

07,01

## Электронная структура системы Zr–He

© О.В. Лопатина<sup>1</sup>, Ю.М. Коротеев<sup>2</sup>, И.П. Чернов<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск, Россия

<sup>2</sup> Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск, Россия

E-mail: lopatina\_oksana@tpu.ru

(Поступила в Редакцию 3 июня 2013 г.

В окончательной редакции 20 октября 2013 г.)

Проведены *ab initio* расчеты электронной структуры ГПУ- и ГЦК-циркония с примесью атомов гелия порядка 6 at.%. Установлено, что присутствие гелия заметно меняет электронную структуру Zr и приводит к значительному перераспределению его электронной плотности. Обсуждаются вычисленные значения химических сдвигов остовных состояний атомов Zr, вызванные присутствием атомов гелия в его решетке.

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

### 1. Введение

В процессе работы ядерных и термоядерных реакторов конструкционные материалы их элементов накапливают примесные атомы гелия, возникающие в результате ( $n, \alpha$ )-ядерных реакций, а также большое количество дефектов как термического, так и радиационного происхождения. Это обстоятельство отрицательно сказывается на радиационной стойкости материалов, а также становится причиной катастрофического ухудшения их свойств, что сокращает сроки службы конструктивных элементов реакторов. Негативными следствиями накопления гелия являются радиационное распухание, высокотемпературное и низкотемпературное радиационное охрупчивание, радиационная ползучесть и др. [1,2]. При изучении данных явлений основное внимание уделялось исследованию поведения атомной подсистемы материалов. Результаты многочисленных работ в этой области обобщены в монографиях и обзорах [1–6]. Слабым местом такого подхода является недооценка роли электронной подсистемы материалов при анализе упомянутых выше явлений. К настоящему моменту в литературе имеется лишь небольшое число работ, посвященных исследованию электронной структуры систем металл–гелий [7–12]. Между тем в работе [12] на основе *ab initio* расчетов было показано, что высокая концентрация атомов гелия ( $\sim 30$  at.%) в решетке Zr приводит к значительному изменению не только атомной, но и электронной структуры металла. В случае же относительно низких концентраций гелия следует ожидать, что атомная подсистема металла будет возмущена несколько слабее, хотя его электронная структура может заметно измениться.

Настоящая работа посвящена изучению электронной структуры системы Zr–He с тетраэдрической и октаэдрической координацией атома гелия в ГПУ- и ГЦК-решетках металла при концентрации  $\sim 6$  at.%. Были исследованы изменения плотности электронных состояний и

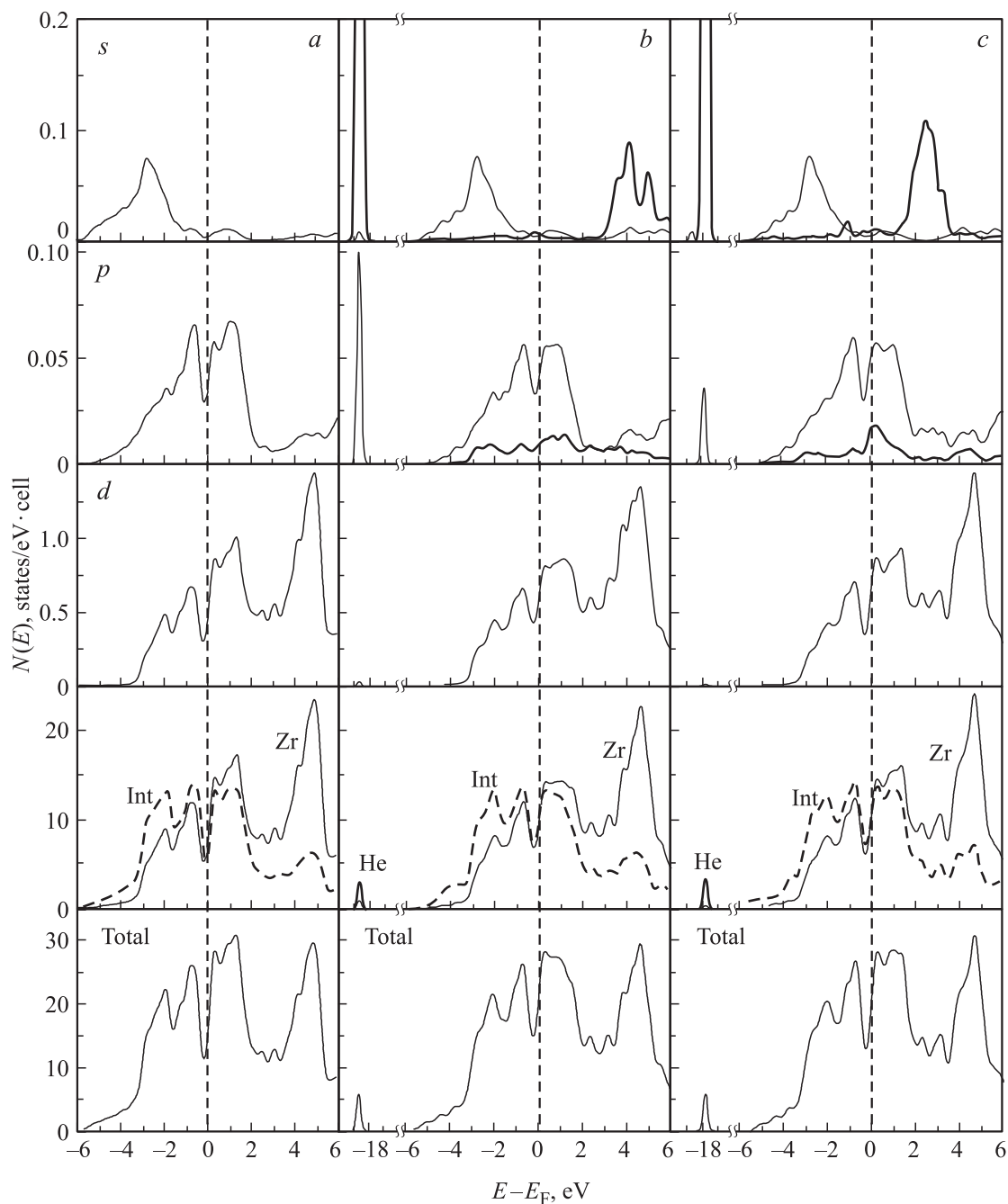
пространственного распределения зарядовой плотности металла, а также проанализированы химические сдвиги остовных уровней Zr в результате внедрения He.

