



УДК 537.9 538.911

## ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ АТОМОВ ТИТАНА И ХРОМА С ТОЧЕЧНЫМИ ДЕФЕКТАМИ В ОЦК ВАНАДИИ

### Ti, Cr INTERACTION WITH BCC VANADIUM POINT DEFECTS

**А.О. Боев, Д.А. Аксенов, В.Н. Максименко, И.В. Неласов, А.И. Картамышев,  
А.Г. Липницкий**  
**A.O. Boev, D.A. Aksyonov, V.N. Maksimenko, I.V. Nelasov, A.I. Kartamyshev,  
A.G. Lipnitskii**

Белгородский национальный исследовательский университет, Россия, 308015, г. Белгород, ул. Победы, 85

Belgorod National Research University, 85 Pobedy St, Belgorod, 308015, Russia

E-mail: boev.anton.olegovich@gmail.com

#### Аннотация

В данной работе мы детально исследуем взаимодействие атомов титана с собственными точечными дефектами ОЦК ванадия с помощью теории функционала электронной плотности. Так мы восполняем имеющийся пробел по энергиям взаимодействия титана с межузельными атомами ванадия. Также мы рассчитываем энергии связи титана с вакансией и получаем, что имеющиеся в литературе данные должны быть существенно скорректированы в верхнюю сторону. Для обоснования полученных значений мы проводим анализ электронной структуры. Для наглядности мы повторяем все расчеты для хрома и устанавливаем различия с титаном. Не ограничиваясь простыми случаями, мы добавляем в наше рассмотрение трех частичные комплексы и показываем, что в случае титана, они должны играть существенную роль. Наконец, для наглядного сравнения с экспериментом, мы используем математические модели для прогнозирования распухания с использованием рассчитанных энергий связи, на основании чего показываем, что известный механизм подавления распухания, ранее не рассматривавшийся применительно к сплавам ванадий-титан, может играть важную роль в подавлении распухания.

#### Abstract

In this paper, we examine in detail the interaction of titanium atoms with their own point defects bcc vanadium using density functional theory. So we fill a gap in energy cooperation with interstitial titanium vanadium atoms. We also look forward to the energy of titanium due to vacancy and obtain that data available in the literature should be substantially adjusted to the upside. To justify the obtained values we conduct a detailed analysis of electronic structure. For clarity, we repeat all the calculations for chromium and establish differences with titanium. Not limited to simple cases, we add to our consideration of three partial complexes and show that in the case of titanium, they should play a significant role. Finally, for visual comparison with experiment, we use mathematical models to predict the swelling by using the calculated binding energies, on the basis of which show that the known mechanism of suppression of swelling, not previously considered in relation to the vanadium-titanium alloys, can play an important role in suppressing the swelling.

**Ключевые слова:** ванадий-титан-хром, точечные дефекты, «первые принципы», радиационное распухание, комплексы титан-вакансия.

**Keywords:** vanadium-titanium-chromium, point defects, ab initio, radiation swelling, titanium-vacancy complexes.

#### Введение

Начиная с 1970-х годов в России, США и Японии ведутся разработки радиационно-стойких сплавов на основе ванадия для применения в термоядерной энергетике. Выбор ванадия в качестве основы для таких сплавов обусловлен в первую очередь наименьшими значениями остаточной радиоактивности изотопов ванадия среди всех металлов. К 2000-ым годам большинство исследователей пришли к выводу, что наиболее оптимальным составом обладает сплав V-4Ti-4Cr.[1,2], и что он может быть использован для построения первой защитной стенки термоядерного реактора. Не уступая ферритным и аустенитным сплавам по остаточной радиоактивности, механическим свойствам и коррозионной стойкости, этот сплав имеет меньший коэффициент термического расширения. Это обеспечивает снижение термических напряжений, возникающих в первой стенке под действием большого градиента температур, и продлевает срок её службы[3].

Ключевой характеристикой сплавов для термоядерной энергетике является устойчивость к нейтронному облучению, одним из аспектов которой является стойкость к радиационному



распуханию при повышенных температурах, т.е. процессу объединения точечных дефектов в комплексы и поры, которые приводят к разрушению материала. Достоверно установлено, что в случае ванадия, существенное снижение радиационного распухания достигается легированием титаном при его концентрации 4-5%. Добавление хрома, в некоторой степени, отрицательно сказывается на радиационном распухании, однако оно нужно для обеспечения необходимой высокотемпературной прочности и низкой ползучести [4].

Несмотря на большое число работ по сплаву V-4Ti-4Cr[5-7] механизм влияния титана и хрома на радиационное распухание до сих пор является плохо изученным. Авторы работы[8] выдвинули гипотезу, что атомы замещения большего размера, по сравнению с атомами матрицы, захватывают избыточные вакансии, и увеличение концентрации вакансий приводит к увеличению доли рекомбинации. А увеличение рекомбинации точечных дефектов и медленная миграция вакансий являются причиной подавления зарождения пор. Таким образом, в результате добавления титана существенно снижается количество образующихся пор, которые приводят к радиационному распуханию и разрушению материала.

