

01,02,07

## Атомная структура систем Zr–He, Zr–vac, Zr–vac–He: расчет из первых принципов

© 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 18 мая 2016 г.)

Проведены *ab initio* исследования атомной структуры систем Zr–He, Zr–vac и Zr–vac–He с концентрацией атомов гелия и вакансий (vac)  $\sim 6$  at.%. Обнаружена индуцированная гелием неустойчивость решетки циркония в системе Zr–He, исчезающая с появлением вакансий. Определено наиболее предпочтительное положение примеси в решетке металла. Рассчитаны энергия растворения гелия и вносимый им избыточный объем. Установлено, что присутствие гелия в решетке Zr заметно понижает энергию образования вакансии.

DOI: 10.21883/FTT.2017.01.43943.188

### 1. Введение

Сплавы на основе циркония являются важнейшими конструкционными материалами для тепловыделяющих элементов водо-водяных ядерных реакторов [1]. В процессе эксплуатации эти сплавы накапливают примесные атомы гелия, возникающие в результате ( $n, \alpha$ )-ядерных реакций, а также большое количество дефектов как термодинамического, так и радиационного происхождения. Атомы гелия из-за их низкой растворимости в металле захватываются дефектами кристаллической решетки, содержащими области избыточного объема, такими как вакансии, дислокации и границы зерен. Это приводит к образованию комплексов „дефект решетки + гелий“, называемых в литературе газонаполненными пузырьками [2–5]. В частности, в результате взаимодействия гелия с вакансиями в металле образуются наполненные гелием вакансионные комплексы [4,5]. В работах [6,7] сообщается о том, что такие гелиевые пузырьки могут формироваться при низких температурах с участием одиночной вакансии и нескольких атомов гелия.

Повышение концентрации вакансий в материале приводит к увеличению его объема, называемому распуханием. Кроме того, в поликристаллах из-за накопления He на границах зерен и образования наполненных гелием вакансионных комплексов в их объеме происходит охрупчивание материала. Эти процессы приводят к деградации эксплуатационных свойств конструкционных материалов [8–12]. Для борьбы с такими нежелательными явлениями необходимо глубокое изучение свойств металла, содержащего точечные дефекты типа вакансий и примесных атомов. Важная информация о свойствах материалов, содержащих указанные дефекты, может быть получена с помощью расчетов из первых принципов в рамках теории функционала плотности.

Целью настоящей работы является *ab initio* исследование атомной структуры систем Zr–He, Zr–vac,

Zr–vac–He при концентрации примесных атомов и вакансий (vac)  $\sim 6$  at.%. В частности, определяется энергетически наиболее выгодное положение атома гелия в решетке идеального кристалла Zr и кристалла с вакансиями, а также вычисляются энергия его растворения и вносимый им в решетку металла избыточный объем, изучается влияние примеси гелия на энергию образования вакансии в Zr.

### 2. Методика и детали расчета

В рамках теории функционала электронной плотности с использованием обобщенно-градиентного приближения [13] линеаризованным методом присоединенных плоских волн [14,15], реализованным в пакете программ FLEUR [16], проведены самосогласованные расчеты полной энергии чистого Zr и систем Zr–He, Zr–vac, Zr–vac–He. Радиусы muffin-tin сфер атомов Zr и He выбирались равными 2.3 и 1.0 а.е. соответственно. Использованное значение параметра обрезания плосковолнового базиса  $k_{\max} = 4.0$  а.е.<sup>-1</sup> отвечало  $\sim 170$  базисным функциям на атом. На каждой итерации самосогласования собственные значения гамильтониана рассчитывались в 14  $k$ -точках зоны Бриллюэна для ГПУ-структур и в 10  $k$ -точках для ГЦК- и ОЦК-структур. Процедура самосогласования электронной плотности проводилась до достижения сходимости не хуже 0.0001 meV/а.е.<sup>3</sup>, что соответствовало сходимости полной энергии не хуже 0.001 meV. Для всех рассмотренных систем была проведена оптимизация параметров решетки, а для системы Zr–vac — также релаксация кристаллической решетки металла вблизи вакансии.