### 2. Детали расчета

В рамках теории функционала электронной плотности с использованием обобщенно-градиентного приближения [13] линейаризованным методом присоединенных плоских волн [14,15], реализованным в пакете программ FLEUR, выполнены самосогласованные расчеты электронной структуры чистого Zr и системы Zr–He с концентрацией примеси  $\sim 6$  at.%. Линейным методом тетраэдронов рассчитаны плотности электронных состояний (ПЭС) на сетке из 54  $k$ -точек в неприводимой части зоны Бриллюэна (НЧЗБ) ГПУ- и ГЦК-решеток. Сглаживание ПЭС осуществлялось гауссианами со среднеквадратичной шириной 0.13 eV. Радиусы muffin-tin (MT) сфер атомов Zr и He были выбраны равными 2.3 и 1.0 а.у. (атомные единицы) соответственно. Использованный параметр обрезания базиса из плоских волн  $k_{\max} = 4.0$  а.у.<sup>-1</sup> соответствовал  $\sim 170$  базисным функциям на атом. На каждой итерации самосогласования собственные значения гамильтониана рассчитывались в 14  $k$ -точках НЧЗБ ГПУ-структуры и в 10  $k$ -точках НЧЗБ ГЦК-структуры. Процедура самосогласования электронной плотности проводилась до достижения сходимости полной энергии не хуже 0.001 meV, что соответствовало сходимости зарядовой плотности не хуже  $1 \cdot 10^{-7}$  e/а.у.<sup>3</sup>. Для чистого Zr расчетные ячейки содержали 16 атомов, а для системы Zr–He еще и один атом гелия.

### 3. Результаты и обсуждения

Как известно, при нормальных условиях чистый цирконий имеет ГПУ-структуру. Проведенные в настоящей работе расчеты полной энергии системы Zr–He



**Рис. 1.** Плотность электронных состояний  $N(E)$  чистого ГПУ-Zr (a) и системы Zr-He с тетраэдрической (b) и октаэдрической (c) координацией атома He в ГПУ-решетке металла. Показаны полная плотность электронных состояний (Total), локальная плотность электронных состояний в межатомной области (Int) и МТ-сферах атомов циркония и гелия, парциальные плотности состояний  $s$ -,  $p$ - и  $d$ -типа.

показали, что в присутствии  $\sim 6$  at.% примеси гелия ГПУ-решетка Zr остается наиболее стабильной из всех встречающихся у этого металла. Обнаружено также, что при рассматриваемой концентрации He возможной становится реализация ГЦК-решетки Zr с атомом гелия в октаэдрическом междуузлии. Разность полных энергий ГПУ- и ГЦК-решеток Zr с атомом гелия в октаэдрическом междуузлии по результатам наших расчетов составила  $\sim 0.001$  eV/atom. Исходя из этого в качестве

объектов исследования были выбраны три системы: ГПУ-цирконий с октаэдрическим и тетраэдрическим положением гелия, а также ГЦК-Zr с атомом He в октаэдрическом междуузлии.

Плотность электронных состояний. Рассчитанные в работе кривые ПЭС чистого ГПУ-Zr и системы Zr-He для различных положений атомов гелия в ГПУ-решетке металла представлены на рис. 1. Видно, что результаты, полученные для чистого металла,

хорошо согласуются с данными работ [16,17]. Из анализа полной ПЭС можно заключить, что в результате внедрения гелия в тетра- и октапору решетки металла происходит следующее:

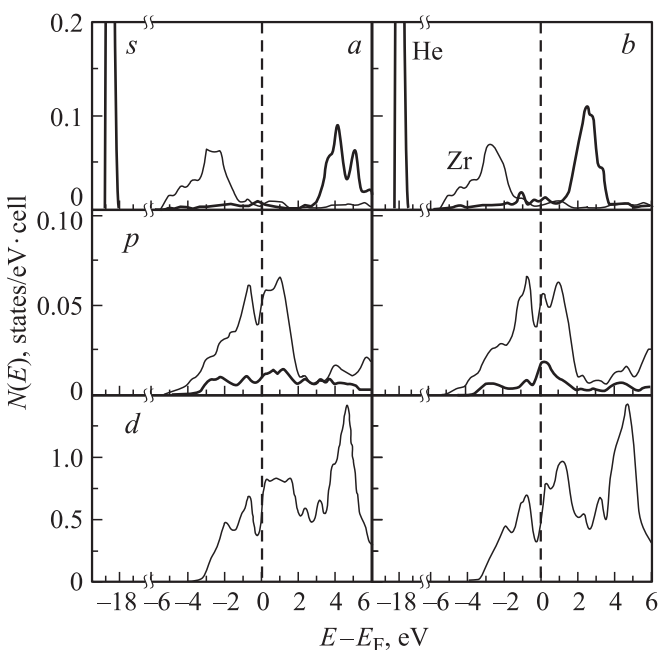
1) ниже дна зоны проводимости Zr появляется узкая (шириной  $\sim 1.0$  eV) зона  $s$ -состояний He, отделенная от валентных состояний металла щелью  $\sim 12.0$  eV;

2) ширина зоны проводимости Zr уменьшается примерно на 0.2 eV;

