

Структурная стабильность и электронные свойства системы Zr–He: расчеты из первых принципов

© Ю.М. Коротеев^{*,**}, О.В. Лопатина^{*}, И.П. Чернов^{*}

^{*} Томский политехнический университет,
Томск, Россия

^{**} Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук,
Томск, Россия

E-mail: koroteev@ispms.tsc.ru

(Поступила в Редакцию 7 мая 2008 г.

В окончательной редакции 10 декабря 2008 г.)

Проведены *ab initio* исследования атомной и электронной структуры системы Zr–He. Обнаружен индуцированный гелием фазовый переход в цирконии. Определено наиболее предпочтительное положение примеси в решетке металла. Рассчитана энергия растворения гелия и вносимый им избыточный объем. Показано, что присутствие гелия в решетке Zr приводит к значительному возмущению валентной зарядовой плотности металла и существенному изменению его электронной структуры.

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки РФ в рамках программы „Развитие научного потенциала высшей школы“.

PACS: 61.66.-f, 61.72.jj, 61.72.S-, 71.20.-b, 71.20.Вс

1. Введение

На протяжении нескольких последних десятилетий широко исследуется поведение инертных газов в металлах [1,2]. Особый интерес проявляется к гелию. Образуясь в результате (n, α)-реакций, он накапливается в металлах и является одним из главных факторов, определяющих радиационное распухание и высокотемпературное охрупчивание конструкционных материалов ядерных реакторов [3,4]. При низких температурах гелий влияет на процессы радиационного упрочнения [5] и усталостные характеристики материала, выступая как препятствие для движения дислокаций [6,7]. Все эти факторы негативно влияют на эксплуатационные свойства реакторных материалов.

Основной трудностью в понимании макроскопических эффектов, возникающих из-за накопления гелия, является необходимость рассмотрения проблемы на многих уровнях: начиная с микроскопического (электронная конфигурация и положение атома гелия в кристаллической решетке металла, соответствующие им энергетические характеристики), через исследование механизмов диффузии, кинетики зарождения и роста пузырей к установлению связи между эволюцией микроструктуры и изменением макроскопических свойств материала [8].

Начало микроскопическому рассмотрению поставленной задачи положено в работах [9–12]. Были вычислены теплота растворения и энергия активации диффузии гелия в Al, Mg, Ni, Cu и Pd. Показано, что для корректного описания поведения гелия в решетке металла необходим учет его квантовой природы (нулевые колебания). Однако эти работы носили полуэмпирический или модельный характер (модель желе), а их результаты могли решить поставленную задачу лишь на качественном уровне.

Как было отмечено в [11], трудности, с которыми столкнулись эти методы, связаны с тем, что гелий существенным образом возмущает электроны металла-хозяина, а также может приводить к искажению его решетки. Таким образом, для получения количественно точных результатов необходимо использование *ab initio* методов.

Исследование систем металл–гелий *ab initio* методами стало возможным только с появлением современных мощных компьютеров. К настоящему моменту опубликован ряд работ, посвященных расчетам различных энергетических характеристик гелия в металлах и сплавах [13–18]. Были рассмотрены такие металлы, как Al, Ni, Fe, Pd, Cu, La, а также различные сплавы и растворы на их основе. Однако в литературе отсутствуют какие-либо работы, посвященные изучению влияния гелия на структурную стабильность и электронные свойства такого важного для ядерной энергетики металла, как цирконий. Действительно, Zr используется для изготовления тепловыделяющих элементов, теплообменников и других конструкций ядерных реакторов. Как известно, в процессе работы ядерных реакторов на тепловых нейтронах с водным теплоносителем трансмутационно порождаются атомы гелия с кинетической энергией ~ 1.8 MeV, что позволяет им проникать в материал внутрикорпусных устройств на глубину до $40 \mu\text{m}$ [19]. Накапливаясь, атомы гелия создают в приповерхностной области металла твердый раствор с высокой концентрацией примеси. Это может быть причиной концентрационного полиморфизма циркония, подобно тому, который имеет место при растворении в нем водорода [20]. Таким образом, для циркония крайне актуально стоит вопрос об устойчивости его кристаллической структуры в присутствии гелия, поскольку от этого зависит безопасность

работы ядерных реакторов. Для наиболее эффективного решения этой задачи необходимо широкое теоретическое исследование физических свойств системы Zr–He из первых принципов.

Целью настоящей работы является *ab initio* исследование фазовой стабильности системы Zr–He, расчет энергии растворения гелия в решетке Zr, а также изучение влияния гелия на электронную структуру и распределение валентной зарядовой плотности металла.