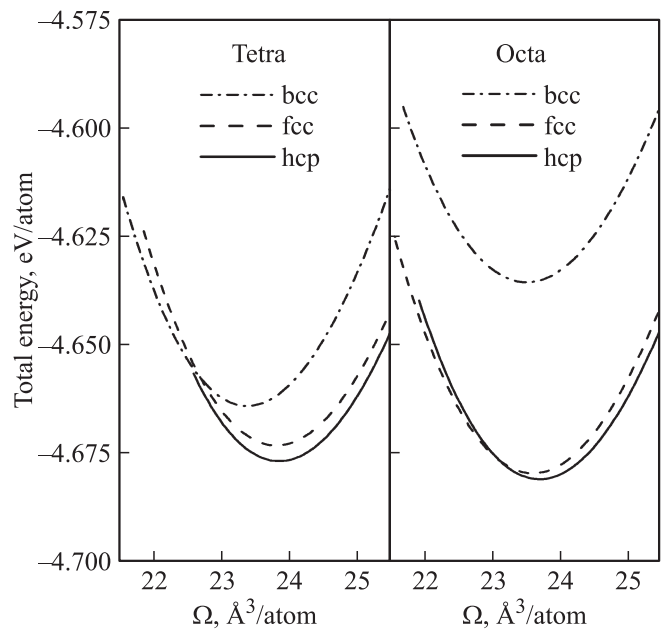
Расчетная ячейка системы Zr–He содержала 16 атомов металла и один атом гелия в тетраэдрическом или октаэдрическом междоузлии. В расчетных ячейках систем с вакансией (Zr–vac и Zr–vac–He) находилось

15 атомов металла и один вакантный узел решетки, а расчетная ячейка системы Zr–vac–He содержала еще и один атом гелия в тетраэдрическом или октаэдрическом междоузлии вблизи вакансии или в самой вакансии.

### 3. Результаты и обсуждение

3.1. Атомная структура системы Zr–He. На первом этапе исследования изучалась устойчивость ГЦК-, ОЦК- и ГПУ-решеток Zr при концентрации растворенного в них гелия, занимавшего тетраэдрическое или октаэдрическое междоузлие,  $\sim 6$  at.%. На рис. 1 представлена рассчитанная зависимость полной энергии  $E_{\text{tot}}$  рассматриваемых кристаллических решеток системы  $\text{Zr}_{16}\text{He}$  от удельного объема  $\Omega$ , приходящегося на один атом металла. Видно, что наиболее энергетически выгодной является ГПУ-структура Zr с атомом гелия в октаэдрическом междоузлии. Полная энергия в этом случае  $E_{\text{tot}}^{\text{hcp}}(\Omega)$  достигает (при  $\Omega_{\text{min}} = 23.7 \text{ \AA}^3/\text{atom}$ ) минимального значения среди всех рассмотренных вариантов системы  $\text{Zr}_{16}\text{He}$ . Однако отметим, что при октаэдрической координации атома гелия разность значений полной энергии ГПУ- и ГЦК-решеток Zr при  $\Omega = \Omega_{\text{min}}$  не превышает  $2 \text{ meV/atom}$ , а при тетраэдрической координации примеси значения полной энергии  $E_{\text{tot}}(\Omega_{\text{min}})$  всех трех рассматриваемых кристаллических решеток выше  $E_{\text{tot}}^{\text{hcp}}(\Omega_{\text{min}})$  не более чем на  $19 \text{ meV/atom}$ . Это означает, что все рассмотренные структуры, за исключением ОЦК-решетки с октаэдрической координацией атома гелия, могут реализоваться по мере повышения температуры до  $T \sim 250 \text{ K}$  (что соответствует разности полных энергий  $21 \text{ meV/atom}$ ), а при температурах работы тепловыделяющих элементов ядерных реакторов ( $350\text{--}400^\circ\text{C}$ ) могут реализоваться все рассмотренные нами структуры. Следует отметить также, что гидростатическое сжатие (переход в область значений  $\Omega < \Omega_{\text{min}}$ ) приводит к сосуществованию рассматриваемых структур и при более низких температурах. Таким образом, оказывается, что при концентрации гелия  $\sim 6 \text{ at.}\%$  кристаллическая структура Zr проявляет неустойчивость как при повышении температуры, так и при гидростатическом давлении.

