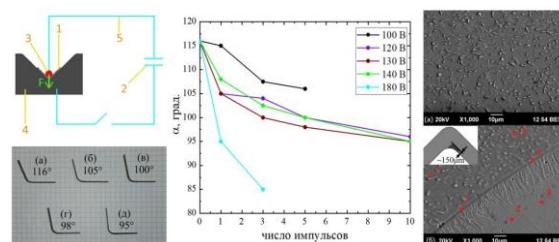
**Fig. 20.** Schemes of the automated laboratory setup: a) mechanical part, b) arrangement of sensors (taken from [42]); patent imprints and certificates for computer programs

Продолжением работы стала модификация лабораторной установки, а также разработка и патентование автоматизированной лабораторной установки для исследования эффекта электропластичности [37]. Вместе с ней было разработано 3 программы для ЭВМ [38-40]. Работа по модернизации установки была продолжена в результате чего был получен Евразийский па-

тент «Автоматизированная лабораторная установка для экспериментального исследования способов электроимпульсной обработки металлов» [41].

## 5. Обзор результатов экспериментальных исследований

В работах [43, 44] представлены результаты экспериментальных исследований влияния импульсов электрического тока на эффект пружинения пластин из титанового сплава, а именно работе [44] исследовались пластины из титанового сплава марки ВТ6 после гибки в V-образной матрице с углом  $90^\circ$  и радиусом кривизны 5 мм. На рисунке 21 (слева сверху) схематически показана оснастка для гибки. Ниже показаны примеры образцов после изгиба без тока (а) и после прохождения импульсов тока в количестве: (б) – 1, (в) – 3, (г) – 5 и (д) – 10, при напряжении 130 В. Также показано изменение угла изгиба  $\alpha$  образцов в зависимости от количества импульсов тока для различных значений напряжения на конденсаторной батарее. В правой части рисунка 21 показаны РЭМ-изображения микроструктуры (а) исходного состояния и (б) границы между зонами, подвергшейся (нижняя) и не подвергшейся (верхняя) температурному воздействию для пластины, подвергнутой электроимпульсной обработке в изогнутом состоянии.

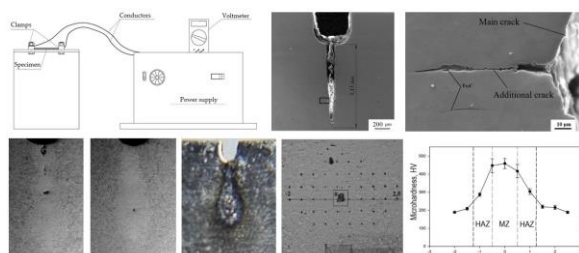


**Рис. 21.** Схема оснастки для гибки и подвода тока, графики изменения угла изгиба и РЭМ-изображения микроструктуры образцов (взято из [44])

**Fig. 21.** Schematic diagram of the equipment for bending and current supply, graphs of the change in bending angle and SEM images of the microstructure of the samples (taken from [44])

В работах [45-47] были опробованы подходы к определению параметров самовосстановления усталостных трещин с помощью электрического импульса. В работе, представленной в виде препринта [47], усталостная трещи-

на длиной 1,13 мм в стальной пластине марки 09Г2С была полностью залечена с помощью обработки импульсным током. Использовались следующие параметры импульсного тока: количество импульсов – 6, длительность импульса –  $10^{-4}$  с, напряжение на конденсаторе увеличивалось от импульса к импульсу в диапазоне от 200 до 250 В, максимальная плотность тока составляла от  $10^3$  до  $1,25 \cdot 10^3$  А/мм<sup>2</sup>. Результаты анализа залеченной трещины выявили специфические структурные и фазовые превращения (рис. 22).



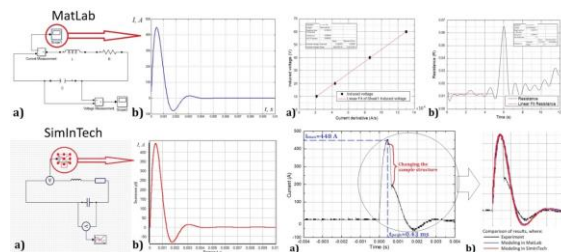
**Рис. 22.** Схема электроимпульсной обработки образца; оптическое изображение трещины, залеченной шестью импульсами тока; изображения микроструктуры после залечивания трещины; карта точек, в которых проводились измерения, и распределение микротвердости вдоль направления, перпендикулярного зажившей трещине (взято из [47])

**Fig. 22.** Schematic diagram of the electric pulse treatment of the sample; optical image of a crack healed by six current pulses; images of the microstructure after crack healing; map of the points at which measurements were taken, and the distribution of microhardness along the direction perpendicular to the healed crack (taken from [47])

Образование мартенсита с повышенной микротвёрдостью в области залеченной трещины может снизить усталостную прочность образца. С другой стороны, мартенсит обладает более высокой коррозионной стойкостью.

В работах [48, 49] произведено моделирование процесса разряда конденсаторной батареи через образец в виде медной проволоки. При помощи метода наименьших квадратов и дискретного преобразования Фурье, были оценены параметры индуктивности и сопротивления всей системы. После чего индуктивность была определена численно. Разработаны две идентичные имитационные модели в пакете программ MatLab (сверху) и среде SimInTech (снизу) (рис. 23). Получили практически пол-

ное предсказание обеими моделями таких параметров, как пиковое значение тока и длина импульса в пределах погрешности измерительного оборудования.



**Рис. 23.** Модели и результаты моделирования процесса разряда конденсаторной батареи через образец в виде медной проволоки в MatLab и SimInTech (взято из [49])

**Fig. 23.** Models and simulation results of the process of discharging a capacitor bank through a copper wire sample in MatLab and SimInTech (taken from [49])

## 6. Перспективы продолжения исследований

В настоящее время командой авторов ведётся разработка оборудования для электроимпульсной обработки металлов бесконтактным способом. В первых экспериментах использовался тот же силовой блок, но вместо контактных клемм применялся специальный индуктор для подведения к образцу энергии электромагнитного импульса бесконтактным способом (рис. 24). Использовались три индуктора, отличающихся числом витков (два, три и четыре).



**Рис. 24.** Схема установки и подвода тока при бесконтактном способе ЭИО, индукторы и образцы

**Fig. 24.** Installation and current supply diagram for the contactless EPT method, inductors and samples

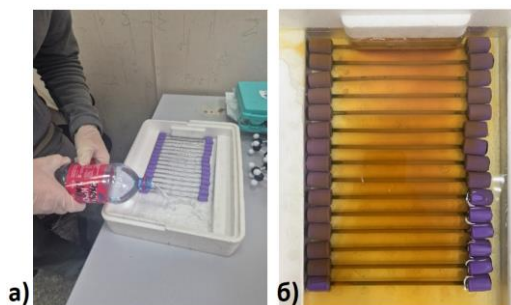
С увеличением числа витков возрастают омическое сопротивление индуктора и его ин-

дуктивное сопротивление переменному току. Это означает, что с ростом числа витков замедляется скорость разряда конденсатора и, следовательно, растет длительность электрического импульса при той же энергии импульса.

Проведенные эксперименты позволили определить слабые места индукторов по отношению к механическим нагрузкам и предельно допустимые токи для них. Все три индуктора в результате многочисленных испытаний, в конце концов, вышли из строя по разным причинам. Работа в этом направлении будет продолжена.

Также авторами в настоящее время проводится очередной эксперимент, но по нему ещё нет итоговых результатов. Как уже отмечалось ранее, электроимпульсная обработка может применяться для улучшения коррозионных свойств металлов и сплавов [50-52]. Было принято решение самостоятельно проверить эту теорию. Были взяты 15 образцов из ржавеющей стальной проволоки, некоторые из которых подверглись электроимпульсной обработке, а некоторые нет.

На рисунке 25 (а) показано как обработанные и промаркированные образцы были погружены в ванночку и залиты 3,5 % соляным раствором. Уже через 3 суток (рис. 25, б) образцы подверглись коррозии.



**Рис. 25.** Исходные образцы, погруженные в соляной раствор (а); образцы после коррозирования (б)

**Fig. 25.** Original samples immersed in salt solution (a); samples after corrosion (b)

Для оценки скорости коррозии нами использовался самый простой гравиметрический метод, заключающийся в измерении массы образца до и после воздействия агрессивной среды. Получены первые потери в весе, оцениваемые примерно в 0,0001 от исходного. Работа продолжится с интенсивностью измерений в 3 дня до получения существенных результатов.

## Заключение

В результате обзора существующих технологий и уже проведенных нами исследований в области электроимпульсной обработки металлов можно сделать следующие выводы: электропластический эффект позволяет повышать пластичность металлов без нагрева; электроимпульсная обработка, за счет локального выделения тепла на дефектах, позволяет решать такие задачи как растворение частиц, совершенствование границ зерен, релаксацию дефектов, повышение коррозионной стойкости; повторяющиеся импульсы тока при постоянном механическом напряжении дают прирост деформации, уменьшающийся с каждым импульсом, поскольку дислокации достигают более сильных стопоров; показано, что электропластический эффект проявляется ярче с повышением плотности тока, без значительного увеличения выделения тепла; получены положительные результаты по ослаблению пружинения в титановом сплаве и залечиванию макротрещины в стальной пластине после пропуска импульсного тока; разработана компьютерная модель, предсказывающая пиковое значение и длину импульса тока при разряде конденсаторной батареи через образец, что будет очень важно при разработке новых и модернизации старых лабораторных установок.