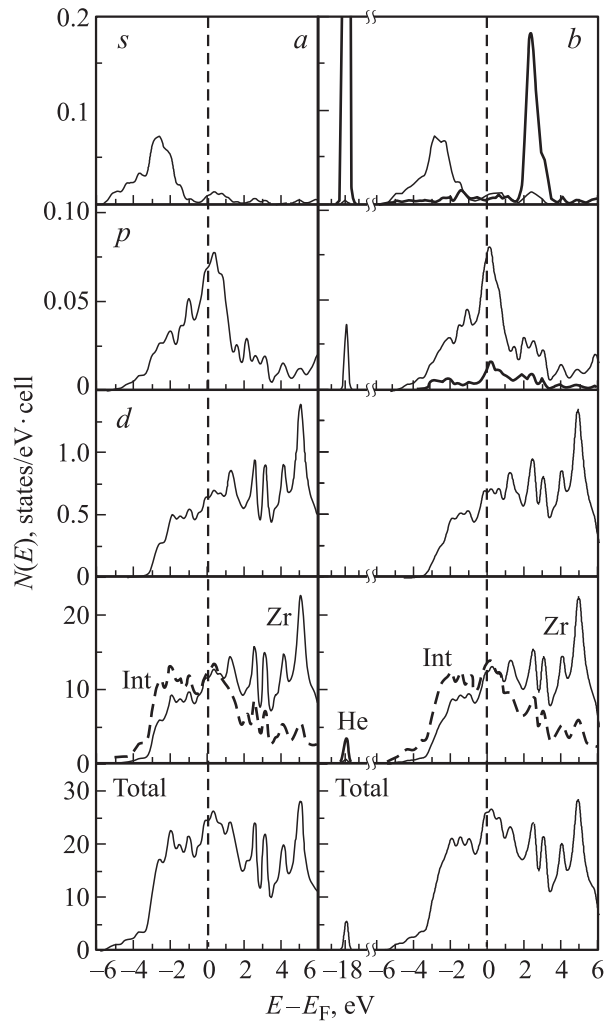
3) ПЭС на уровне Ферми систем с тетраэдрической и октаэдрической координацией атомов гелия повышается примерно на 5.5 states/eV · cell относительно значения ПЭС для чистого циркония. Последнее обстоятельство указывает на более высокую степень металличности системы Zr–He по сравнению с чистым цирконием.

Из анализа локальных ПЭС видно, что большая часть валентной зарядовой плотности металла находится в межатомной области. Как показывают проведенные расчеты, внедрение гелия увеличивает валентный заряд в межатомной области расчетной ячейки на  $0.75e$ . Увеличение параметров решеток Zr, обусловленное внедрением гелия, приводит к уменьшению на  $0.02e$  валентного заряда в МТ-сферах металла. На фоне этого уменьшения валентный заряд в МТ-сферах ближайших к гелию атомов Zr (атомов первой координационной сферы) увеличивается на  $0.05e$ .

Из рис. 1 также видно, что присутствие гелия заметно изменяет парциальные ПЭС в МТ-сферах Zr, ближайших к атому гелия. Так, в области энергий  $\sim -19$  eV появляется значительный пик  $p$ -типа, обусловленный проникновением „хвостов“  $1s$ -состояния гелия в МТ-сферу



**Рис. 2.** Локальные парциальные плотности состояний  $s$ -,  $p$ - и  $d$ -типа в МТ-сферах атома He и атомов ГПУ-Zr второй координационной сферы гелия, находящегося в тетра-эдрической (a) и октаэдрической (b) координации.

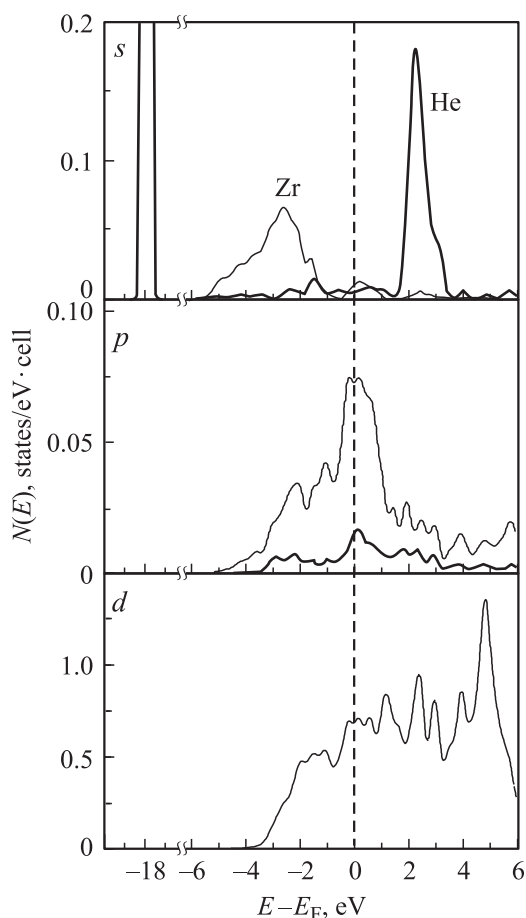


**Рис. 3.** Плотность электронных состояний  $N(E)$  чистого ГЦК-Zr (a) и системы Zr–He с октаэдрической координацией атома He в ГЦК-решетке металла (b). Обозначения те же, что на рис. 1.

металла. Отметим, что парциальные ПЭС атомов циркония, находящихся во второй координационной сфере гелия (рис. 2), не содержат этого пика. В области энергий от  $-6.0$  до  $3.0$  eV в МТ-сфере гелия наблюдаются  $p$ -состояния, являющиеся, по-видимому, „хвостами“  $d$ -состояний атомов Zr. Выше  $3.0$  eV в МТ-сфере гелия имеется пик ПЭС, порождаемый его  $2s$ -состояниями.