2. Метод и детали расчета

В рамках теории функционала плотности с использованием обобщенно-градиентного приближения [21] линеаризованным методом присоединенных плоских волн [22,23], реализованным в пакете программ FLEUR [24], выполнены самосогласованные расчеты полной энергии и электронной структуры чистого Zr и системы Zr–He. Радиусы muffin-tin (MT)-сфер атомов Zr и He были выбраны равными 2.3 и 1.0 а.е. соответственно, что позволяло атомам гелия свободно помещаться в тетраэдрическом и октаэдрическом междуузлиях гексагональной плотноупакованной (ГПУ), объемно центрированной кубической (ОЦК) и граничноцентрированной кубической (ГЦК) решетках циркония, а также в различных междуузлиях его ω -фазы. В разложении волновой функции внутри MT-сфер по сферическим гармоникам учитывались члены вплоть до $l = 8$ для Zr и до $l = 6$ для He. Для достижения необходимой точности при расчете полной энергии параметр обрезания плосковолнового базиса k_{\max} был выбран равным 4.0 а.е.^{-1} , что соответствовало более 160 базисным функциям (присоединенным плоским волнам) на атом. На каждой итерации самосогласования собственные значения гамильтониана рассчитывались в 140 k -точках неприводимой части зоны Бриллюэна для ГЦК- и ГПУ-структур, в 126 k -точках для ОЦК-структуры и в 205 k -точках для ω -фазы. Процедура самосогласования электронной плотности проводилась до достижения сходимости полной энергии не хуже 0.02 meV , что соответствовало сходимости зарядовой плотности не хуже $0.0001 \text{ meV/Bohr}^3$. Плотность электронных состояний $N(E)$ рассчитывалась линейным методом тетарэдронов, а ее сглаживание осуществлялось гауссианами со среднеквадратичной шириной 0.08 eV .

Для удобства сравнения значений полной энергии расчетные элементарные ячейки были выбраны так, что для чистого Zr в ГПУ-, ОЦК- и ГЦК-структурах они содержали два атома металла, а для системы Zr–He еще и один атом гелия. Полная энергия ω -фазы системы Zr–He сравнивалась с аналогичной величиной наиболее энергетически выгодной (это показано далее) ОЦК-фазы, рассчитанной для элементарной ячейки с гексагональной симметрией, содержащей три атома Zr и один атом He. Обе структуры (ОЦК- и ω -фазы) могут быть описаны гексагональной решеткой с тремя атомами на ячей-

ку [25], положения которых определяются координатами (000), $(1/3, 2/3, 1/3 + z_\omega)$ и $(2/3, 1/3, 2/3 - z_\omega)$, где $z_\omega = 0$ отвечает ОЦК-структуре, а $z_\omega = 1/6$ — ω -фазе.

Для кубических структур (ГЦК и ОЦК) была рассчитана зависимость полной энергии кристалла E_{tot} от объема его элементарной ячейки Ω . Для гексагональных структур (ГПУ- и ω -фазы) полная энергия была вычислена как функция Ω и отношения параметров решетки c/a .

3. Результаты и обсуждения

3.1. Атомная структура. На рис. 1 приведена рассчитанная в работе зависимость полной энергии E_{tot} кристалла Zr от удельного объема Ω_0 , приходящегося на один атом. Видно, что при отсутствии внешнего давления кристалл Zr имеет ГПУ-структуру. Под давлением (уменьшение Ω_0) наблюдается фазовый переход из ГПУ-фазы в ω -фазу, которая при еще больших давлениях переходит в ОЦК-фазу. Эта последовательность индуцированных давлением фазовых переходов хорошо согласуется с результатами широких экспериментальных и теоретических исследований [26–28]. Вычисленные значения равновесного объема Ω_0 для кристаллических структур ГПУ-, ГЦК-, ОЦК- и ω -фаз равны соответственно $23.27, 23.06, 22.82$ и 23.11 \AA^3 и находятся в хорошем согласии как с экспериментальными [26,29–31], так и с теоретическими результатами других работ [27,32–34].

На рис. 2 представлена рассчитанная зависимость $E_{\text{tot}}(\Omega)$ для системы Zr–He, когда атомы металла образуют ГПУ-, ОЦК- и ГЦК-решетки, а атомы гелия занимают тетраэдрические или октаэдрические междуузлия. Здесь Ω — объем элементарной ячейки, содержащей два атома Zr и один атом He. Как следует из рис. 2, ОЦК-структура металла является наиболее энергетически выгодной и при тетраэдрическом, и при октаэдрическом расположении гелия, а тетраэдрическое

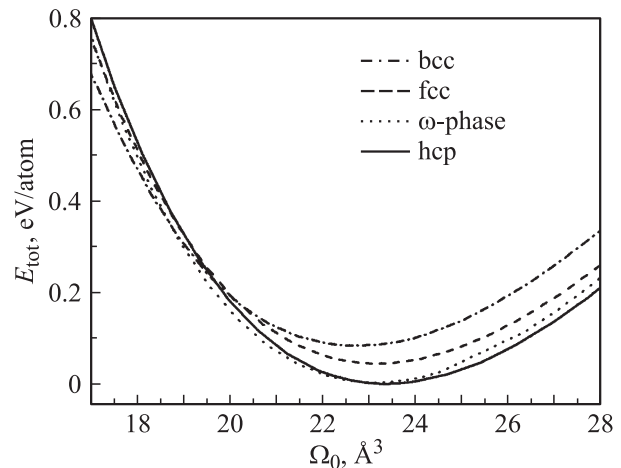


Рис. 1. Зависимость полной энергии чистого Zr от удельного объема Ω_0 , приходящегося на один атом. За точку отсчета принято значение полной энергии ГПУ-структуры.

междоузлие предпочтительнее октаэдрического для всех трех рассмотренных структур.