Такое поведение системы можно понять, обратившись к результатам нашей более ранней работы [17], в которой исследовалась стабильность кристаллической решетки системы Zr–He с более высокой по сравнению с рассматриваемой в настоящей публикации концентрацией гелия. В этой работе тоже были рассчитаны зависимости  $E_{\text{tot}}(\Omega)$  для различных кристаллических решеток чистого Zr и системы Zr–He. Сопоставляя результаты настоящей работы с данными [17], можно заключить, что размещение в решетке Zr атома He эквивалентно в некотором смысле сдавливанию кристалла. Действительно, рассмотренная в [17] большая концентрация He стабилизирует ОЦК-решетку Zr, реализующуюся в чистом металле лишь под давлением,



**Рис. 1.** Зависимость полной энергии системы Zr–He от удельного объема  $\Omega$ , приходящегося на один атом металла, ГПУ (hcp)-, ГЦК (fcc)- и ОЦК (bcc)-решеток для тетраэдрической и октаэдрической координации атома гелия. За точку отсчета принято значение полной энергии ГПУ-структуры чистого Zr.

т.е. при уменьшении удельного объема металла от равновесного значения  $\Omega_{\text{min}} = 23.27 \text{ \AA}^3/\text{atom}$  до значения  $\Omega \sim 18.5 \text{ \AA}^3/\text{atom}$  (рис. 1 в [17]). Рассмотренная в настоящей работе более низкая концентрация гелия  $\sim 6 \text{ at.}\%$ , вероятно, отвечает меньшим давлениям в чистом Zr и, следовательно, бóльшим, чем в предыдущем случае, значениям удельного объема  $\Omega$ . Так, согласно данным рис. 1 в работе [17], у чистого Zr в области значений  $\Omega \sim 19.3 \text{ \AA}^3/\text{atom}$  функциональные зависимости  $E_{\text{tot}}(\Omega)$  всех рассмотренных структур очень близко подходят друг к другу и пересекаются. Это свидетельствует о неустойчивости кристаллической решетки металла при давлениях, отвечающих такому удельному объему.

Как известно, присутствие примесных атомов в кристалле приводит к увеличению его объема. В настоящей работе рассчитаны значения избыточного объема  $\Delta\Omega$ , вносимого атомом He в ГЦК-, ОЦК- и ГПУ-решетки Zr, определяемого как разность объемов кристалла с примесью атомов He и чистого кристалла. Расчеты показали, что наименьший избыточный объем атомы гелия вносят в ГПУ-решетку, при этом минимальное его значение  $\Delta\Omega \sim 6.2 \text{ \AA}^3/\text{atom}$  соответствует октаэдрической координации атомов гелия. Это коррелирует с выводом о наибольшей энергетической выгоду именно этой системы. Последнее, по-видимому, обусловлено тем, что размер тетраэдрических междоузлий рассмотренных решеток почти вдвое меньше размера октаэдрических.

Таблица 1. Энергия растворения гелия в Zr

Тип решетки	$\Delta E, \text{eV}$			
	Тетраэдрическое междоузлие		Ортоэдрическое междоузлие	
	Настоящая работа	[17]	Настоящая работа	[17]
ГПУ	3.67	3.08	3.61	3.19
ГЦК	3.37	3.09	3.28	3.28
ОЦК	2.84	2.63	3.25	3.02

Энергия растворения гелия в Zr была рассчитана по формуле

$$\Delta E = E_{\text{tot}}(\text{Zr}_n\text{He}) - E_{\text{tot}}(\text{Zr}_n) - E_{\text{tot}}(\text{He}), \quad (1)$$