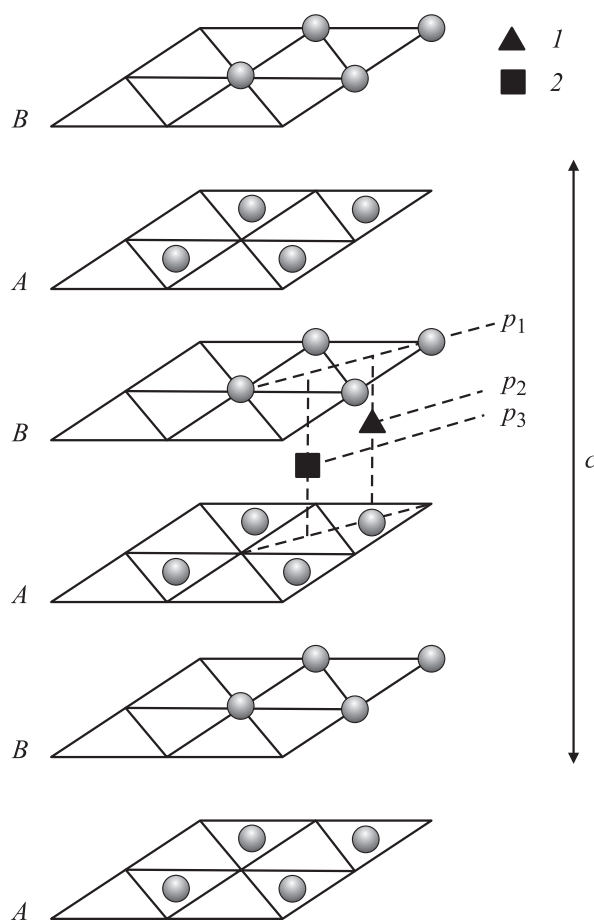
На рис. 3 и 4 приведены кривые ПЭС чистого ГЦК-Zr и системы Zr–He с октаэдрическим положением атомов гелия в ГЦК-решетке металла. Видно, что примесь изменяет электронную структуру ГЦК-металла таким же образом, как и в случае ГПУ-решетки. Различие заключается лишь в том, что ширина зоны проводимости Zr уменьшается на 0.16 eV, а его ПЭС на уровне Ферми повышается на 1.3 states/eV · cell.

**Зарядовая плотность.** В работе были вычислены пространственные распределения зарядовой плотности чистого Zr и системы Zr–He, а также их разность для ряда кристаллографических плоскостей. На рис. 5



**Рис. 4.** Локальные парциальные плотности состояний  $s$ -,  $p$ - и  $d$ -типа в МТ-сферах атома He и атомов ГЦК-Zr второй координационной сферы гелия, находящегося в октаэдрической координации.

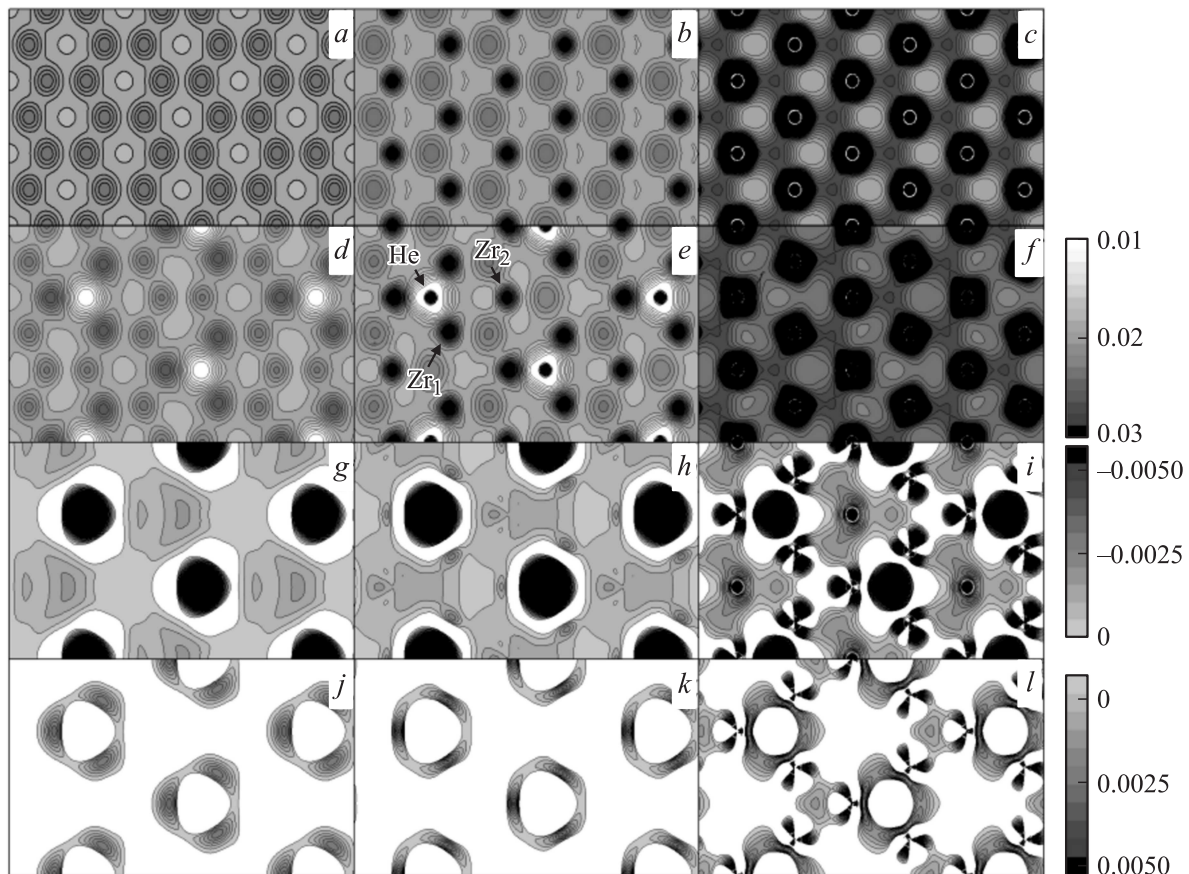
представлены расчетная ячейка ГПУ-структуры системы Zr–He и три рассматриваемые нами плоскости  $p_1$ ,  $p_2$  и  $p_3$ , параллельные базовой плоскости (0001) ГПУ-структуры. На рис. 6 и 7 приведены распределения зарядовой плотности чистого Zr и системы Zr–He в ГПУ-структуре с тетраэдрической и октаэдрической координацией примесного атома гелия. На рис. 6,  $a, d, g, j, b, e, h, k$  и  $c, f, i, l$  показаны плотности заряда в плоскостях  $p_1$ ,  $p_2$  и  $p_3$  соответственно. На рис. 6,  $e$  представлены положения атомов гелия, а также проекции положений атомов циркония первой и второй координационных сфер. На рис. 7,  $a, c, e$  и  $b, d, f$  приведены плотности заряда в плоскостях  $p_1$  и  $p_3$  соответственно. На рис. 7,  $b$  показаны положения атомов циркония первой и второй координационных сфер, а также проекция положения атома гелия. Из анализа результатов, представленных на рис. 6,  $a-f$  и рис. 7,  $a, b$ , видно, что внедрение гелия вызывает заметное изменение распределения зарядовой плотности системы. Для более детального анализа этого изменения на рис. 6,  $g-i$  и 7,  $c, d$  приведены отрицательные, а на рис. 6,  $j-l$  и 7,  $e, f$  — положительные значения разности плотно-