Попадая в кристалл, примесь изменяет его объем. Величина этого изменения определяется как разность объемов кристалла с примесью и чистого кристалла и называется обычно избыточным объемом. В табл. 1 приведен избыточный объем, вносимый атомом гелия в решетку Zr. Видно, что, располагаясь в тетраэдрическом междоузлии ОЦК-решетки, атом гелия вносит меньший

Таблица 1. Избыточный объем, вносимый атомом He в решетку Zr

Тип решетки	Избыточный объем, Å ³	
	Тетраэдрическое междоузлие	Октаэдрическое междоузлие
ОЦК	6.51	7.90
ГПУ	7.25	6.57
ГЦК	8.86	7.31

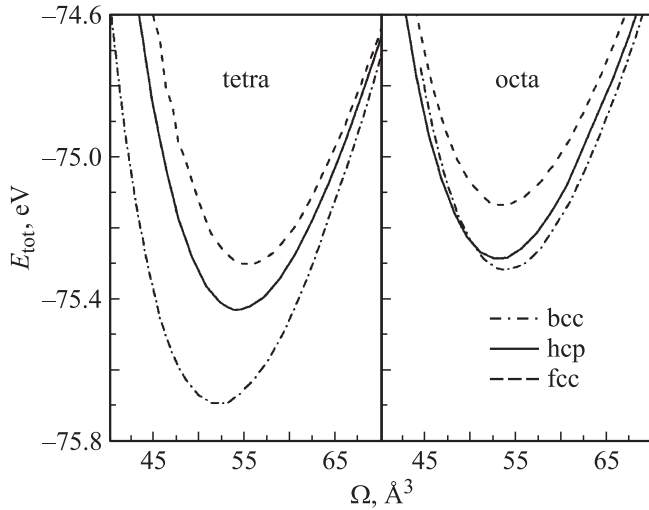


Рис. 2. Зависимость полной энергии системы Zr–He от объема элементарной ячейки Ω ГПУ (hcp)-, ГЦК (fcc)- и ОЦК (bcc)-решеток Zr для тетраэдрической и октаэдрической координации атома гелия. За точку отсчета принято значение полной энергии ГПУ-структуры чистого Zr.

избыточный объем, чем в октаэдрическом. Для ГПУ- и ГЦК-решеток наблюдается противоположная картина. Это можно понять, опираясь на тот факт, что в ГЦК- и ГПУ-структурах координационные полиэдры являются правильными многогранниками, при этом тетраэдры по объему вдвое меньше октаэдров. Отсюда следует, что при размещении примесного атома в тетрапоре элементарная ячейка Zr увеличится (без изменения формы) в большей степени, чем в случае октаэдрической координации.

Октаэдрические междоузлия ОЦК-решетки также вдвое больше по объему тетраэдрических. Однако координационные многогранники в ОЦК-структуре не являются правильными: ребра тетраэдров различаются по величине (одно равно a , пять ребер равны $a\sqrt{3}/2$), а октаэдры хотя и имеют равновеликие ребра, но сильно сплюснуты в одном из направлений. Эти особенности координационных полиэдров ОЦК-решетки приводят к тому, что в тетрапоры могут внедриться без смещения атомов металла более крупные неметаллические атомы, чем в октапоры [35]. В нашем случае это обстоятельство проявляется в том, что, располагаясь в октапоре ОЦК-решетки, атом гелия в большей степени увеличивает размер элементарной ячейки Zr, чем в тетрапоре.

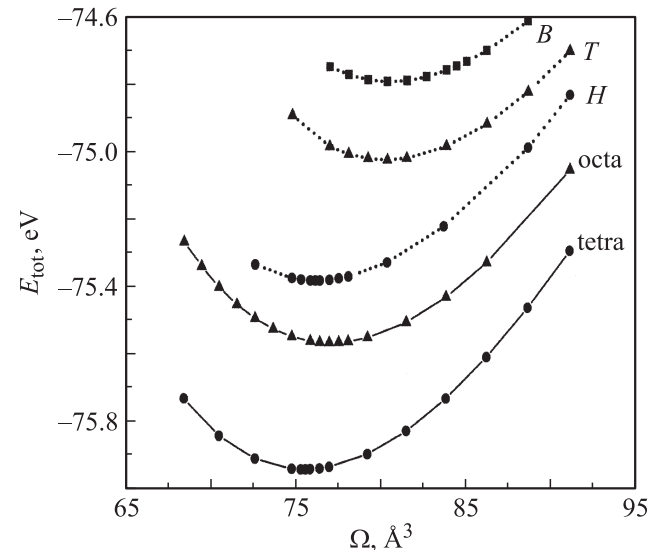


Рис. 3. Зависимость $E_{tot}(\Omega)$ для систем Zr–He, где атомы циркония находятся в ОЦК- (сплошные линии) и ω -фазе (пунктирные линии). B, H и T соответствуют положениям атома гелия с координатами $(0, 0, 1/2)$, $(1/2, 1/2, 0)$ и $(1/2, 1/2, 1/4)$ в решетке ω -фазы Zr. Как и на рис. 2, энергия приводится относительно минимума полной энергии ГПУ-структуры Zr, нормированной по количеству атомов в ячейке.