где  $E_{\text{tot}}(\text{Zr}_n\text{He})$ ,  $E_{\text{tot}}(\text{Zr}_n)$  и  $E_{\text{tot}}(\text{He})$  — полные энергии системы  $\text{Zr}_n\text{He}$ , чистого Zr и изолированного атома гелия,  $n$  — число атомов Zr в расчетной ячейке (в данном случае  $n = 16$ ). Для энергии  $E_{\text{tot}}(\text{He})$  использовано значение  $-78.5044 \text{ eV}$ , полученное нами с помощью самосогласованного расчета одиночного атома гелия. Рассчитанные значения энергии растворения приведены в табл. 1. Как видно из этой таблицы, энергия растворения имеет положительные значения для всех трех рассмотренных кристаллических структур. Это свидетельствует о том, что при нормальных условиях гелий не растворяется в Zr и может проникать в объем материала лишь при особых условиях, например в процессе имплантации ионов гелия или в результате  $(n, \alpha)$ -ядерных реакций, протекающих в материале под действием нейтронов. Наименьшие значения энергии растворения соответствуют ОЦК-, а наибольшие — ГПУ-решетке Zr. При этом в ОЦК-решетке энергия растворения в тетраэдрических междоузлиях ниже, чем в октаэдрических, тогда как для ГЦК- и ГПУ-структур ситуация обратная. Для сравнения в табл. 1 приведены также результаты расчетов энергии растворения He в цирконии при более высокой концентрации примеси [17]. Видно, что при более высокой концентрации гелия энергия его растворения в междоузлиях всех рассмотренных решеток ниже соответствующих значений при концентрации  $\sim 6 \text{ at.}\%$  на  $0.2\text{--}0.6 \text{ eV}$ , за исключением октаэдрического междоузлия ГЦК-решетки, где она практически не изменилась. Аналогичная зависимость энергии растворения от концентрации наблюдалась в работе [18] для ОЦК-переходных металлов Fe, Cr и Mo при более низких концентрациях гелия ( $\sim 0.8$  и  $\sim 1.8 \text{ at.}\%$ ), при этом уменьшение энергии растворения было порядка  $0.06\text{--}0.18 \text{ eV}$ . Относительно небольшое изменение энергии растворения в этом случае обусловлено близостью рассмотренных концентраций. Такая функциональная зависимость энергии растворения гелия от его концентрации связана, по-видимому, с заметным увеличением параметров решетки кристалла с увеличением концен-

трации гелия в условиях очень слабого химического взаимодействия He–Zr.

3.2. Атомная структура системы Zr–vac. В работе исследована также атомная структура системы Zr–vac. На рис. 2 представлена зависимость полной энергии этой системы от удельного объема, приходящегося на один узел решетки, включая вакантные. Видно, что энергетически более выгодной является ГПУ-структура металла, так как полная энергия в этом случае достигает минимального значения среди всех рассмотренных решеток. Равновесные удельные объемы  $\Omega_v$  для ГПУ-, ГЦК- и ОЦК-структур равны  $22.85, 22.74, 22.36 \text{ \AA}^3/\text{site}$  соответственно. Значения равновесного удельного объема  $\Omega$  чистого Zr без вакансий для этих же структур равны  $23.26, 23.06, 22.77 \text{ \AA}^3/\text{site}$  соответственно. Таким образом, наличие  $\sim 6 \text{ at.}\%$  вакансий в цирконии приводит к уменьшению равновесного объема образца на  $1.4\text{--}1.8\%$ . Эти значения хорошо согласуются с результатами эксперимента [19] и на качественном уровне с результатами *ab initio* расчета методом функции Грина [20].

Энергии образования вакансии  $E_v$  в ГПУ-, ГЦК- и ОЦК-цирконии рассчитывались по формуле

$$E_v = E_{\text{tot}}(\text{Zr}_{n-1}) - E_{\text{tot}}(\text{Zr}_n)(n-1)/n, \quad (2)$$

где  $E_{\text{tot}}(\text{Zr}_n)$  — полная энергия идеального кристалла Zr ( $n$  атомов в расчетной ячейке), а  $E_{\text{tot}}(\text{Zr}_{n-1})$  — полная энергия кристалла Zr с вакансией. Полученные значения энергии образования вакансии  $E_v$  (с учетом и без учета релаксации), а также результаты расчетов