**Рис. 5.** Расчетная ячейка ГПУ-структуры системы Zr–He.  $A$  и  $B$  — плотноупакованные слои ГПУ-решетки Zr. 1, 2 — тетраэдрическое и октаэдрическое междуузлия соответственно.  $c$  — параметр расчетной ячейки вдоль оси  $z$ .

стей  $\Delta\rho(r) = \rho_{\text{Zr-He}}(r) - \rho_{\text{Zr}}(r) - \rho_{\text{He}}(r)$ . Из рис. 6,  $g-i$  и 7,  $c, d$  видно, что, попадая в тетраэдрическое или октаэдрическое междуузлие ГПУ-решетки Zr, гелий вытесняет оттуда электроны металла, а также приводит к уменьшению зарядовой плотности в МТ-сферах атомов Zr второй координационной сферы и в окружающем их межатомном пространстве. Существенно неоднородное перераспределение зарядовой плотности наблюдается в МТ-сферах атомов Zr первой координационной сферы. Из рис. 6,  $j-l$  и 7,  $e, f$  видно, что увеличение зарядовой плотности происходит главным образом в области первой координационной сферы атома гелия.

На рис. 8 приведены распределения зарядовой плотности ГЦК-структуры чистого Zr и системы Zr–He с октаэдрической координацией атома гелия, рассчитанные в плоскости, проходящей как через атомы Zr, так и через атомы He. На рис. 8,  $b$  показаны положения атома гелия и атомов циркония первой координационной сферы, а также проекции положений атомов Zr второй координационной сферы. Из рис. 8,  $a, b$  видно, что внедрение гелия вызывает заметное перераспределение зарядовой плотности системы. На рис. 8,  $c$  и  $d$  приведены



**Рис. 6.** Распределение зарядовой плотности  $\rho(r)$  ГПУ-структуры чистого Zr и системы Zr–He с тетраэдрической координацией атома He. *a–c* — зарядовые плотности  $\rho_{Zr}(r)$  чистого Zr, *d–f* — зарядовые плотности  $\rho_{Zr-He}(r)$  системы Zr–He, *g–i* — отрицательные, *j–l* — положительные значения разности валентных плотностей  $\Delta\rho(r)$ .

соответственно отрицательные и положительные значения разности плотностей  $\Delta\rho(r)$ . Видно, что, попадая в октаэдрическое междуузлие ГЦК-решетки Zr (рис. 8, *c*), гелий вытесняет электроны металла из занимаемой им области, а также приводит к уменьшению зарядовой плотности в ближайших к нему пустых октаэдрических междуузлиях. Очень неоднородное перераспределение зарядовой плотности наблюдается в МТ-сферах атомов Zr первой координационной сферы. Рис. 8, *d* показывает, что увеличение зарядовой плотности происходит главным образом в области первой координационной сферы атома гелия и в пустых октаэдрических междуузлиях второй координационной сферы.

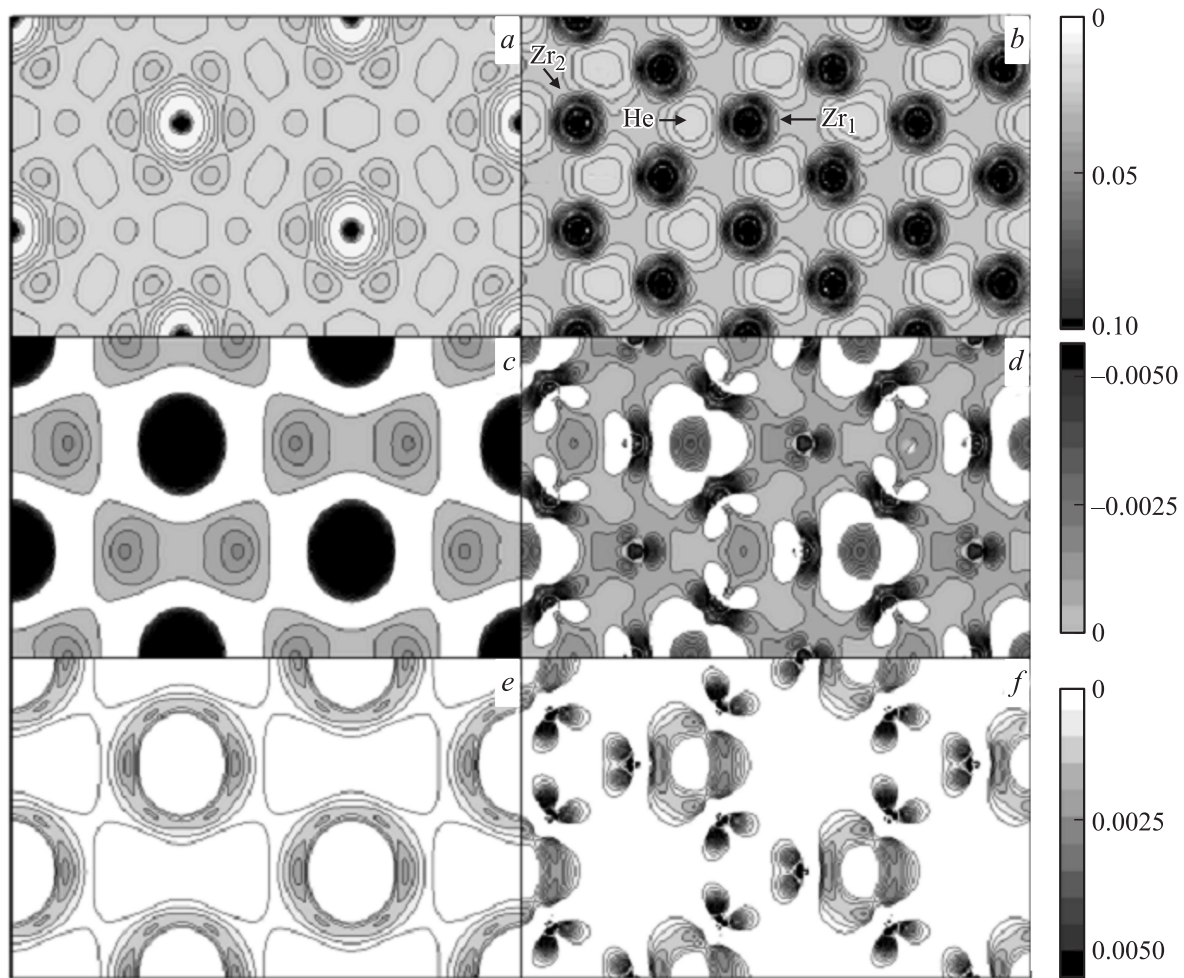
**Остовные сдвиги.** Величины энергий связи остовных уровней компонентов различных соединений широко используются для интерпретации результатов исследования физико-химических процессов [18–22]. Экспериментально эти энергии определяются при помощи рентгеновской фотоэмиссионной спектроскопии (РФЭС) или других спектроскопических методов. Специфический для каждого атома набор энергий связи позволяет определить химический состав материала, по сдвигу уровней остова можно судить о химическом состоянии атомов, а также об их положении в решетке