На рис. 3 представлена рассчитанная зависимость $E_{tot}(\Omega)$ для системы Zr–He, где атомы циркония находятся в ОЦК- и ω -фазе. Для этих систем концентрация гелия в решетке Zr ниже (на три атома Zr приходится один атом He), чем в предыдущем случае (на два атома Zr — один атом He). Сравнивая рис. 2 и 3, можно видеть, что при понижении концентрации гелия в ОЦК-решетке Zr тетраэдрическое положение примеси остается энергетически более предпочтительным, чем октаэдрическое. Кроме того, из рис. 3 следует, что ОЦК-структура Zr с тетраэдрическим и даже октаэдрическим положением гелия энергетически выгоднее ω -фазы металла со всеми возможными междоузельными положениями рассматриваемой примеси.

В табл. 2 приведена вычисленная в работе энергия растворения атома гелия в решетке Zr, определявшаяся по формуле

$$\Delta E = E_{tot}(Zr_nHe) - [nE_{tot}(Zr) + E_{tot}(He)],$$

где $E_{tot}(Zr_nHe)$, $E_{tot}(Zr)$ и $E_{tot}(He)$ — полные энергии системы Zr_nHe , чистого Zr и изолированного атома

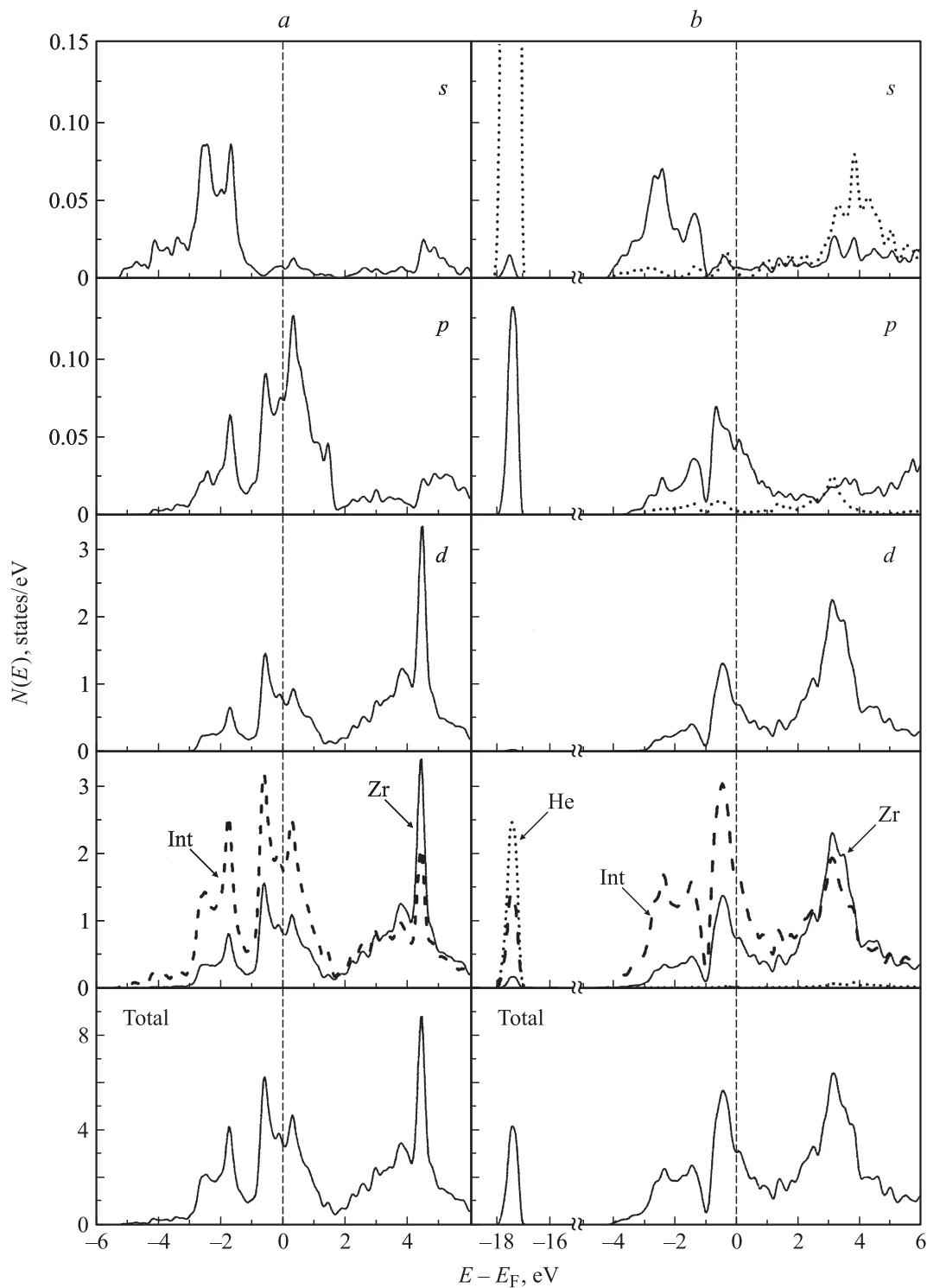


Рис. 4. Плотность электронных состояний $N(E)$ ОЦК-структуры чистого Zr (*a*) и системы Zr–He с тетраэдрической координацией атома He (*b*). На нижней панели приведена полная плотность электронных состояний (Total), на второй панели снизу — локальная плотность электронных состояний в межатомной области (Int) и МТ-сферах атомов циркония и гелия, на трех верхних панелях — парциальные плотности состояний s -, p - и d -типа.