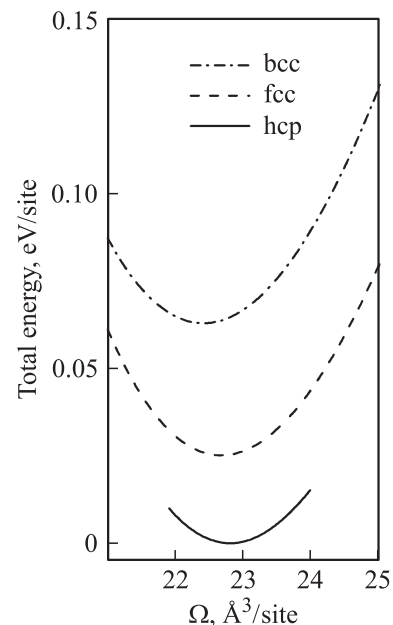


Рис. 2. Зависимость полной энергии системы Zr–vac от удельного объема  $\Omega$ , приходящегося на один узел решетки, включая вакантные, ГПУ (hcp)-, ГЦК (fcc)- и ОЦК (bcc)-решеток. За точку отсчета принято значение полной энергии ГПУ-структуры системы Zr–vac.

**Таблица 2.** Энергия образования вакансии  $E_v$  в различных кристаллических модификациях Zr

Тип решетки	$E_v, eV$			
	Настоящая работа		Расчеты других авторов	Эксперимент
	Без учета релаксации	С учетом релаксации		
ГЦК	2.23	2.18	1.77 [20]	1.70 [29]
ОЦК	2.18	1.41	1.68 [20] 2.34, 2.30 [28]	
ГПУ	2.15	2.04	1.86 [21] 1.75 [22] 1.79 [23] 1.74 [24] 1.93, 2.07 [25] 1.55 [26] 1.70, 1.86 [27] 2.07 [28]	

других авторов [20–28] и соответствующие экспериментальные данные [29] для трех рассматриваемых структур приведены в табл. 2. Как показали наши расчеты с учетом релаксации, наименьшее значение энергии образования вакансии имеет ОЦК-цирконий, а наибольшее — ГЦК-цирконий. Первое, по-видимому, обусловлено самой низкой (среди рассматриваемых структур) степенью плотной упаковки атомов в ОЦК-кристалле, где каждый атом имеет восемь ближайших соседей, тогда как в ГЦК- и ГПУ-кристаллах — по 12 ближайших соседей. С этим, также связано и наиболее сильное влияние релаксации в ОЦК-цирконии на энергию образования вакансии  $E_v$ , проявляющееся в ее уменьшении на 0.77 eV (против 0.05 и 0.11 eV в ГЦК- и ГПУ-кристаллах соответственно). Второе, очевидно, связано с тем, что расстояние между ближайшими соседями в ГЦК-цирконии (2.26 Å) заметно меньше, чем в ГПУ-кристалле (2.58 и 3.22 Å), а следовательно, и силы связи между атомами в ГЦК-цирконии сильнее, чем в ГПУ-цирконии.

Энергия образования вакансии в ГПУ-Zr, рассчитанная в работах [21–28], варьируется от 1.55 до 2.07 eV. Такой разброс значений обусловлен использованием целого ряда методов (*ab initio* или полуэмпирических) и условий расчета (с релаксацией и без нее), а также различной концентрацией вакансий. Полученное нами значение величины  $E_v$  находится в рамках этого разброса и удовлетворительно согласуется с данными экспериментов. Значения энергии образования вакансии, найденные нами для ГЦК- и ОЦК-решеток, разумно согласуются с расчетами других авторов.

3.3. Атомная структура системы Zr–vac–He. На рис. 3 представлена рассчитанная зависимость полной энергии системы Zr–vac–He от удельного объема, приходящегося на один узел решетки, включая вакантные, для трех рассматриваемых нами структур. Для каждой из этих структур было рассмотрено три варианта расположения атомов гелия в решетке металла:

тетраэдрическое и октаэдрическое междуузлия первой координационной сферы вакансии, а также вакансии. Как следует из рисунка, энергетически наиболее предпочтительным местом расположения атома гелия во всех изученных кристаллических решетках оказалась вакансии. Для всех трех вариантов расположения атомов гелия энергетически наиболее выгодной структурой является ГПУ-решетка Zr. Любопытно отметить, что в непосредственной близости от вакансии октаэдрическое междуузлие, являющееся предпочтительным для гелия в системе Zr–He (рис. 1), становится энергетически менее выгодным относительно тетраэдрического междуузлия в системе Zr–vac–He.