матрицы, поскольку изменение электронного состояния атома при его внедрении в кристалл меняет энергии и более глубоких уровней [23].

В данной работе самосогласованным образом были рассчитаны не только энергетические спектры валентных электронов чистого Zr и системы Zr–He, но и значения энергий остовных уровней атомов металла. Это позволило вычислить величину химических сдвигов  $\delta E^{Zr}$  остовных состояний атомов Zr, обусловленных присутствием гелия в решетке металла. Величина этих сдвигов определялась как разность

$$\delta E^{Zr} = E_{Zr-He}^{Zr} - E_{Zr},$$

где  $E_{Zr-He}^{Zr}$  и  $E_{Zr}$  — энергии остовных уровней атомов Zr системы Zr–He и чистого металла соответственно. В табл. 1 приведены энергии остовных уровней атомов Zr в ГПУ-решетке системы Zr–He и чистого металла, а также сдвиги этих уровней, вызванные внедрением гелия. Цифрами 1 и 2 обозначены типы атомов Zr первой координационной сферы He. Атомы первого типа находятся в вершине тетраэдра, содержащего примесь, атомы второго типа образуют его основание. Как видно из табл. 1, в результате внедрения гелия остовные уровни атомов Zr сдвинулись к большим энергиям связи

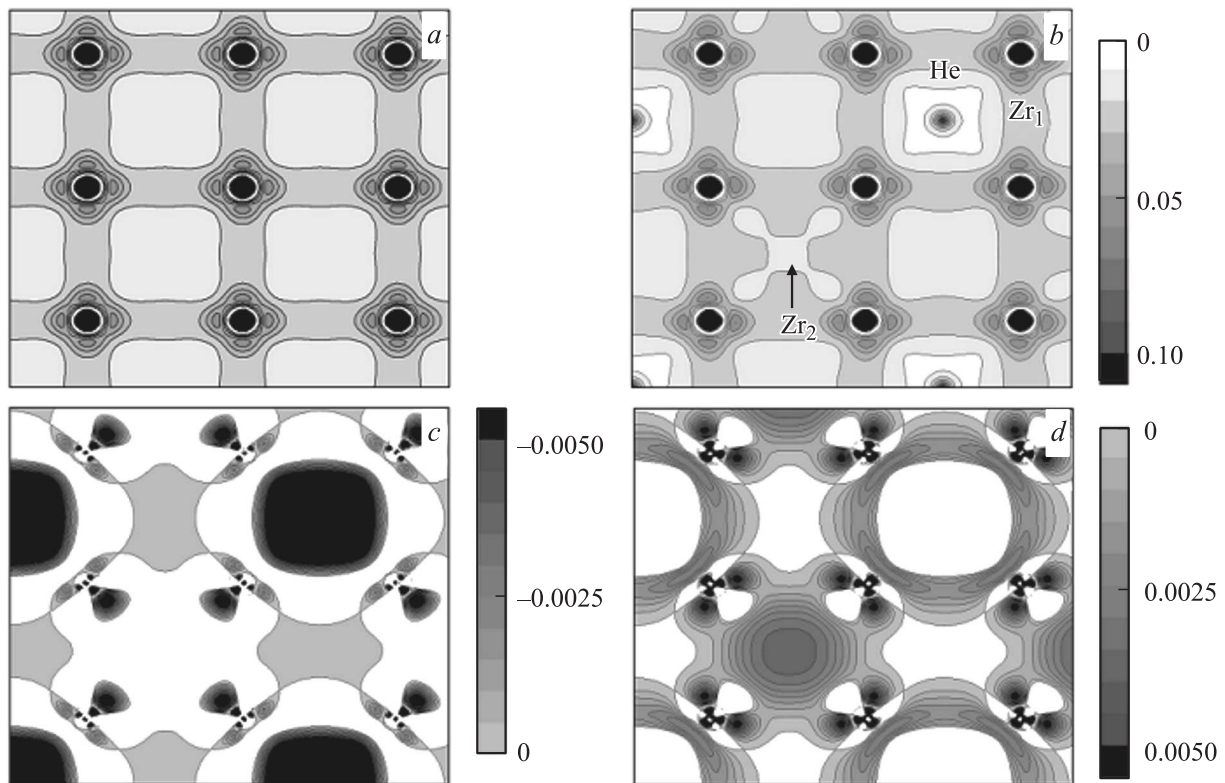


**Рис. 7.** Распределение зарядовой плотности  $\rho(r)$  ГПУ-структуры системы Zr–He с октаэдрической координацией атома гелия. *a, b* — зарядовые плотности  $\rho_{\text{Zr–He}}(r)$  системы Zr–He, *c, d* — отрицательные, *e, f* — положительные значения разности валентных плотностей  $\Delta\rho(r)$ .