гелия. Для последней величины было использовано значение -78.5044 eV, полученное нами из самосогласованного расчета атома гелия в вакууме при нулевой температуре.

Вычисленная энергия растворения имеет положительные значения для всех рассмотренных случаев. Это обстоятельство свидетельствует о том, что при нормальных условиях гелий не растворяется в цирконии и

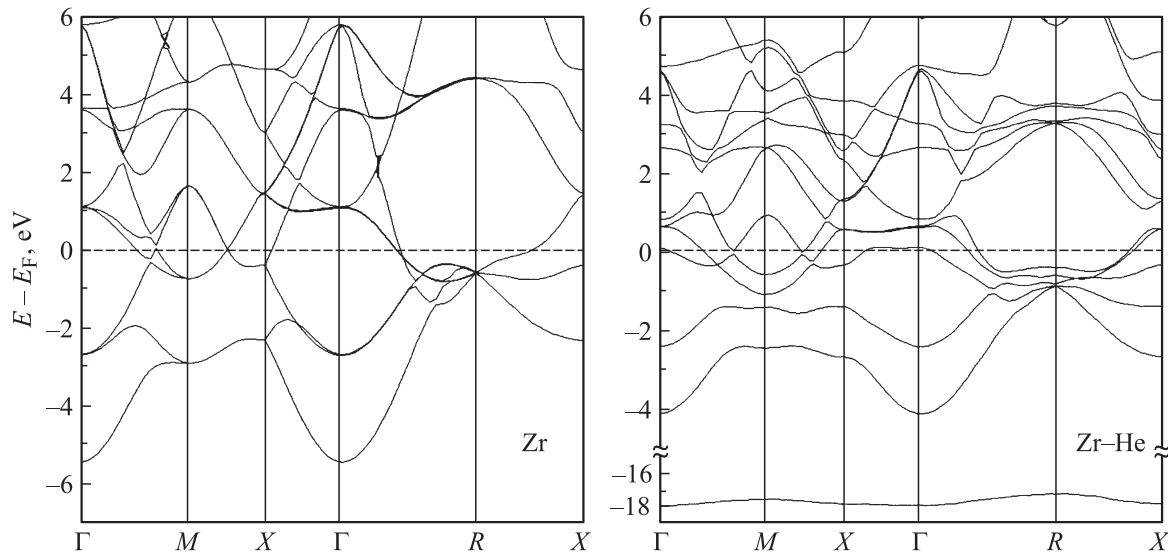


Рис. 5. Дисперсионные кривые $E(k)$ для Zr и Zr–He в ОЦК-структуре с гелием в тетрапоре.

может проникать в объем материала лишь при особых условиях, например в результате имплантации (облучения α -частицами) или ядерных реакций, протекающих в материале. Как следует из табл. 2, для всех рассмотренных структур наименьшую энергию растворения гелий имеет в тетраэдрическом междуузлии, а энергия его растворения в обоих междуузлиях ОЦК-решетки меньше соответствующих величин для других рассмотренных структур.

К сожалению, нам не удалось найти в литературе данных об энергии растворения гелия в Zr, поэтому мы провели сравнение наших результатов с данными для Al, Mg [9] и α -Fe [16]. Псевдопотенциальные расчеты [9], проведенные в рамках теории нелинейного экранирования, дали следующие значения энергии растворения гелия: в Al $\Delta E_{\text{octa}} = 4.06$ eV и $\Delta E_{\text{tetra}} = 5.77$ eV; в Mg $\Delta E_{\text{octa}} = 2.71$ eV и $\Delta E_{\text{tetra}} = 3.28$ eV. Отсюда в работе [9] был сделан вывод о том, что октаэдрическое междуузлие решетки Al и Mg является более предпочтительным для размещения гелия, чем тетраэдрическое. Такое заключение противоречит сделанному нами выводу о тетраэдрической координации гелия в ГЦК- и ГПУ-решетках Zr. По-видимому, указанное обстоятельство может быть связано с тем, что Al и Mg являются простыми металлами, в то время как Zr — переходный металл.

Таблица 2. Энергия растворения гелия в Zr

Тип решетки	Энергия растворения, eV	
	Тетраэдрическое междуузлие	Октаэдрическое междуузлие
ОЦК	2.63	3.02
ГПУ	3.08	3.19
ГЦК	3.09	3.28

Действительно, $4d$ -электроны Zr сильнее локализованы в пространстве, чем валентные $s-p$ -электроны Al и Mg, поэтому они в большей степени испытывают отталкивание от сильно связанных „остовных“ $1s$ -электронов внедренного гелия.