## Список литературы

1. Троицкий О.А. Электропластический эффект в металлах // Черная металлургия. 2018. № 9. С. 65-76.
2. Пономарев Т.С., Белявин К.Е., Минько Д.В., Корольков О.Е., Столяров В.В. Электропластический эффект при изгибе проволоки из вольфрама // Актуальные проблемы прочности: материалы международной научной конференции. Под редакцией В.В. Рубаника. 2020. С. 296-298.
3. Пономарев Т.С., Белявин К.Е., Минько Д.В., Угурчиев У.Х., Столяров В.В. Электропластический эффект при растяжении титановой проволоки // Перспективные материалы и технологии: сборник материалов международного симпозиума. Под общей редакцией В.В. Рубаника. 2019. С. 507-509.
4. Астанин В.В., Хайруллина Д.Р., Павлова Т.Е., Козлов Е.Д., Мингажев А.Д. Электропластический эффект в процессе

- электромагнитной формовки // *Materials. Technologies. Design*. 2024. Т. 6. № 3 (18). С. 5-17.
5. Хайруллина Д.Р., Павлова Т.Е., Козлов Е.Д., Мингажев А.Д., Маслова Л.И. Электропластический эффект в технологии электромагнитной штамповки // *Молодой ученый*. 2024. № 25 (524). С. 31-35.
6. Чиченев Н.А., Горовая Т.Ю., Карфидов А.О., Чиченева О.Н. Анализ схем подачи электрического тока к валкам при электропластической прокатки микролент из вольфрама // *Цветные металлы*. 2022. № 6. С. 81-86.
7. Siopis M.S., Kinsey B.L. Experimental Investigation of Grain and Specimen Size Effects during Electrical-Assisted Forming // *Journal of Manufacturing Science and Engineering*. 2010. V. 132. Is. 2. No. 021004.
8. Вовченко А.И., Демиденко Л.Ю., Половинка В.Д. Влияние параметров импульсов тока на развитие физического контакта при сварке металлов давлением // *Электронная обработка материалов*. 2013. № 49(4). С. 30-34.
9. Минько Д.В. Анализ перспектив применения электропластического эффекта в процессах обработки металлов давлением // *Литье и металлургия*. 2020. № 4. С. 125-130.
10. Почивалов Ю.И. Структура и свойства малолегированной стали 10Г2ФБЮ после прокатки в рельефных валках в условиях электропластичности // *Известия высших учебных заведений. Черная металлургия*. 2023. Т. 66. № 6. С. 659-665.
11. Савенко В.С., Чэнь Я. Повышение эксплуатационных характеристик алюминия путем электропластической деформации // *Известия Национальной академии наук Беларуси. Серия физико-технических наук*. 2024. Т. 69. № 4. С. 286-296.
12. Ruszkiewicz B.J., Mears L., Grimm T., Roth J.T., Ragai I. A review of electrically-assisted manufacturing with emphasis on modeling and understanding of the electroplastic effect // *Journal of Manufacturing Science and Engineering. Transactions of the American Society of Mechanical Engineers*. 2017. V. 139. Is. 11. No. 110801.
13. Троицкий О.А. Электромеханический эффект в металлах // *Письма в ЖЭТФ*. 1969. Т. 2. № 10. С. 18-22.
14. Izadpanah S., Cao X., An D., Li X., Chen J. One step forward to electrically assisted forming mechanisms and computer simulation: A review // *Advanced Engineering Materials*. 2023. V. 25. Is. 5. No. 2200425.
15. Корольков О.Е., Мисоченко А.А., Столяров В.В. Электропластический эффект в титане при сжатии // *Заводская лаборатория. Диагностика материалов*. 2024. Т. 90. № 12. С. 65-71.
16. Stolyarov V., Misochenko A. A pulsed current application to the deformation processing of materials // *Materials*. 2023. V. 16. Is. 18. No. 6270.
17. Kim M.-J., Yoon S., Park S., Jeong H.-J., Park J.-W., Kim K., Jo J., Heo T., Hong S.-T., Cho S.H., Kwon Y.-K., Choi I.-S., Kim M., Han H.N. Elucidating the origin of electroplasticity in metallic materials // *Applied Materials Today*. 2020. V. 21. No. 100874.
18. Cai Q., Zhou M., Bagherpour E., Hosseini S., Mendis C., Chang I., Assadi H. New Insight into Crack-Healing Mechanism via Electropulsing Treatment // *Metallurgical and Materials Transactions A*. 2023. V. 54. P. 2960-2974.
19. Xu W., Yang C., Yu H., Jin X., Yang G., Shan D., Guo B. Combination of eddy current and heat treatment for crack healing and mechanical-property improvement in magnesium alloy tube // *Journal of magnesium and alloys*. 2021. V. 9. Is. 5. P. 1768-1781.
20. Xu W., Yang C., Yu H., Jin X., Guo B., Shan D. Microcrack healing in non-ferrous metal tubes through eddy current pulse treatment // *Scientific Reports*. 2018. V. 8. Is. 1. No. 6016.
21. Cheng X., Zhang X. Anti-corrosion Performance Regeneration in Aged Austenitic Stainless Steel by Precipitate Dissolution Below Critical Temperature Using Electropulsing // *ISIJ International*. 2020. V. 60. Is. 5. P. 1022-1029.
22. Kumar R.P., Santhi Srinivas N.C., Pandey R.K., Manna R. Electropulsing of Low-Density Duplex Steel for Strengthening and Ductilization by Microstructural Refinement // *Journal of Materials Processing Technology*. 2024. V. 329. No. 118423.
23. Fu X., Xu X., Zhao Y., Chen D., Wu Z., Yan X., Zhou Y., Yu Y. Retain the austenite via diffusion control under electropulsing to improve the mechanical properties of the AISI 420 stainless steel // *Journal of Materials Research and Technology*. 2024. V. 29. P. 1665-1674.



24. Tang H., Du H., Tao K., Chen J., Zhang J. Effect of electropulsing on edge stretchability and corrosion resistance near the punched edge of a 2024T4 aluminum alloy sheet // *Journal of Materials Processing Technology*. 2019. V. 263. P. 343-355.
25. Абдуллина Д.У., Бебихов Ю.В., Татаринов П.С., Дмитриев С.В. Обзор последних достижений в области электропластической обработки металлов давлением // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. 2023. Т. 20. № 4. С. 469-483.
26. Ким Д.Ч., Семёнов А.С., Бебихов Ю.В., Ефимов В.А., Спиридонов В.М., Татаринов П.С. Разработка и испытание установки для изучения лабораторного аналога шаровой молнии // *Вестник Северо-Восточного федерального университета им. М.К. Аммосова*. 2020. № 6 (80). С. 34-47.
27. Kim, D.C., Semenov, A.S., Efimov, V.A., Bebikhov, Y.V. Installation for Studying the Laboratory Analog of Ball Lightning // *2020 International Multi Conference on Industrial Engineering and Modern Technologies (Fareastcon 2020)*. 2020. No. 9271597.
28. Ким Д.Ч., Семёнов А.С., Бебихов Ю.В., Татаринов П.С. Применение импульсного тиратрона для коммутации гатчинского разряда // *Вестник Северо-Восточного федерального университета им. М.К. Аммосова*. 2022. № 3 (89). С. 27-38.
29. Kim, D.C., Semenov, A.S., Tatarinov, P.S., Bebikhov, Y.V. Upgrade of High-Voltage Section of Laboratory Unit for Ball Plasmoid Generation // *Proceedings 2022 4th International Conference on Control Systems Mathematical Modeling Automation and Energy Efficiency (Summa 2022)*. 2022. P. 755-759.
30. Татаринов В.П., Татаринов П.С., Бебихов Ю.В., Семёнов А.С., Дмитриев С.В. Разработка способа измерения импульсных токов большой величины // *Вестник Северо-Восточного федерального университета им. М.К. Аммосова*. 2024. Т. 21. № 1. С. 81-88.
31. Татаринов В.П., Бебихов Ю.В., Татаринов П.С., Золотина К.В., Гуляев Г.С. Экспериментальное исследование электропластического эффекта при прохождении импульсов тока // *Наука и инновационные разработки – Северу: сборник материалов III Международной научно-практической конференции*. 2024. С. 201-205.
32. Dmitriev S.V., Morkina A.Y., Tarov D.V., Khalikova G.R., Abdullina D.U., Tatarinov P.S., Tatarinov V.P., Semenov A.S., Naimark O.B., Khokhlov A.V., Stolyarov V.V. Effect of repetitive high-density current pulses on plastic deformation of copper wires under stepwise loading // *Spectrum of Mechanical Engineering and Operational Research*. 2024. Т. 1. № 1. С. 27-43.
33. Моркина А.Ю., Таров Д.В., Наумова Д.М., Татаринов П.С., Татаринов В.П., Семёнов А.С., Якушев И.А., Дмитриев С.В. Влияние повторяющихся импульсов тока высокой плотности на пластическую деформацию медных проводов // *Известия Уфимского научного центра РАН*. 2024. № 3. С. 15-23.
34. Morkina A.Y., Tarov D.V., Khalikova G.R., Semenov A.S., Tatarinov P.S., Yakushev I.A., Dmitriev S.V. Comparison of the effect of electroplasticity in copper and aluminum // *Facta Universitatis. Series: Mechanical Engineering*. 2024. Vol. 22. No 4. С. 615-632.
35. Morkina A.Y., Tarov D.V., Yakushev I.A., Tatarinov P.S., Korznikova E.A., Dmitriev S.V. Effect of electroplasticity studied for aluminum wires under tension // *Procedia Structural Integrity*. 2024. V. 65. P. 158-162.
36. Morkina A.Y., Tarov D.V., Korznikova E.A., Khazimullin M.V., Semenova M.N., Tatarinov P.S., Yakushev I.A., Dmitriev S.V. Effect of current pulse parameters on the electroplasticity of tensioned copper wires // *European Journal of Mechanics - A/Solids*. 2026. V. 118. No. 106078.
37. Дмитриев С.В., Татаринов П.С., Семёнов А.С., Бебихов Ю.В., Татаринов В.П., Таров Д.В. Автоматизированная лабораторная установка для исследования эффекта электропластичности. Патент на изобретение RU 2843809 C1, 18.07.2025. Заявка № 2024138887 от 23.12.2024.
38. Дмитриев С.В., Татаринов П.С., Татаринов В.П., Егорова А.А., Семёнова М.Н. Программа для автоматической калибровки, сбора и статистической обработки данных измерений на примере измерения усилия с помощью тензодатчика. Свидетельство о регистрации программы для ЭВМ RU 2025661426, 06.05.2025. Заявка № 2025618919 от 17.04.2025.
39. Дмитриев С.В., Татаринов П.С., Татаринов В.П., Бебихов Ю.В., Якушев И.А. Программа для автоматического считывания показаний оптической микрометрической

линейки. Свидетельство о регистрации программы для ЭВМ RU 2025660695, 25.04.2025. Заявка № 2025618920 от 17.04.2025.

40. Дмитриев С.В., Татаринов П.С., Татаринов В.П., Бебихов Ю.В., Семёнов А.С. Программа для автоматической нормировки импульса тока по величине заряда батареи конденсаторов. Свидетельство о регистрации программы для ЭВМ RU 2025660558, 24.04.2025. Заявка № 2025618911 от 17.04.2025.

41. Дмитриев С.В., Татаринов П.С., Семёнов А.С., Бебихов Ю.В., Татаринов В.П., Таров Д.В. Автоматизированная лабораторная установка для экспериментального исследования способов электроимпульсной обработки металлов. Евразийский патент на изобретение № 052382, 04.02.2026. Заявка № 202591802 от 09.07.2025.

42. Татаринов П.С., Татаринов В.П., Сугоняко И.С., Моркина А.Ю., Хазимуллин М.В., Таров Д.В., Корзникова Е.А., Якушев И.А., Дмитриев С.В. Автоматизированная лабораторная установка для разработки методов электроимпульсной обработки металлов // Известия Алтайского государственного университета. 2026. № 1 (147). С. 56–62.