**Таблица 1.** Энергии основных уровней атомов Zr в ГПУ-решетках системы Zr–He и чистого металла, а также сдвиги этих уровней, обусловленные присутствием He

Остовный уровень	$E_{\text{Zr–He}}^{\text{Zr}}, \text{eV}$				$E_{\text{Zr}}, \text{eV}$	$\delta E^{\text{Zr}}, \text{eV}$			
	Тетра		Окта			Тетра		Окта	
	1	2	1	2		1	2	1	2
$1s^2$	–17800.2863	–17800.3679	–17800.2047	–17800.1720	–17800.027	–0.2593	–0.3409	–0.1777	–0.1450
$2s^2$	–2451.3348	–2451.4083	–2451.2586	–2451.2096	–2451.079	–0.2558	–0.3293	–0.1796	–0.1306
$2p^2$	–2242.4629	–2242.5364	–2242.3840	–2242.3378	–2242.207	–0.2559	–0.3294	–0.1770	–0.1308
$2p^4$	–2156.6219	–2156.6954	–2156.5430	–2156.4967	–2156.366	–0.2559	–0.3294	–0.1770	–0.1307
$3s^2$	–367.5962	–387.6533	–387.4955	–387.4547	–387.321	–0.2752	–0.3323	–0.1745	–0.1337
$3p^2$	–309.8478	–309.9050	–309.7444	–309.7036	–309.570	–0.2778	–0.3350	–0.1744	–0.1336
$3p^4$	–296.1823	–296.2394	–296.0816	–296.0408	–295.907	–0.2753	–0.3324	–0.1746	–0.1338
$3d^4$	–159.1457	–159.2056	–159.0478	–159.0042	–158.871	–0.2747	–0.3346	–0.1768	–0.1332
$3d^6$	–156.6505	–156.7076	–156.5498	–156.5062	–156.375	–0.2755	–0.3326	–0.1748	–0.1312
$4s^2$	–37.7095	–37.6986	–37.5027	–37.4918	–37.345	–0.3645	–0.3536	–0.1577	–0.1468

Примечание. Тетра — тетраэдрическая координация атома гелия в ГПУ-решетке Zr, окта — октаэдрическая координация атома гелия в ГПУ-решетке Zr.



**Рис. 8.** Распределение зарядовой плотности  $\rho(r)$  ГЦК-структуры чистого Zr (a) и системы Zr–He с октаэдрической координацией атома гелия (b). c — отрицательные, d — положительные значения разности валентных плотностей  $\Delta\rho(r)$ .

(все остовные сдвиги имеют отрицательные значения). В случае тетраэдрического положения гелия величина остовных сдвигов для атомов Zr первого типа имеет значения в интервале от  $-0.25$  до  $-0.27$  eV, и только  $4s$ -состояние сдвигается на  $-0.36$  eV. Для атомов второго типа сдвиги лежат в области от  $-0.33$  до  $-0.35$  eV. При октаэдрической координации атома He значения остовных сдвигов для атомов Zr первого типа

лежат в интервале примерно от  $-0.16$  до  $-0.18$  eV, а для атомов второго типа — в интервале от  $-0.13$  до  $-0.15$  eV. Для атомов Zr второй координационной сферы величины остовных сдвигов в случае тетраэдрической координации He лежат в интервалах  $(-0.28, -0.30)$  и  $(-0.31, -0.34)$  eV, а при октаэдрической координации — в интервалах  $(-0.13, -0.15)$  и  $(-0.15, -0.17)$  eV для атомов первого и второго типов соответственно.

**Таблица 2.** Энергии остовных уровней атомов Zr в ГЦК-решетке системы Zr–He и чистого металла, а также сдвиги этих уровней, обусловленные присутствием He

Остовный уровень	$E_{Zr-He}^{Zr}, eV$		$E_{Zr}, eV$	$\delta E^{Zr}, eV$	
	Окта			Окта	
	1	2		1	2
$1s^2$	-17800.1829	-17800.1747	-17799.886	-0.2969	-0.2887
$2s^2$	-2451.2178	-2451.2096	-2450.932	-0.2858	-0.2776
$2p^2$	-2242.3459	-2242.3378	-2242.057	-0.2889	-0.2808
$2p^4$	-2156.5076	-2156.4995	-2156.219	-0.2886	-0.2805
$3s^2$	-387.4629	-387.4547	-387.172	-0.2909	-0.2827
$3p^2$	-309.7118	-309.7063	-309.423	-0.2888	-0.2833
$3p^4$	-296.0489	-296.0408	-295.758	-0.2909	-0.2828
$3d^4$	-159.0124	-159.0042	-158.724	-0.2884	-0.2802
$3d^6$	-156.5144	-156.5090	-156.226	-0.2884	-0.2830
$4s^2$	-37.4972	-37.4891	-37.198	-0.2992	-0.2911

Примечание. Окта — октаэдрическая координация атома гелия в ГЦК-решетке Zr.

В табл. 2 представлены данные для ГЦК-структуры, аналогичные приведенным в табл. 1. Как и в предыдущем случае, цифрами 1 и 2 обозначены типы атомов Zr. При октаэдрической координации атома He величины остовных сдвигов для атомов Zr первого и второго типов имеют сходные значения, лежащие в диапазоне от  $-0.28$  до  $-0.30$  eV. Для атомов второй координационной сферы величины остовных сдвигов лежат в интервалах  $(-0.24, -0.26)$  и  $(-0.27, -0.29)$  eV для атомов первого и второго типов соответственно.