Более поздние *ab initio* расчеты [16] дали для энергии растворения гелия в α -Fe значения $\Delta E_{\text{octa}} = 4.58$ eV и $\Delta E_{\text{tetra}} = 4.40$ eV. Это означает, что тетраэдрическое междуузлие решетки α -Fe предпочтительнее октаэдрического для размещения гелия. Этот вывод хорошо согласуется с результатами наших расчетов для ОЦК Zr. Что касается значений энергии растворения, то они оказались более чем в 1.5 раза выше соответствующих величин, полученных нами для циркония. Вероятнее всего, это обусловлено тем, что в железе число валентных d -электронов в 3 раза больше, чем в цирконии.

3.2. Электронная структура

3.2.1. Плотность электронных состояний. В связи с тем, что ОЦК-структура Zr с тетраэдрической координацией гелия является наиболее энергетически выгодной, в дальнейшем будем рассматривать лишь ее. На рис. 4 представлены рассчитанные плотности электронных состояний чистого Zr и системы Zr–He. Результаты, полученные нами для чистого металла, хорошо согласуются с данными справочника [36] и работы [37]. Как видно из рис. 4, присутствие гелия в решетке металла заметно изменяет его электронную структуру.

1) Ниже дна зоны проводимости Zr появляется узкая (~ 0.7 eV) зона s -состояний гелия, отделенная от валентных состояний металла щелью ~ 13 eV.

2) Ширина зоны проводимости Zr уменьшается с 5.25 до 4.15 eV, т. е. на 1.1 eV.

3) Исчезает пик плотности состояний металла при энергии 0.28 eV.

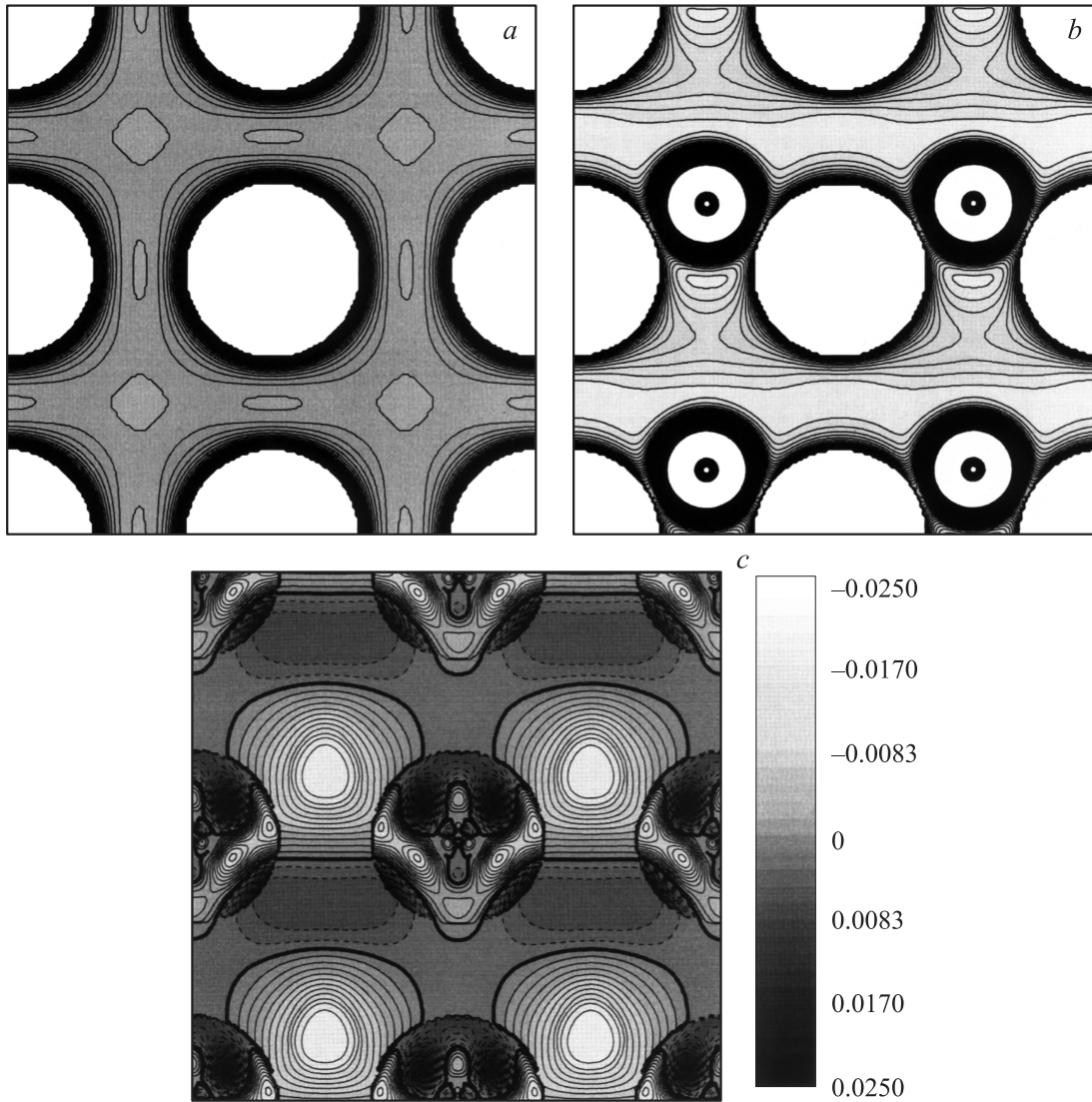


Рис. 6. Распределение зарядовой плотности $\rho(r)$ в ОЦК-структуре. *a* — $\rho_{\text{Zr}}(r)$ чистого Zr, *b* — $\rho_{\text{Zr-He}}(r)$ системы Zr–He, *c* — разность валентных плотностей $\rho(r) = \rho_{\text{Zr-He}}(r) - (\rho_{\text{Zr}}(r) + \rho_{\text{He}}(r))$.