43. Morkina A.Y., Tarov D.V., Tatarinov P.S., Bebikhov Yu.V., Korznikova E.A., Dmitriev S.V. Electric Pulse Treatment of Grade 5 Titanium Alloy Plates after Bending to Reduce Springback Effect // Mechanics of Solids. 2025. V. 60. Is. 3. P. 2344-2352.

44. Моркина А.Ю., Таров Д.В., Лутфуллин Р.Я., Татаринов П.С., Бебихов Ю.В., Семёнов А.С., Корзникова Е.А., Дмитриев С.В. Обработка импульсным током пластин титанового сплава ВТ6 после гибки для ослабления пружинения // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2025. Т. 22. № 3. С. 324-334.

45. Kukudzhanov K.V., Korznikova E.A., Chentsov A.V., Dmitriev S.V. A novel approach to determining the parameters of electric pulse healing of fatigue cracks // Materials Letters. 2026. V. 404. No. 139565.

46. Kukudzhanov K.V., Khalikova G.R., Korznikova E.A., Chentsov A.V., Dmitriev S.V. Healing of Long Fatigue Cracks in Steel Plates by High-Density Current Pulses // Mechanics of Solids. 2024. V. 59. Is. 5. P. 3223-3234.

47. Sugonyako I.S., Tarov D.V., Korznikova E.A., Khalikova G.R., Semenov A.S.,

Kukudzhanov K.V., Dmitriev S.V. Microstructure of 09G2S Steel Near a Fatigue Crack Healed by Pulsed Current // Preprints.org (Posted Date: 10 November 2025).

<https://doi.org/10.20944/preprints202511.0698.v1>

48. Semenov A.S., Semenova M.N., Bebikhov Yu.V., Yakushev I.A. Mathematical and simulation modeling in the study of the electroplastic effect in metals // Computational Mathematics and Modeling. 2025. (In press: <https://doi.org/10.1007/s10598-025-09650-y>)

49. Семёнов А.С., Татаринов В.П., Татаринов П.С., Якушев И.А. Компьютерное моделирование процесса разряда конденсаторной батареи через образец в виде медной проволоки // Вестник Северо-Восточного федерального университета им. М.К. Аммосова. 2025. Т. 22. № 4 (102). С. 56-66.

50. Ding S., Zhou M., Liu X., Liu C., Zhang X. Improving the stress corrosion cracking resistance of aged SA508-309L dissimilar metal weld joints by pulsed electric current // Materials Science and Engineering A. 2022. V. 849. No. 143506.

51. Gao J.-Y., Liu X.-B., Zhou H.-F., Zhang X.-F. Modification of corrosion resistance of the plain carbon steels by pulsed electric current // Acta Metallurgica Sinica. 2018. V. 31. P. 1233-1239.

52. Sun C., Li J., Zhang J., Yan W., Li S.H. Formation and evolution of primary carbides in high-carbon martensitic stainless steel // Journal of Iron and Steel Research International. 2023. V. 30. P. 2000-2009.

### Информация об авторах

*М.Н. Семёнова – канд. физ.-мат. наук, доцент кафедры Фундаментальной и прикладной математики Политехнического института (филиала) в г. Мирном, Северо-Восточный федеральный университет им. М.К. Аммосова.*

*Ю.В. Бебихов – доктор физ.-мат. наук, доцент, зав. кафедрой Электроэнергетики и автоматизации промышленного производства Политехнического института (филиала) в г. Мирном, Северо-Восточный федеральный университет им. М.К. Аммосова.*

*В.П. Татаринов – студент, лаборант лаборатории кафедры Электроэнергетики и автоматизации промышленного производства Политехнического института (филиала) в г. Мирном, Северо-Восточный федеральный университет им. М.К. Аммосова.*

П.С. Татаринов – старший преподаватель кафедры Электроэнергетики и автоматизации промышленного производства Политехнического института (филиала) в г. Мирном, Северо-Восточный федеральный университет им. М.К. Аммосова.

И.А. Якушев – канд. физ.-мат. наук, доцент, доцент кафедры Фундаментальной и прикладной математики Политехнического института (филиала) в г. Мирном, Северо-Восточный федеральный университет им. М.К. Аммосова.

Д.У. Абдуллина – аспирант, младший научный сотрудник лаборатории Института физики молекул и кристаллов, Уфимский федеральный исследовательский центр РАН.

А.С. Семёнов – доктор физ.-мат. наук, доцент, старший научный сотрудник лаборатории Института физики молекул и кристаллов, Уфимский федеральный исследовательский центр РАН; зам. председателя Западно-Якутского научного центра Академии наук Республики Саха (Якутия).

С.В. Дмитриев – доктор физ.-мат. наук, профессор, заведующий лабораторией Института физики молекул и кристаллов, Уфимский федеральный исследовательский центр РАН; профессор Уфимского государственного нефтяного технического университета.

## References

1. Troitsky O.A. (2018) Electroplastic effect in metals. *Ferrous metallurgy*, 9, 65-76.
2. Ponomarev T.S., Belyavin K.E., Minko D.V., Korolkov O.E., Stolyarov V.V. (2020) Electroplastic effect during bending of tungsten wire. In: *Actual problems of strength: proceedings of the international scientific conference*, 296-298.
3. Ponomarev T.S., Belyavin K.E., Minko D.V., Ugurchiev U.Kh., Stolyarov V.V. (2019) Electroplastic effect during stretching of titanium wire. In: *Advanced materials and technologies: collection of materials of the international symposium*, 507-509.
4. Astanin V.V., Khairullina D.R., Pavlova T.E., Kozlov E.D., Mingazhev A.D. (2024) Electroplastic effect in the process of electromagnetic forming. *Materials. Technologies. Design*, 6(3), 5-17.
5. Khairullina D.R., Pavlova T.E., Kozlov E.D., Mingazhev A.D., Maslova L.I. (2024) Electroplastic effect in electromagnetic stamping technology. *Young Scientist*, 25, 31-35.
6. Chichenev N.A., Gorovaya T.Yu., Karfidov A.O., Chicheneva O.N. (2022) Analysis of electric current supply schemes to rolls during electroplastic rolling of tungsten micro-ribbons. *Non-ferrous metals*, 6, 81-86.
7. Siopis M.S., Kinsey B.L. (2010) Experimental Investigation of Grain and Specimen Size Effects during Electrical-Assisted Forming. *Journal of Manufacturing Science and Engineering*, 132(2), 021004.
8. Vovchenko A.I., Demidenko L.Yu., Polovinka V.D. (2013) Influence of current pulse parameters on the development of physical contact during pressure welding of metals. *Electronic processing of materials*, 49, 30-34.
9. Minko D.V. (2020) Analysis of the prospects for applying the electroplastic effect in metal forming processes. *Casting and metallurgy*, 4, 125-130.
10. Pochivalov Yu.I. (2023) Structure and properties of low-alloy steel 10G2FBYu after rolling in relief rolls under electroplasticity conditions. *News of higher educational institutions. Ferrous metallurgy*, 66(6), 659-665.
11. Savenko V.S., Chen Ya. (2024) Improving the performance characteristics of aluminum by electroplastic deformation. *Bulletin of the National Academy of Sciences of Belarus. Series of Physical and Technical Sciences*, 69(4), 286-296.
12. Ruskiewicz B.J., Mears L., Grimm T., Roth J.T., Ragai I. (2017) A review of electrically-assisted manufacturing with emphasis on modeling and understanding of the electroplastic effect. *Journal of Manufacturing Science and Engineering. Transactions of the American Society of Mechanical Engineers*, 139(11), 110801.
13. Troitsky O.A. (1969) Electromechanical effect in metals. *Letters to JETP*, 2(10), 18-22.
14. Izadpanah S., Cao X., An D., Li X., Chen J. (2023) One step forward to electrically assisted forming mechanisms and computer simulation: A review. *Advanced Engineering Materials*, 25(5), 2200425.
15. Korolkov O.E., Misochenko A.A., Stolyarov V.V. (2024) Electroplastic effect in

- titanium under compression. *Factory laboratory. Diagnostics of materials*, 90(12), 65-71.
16. Stolyarov V., Misochenko A. (2023) A pulsed current application to the deformation processing of materials. *Materials*, 16(18), 6270.
17. Kim M.-J., Yoon S., Park S., Jeong H.-J., Park J.-W., Kim K., Jo J., Heo T., Hong S.-T., Cho S.H., Kwon Y.-K., Choi I.-S., Kim M., Han H.N. (2020) Elucidating the origin of electroplasticity in metallic materials. *Applied Materials Today*, 21, 100874.
18. Cai Q., Zhou M., Bagherpour E., Hosseini S., Mendis C., Chang I., Assadi H. (2023) New Insight into Crack-Healing Mechanism via Electropulsing Treatment. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 54, 2960-2974.
19. Xu W., Yang C., Yu H., Jin X., Yang G., Shan D., Guo B. (2021) Combination of eddy current and heat treatment for crack healing and mechanical-property improvement in magnesium alloy tube. *Journal of magnesium and alloys*, 9(5), 1768-1781.
20. Xu W., Yang C., Yu H., Jin X., Guo B., Shan D. (2018) Microcrack healing in non-ferrous metal tubes through eddy current pulse treatment. *Scientific Reports*, 8(1), 6016.
21. Cheng X., Zhang X. (2020) Anti-corrosion Performance Regeneration in Aged Austenitic Stainless Steel by Precipitate Dissolution Below Critical Temperature Using Electropulsing. *ISIJ International*, 60(5), 1022-1029.
22. Kumar R.P., Santhi Srinivas N.C., Pandey R.K., Manna R. (2024) Electropulsing of Low-Density Duplex Steel for Strengthening and Ductilization by Microstructural Refinement. *Journal of Materials Processing Technology*, 329, 118423.
23. Fu X., Xu X., Zhao Y., Chen D., Wu Z., Yan X., Zhou Y., Yu Y. (2024) Retain the austenite via diffusion control under electropulsing to improve the mechanical properties of the AISI 420 stainless steel. *Journal of Materials Research and Technology*, 29, 1665-1674.
24. Tang H., Du H., Tao K., Chen J., Zhang J. (2019) Effect of electropulsing on edge stretchability and corrosion resistance near the punched edge of a 2024T4 aluminum alloy sheet. *Journal of Materials Processing Technology*, 263, 343-355.
25. Abdullina D.U., Bebikhov Yu.V., Tatarinov P.S., Dmitriev S.V. (2023) Review of the latest achievements in the field of electroplastic metal forming. *Basic Problems of Material Science*, 20(4), 469-483.
26. Kim D.Ch., Semenov A.S., Bebikhov Yu.V., Efimov V.A., Spiridonov V.M., Tatarinov P.S. (2020) Development and testing of a setup for studying a laboratory analogue of ball lightning. *Bulletin of the Ammosov North-Eastern Federal University*, 6(80), 34-47.
27. Kim, D.C., Semenov, A.S., Efimov, V.A., Bebikhov, Y.V. (2020) Installation for Studying the Laboratory Analog of Ball Lightning. In: *2020 International Multi Conference on Industrial Engineering and Modern Technologies (Fareastcon 2020)*, 9271597.
28. Kim D.Ch., Semenov A.S., Bebikhov Yu.V., Tatarinov P.S. (2022) Application of a pulsed thyatron for switching the Gatchina discharge. *Bulletin of the Ammosov North-Eastern Federal University*, 3(89), 27-38.
29. Kim, D.C., Semenov, A.S., Tatarinov, P.S., Bebikhov, Y.V. (2022) Upgrade of High-Voltage Section of Laboratory Unit for Ball Plasmoid Generation. In: *Proceedings 2022 4th International Conference on Control Systems Mathematical Modeling Automation and Energy Efficiency (Summa 2022)*, 755-759.
30. Tatarinov V.P., Tatarinov P.S., Bebikhov Yu.V., Semenov A.S., Dmitriev S.V. (2024) Development of a method for measuring high-magnitude pulse currents. *Bulletin of the Ammosov North-Eastern Federal University*, 21(1), 81-88.
31. Tatarinov V.P., Bebikhov Yu.V., Tatarinov P.S., Zolotina K.V., Gulyaev G.S. (2024) Experimental study of the electroplastic effect during the passage of current pulses. In: *Science and innovative developments - to the North: collection of materials of the III International scientific and practical conference*, 201-205.
32. Dmitriev S.V., Morkina A.Y., Tarov D.V., Khalikova G.R., Abdullina D.U., Tatarinov P.S., Tatarinov V.P., Semenov A.S., Naimark O.B., Khokhlov A.V., Stolyarov V.V. (2024) Effect of repetitive high-density current pulses on plastic