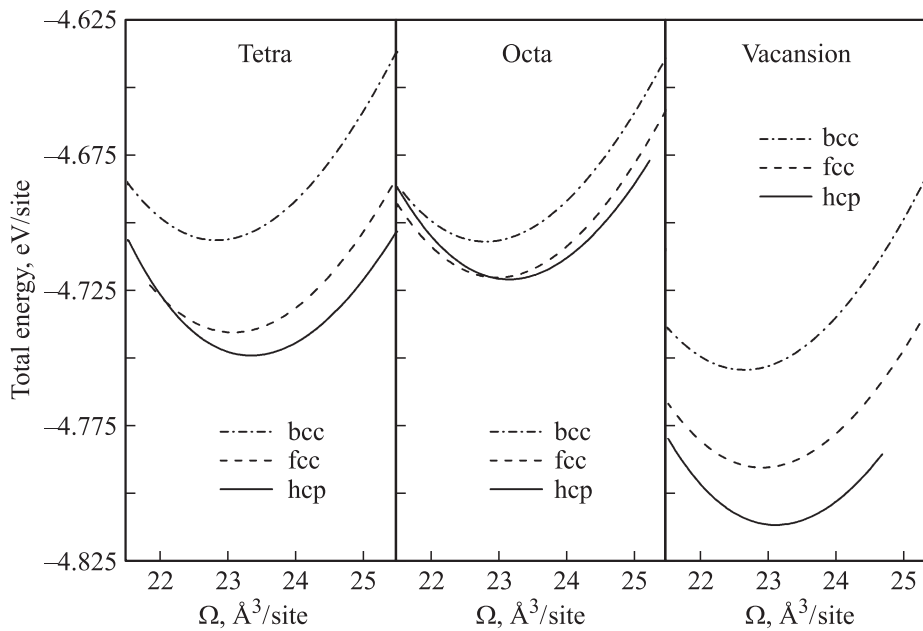
В табл. 3 представлены значения энергии растворения гелия в системе Zr–vac для трех рассматриваемых кристаллических структур, рассчитанные по формуле

$$\Delta E_v = E_{\text{tot}}(\text{Zr}_{n-1}\text{He}) - E_{\text{tot}}(\text{Zr}_{n-1}) - E_{\text{tot}}(\text{He}), \quad (3)$$

где  $E_{\text{tot}}(\text{Zr}_{n-1}\text{He})$ ,  $E_{\text{tot}}(\text{Zr}_{n-1})$  и  $E_{\text{tot}}(\text{He})$  — полные энергии систем Zr–vac–He, Zr–vac и изолированного атома гелия. Из табл. 3 видно, что величина энергии растворения имеет положительные значения для всех трех рассмотренных решеток. В каждой из этих решеток наименьшее значение энергии растворения имеет в том

**Таблица 3.** Энергия растворения гелия в тетраэдрическом и октаэдрическом междуузлиях системы Zr–vac вблизи вакансии и в самой вакансии

Тип решетки	$\Delta E_v, eV$		
	Вакансия	Тетраэдрическое междуузлие	Октаэдрическое междуузлие
ГПУ	1.51	2.51	2.97
ГЦК	1.49	2.27	2.60
ОЦК	1.42	2.18	2.20



**Рис. 3.** Зависимость полной энергии системы Zr–vac–He от удельного объема  $\Omega$ , приходящегося на один узел решетки, включая вакантные, ГПУ (hcp)-, ГЦК (fcc)- и ОЦК (bcc)-решеток для тетраэдрической и октаэдрической координации атома гелия, а также для атома He в вакансии. Как и на рис. 2, за точку отсчета принято значение полной энергии ГПУ-структуры системы Zr–vac.

случае, когда атом гелия располагается в вакантном узле кристалла Zr.

Сопоставляя данные табл. 1 и 3, можно видеть, что присутствие вакансий в Zr понижает энергию растворения гелия в тетраэдрическом междуузлии ГПУ- и ГЦК-циркония и октаэдрическом междуузлии ОЦК-циркония на  $\sim 1.1$  eV. При этом энергия растворения в октаэдрическом междуузлии ГПУ- и ГЦК-решеток, а также тетраэдрическом междуузлии ОЦК-структуры понижается на  $\sim 0.67$  eV. По-видимому, это связано с тем, что система Zr–vac находится как бы под отрицательным давлением, так как наличие вакансий приводит к уменьшению равновесного объема образца, как было отмечено в подразделе 3.2. В этом случае избыточный объем, вносимый гелием при растворении в системе Zr–vac, эффективно уменьшается, что и приводит к понижению энергии растворения.