Таким образом, можно видеть, что сдвиги остовных уровней Zr заметно зависят от положения атома гелия в ГПУ-решетке металла. При тетраэдрическом положении примеси эти сдвиги в 2 раза больше, чем при октаэдрическом. Измеряя в эксперименте величины этих сдвигов, можно судить о положении примеси в ГПУ-решетке металла. Кроме того, следует отметить имеющиеся различия величины и характера остовных сдвигов для двух рассмотренных нами кристаллических структур. Так, остовные сдвиги при октаэдрическом положении атома гелия в ГЦК- и ГПУ-решетках отличаются друг от друга более чем в 1.5 раза ( $-0.28$  eV против  $-0.17$  eV). В случае тетраэдрического положения He в ГПУ-решетке и октаэдрического в ГЦК-цирконии отличие заключается в характере сдвигов. При тетраэдрическом положении He остовные сдвиги имеют два характерных значения порядка  $-0.26$  и  $-0.34$  eV. В случае же октаэдрического положения остовные сдвиги характеризуются значением  $-0.28$  eV. Этот факт в совокупности с данными фотоэмиссии может позволить судить о наличии областей (зерен) в кристаллах Zr, имеющих в результате имплантации гелия различную кристаллическую структуру.

#### 4. Заключение

Таким образом, в рамках теории функционала плотности проведен самосогласованный расчет электронной структуры чистого циркония и системы Zr–He. Рассчитаны плотности электронных состояний как чистого металла, так и металла с примесью. Показано, что в электронном спектре системы Zr–He имеются состояния, лежащие ниже дна валентной зоны, локализованные на атоме He. Обнаружено, что внедрение гелия приводит к увеличению плотности электронных состояний металла на уровне Ферми. Анализ рассчитанных распределений зарядовой плотности показал, что, попадая в кристалл циркония, атом гелия вызывает значительное анизотропное перераспределение электронной плотности металла. Рассчитаны химические сдвиги остовных состояний атомов Zr, обусловленные присутствием He в решетке металла. Эти данные в комбинации с данными РФЭС-экспериментов могут быть использованы при определении положения атомов гелия в решетке циркония.

#### Список литературы

[1] В.Ф. Зеленский, И.М. Неклюдов, Т.П. Черняева. Радиационные дефекты и распухание металлов. Наук. думка, Киев (1988). 294 с.

- [2] А.Г. Залужный, Ю.Н. Сокурский, В.Н. Тебус. Гелий в реакторных материалах. Энергоатомиздат, М. (1988). 224 с.
- [3] H. Ullmaier. Rad. Eff. **78**, 1 (1983).
- [4] H. Ullmaier. Nucl. Fusion **24**, 1039 (1984).
- [5] А.И. Ранюк, В.Ф. Рыбалко. Гелий в решетке металлов: Обзор. ЦНИИАтоминформ, М. (1986). 64 с.
- [6] И.М. Неклюдов, В.Ф. Рыбалко, Г.Д. Толстолуцкая. Эволюция профилей распределения гелия и водорода в материалах в процессе облучения и отжига: Обзор. ЦНИИАтоминформ, М. (1985). 41 с.
- [7] T. Seletskaiia, Y. Osetsky, R.E. Stoller, G.M. Stoks. Phys. Rev. Lett. **94**, 046 403 (2005).
- [8] T. Seletskaiia, Y. Osetsky, R.E. Stoller, G.M. Stoks. Phys. Rev. B **78**, 134 103 (2008).
- [9] X.T. Zu, L. Yang, F. Gao, S.M. Peng, H.L. Heinisch, X.G. Long, R.J. Kurtz. Phys. Rev. B **80**, 054 104 (2009).
- [10] L. Yang, S.M. Peng, X.G. Long, F. Gao, H.L. Heinisch, R.J. Kurtz, X.T. Zu. J. Phys.: Cond. Matter **23**, 035 701 (2011).
- [11] L. Yang, S.M. Peng, X.G. Long, F. Gao, H.L. Heinisch, R.J. Kurtz, X.T. Zu. J. Appl. Phys. **107**, 054 903 (2010).
- [12] Ю.М. Коротеев, О.В. Лопатина, И.П. Чернов. ФТТ **51**, 1509 (2009).
- [13] J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof. Phys. Rev. Lett. **77**, 3865 (1996).
- [14] E. Wimmer, H. Krakauer, M. Wienert, A.J. Freeman. Phys. Rev. B **24**, 864 (1981).
- [15] M. Wienert, E. Wimmer, A.J. Freeman. Phys. Rev. B **26**, 4571 (1982).
- [16] 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.
- [17] G.B. Grad, P. Blacha, J. Luitz, K. Schwarz. Phys. Rev. B **62**, 12743 (2000).
- [18] Т.С. Зюбина, А.С. Зюбин, Л.В. Яшина, В.И. Штанов. ЖНХ **53**, 817 (2008).
- [19] М.В. Гомоюнова, И.И. Пронин. ЖТФ **74**, 10, 1 (2004).
- [20] А.С. Зюбин, С.Н. Дедюлин, Л.В. Яшина, В.И. Штанов. ЖНХ **52**, 283 (2007).
- [21] А.С. Зюбин, С.Н. Дедюлин, Л.В. Яшина, В.И. Штанов. ЖНХ **54**, 786 (2009).
- [22] Л.А. Песин, И.В. Воинкова, С.Е. Евсюков, И.В. Грибов, В.Л. Кузнецов, Н.А. Москвина. Изв. Челяб. науч. центра **4(26)**, 21 (2004).
- [23] К. Зигбан, К. Нордлинг, А. Фальман, Р. Нордберг, К. Хармин, Я. Хедман, Г. Йоханссон, Т. Бергмак, С. Карлссон, И. Линдгрэн, Б. Линдгрэн. Электронная спектроскопия. Мир, М. (1971). 493 с.