deformation of copper wires under stepwise loading. *Spectrum of Mechanical Engineering and Operational Research*, 1(1), 27-43.

33. Morkina A.Yu., Tarov D.V., Naumova D.M., Tatarinov P.S., Tatarinov V.P., Semenov A.S., Yakushev I.A., Dmitriev S.V. (2024) Influence of repeating high-density current pulses on plastic deformation of copper wires. *Bulletin of the Ufa Scientific Center of the Russian Academy of Sciences*, 3, 15-23.

34. Morkina A.Y., Tarov D.V., Khalikova G.R., Semenov A.S., Tatarinov P.S., Yakushev I.A., Dmitriev S.V. (2024) Comparison of the effect of electroplasticity in copper and aluminum. *Facta Universitatis. Series: Mechanical Engineering*, 22(4), 615-632.

35. Morkina A.Y., Tarov D.V., Yakushev I.A., Tatarinov P.S., Korznikova E.A., Dmitriev S.V. (2024) Effect of electroplasticity studied for aluminum wires under tension. *Procedia Structural Integrity*, 65, 158-162.

36. Morkina A.Y., Tarov D.V., Korznikova E.A., Khazimullin M.V., Semenova M.N., Tatarinov P.S., Yakushev I.A., Dmitriev S.V. (2026) Effect of current pulse parameters on the electroplasticity of tensioned copper wires. *European Journal of Mechanics - A/Solids*, 118, 106078.

37. Dmitriev S.V., Tatarinov P.S., Semenov A.S., Bebikhov Yu.V., Tatarinov V.P., Tarov D.V. (2025) Automated laboratory setup for studying the electroplasticity effect. Patent RU 2843809.

38. Dmitriev S.V., Tatarinov P.S., Tatarinov V.P., Egorova A.A., Semenova M.N. (2025) Software for automatic calibration, collection, and statistical processing of measurement data using a strain gauge force measurement example. Computer program registration certificate RU 2025661426.

39. Dmitriev S.V., Tatarinov P.S., Tatarinov V.P., Bebikhov Yu.V., Yakushev I.A. (2025) Software for Automatic Reading of Optical Micrometer Ruler Readings. Computer Program Registration Certificate RU 2025660695.

40. Dmitriev S.V., Tatarinov P.S., Tatarinov V.P., Bebikhov Yu.V., Semenov A.S. (2025) Software for Automatic Normalization of Current Pulse Based on Capacitor Battery Charge.

Computer Program Registration Certificate RU 2025660558.

41. Dmitriev S.V., Tatarinov P.S., Semenov A.S., Bebikhov Yu.V., Tatarinov V.P., Tarov D.V. (2026) Automated Laboratory Setup for Experimental Study of Electric Pulse Machining Methods of Metals. Eurasian Patent No. 052382.

42. Tatarinov P.S., Tatarinov V.P., Sugonyako I.S., Morkina A.Y., Khazimullin M.V., Tarov D.V., Korznikova E.A., Yakushev I.A., Dmitriev S.V. (2026) Automated Laboratory Setup for the Development of Methods for Electrical Discharge Machining of Metals. *Izvestiya of Altai State University*, 1(147), 56-62.

43. Morkina A.Y., Tarov D.V., Tatarinov P.S., Bebikhov Yu.V., Korznikova E.A., Dmitriev S.V. (2025) Electric Pulse Treatment of Grade 5 Titanium Alloy Plates after Bending to Reduce Springback Effect. *Mechanics of Solids*, 60(3), 2344-2352.

44. Morkina A.Yu., Tarov D.V., Lutfullin R.Ya., Tatarinov P.S., Bebikhov Yu.V., Semenov A.S., Korznikova E.A., Dmitriev S.V. (2025) Pulsed current treatment of VT6 titanium alloy plates after bending to weaken springback. *Basic Problems of Material Science*, 22(3), 324-334.

45. Kukudzhанov K.V., Korznikova E.A., Chentsov A.V., Dmitriev S.V. (2026) A novel approach to determining the parameters of electric pulse healing of fatigue cracks. *Materials Letters*, 404, 139565.

46. Kukudzhанov K.V., Khalikova G.R., Korznikova E.A., Chentsov A.V., Dmitriev S.V. (2024) Healing of Long Fatigue Cracks in Steel Plates by High-Density Current Pulses. *Mechanics of Solids*, 59(5), 3223-3234.

47. Sugonyako I.S., Tarov D.V., Korznikova E.A., Khalikova G.R., Semenov A.S., Kukudzhанov K.V., Dmitriev S.V. (2025) Microstructure of 09G2S Steel Near a Fatigue Crack Healed by Pulsed Current. Preprints.org. <https://doi.org/10.20944/preprints202511.0698.v1>

48. Semenov A.S., Semenova M.N., Bebikhov Yu.V., Yakushev I.A. (2025) Mathematical and simulation modeling in the study of the electroplastic effect in metals. *Computational Mathematics and Modeling* (In press: <https://doi.org/10.1007/s10598-025-09650-y>).

49. Semenov A.S., Tatarinov V.P., Tatarinov P.S., Yakushev I.A. (2025) Computer simulation of the process of discharge of a capacitor bank through a sample in the form of copper wire. *Bulletin of the Ammosov North-Eastern Federal University*, 22(4), 56-66.

50. Ding S., Zhou M., Liu X., Liu C., Zhang X. (2022) Improving the stress corrosion cracking resistance of aged SA508-309L dissimilar metal weld joints by pulsed electric current. *Materials Science and Engineering A*, 849, 143506.

51. Gao J.-Y., Liu X.-B., Zhou H.-F., Zhang X.-F. (2018) Modification of corrosion resistance of the plain carbon steels by pulsed electric current. *Acta Metallurgica Sinica*, 31, 1233-1239.

52. Sun C., Li J., Zhang J., Yan W., Li S.H. (2023) Formation and evolution of primary carbides in high-carbon martensitic stainless steel. *Journal of Iron and Steel Research International*, 30, 2000-2009.

#### **Information about the authors**

M.N. Semenova – Cand. of Phys. and Math. Sciences, Associate Professor in the Department of Fundamental and Applied Mathematics at the Polytechnic Institute (branch) in Mirny, Ammosov North-Eastern Federal University.

Yu.V. Bebikhov – Doctor of Phys. and Math. Sciences, Associate Professor, Head of the Department of Electric Power Engineering and Industrial Automation at the Polytechnic Institute

(branch) in Mirny, Ammosov North-Eastern Federal University.

V.P. Tatarinov – Student, Laboratory Assistant in the Department of Electric Power Engineering and Industrial Automation at the Polytechnic Institute (branch) in Mirny, Ammosov North-Eastern Federal University.

P.S. Tatarinov – Senior Lecturer in the Department of Electric Power Engineering and Industrial Automation at the Polytechnic Institute (branch) in Mirny, Ammosov North-Eastern Federal University.

I.A. Yakushev – Cand. of Phys. and Math. Sciences, Associate Professor in the Department of Fundamental and Applied Mathematics at the Polytechnic Institute (branch) in Mirny, Ammosov North-Eastern Federal University.

D.U. Abdullina – Graduate Student and Junior Researcher in the Laboratory of the Institute of Molecule and Crystal Physic, Ufa Federal Research Center of the Russian Academy of Sciences.

A.S. Semenov – Doctor of Phys. and Math. Sciences, Associate Professor, Senior Researcher in the Laboratory of the Institute of Molecule and Crystal Physic, Ufa Federal Research Center of the Russian Academy of Sciences; Deputy Chairman of the West Yakut Scientific Center of the Academy of Sciences of the Republic of Sakha (Yakutia).

S.V. Dmitriev – Doct. of Phys. and Math. Sciences, Professor, Head of Laboratory at the Institute of Molecule and Crystal Physic, Ufa Federal Research Center of the Russian Academy of Sciences; Professor at the Ufa State Petroleum Technological University.

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.  
The authors declare that there is no conflict of interest.

Статья поступила в редакцию 02.03.2026; одобрена после рецензирования 10.03.2026; принята к публикации 11.03.2026.

The article was received by the editorial board on 02 Mar. 2026; approved after reviewing 10 Mar. 2026; accepted for publication 11 Mar. 2026.