Нам неизвестны работы, посвященные исследованию комплексов вакансии–гелий в цирконии. Поэтому мы сравнили полученные нами результаты с данными теоретических работ, посвященных изучению энергетики систем матрица–вакансия–гелий, где в роли матрицы выступали ОЦК- ( $\alpha$ -Fe, Cr, Mo, W, V, Nb, Ta) [6,18,30], ГЦК- (Ni, Cu, Ag, Pd) [18] и ГПУ- (Er, Sc, Y, Gd, Tb, Dy, Ho, Lu) [31–33] металлы. Вычисленные в этих работах энергии растворения гелия в кристалле с вакансиями имеют положительные значения, как и в нашем случае для Zr. Для всех рассмотренных кристаллических решеток наименьшее значение этой величины соответствует ситуации, когда гелий располагался в вакансии. При этом энергия растворения гелия в тетраэдрическом междуузлии ниже ее значения для октаэдрического

междуузлия. Все это хорошо согласуется с результатами настоящей работы.

Нами также была рассчитана энергия образования вакансии в системе Zr–He для трех рассматриваемых кристаллических структур по формуле

$$E_v(\text{Zr–He}) = E_{\text{tot}}(\text{Zr}_{n-1}\text{He}) - E_{\text{tot}}(\text{Zr}_n\text{He}) + \nu/nE_{\text{tot}}(\text{Zr}_n), \quad (4)$$

где  $E_{\text{tot}}(\text{Zr}_{n-1}\text{He})$ ,  $E_{\text{tot}}(\text{Zr}_n\text{He})$  — полные энергии систем Zr–He при наличии вакансии и без нее,  $\nu$  — число вакансий в расчетной ячейке (в данном случае  $\nu = 1$ ). Полученные значения энергии образования вакансии  $E_v(\text{Zr–He})$  представлены в табл. 4. Сравнение этих результатов с данными для чистого бездефектного металла (энергии образования вакансии без учета релаксации в табл. 2) показывает, что присутствие гелия в цирконии понижает энергию образования вакансии во всех исследованных системах. Поскольку системы Zr–He и Zr–vac–He рассматривались нами без учета релаксации кристаллической решетки металла вблизи дефектов, мы

**Таблица 4.** Энергия образования вакансии  $E_v(\text{Zr–He})$  в различных кристаллических модификациях системы Zr–He

Тип решетки	$E_v(\text{Zr–He}), \text{eV}$	
	Тетраэдрическое междуузлие	Ортоэдрическое междуузлие
ГЦК	1.09	1.57
ОЦК	1.53	1.11
ГПУ	1.06	1.56

сравниваем энергии образования вакансии в системе Zr–He с соответствующими (нерелаксированными) значениями для чистого металла.

#### 4. Заключение

Выполнены *ab initio* исследования атомной структуры систем Zr–He, Zr–vac и Zr–vac–He с концентрацией атомов гелия и вакансий  $\sim 6$  at.% для ГПУ-, ГЦК- и ОЦК-решеток металла. Расчеты полной энергии этих систем показали, что при рассматриваемой концентрации гелий индуцирует неустойчивость ГПУ-решетки циркония, а наличие вакансий в системе Zr–He, напротив, стабилизирует ее. Наиболее предпочтительным положением атома гелия в системе Zr–vac–He являются вакансии, наличие которых понижает энергию растворения гелия в цирконии. Обнаружено, что присутствие гелия в решетке Zr понижает энергию образования вакансии.