4) Высокий пик $N(E)$ с энергией 4.4 eV сдвигается к уровню Ферми на 1.3 eV, а его высота понижается на 2.5 states/eV.

Добавим, что сужение зоны проводимости Zr происходит за счет вытеснения атомом гелия $s-p$ -состояний металла в МТ-сферах и их „хвостов“ в межатомной области кристалла из энергетического интервала от -5.25 до -4.18 eV.

Атом гелия имеет два электрона в s -состоянии. При выбранных нами радиусах МТ-сфер 62% электронной зарядовой плотности атома гелия находится в его МТ-сфере, 34% попадает в межатомную область кристалла, а 4% — в МТ-сферу Zr. Пик плотности состояний p -типа в МТ-сфере Zr как раз и обусловлен проникновением „хвостов“ s -состояний атома гелия в МТ-сферу металла.

3.2.2. Дисперсионные кривые. Как было отмечено выше, для расчета электронной структуры

ОЦК-фазы чистого Zn и системы Zr–He была использована элементарная ячейка, содержащая два атома Zr. Поэтому дисперсионные кривые $E(k)$ (рис. 5) вычислялись вдоль симметричных направлений неприводимой части простой кубической решетки.

Из рис. 5 следует, что результаты расчета для чистого Zr хорошо согласуются с аналогичными данными, приведенными в справочнике [36]. Из рисунка видно, что присутствие гелия снимает вырождение большого количества электронных состояний вдоль всех симметричных направлений зоны Бриллюэна. Заметно изменяется топология поверхности Ферми. Модифицируется характер дисперсии большого количества зон как выше, так и ниже уровня Ферми. На некоторых энергетических зонах появляются участки с очень слабой зависимостью от волнового вектора. В области уровня Ферми появляются идущие параллельно друг другу зоны с

различными волновыми векторами Ферми. Все это будет приводить к изменению спектра как одночастичных, так и коллективных возбуждений электронной подсистемы кристалла и повлияет на его оптические свойства.

3.2.3. Валентная зарядовая плотность. На рис. 6 приведены рассчитанные в работе пространственные распределения валентной зарядовой плотности чистого Zr и системы Zr–He в плоскости (001), содержащей как атомы металла, так и атомы гелия. Попадая в решетку циркония, гелий сильно изменяет распределение валентной зарядовой плотности металла. Наиболее отчетливо это видно из рис. 6, с, где показана разность зарядовых плотностей системы Zr–He, с одной стороны, и чистого циркония с атомом гелия, с другой. Жирная кривая показывает изолинию, соответствующую нулевой разности плотностей. Более светлые области соответствуют отрицательным значениям разности, а более темные — положительным. Видно, что гелий вытесняет электронную зарядовую плотность Zr из области тетраэдрического междоузлия и даже из области МТ-сферы металла. В большей части межатомной области кристалла зарядовая плотность возрастает. Кроме этого, наблюдается значительное возрастание зарядовой плотности в некоторых областях МТ-сферы металла. Анализ орбитального распределения заряда исследуемых систем показал, что гелий понижает заряд валентных *s*- и *d*-электронов в МТ-сфере металла на $0.025e$ и $0.017e$ соответственно, а заряд валентных *p*-электронов повышает на $0.028e$. Здесь e — заряд электрона. В целом из МТ-сферы металла уходит заряд, равный $0.011e$.

Таким образом видно, что, попадая в цирконий, гелий вызывает очень сильное и довольно сложное перераспределение валентной зарядовой плотности как межатомной области металла, так и в его МТ-сфере.

4. Заключение

Проведены *ab initio* расчеты электронной структуры чистого Zr и системы Zr–He для ГПУ-, ГЦК-, ОЦК-структур и ω -фазы. Исследования стабильности системы Zr–He показали, что при нормальных условиях для чистого Zr энергетически более выгодна ГПУ-структура, а присутствие гелия стабилизирует ОЦК-решетку металла. Для всех исследованных структур тетраэдрическое местоположение гелия в решетке металла является наиболее предпочтительным.

Вычисленная энергия растворения имеет положительные значения для всех рассмотренных нами случаев. Это обстоятельство свидетельствует о том, что гелий не способен растворяться в цирконии и может проникать в объем материала лишь в специальных условиях, например в процессе имплантации (облучения α -частицами). Гелий вносит довольно большой избыточный объем в решетку металла (от 6.51 до 8.86 \AA^3 на один атом He), что может являться причиной возникновения внутренних напряжений в системе Zr–He.