## РАЗДЕЛ 2. МЕТАЛЛОВЕДЕНИЕ И ТЕРМИЧЕСКАЯ ОБРАБОТКА МЕТАЛЛОВ И СПЛАВОВ

Научная статья

2.6.1. Металловедение и термическая обработка металлов и сплавов (технические науки)

УДК 539.89:669

doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2026.01.013

### ПОВЫШЕНИЕ СДВИГОВОГО НАПРЯЖЕНИЯ РАЗРУШЕНИЯ СУБМИКРОКРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ МЕДИ МЕТОДОМ ГИДРОЭКСТРУЗИИ

Яшарова Елизавета Владимировна<sup>1</sup>, Гангало Александр Николаевич<sup>2</sup>,  
Суrowицкий Виктор Дациевич<sup>3</sup>, Бурховецкий Валерий Викторович<sup>4</sup>

<sup>1,2,3,4</sup>ФГБНУ «Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина», г. Донецк, РФ

<sup>1</sup>ФГБОУ ВО «Донецкий государственный университет», г. Донецк, РФ

<sup>2</sup>ФГБНУ «Институт физики горных процессов», г. Донецк, РФ

<sup>1</sup>yasharova.liza@yandex.ru, ORCID 0009-0002-8780-0918

<sup>2</sup>al-gangalo@yandex.ru, ORCID 0000-0001-5683-1346

<sup>3</sup>suroq94@gmail.com, ORCID 0009-0009-0722-4035

<sup>4</sup>val-bur\_63@mail.ru, ORCID 0009-0004-6249-2722

**Аннотация.** В работе исследовалось влияние пост обработки гидроэкструзией на сдвиговое напряжение разрушения при растяжении меди с субмикрокристаллической структурой, сформированной равноканальным угловым прессованием. Показано, что обработка гидроэкструзией оказывает положительное влияние на пластические характеристики материала. Выявлено, что в интервале деформаций  $\varepsilon_{ГЭ} = 0...0.6$  рост сдвигового напряжения разрушения приводит к увеличению предела прочности до 10%, а при дальнейшем повышении величины деформации гидроэкструзией предел прочности падает вследствие деформационного разогрева. Сканирующей электронной микроскопией исследованы поверхности разрушения. Определена величина соотношения предела прочности к сдвиговому напряжению разрушения, при которой изменяется механизм разрушения при растяжении от сдвигового на механизм нормального отрыва. Оценено влияние деформации гидроэкструзии на размеры ямок разрушения: средний диаметр ямок возрастает почти в 2 раза, что свидетельствует о повышении вязкости материала. Исследованы структурные изменения материала методом просвечивающей электронной микроскопии, показано формирование аксиальной текстуры в процессе обработки гидроэкструзией, что привело к повышению сдвигового напряжения разрушения и предела прочности.

**Ключевые слова:** сдвиговое напряжение разрушения, субмикрокристаллическая структура, медь, гидроэкструзия, равноканальное угловое прессование, деформация, предел прочности, относительное удлинение, относительное сужение, механизм разрушения, угол отрыва.

**Благодарности:** Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках Проекта по созданию молодежных лабораторий и государственного задания FREZ-2024-0001, тема «Объемные и пленочные наноструктурированные материалы с высоким уровнем физических и механических свойств».

---

**Для цитирования:** Яшарова Е.В., Гангало А.Н., Суrowицкий В.Д., Бурховецкий В.В. Повышение сдвигового напряжения разрушения субмикрокристаллической меди методом гидроэкструзии // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2026. Т. 23, № 1. С. 124-132. doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2026.01.013.

---

Original article

## FRACTURE SHEAR STRESS INCREASING OF ULTRA-FINE GRAINED COPPER BY HYDROSTATIC EXTRUSION

Elizaveta V. Iasharova<sup>1</sup>, Alexandr N. Gangalo<sup>2</sup>, Victor D. Surovitsky<sup>3</sup>, Valery V. Burkhovetskii<sup>4</sup>

<sup>1,2,3,4</sup>Galkin Donetsk Institute for Physics and Engineering, Donetsk, 283048, DPR, Russia

<sup>1</sup>Donetsk State University, Donetsk, 283001, DPR, Russia

<sup>2</sup>Institute of Physics of Mining Processes, Donetsk, 283048, DPR, Russia

<sup>1</sup>yasharova.liza@yandex.ru, ORCID 0009-0002-8780-0918

<sup>2</sup>al-gangalo@yandex.ru, ORCID 0000-0001-5683-1346

<sup>3</sup>suroq94@gmail.com, ORCID 0009-0009-0722-4035

<sup>4</sup>val-bur\_63@mail.ru, ORCID 0009-0004-6249-2722

**Abstract.** The effect of postprocessing by hydrostatic extrusion on the fracture shear stress during tensile testing of ultra-fine grained copper obtained by equal-channel angular pressing was investigated. The hydrostatic extrusion processing influence has a positive effect on the plastic characteristics of the material was shown. The fracture shear stress increasing leads to increase the tensile strength to 10% in the range of  $\varepsilon_{HE}=0..0.6$ , with a further increase of deformation value the tensile strength decreases due to deformation heating was revealed. The fracture surfaces were examined by scanning electron microscopy. The tensile strength to the fracture shear stress ratio value, at which the mechanism of tensile fracture changes from shear to the mechanism of normal separation, was determined. The deformation of the hydrostatic extrusion influence on the dimples size was estimated: the mean dimples diameter raising almost twofold, which indicates an increase in the material viscosity. Structural changes in the material were studied by transmission electron microscopy. The axial texture during the hydrostatic extrusion process was formed, which leads to fracture shear stress and tensile strength increasing.

**Keywords:** fracture shear stress, ultra-fine grained structure, copper, hydrostatic extrusion, equal-channel angular pressing, deformation, strength, relative elongation, relative constriction, fracture mechanism, fracture angle.

**Acknowledgements:** The work was supported by Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation as part of a Project to create youth laboratories and a state assignment FREZ-2024-0001, the topic is "Bulk and film nanostructured materials with a high level of physical and mechanical properties".

**For citation:** Iasharova E.V., Gangalo A.N., Surovitsky V.D., Burkhovetskii V.V. (2026). Fracture shear stress increasing of ultra-fine grained copper by hydrostatic extrusion. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 23(1), 124-132. (In Russ.). doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2026.01.013.

### Введение

Медь – один из важнейших металлов, обладающих высокой пластичностью, ковкостью, тепло- и электропроводностью, а также высокой стойкостью к коррозии [1]. Медь и её сплавы широко используются в различных механических деталях, включая сварочные электроды одноточечных сварочных аппаратов, автомобильные детали, гидравлические линии давления и многие другие. Поэтому улучшение механических свойств меди для расширения её применения является актуальной исследовательской задачей [2].

Одним из подходов к решению является измельчение зеренной структуры до субмикроструктурного (СМК) состояния, для чего применяют методы интенсивной пластической

деформации (ИПД) [3, 4]. Использование этих методов позволяет в 2-3 и более раза повысить прочностные характеристики меди и сплавов на ее основе [5, 6]. Наиболее распространенным методом ИПД для получения прутковых материалов является метод равноканального углового прессования (РКУП) [7]. Суть метода заключается в продавливании заготовки через два пересекающихся канала, в результате чего материал испытывает интенсивные деформации простого сдвига, что приводит к измельчению зерна вплоть до наноразмеров и значительному повышению прочности. Однако, сопоставление прочностных свойств на примере магниевых сплавов с одинаковым размером зерна после РКУП и радиально-сдвиговой прокатки показало большие значения в пользу прокатки [8]. Это связано с тем, что в процессе обработки РКУП

в материале образуется наклоненная на  $45\text{--}50^\circ$  к направлению прессования базисная текстура [9]. Формирование такой текстуры после РКУП приводит к заниженным значениям критического напряжения сдвига для основных действующих систем деформаций, что косвенно свидетельствует о снижении прочности [8].

Исследование режима разрушения меди при испытаниях на растяжение после обработки РКУП (1-3 перехода) показало, что независимо от числа циклов материал разрушается по сдвиговому механизму с углом отрыва  $\theta=45^\circ$  [10]. Согласно критерию разрушения при растяжении, это свидетельствует о незначительной величине отношения сдвигового напряжения разрушения  $\tau_0$  к нормальному напряжению разрушения  $\sigma_0$  [11].

Дополнительное увеличение прочности меди СМК структурой, сформированной РКУП, возможно при повышении величины сдвигового напряжения разрушения. Для этого рекомендуется скомбинировать обработку с другой схемой деформирования, что уменьшит влияния текстуры, сформированной простым сдвигом [12, 13]. Так, например, применение гидроэкструзии (ГЭ) после обработки РКУП алюминиевого сплава АМц в зависимости от величины деформации позволило повысить прочность ещё на 5-20% [14].

Цель данной работы исследовать влияние деформации гидроэкструзии на сдвиговое напряжение разрушения и прочность субмикроструктурной меди, сформированной равноканальным угловым прессованием.

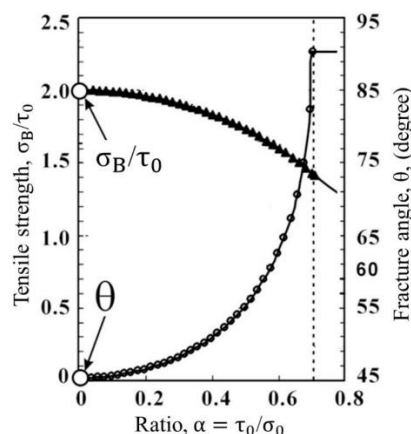
## 2. Материал и методика исследования

Материалом для исследования служила бескислородная медь марки М06, предварительно отожженная ( $600^\circ\text{C}$  2 часа), с пределом прочности на разрыв  $\sigma_b=242\pm 4$  МПа и относительным удлинением  $\delta=47.1\pm 0.5\%$ . Для перевода в СМК состояние заготовки диаметром 20 мм и длиной 140 мм были обработаны с использованием установки для РКУП с соответствующим диаметром рабочего канала, углом его пересечения  $\Phi=90^\circ$  и углом внешнего закругления  $\Psi=37^\circ$ . Это обеспечивало деформацию за один проход  $\approx 1$  [15]. Медные заготовки подверглись 12 циклам прессования с поворотом вокруг своей оси на  $90^\circ$  после каждого цикла деформирования (маршрут ВС [12]). Данный деформационный режим для меди

обеспечивает формирование однородной равноосной структуры [16, 17]. Таким образом суммарная деформация, накопленная РКУП в заготовках, составила  $\varepsilon_{\text{РКУП}}=12$ .

В дальнейшем СМК медь после удаления концевых эффектов РКУП (20 мм с каждого торца) обрабатывалась ГЭ. На установке с рабочим диаметром контейнера 22 мм материал деформировался через коническую матрицу с выходным диаметром отверстия  $d_m=11$  мм с различными степенями деформации  $\varepsilon_{\text{ГЭ}}=\ln(d_3^2/d_m^2)=0.3, 0.6, 0.9, 1.2$ , где  $d_3$  – диаметр заготовки, на который перетачивалась заготовка перед ГЭ. Скорость перемещения пуансона составляла 3 мм/с, рабочей жидкостью выступало индустриальное масло ИЗО.

Сдвиговое напряжение разрушения  $\tau_0$  определялось на базе критерия «эллипса» по значениям предела прочности  $\sigma_b$  при растяжении и угла отрыва  $\theta$ , используя зависимость этих параметров, представленную на рис. 1 [11].



**Рис.1.** Зависимость относительного предела прочности  $\sigma_b/\tau_0$  и угла отрыва  $\theta$  от отношения  $\alpha=\tau_0/\sigma_0$  [11].