#### Список литературы

- [1] А.С. Займовский, А.В. Никулина, Н.Г. Решетников. Циркониевые сплавы в атомной энергетике. Энергоатомиздат, М. (1981). 232 с.
- [2] Y. Ishiyama, M. Kodama, N. Yokota, K. Asano, T. Kato, K. Fukuya. *J. Nucl. Mater.* **239**, 90 (1996).
- [3] R.E. Stoller, G.R. Odette. *J. Nucl. Mater.* **154**, 286 (1988).
- [4] M.B. Lewis, K. Farrell. *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B* **16**, 163 (1986).
- [5] R. Vassen, H. Trinkaus, P. Jung. *Phys. Rev. B* **44**, 4206 (1991).
- [6] C.-C. Fu, F. Willaime. *Phys. Rev. B* **72**, 064117, (2005).
- [7] G. Thomas, R. Bastasz. *J. Appl. Phys.* **52**, 6426 (1981).
- [8] В.Ф. Зеленский, И.М. Неклюдов, Т.П. Черняева. Радиационные дефекты и распухание металлов. Наук. думка, Киев (1988). 296 с.
- [9] Fundamental aspect of inert gases in solids / Eds S.E. Donnelly, J.H. Evans. Plenum, N.Y. (1991). 473 p.
- [10] T. Ishizaki, Q. Xu, T. Yoshiie, S. Nagata, T. Troev. *J. Nucl. Mater.* **307–311**, 961 (2002).
- [11] H. Trinkaus, B.N. Singh. *J. Nucl. Mater.* **323**, 229 (2003).
- [12] И.М. Неклюдов, Г.Д. Толстолуцкая. *Вопр. атомной науки и техники. Сер. Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение (83)* **3**, 3 (2003).
- [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] <http://www.flapw.de>
- [17] Ю.М. Коротеев, О.В. Лопатина, И.П. Чернов. *ФТТ* **51**, 1509 (2009).
- [18] X.T. Zu, L. Yang, F. Gao, S.M. Peng, H.L. Heinisch, X.G. Long, R.J. Kurtz. *Phys. Rev. B* **80**, 054104 (2009).
- [19] P. Ehrhart, P. Jung, H. Schultz, H. Ullmaier. *Atomic defects in metals / Ed. H. Ullmaier. Landolt–Börnstein. New Ser. Group III/25. Springer-Verlag, Berlin (1991).* 437 p.
- [20] P.A. Korzhavyi, I.A. Abrikosov, B. Johansson, A.V. Ruban, H.L. Skriver. *Phys. Rev. B* **59**, 11693 (1999).
- [21] C. Domain, A. Legris. *Phil. Mag.* **85**, 569 (2005).
- [22] Y. Dai, J.H. Li, B.X. Liu. *J. Phys.: Condens. Matter* **21**, 385402 (2009).
- [23] G.J. Ackland. *Phil. Mag. A* **66**, 917 (1992).
- [24] R.C. Pasianot, A.M. Monti. *J. Nucl. Mater.* **264**, 198 (1999).
- [25] M.I. Baskes, R.A. Johnson. *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.* **2**, 147 (1994).
- [26] M. Fuse. *J. Nucl. Mater.* **136**, 250 (1985).
- [27] D.J. Oh, R.A. Johnson. *J. Nucl. Mater.* **169**, 5 (1989).
- [28] O. Le Bacq, F. Willaime, A. Pasturel. *Phys. Rev. B* **59**, 8508 (1999).
- [29] F.R. de Boer, R. Boom, W.C.M. Matterns, A.R. Miedemo, A.K. Niessen. *Cohesion in metals: transition metal alloys. North-Holland, Amsterdam (1988).* 758 p.
- [30] T. Seletskaya, Y. Osetsky, R.E. Stoller, G.M. Stoks. *Phys. Rev. Lett.* **94**, 046403 (2005).
- [31] L. Yang, S.M. Peng, X.G. Long, F. Gao, H.L. Heinisch, R.J. Kurtz, X.T. Zu. *J. Appl. Phys.* **107**, 054903 (2010).
- [32] L. Yang, S.M. Peng, X.G. Long, F. Gao, H.L. Heinisch, R.J. Kurtz, X.T. Zu. *J. Phys.: Condens. Matter* **23**, 035701 (2011).
- [33] L. Yang, R.C. Chen, S.M. Peng, X.G. Long, Z.C. Wu, F. Gao, X.T. Zu. *Sci. China Phys. Mech. Astron.* **54**, 827 (2011).