Присутствие гелия в решетке циркония значительно изменяет электронный энергетический спектр металла: снимает вырождение некоторых зон, приводит к появлению на них плоских участков. Это может существенным образом изменить спектр одноэлектронных и коллективных возбуждений металла. Кроме того, гелий приводит к значительному перераспределению валентной зарядовой плотности внутри металла, что не может не сказаться на типе связей между его атомами.

Список литературы

- [1] H. Ullmaier. Rad. Eff. **78**, 1 (1983).
- [2] Fundamental aspects of inert gases in solids / Eds S.E. Donnelly, J.H. Evans. V. 279 of NATO Advanced Study Institute Ser. B. Plenum, N.Y. (1991).
- [3] L.K. Mansur, W.A. Coghan. J. Nucl. Mater. **119**, 1 (1983).
- [4] H. Ullmaier. Nucl. Fusion **24**, 1039 (1984).
- [5] R.L. Klueh, D.J. Alexander. J. Nucl. Mater. **218**, 151 (1995).
- [6] M.I. Baskes. MRS Bull. **11**, 14 (1986).
- [7] M.I. Baskes, M.S. Daw. Hydrogen effects on material behavior / Eds N.R. Moody, A.W. Thompson. TMS, Warrendale, PA (1990). P. 717.
- [8] H. Trinkaus, B.N. Singh. J. Nucl. Mater. **323**, 229 (2003).
- [9] M.D. Whitmore. J. Phys. F **6**, 1259 (1976).
- [10] R. Benedek. J. Phys. F **8**, 807 (1978).
- [11] M.J. Puska. Phys. Rev. B **29**, 5382 (1984).
- [12] W.D. Wilson, C.L. Bisson, M.I. Baskes. Phys. Rev. B **24**, 5616 (1981).
- [13] R. Rajaraman, G. Amaraddra, B. Vismanathan, C.S. Sundar, K.P. Gopinathan. J. Nucl. Mater. **231**, 55 (1996).
- [14] R.J. Kurtz, H.J. Heinisch. J. Nucl. Mater. **329**, 1199 (2004).
- [15] C.H. Hu, R.J. Zhang, L.Q. Shi, D.M. Chen, Y.M. Wang, K. Yang. Mater. Sci. Eng. B **123**, 13 (2005).
- [16] Chu-Chun Fu, F. Willaime. Phys. Rev. B **72**, 064 117 (2005).
- [17] Jixing Xia, Wangyu Hu, Jiany Yang, Bingyun Ao, Xiaolin Wang. Phys. Status Solidi B **243**, 2702 (2006).
- [18] Jianyu Yang, Bingyun Ao, Wangyu Hu, Xiaolin Wang. J. Phys.: Conf. Ser. **29**, 190 (2006).
- [19] В.Н. Воеводин, И.М. Неклюдов. Эволюция структурно-фазового состояния и радиационная стойкость конструкционных материалов. Наук. думка, Киев (2006). 376 с.
- [20] R.L. Beck, W.M. Mueller. Metal Hydrides / Eds W.M. Mueller, J.P. Blackledge, G.G. Libowitz. Academic, N.Y. (1968). P. 241.
- [21] J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof. Phys. Rev. Lett. **77**, 3865 (1996).
- [22] E. Wimmer, H. Krakauer, M. Wienert, A.J. Freeman. Phys. Rev. B **24**, 864 (1981).
- [23] M. Wienert, E. Wimmer, A.J. Freeman. Phys. Rev. B **26**, 4571 (1982).
- [24] <http://www.flapw.de>
- [25] G.B. Grad, A. Fernández Guillemet, J.J. Pieres, J.R. Granada. Z. Metallkd. **87**, 726 (1996).
- [26] H. Xia, S.J. Duclos, A.L. Ruoff, Y.K. Vohra. Phys. Rev. Lett. **64**, 204 (1990).
- [27] I. Bakonyi, H. Ebert, A.I. Liechtenstein. Phys. Rev. B **48**, 7841 (1993).

- [28] P.S. Balog, R.A. Secco. *J. Phys.: Cond. Matter* **11**, 1273 (1999).
- [29] *Metals reference book* / Ed. C.I. Smithells. Butterworth, London (1976). 437 p.
- [30] J. Donohue. *The structure of the elements*. Wiley, N.Y. (1974). P. 236.
- [31] H. Xia, G. Parthasarathy, J. Luo, Y.K. Vohra, A.L. Ruoff. *Phys. Rev. B* **42**, 6736 (1990).
- [32] A. Aguayo, G. Murrieta, R. de Coss. *Phys. Rev. B* **65**, 092 106 (2002).
- [33] C. Domain. *J. Nucl. Mater.* **351**, 1 (2006).
- [34] R. Ahuja, J.M. Wills, B. Johansson, O. Eriksson. *Phys. Rev. B* **48**, 16 269 (1993).
- [35] П.А. Андриевский, Я.С. Уманский. *Фазы внедрения*. Наука, М. (1977). 240 с.
- [36] *Calculated electronic properties of ordered alloys. A Handbook: The elements and their 3d/3d and 4d/4d alloys* / Eds V.L. Moruzzi, C.B. Sommers. World Scientific Publ., Singapore (1995). 341 p.
- [36] G.B. Grad, P. Blacha, J. Luitz, K. Schwarz. *Phys. Rev. B* **62**, 12 743 (2000).