**Fig. 1.** Dependence of the tensile strength  $\sigma_b/\tau_0$  and fracture angle  $\theta$  on the ratio  $\alpha=\tau_0/\sigma_0$  [11].

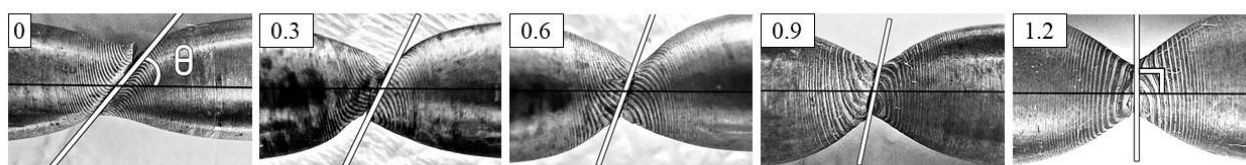
Испытания на растяжение проводили на разрывной машине Р-50 на образцах с диаметром разрывной части 5 мм с пятикратной длиной (ГОСТ 1497–84, тип III) со скоростью деформации  $\dot{\varepsilon}=1\times 10^{-3}\text{с}^{-1}$ . Макроскопический вид пластичного разрушения фотографировали с использованием цифровой камеры, установленной в Apple iPhone 13 Pro. Угол отрыва измеряли с использованием программы ImageJ. Микрорельеф центральной части поверхности

разрушения исследовали с использованием сканирующей электронной микроскопии (СЭМ) с использованием микроскопа JSM-6490LV. Микроструктуру исследовали методом просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) с использованием микроскопа JEOL JEM-200A.

### 3. Результаты и обсуждение

На рис. 2 показано влияние деформации гидроэкструзии  $\varepsilon_{ГЭ}$  на макроскопический вид пластического разрушения при растяжении ме-

ди с СМК структурой, сформированной РКУП. В исходном состоянии разрушение происходит по типу косого излома с углом отрыва  $\theta=50^\circ$ . Различия величины угла отрыва с данными работы [10], по-видимому, связаны с большим числом циклов РКУП, что обеспечивает однородную равноосную структуру без вытянутых зерен вдоль линии сдвига [8, 16], и погрешностью измерений. С применением обработки ГЭ угол отрыва  $\theta$  растет с увеличением степени деформации  $\varepsilon_{ГЭ}$  и достигает максимального значения  $\theta=90^\circ$  при деформации  $\varepsilon_{ГЭ}=1.2$ , характер разрушения переходит в чашечный тип.



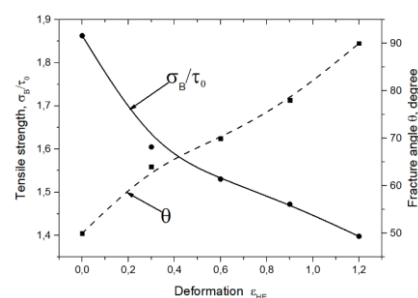
**Рис. 2.** Влияние деформации ГЭ на макроскопический вид пластического разрушения при растяжении СМК меди.

**Fig. 2.** The effect of hydrostatic extrusion deformation on the macroscopic appearance of plastic fracture during tensile testing of ultra-fine grained (UFG) copper.

Зависимость угла отрыва  $\theta$  и отношения предела прочности к сдвиговому напряжению разрушения, построенное по критерию «эллипса» [11], от деформации ГЭ представлено на рис. 3. Как видно, в исходном состоянии отношение предела прочности к сдвиговому напряжению разрушения СМК меди имеет максимальное значение  $\sigma_B/\tau_0=1.86$ . С применением деформации ГЭ происходит снижение данного отношения на всем промежутке деформаций вплоть до  $\sigma_B/\tau_0=1.4$  при максимальном уровне деформации ГЭ  $\varepsilon_{ГЭ}=1.2$ . При этом интенсивное снижение  $\sigma_B/\tau_0$  до 1.60 наблюдается сразу после смены схемы деформирования при деформации ГЭ  $\varepsilon_{ГЭ}=0.3$ , после чего происходит практически линейное понижение  $\sigma_B/\tau_0$  с увеличением деформации ГЭ. Снижение отношения предела прочности к сдвиговому напряжению разрушения под действием ГЭ возможно при снижении предела  $\sigma_B$  прочности или повышении сдвигового напряжения разрушения  $\tau_0$ , а также может являться результатом их взаимного изменения.

Влияние деформации ГЭ на механические свойства при растяжении СМК меди приведено в таблице 1. До обработки ГЭ сдвиговое напряжение разрушения составляло

$\tau_0=233\pm 5$  МПа, а предел прочности  $\sigma_B=434\pm 10$  МПа. Применение ГЭ повышает обе прочностные характеристики до максимальных значений  $\tau_0=324\pm 5$  МПа и  $\sigma_B=477\pm 8$  МПа при величине деформации  $\varepsilon_{ГЭ}=0.9$ . С превышением этой величины деформации происходит снижение прочностных свойств, что связано с интенсификацией процессов динамического возврата и рекристаллизации вследствие деформационного разогрева при ГЭ [18, 19].



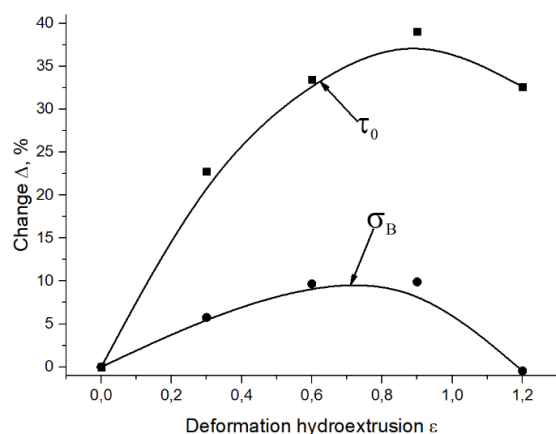
**Рис. 3.** Зависимость угла отрыва при растяжении СМК меди и отношения предела прочности к сдвиговому напряжению разрушения  $\sigma_B/\tau_0$  от деформации гидроэкструзией.

**Fig. 3.** Dependence of UFG copper fracture angle  $\theta$  during tensile testing and the tensile strength  $\sigma_B/\tau_0$  on the deformation value  $\varepsilon_{HE}$ .

**Таблица 1.** Влияние деформации гидроэкструзией на механические свойства СМК меди.**Table 1.** The effect of hydrostatic extrusion deformation on the UFG copper mechanical properties.

| Деформация гидроэкструзией $\varepsilon_{ГЭ}$  | 0        | 0,3      | 0,6      | 0,9      | 1,2      |
|------------------------------------------------|----------|----------|----------|----------|----------|
| Сдвиговое напряжение разрушения $\tau_0$ , МПа | 233±5    | 286±5    | 311±5    | 324±5    | 309±10   |
| Предел прочности $\sigma_b$ , МПа              | 434±10   | 459±8    | 476±7    | 477±8    | 432±14   |
| Относительное сужение $\psi$ , %               | 77.0±2.2 | 85.8±2.0 | 86.7±1.8 | 88.8±2.1 | 91.1±1.8 |
| Относительное удлинение $\delta$ , %           | 19.3±0.4 | 19.9±0.3 | 19.1±0.3 | 18.9±0.3 | 21.0±0.4 |

Для дальнейшего анализа влияния обработки ГЭ на механические свойства СМК меди при растяжении на рис. 4 показано относительное изменение сдвигового напряжения разрушения  $\Delta\tau_0$  и предела прочности  $\Delta\sigma_b$  от деформации  $\varepsilon_{ГЭ}$ . Как видно, приращение сдвигового напряжения разрушения от деформации ГЭ больше, чем для предела прочности, что объясняет снижение их отношения (рис. 3) при росте обоих характеристик. На отрезке деформации гидроэкструзией  $\varepsilon_{ГЭ}=0-0.6$  наблюдается интенсивное приращение прочностных характеристик, которое достигает значений  $\Delta\tau_0=33.5\%$  и  $\Delta\sigma_b=9.7\%$ . С увеличением деформации до  $\varepsilon_{ГЭ}=0.9$  наблюдается замедление роста прочностных характеристик, особенно предела прочности, при этой величине их повышение достигает максимума  $\Delta\tau_0=39.0\%$  и  $\Delta\sigma_b=9.9\%$ . Обработка ГЭ с деформацией  $\varepsilon_{ГЭ}=1.2$  приводит к незначительному снижению приращения сдвигового напряжения разрушения  $\Delta\tau_0=32.6\%$  и к полной потере для предела прочности  $\Delta\sigma_b=-0.5\%$ .

**Рис. 4.** Относительное изменение сдвигового напряжения разрушения  $\Delta\tau_0$  и предела прочности при растяжении  $\Delta\sigma_b$  от деформации  $\varepsilon_{ГЭ}$ .**Fig. 4.** Dependence of the change in fracture shear stress  $\Delta\tau_0$  and tensile strength  $\Delta\sigma_b$  on deformation  $\varepsilon_{HE}$ .

Гидроэкструзия оказывает положительное влияние на пластические характеристики СМК меди, особенно на относительное сужение, которое в исходном состоянии составляла  $\psi=77.0\pm2.2\%$  (табл. 1). Применение ГЭ с малой степенью деформации  $\varepsilon_{ГЭ}=0.3$  приводит к интенсивному увеличению относительного сужения до  $\psi=85.8\pm2.0\%$ , также наблюдается и небольшой рост относительного удлинения, который возрастает с  $\delta=19.3\pm0.4\%$  до  $\delta=19.9\pm0.3\%$ . Дальнейшее увеличение степени деформации приводит к монотонному увеличению относительного сужения до  $\psi=91.1\pm1.8\%$  при максимальной величине деформации ГЭ. Относительное удлинение ведет себя иначе: при величине деформации ГЭ  $\varepsilon_{ГЭ}=0.6-0.9$  происходит его снижение до  $\delta=18.9\pm0.3\%$ , а при деформации  $\varepsilon_{ГЭ}=1.2$  рост до  $\delta=21.0\pm0.4\%$ . Увеличение относительного удлинения при  $\varepsilon_{ГЭ}=1.2$ , по видимому, связано со снижением прочностных характеристик в результате процессов динамического возврата и рекристаллизации.

Сканирующая электронная микроскопия центральной части поверхности разрушения при растяжении СМК меди для всех образцов показала наличие волокнистой зоны, состоящей из разделенных гребнями ямок, в которой зарождаются, развиваются и объединяются поры, что характерно вязкому типу разрушения. На внутренней поверхности ямок наблюдаются волнистые линии, что свидетельствует о скольжении меди по линиям скольжения вследствие большой пластической деформации в процессе роста ямок перед разрушением.

В исходном состоянии после РКУП волокнистая зона СМК меди состоит из ямок параболической формы, вытянутых в одну сторону, что свидетельствует о сдвиговом механизме разрушения (рис 5а). В случае последующей ГЭ с деформацией  $\varepsilon_{ГЭ}=0.3$  волокнистая зона состоит из равноосных ямок нормального отрыва (рис 5б). Снижение отношения предела прочности к сдвиговому напряжению разрушения  $\sigma_b/\tau_0=1.86$  в исходном состоянии до  $\sigma_b/\tau_0=1.60$



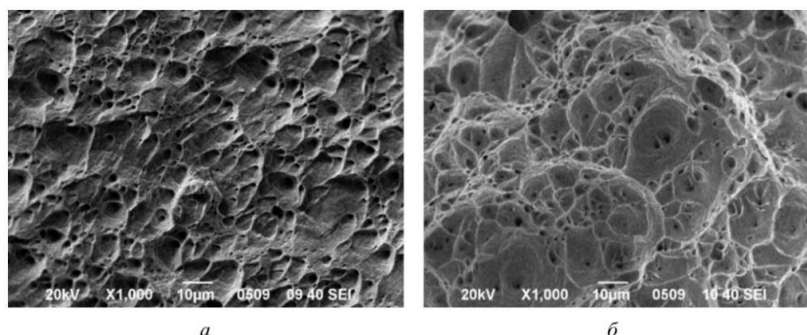
после ГЭ достаточно для изменения механизма разрушения со сдвигового в механизм нормального отрыва. По-видимому, качественное изменение механизма разрушения при малой величине деформации ( $\varepsilon_{ГЭ}=0.3$ ) и приводит к повышению пластических характеристик, отмеченных выше.

Оценка размеров ямок разрушения показала, что применение ГЭ приводит к их росту. В исходном состоянии средний размер ямок составлял  $d_{ср}=5.6 \mu\text{m}$ , после ГЭ с максимальной деформацией увеличился до  $d_{ср}=10.7 \mu\text{m}$ . Укрупнение ямочного рельефа в процессе обработки ГЭ свидетельствует о повышении вязкости материала, поскольку для образования трещины необходима большая пластическая деформация при слиянии пор и формировании ямок отрыва [20].

Влияние деформации ГЭ на структурные изменения меди с СМК структурой исследова-

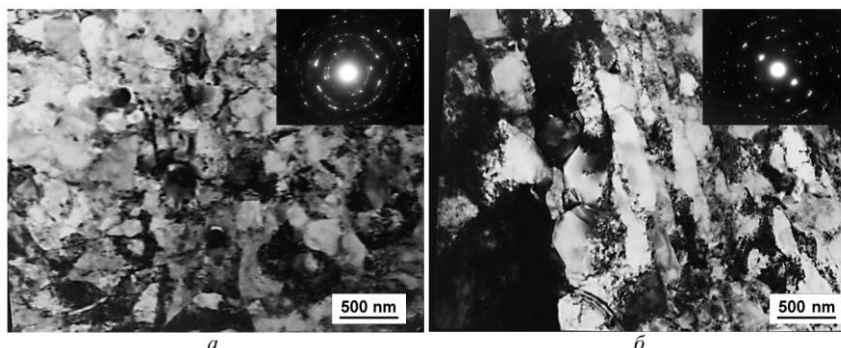
лись вдоль оси деформирования. В исходном состоянии после предварительной обработки РКУП была сформирована равноосная структура с размером зерен 200-300 nm и высокоугловой разориентировкой границ (рис. 6. а). Для малых деформаций ГЭ значимых изменений структуры не наблюдалось. При увеличении деформации до  $\varepsilon_{ГЭ}=1.2$  происходит формирование аксиальной текстуры с зернами размером до 500 nm, вытянутыми вдоль оси деформирования (рис. 6 б).

В технически чистых металлах с СМК структурой зарождение микропор и развитие трещин происходит преимущественно на границах зерен [20, 21]. Формирование вытянутых зерен вдоль оси нагружения препятствует развитию сдвигового механизма разрушения, тем самым повышая сдвиговое напряжение разрушения и предел прочности материала.



**Рис. 5.** Микрорельеф центральной части поверхности разрушения при растяжении СМК меди: а – в исходном состоянии ( $\sigma_b/\tau_0=1.86$ ), б – после гидроэкструзии с  $\varepsilon_{ГЭ}=0.3$  ( $\sigma_b/\tau_0=1.60$ ). СЭМ, контраст во вторичных электронах.

**Fig. 5.** The fracture surface central part of UFG copper tensile test: а – initial state ( $\sigma_b/\tau_0=1.86$ ), б – after hydrostatic extrusion with  $\varepsilon_{HE}=0.3$  ( $\sigma_b/\tau_0=1.60$ ). SEM, the contrast is in the secondary electrons.



**Рис. 6.** Микроструктура СМК меди вдоль оси деформирования (ПЭМ): а – исходное состояние, б – после гидроэкструзии с  $\varepsilon_{ГЭ}=1.2$ .

**Fig. 6.** Microstructure of UFG copper along the deformation axis (TEM): а – initial state, б – after hydrostatic extrusion with  $\varepsilon_{HE}=1.2$ .



#### 4. Выводы

1. Пост обработка гидроэкструзией меди с субмикроструктурной структурой, сформированной равноканальным угловым прессованием, позволяет дополнительно повысить прочностные свойства материала при растяжении. Гидроэкструзия с деформацией до  $\varepsilon_{гэ}=0.6$  обеспечивает наиболее эффективное влияние роста сдвигового напряжения разрушения на повышение предела прочности. В этом диапазоне деформаций сдвиговое напряжение разрушения повышается на 33.5% до  $\tau_0=324\pm 5$  МПа, а предел прочности на 9.7% до  $\sigma_b=476\pm 7$  МПа.

2. Снижение отношения предела прочности к сдвиговому напряжению разрушения с  $\sigma_b/\tau_0=1.86$  до  $\sigma_b/\tau_0=1.60$  приводит к изменению механизма разрушения при растяжении со сдвигового на механизм нормального отрыва.

#### Список литературы

1. M. Morales, E. Xuriguera, M. Martínez, J.A. Padilla, J. Molera, N.Ferrer, M. Segarra, and F. Espiell, Mechanical Characterization of Copper-Copper Wires Joined by Friction Welding Using Instrumented Indentation Technique, *J. Mater. Eng. Perform.*, 2014, 23, p 3941–3948.
2. M.J. Zehetbauer and R.Z. Valiev, *Nanomaterials by Severe Plastic Deformation*, Wiley, Hoboken, 2006, p 12–90.
3. Volokitin A.V., Volokitina I.E., Denissova A.I., Seref Sonmez M. Severe plastic deformation methods influence on the structure and properties of metal materials: A review // *Johnson Matthey Technology Review*. 2025. V. 69. Is. 2. P. 198–213. DOI:10.1595/205651325X17343556140949.
4. Valiev R.Z., Straumal B., Langdon T.G. Using severe plastic deformation to produce nanostructured materials with superior properties // *Annual Review of Materials Research*. 2022. V. 52. P. 357–382. DOI: 10.1146/annurev-matsci-081720-123248.
5. Edalati K., Bachmaier A., Beloshenko V.A., Beygelzimer Y. et al. Nanomaterials by severe plastic deformation: review of historical developments and recent advances // *Materials Research Letters*. 2022. V. 10. N 4. P. 163–256. DOI: 10.1080/21663831.2022.2029779.
6. Valiev, R.Z., Alexandrov, I.V., Kawasaki, M., and Langdon, T.G., *Ultrafine-Grained Materials*, Springer Nature, 2024.
7. Сегал В.М., Резников В.И., Копылов В.И. и др. Процессы пластического структурообразования. Минск: Наука і тэхніка, 1994. 232 с.
8. Серебряный В.Н., Добаткин С.В., Эстрин Ю.З., Галкин С.П., Диез М. Сравнительный анализ вклада текстуры в уровень механических свойств мелкозернистых магниевых сплавов после равноканального углового прессования и радиально-сдвиговой прокатки. *Технология легких сплавов*. №2, 2015. С.112–118.
9. Серебряный В.Н., Дьяконов Г.С., Копылов В.И., Салищев Г.А., Добаткин С.В. Вклад текстуры и структуры в повышение низкотемпературной пластичности сплава МА2-1пч системы Mg-Al-Zn-Mn, подвергнутого РКУП и отжигам. *Физика металлов и металловедение*. 2013, том 114, №5, с. 488–496.
10. Hoseini, S.H., Khalilpourazary, S. & Zadshakoyan, M. Fracture Behavior of Annealed and Equal Channel Angular Pressed Copper: An Experimental Study. *J. of Mater. Eng and Perform* 29, 975–986 (2020). <https://doi.org/10.1007/s11665-020-04598-z>.
11. Zhang Z.F., Eckert J. Unified tensile fracture criterion // *Physical Review Letters*. 2005. V. 94. Art. N 094301. DOI: 10.1103/PhysRevLett.94.094301.
12. Валиев Р.З., Жилиев А.П., Ленгдон Т.Дж. Объемные наноструктурные материалы: фундаментальные основы и применения. СПб.: Эко-Вектор, 2017. 479 с.
13. Бейгельзимер Я.Е., Варюхин В.Н., Орлов Д.В., Сынков С.Г. Винтовая экструзия – процесс накопления деформации. – Донецк: Фирма ТЕАН, 2003. – 87 с.
14. Сенникова Л.Ф., Гангало А.Н., Свиридова Е.А., Васильев С.В., Ткаченко В.М. Влияние разовой степени деформации гидроэкструзией на механические свойства сплава АМц, предварительно обработанного равноканальным угловым прессованием // *Прогрессивные технологии и системы машиностроения*. 2024. № 4 (87). С. 71–76.
15. Principle of equal-channel angular pressing for the processing of ultra-tine grained materials / Y. Iwahashi., J. Wang, Z. Horita et al. // *Scripta Materialia*. – 1996. – V. 35. – P. 143–146.
16. Dalla Torre, F. Microstructures and properties of copper processed by equal channel extrusion for 1– 16 passes / F. Dalla Torre, R. Lapovok, J. Sandlin, P. F. Thomson, C. H. J. Davies, E. V.

Pereloma // Acta Mater. – 2004. – V. 52. – P. 4819–4832.

17. Утяшев Ф.З., Рааб Г.И. Научные основы деформационных технологий формирования ультрамелкозернистых и наноструктурных объемных материалов: монография. Москва; Вологда: Инфра-Инженерия, 2021. 160 с.

18. Pachla W., Rulczyk M., Smalc-Koziorowska J., Przybysz S., Wroblewska M., Skiba J., Przybysz M. Enhanced strength and toughness in ultra-fine grained 99.9% copper obtained by cryo-hydrostatic extrusion // Materials Characterization. – 2018. – Vol.141. – P. 375–387.

19. Гангало, А.Н. Влияние гидропрессования на механические свойства ультрамелкозернистой меди / А.Н. Гангало, Е.В. Яшарова, Л.Ф. Сенникова, В.Д. Суровицкий, В.В. Бурховецкий, В.А. Глазунова // Деформация и разрушение материалов. 2025г. №10, С19-27. DOI: 10.31044/1814-4632-2025-10-19-27/.

20. Ботвина Л.Р. Основы фактодиагностики. Москва: ТЕХНОСФЕРА, 2022. – 394с.

21. Бетехтин В.И., Кадомцев А.Г. Эволюция микроскопических трещин и пор в нагруженных твердых телах. Физика твердого тела, 2005, том 47, вып. 5. С.801-807.

### Информация об авторах

Е.В. Яшарова – инженер-исследователь ФГБНУ «Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина»; магистрант Донецкого государственного университета; +79493536750.

А.Н. Гангало – кандидат технических наук, заведующий лабораторией «Объемных и пленочных наноструктурированных материалов» ФГБНУ «Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина»; +79494273846.

В.Д. Суровицкий – ведущий инженер ФГБНУ «Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина»; +79495870053.

В.В. Бурховецкий – научный сотрудник ФГБНУ «Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина»; +79496456045.

### References

1. M. Morales, E. Xuriguera, M. Martí 'nez, J.A. Padilla, J. Molera, N.Ferrer, M. Segarra, and F. Espiell, Mechanical Characterization of Copper-Copper Wires Joined by Friction Welding Using

Instrumented Indentation Technique, J. Mater. Eng. Perform., 2014, 23, p 3941–3948.

2. M.J. Zehetbauer and R.Z. Valiev, Nanomaterials by Severe Plastic Deformation, Wiley, Hoboken, 2006, p 12–90.

3. Volokitin A.V., Volokitina I.E., Denisova A.I., Seref Sonmez M. Severe plastic deformation methods influence on the structure and properties of metal materials: A review // Johnson Matthey Technology Review. 2025. V. 69. Is. 2. P. 198–213. DOI:10.1595/205651325X17343556140949.

4. Valiev R.Z., Straumal B., Langdon T.G. Using severe plastic deformation to produce nanostructured materials with superior properties // Annual Review of Materials Research. 2022. V. 52. P. 357–382. DOI: 10.1146/annurev-matsci-081720-123248.

5. Edalati K., Bachmaier A., Beloshenko V.A., Beygelzimer Y. et al. Nanomaterials by severe plastic deformation: review of historical developments and recent advances // Materials Research Letters. 2022. V. 10. N 4. P. 163-256. DOI: 10.1080/21663831.2022.2029779.

6. Valiev, R.Z., Alexandrov, I.V., Kawasaki, M., and Langdon, T.G., Ultrafine-Grained Materials, Springer Nature, 2024.

7. Segal V.M., Reznikov V.I., Kopylov V.I. et al. Processes of plastic structure formation. Minsk: Navuka i tekhnika, 1994. 232 p.

8. Serebryanny V.N., Dobatkin S.V., Estrin Yu.Z., Galkin S.P., Diez M. Comparative analysis of the contribution of texture to the level of mechanical properties of fine-grained magnesium alloys after equal channel angular pressing and radial shear rolling. Technology of light alloys. No. 2, 2015. P.112-118.

9. Serebryanny V.N., Dyakonov G.S., Kopylov V.I., Salishchev G.A., Dobatkin S.V. Contribution of texture and structure to the increase in low-temperature plasticity of alloy MA2-1pch of the Mg-Al-Zn-Mn system subjected to ECAP and anneals. Physics of metals and metal science. 2013, V. 114, No. 5, P. 488-496.

10. Hoseini, S.H., Khalilpourazary, S. & Zadshakoyan, M. Fracture Behavior of Annealed and Equal Channel Angular Pressed Copper: An Experimental Study. J. of Materi Eng and Perform 29, 975–986 (2020). <https://doi.org/10.1007/s11665-020-04598-z>.

11. Zhang Z.F., Eckert J. Unified tensile fracture criterion // Physical Review Letters. 2005. V. 94. Art. N 094301. DOI: 10.1103/PhysRevLett.94.094301.

12. Valiev R.Z., Zhilyaev A.P., Langdon T.G. Bulk nanostructured materials: fundamental principles and applications. SPb.: Ekho-Vektor, 2017. 479 p.
13. Beygelzimer Ya.E., Varyukhin V.N., Orlov D.V., Synkov S.G. Screw extrusion – process of strain accumulation. – Donetsk: Firma TEAN, 2003. – 87 p.
14. Sennikova L.F., Gangalo A.N., Sviridova E.A., Vasiliev S.V., Tkachenko V.M. Influence of single deformation degree by hydroextrusion on mechanical properties of AMts alloy, pre-processed by equal channel angular pressing // Progressive technologies and systems of mechanical engineering. 2024. No. 4 (87). P. 71-76.
15. Principle of equal-channel angular pressing for the processing of ultra-fine grained materials / Y. Iwahashi., J. Wang, Z. Horita et al. // Scripta Materiala. – 1996. – V. 35. – P. 143-146.
16. Dalla Torre, F. Microstructures and properties of copper processed by equal channel extrusion for 1– 16 passes / F. Dalla Torre, R. Lapovok, J. Sandlin, P. F. Thomson, C. H. J. Davies, E. V. Pereloma // Acta Mater. – 2004. – V. 52. – P. 4819– 4832.
17. Utyashev F.Z., Raab G.I. Scientific foundations of deformation technologies for forming ultrafine-grained and nanostructured bulk materials: monograph. Moscow; Vologda: Infra-Engineering, 2021. 160 p.
18. Pachla W., Rulczyk M., Smalc-Koziorowska J., Przybysz S., Wroblewska M., Skiba J., Przybysz M. Enhanced strength and toughness in ultra-fine grained 99.9% copper obtained by cryo-hydrostatic extrusion // Materials Characterization. – 2018. – Vol.141. – P. 375–387.
19. Gangalo, A.N. Influence of hydropressing on mechanical properties of ultrafine-grained copper / A.N. Gangalo, E.V. Yasharova, L.F. Sennikova, V.D. Surovitskiy, V.V. Burkhovetskiy, V.A. Glazunova // Deformation and fracture of materials. 2025, No. 10, P. 19-27. DOI: 10.31044/1814-4632-2025-10-19-27/.
20. Botvina L.R. Fundamentals of fractodiagnosics. Moscow: TECHNOSPHERE, 2022. – 394 p.
21. Betekhtin V.I., Kadomtsev A.G. Evolution of microscopic cracks and pores in loaded solids. Physics of the Solid State, 2005, vol. 47, issue 5. P. 801-807.

### **Information about the authors**

*E.V. Iasharova – research engineer at Galkin Donetsk Institute for Physics and Engineering; master's student at Donetsk State University; +79493536750.*

*A.N. Gangalo – Candidate of Technical Sciences, head of the laboratory “Bulk and Film Nanostructured Materials” at Galkin Donetsk Institute for Physics and Engineering; +79494273846.*

*V.D. Surovitsky – leading engineer at Galkin Donetsk Institute for Physics and Engineering; +79495870053.*

*V.V. Burkhovetskii – research associate at Galkin Donetsk Institute for Physics and Engineering; +79496456045.*

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.  
The authors declare that there is no conflict of interest.

Статья поступила в редакцию 14.11.2025; одобрена после рецензирования 23.02.2026; принята к публикации 02.03.2026.

The article was received by the editorial board on 14 Nov. 2025; approved after reviewing 23 Feb. 2026; accepted for publication 02 Mar. 2026.



### Памяти Александра Марковича Глезера

26 января 2026 года исполнилось бы 80 лет Александру Марковичу Глезеру, доктору физико – математических наук, профессору – крупному ученому и лидеру научной школы в области изучения и разработки многофункциональных материалов нового поколения. Под его руководством выполнен ряд фундаментальных и прикладных исследований нанокристаллических и аморфных функциональных материалов. Он является ведущим ученым России в области материалов, полученных методами закалки из расплава и интенсивной пластической деформации. Он также известен как ведущий ученый в области применения электронно-микроскопических методов для исследования структуры конденсированного состояния.

Им впервые обнаружены необычные эффекты структурно-фазовых превращений, связанные с высокой степенью пересыщения материалов избыточными вакансиями, формирующимися при закалке из расплава. Им также впервые обнаружен и детально проанализирован размерный эффект при мартенситном превращении в нанокристаллах. А.М.Глезеру принадлежит новый оригинальный подход, позволивший понять природу структурно – фазовых превращений, происходящих при интенсивной пластической деформации.

А.М. Глезером установлены способы и конкретные режимы кардинального повышения магнитных, прочностных и пластических свойств модельных и промышленных функциональных материалов на основе железа, никеля и кобальта, в основе которых лежат методы получения нанокристаллических структур с помощью закалки из расплава в сочетании с интенсивной пластической деформацией.

А.М.Глезер более 20 лет руководил Институтом металловедения и физики металлов им. академика Г.В. Курдюмова – одним из авторитетнейших институтов России в области материаловедения. А.М. Глезер – лауреат Премии РАН имени П.П. Аносова (2011 год) за выдающиеся научные работы в области металлургии, металловедения и термической обработки металлов и сплавов.

А.М. Глезер был главным редактором журнала «Деформация и разрушение материалов», который входит в список ВАК и переводится на английский язык издательством «Шпрингер», заместителем главного редактора журнала «Материаловедение», членом редколлегий журналов «Известия РАН, серия физическая», «Journal of Material Science & Technology», «Наноструктурное материаловедение», «Фундаментальные проблемы современного материаловедения» и «Проблемы черной металлургии и материаловедения».

А.М. Глезер входил в состав Научных Советов РАН по физике конденсированных сред, наноматериалам, металловедению и металлургии. Он также являлся одним из руководителей Межгосударственного Координационного Совета по физике прочности и пластичности материалов.

В нашей памяти Александр Маркович Глезер останется как яркий и самобытный ученый, неутомимый исследователь, человек высоких нравственных принципов и государственного мышления. Имя Александра Марковича Глезера навсегда вписано в историю металлофизической науки. Мы навсегда сохраним светлую память об этом талантливом Человеке и Ученом!

---

Отпечатано в типографии АлтГТУ. Адрес: 656038, Алтайский край, г. Барнаул, пр. Ленина, д. 46

---

Сдано в набор 23.03.2026 г.    Подписано в печать 25.03.2026 г.    Дата выхода в свет 31.03.2026 г.  
Формат 60х84 1/8    Бумага офсет    Гарнитура Таймс    Печать цифровая  
Усл. печ. л. 14,88    / Тираж 250 экз.    Заказ № 1