В этой статье мы, используя расчеты “из первых принципов”, исследовали взаимодействие двух вакансий в чистом ванадии в зависимости от расстояния между ними и определили энергию связи дивакансии. Также мы провели расчеты энергий образования и объемов образования точечных дефектов, изучили взаимодействие вакансий и межузельного атома в ванадии с атомами примеси титана и хрома.

### Детали расчетов

Расчеты проводились с помощью теории функционала электронной плотности[9] в рамках обобщенного градиентного приближения (GGA)[10] для обменно-корреляционного потенциала с функционалом вида PBE (Perdew-Burke-Ernzerhof)[10], с использованием программного пакета VASP[18].

Энергия обрезания базиса плоских волн составила 350 эВ. Сетка k-точек в обратном пространстве задавалась по Гамма-центрированной схеме с расстоянием между k-точками 0.15 Å<sup>-1</sup>. Для размывания энергии на уровне Ферми использован метод Methfessel-Paxton[12] с шириной размывания 0.20 эВ.

Для расчета энергий образования вакансий и межузельных атомов использованы PAW (присоединенные плоские волны) потенциалы[13] ванадия с 5 (4s<sup>2</sup>3d<sup>3</sup>) и 13 (3s<sup>2</sup>3p<sup>6</sup>4s<sup>2</sup>3d<sup>3</sup>) валентными электронами, соответственно. Для титана был использован потенциал с 12 электронами (3p<sup>6</sup>4s<sup>2</sup>3d<sup>4</sup>), а для хрома с 14 электронами (3s<sup>2</sup>3p<sup>6</sup>3d<sup>5</sup>4s<sup>1</sup>).

Для расчетов энергий образования точечных дефектов и комплексов применен метод сверхячеек с периодическими граничными условиями (ПГУ)[14]. Для всех случаев релаксация положений атомов проводилась до сил менее 25 мэВ/Å.

Для ячейки, состоящей из N атомов, энергия образования моновакансии была рассчитана по формуле:

$$E_f^{Vac} = E^{Vac}(V_{N-1}) - [(N - 1)/N]E(V_N), \quad (1)$$

энергия образования межузельного атома:

$$E_f^{SIA} = E^{SIA}(V_{N+1}) - [(N + 1)/N]E(V_N), \quad (2)$$

Энергия растворения Ti/Cr:

$$E_s^X = E^X(V_{N-1} + X) - \left[ \frac{(N-1)}{N} \right] E(V_N) - E(X), \quad (3)$$

где  $E(V_N)$  - энергия идеальной ячейки, состоящей из N атомов,  $E^{Vac}(V_{N-1})$  - энергия ячейки, состоящей из (N - 1) атомов ванадия и содержащей одну вакансию,  $E^{SIA}(V_{N+1})$  - энергия ячейки, состоящей из (N+1) атомов ванадия и содержащей один межузельный атом,  $E^X(V_{N-1} + X)$  - энергия ячейки, состоящей из (N - 1) атомов ванадия и содержащей один атом примеси замещения,  $E(X)$  - энергия одного атома примеси (X-Ti в ГПУ решетке, Cr в ОЦК решетке).

Энергия связи между A и B (A и B могут быть атомами замещения, межузельными атомами или вакансиями) определяется как:

$$E_b^{(A,B)} = E^A(V_{N-1} + A) + E^B(V_{N-1} + B) - E^{A+B}(V_{N-2} + A + B) - E(V_N), \quad (4)$$



где  $E(V_N)$  - энергия идеальной ячейки, состоящей из  $N$  атомов ванадия,  $E^{Vac}(V_{N-1})$  - энергия ячейки, состоящей из  $(N - 1)$  атомов ванадия и содержащей одну вакансию, и  $E^A(V_{N-1} + A)$  или  $E^B(V_{N-1} + B)$  - энергии ячеек, состоящих из  $(N-1)$  атомов ванадия и содержащих дефекты  $A$  и  $B$  соответственно;  $E^{A+B}(V_{N-2} + A + B)$  -- энергия ячейки, состоящей из  $(N-2)$  атомов ванадия и содержащей два дефекта  $A$  и  $B$ . Положительная энергия связи означает притяжение двух дефектов, а отрицательная - отталкивание.

Расчет объема образования вакансии проводился по формуле:

$$\Omega_f^{Vac} = \Omega^{Vac}(V_{N-1}) - [(N - 1)/N]\Omega(V_N), \quad (5)$$

где  $\Omega(V_N)$  - объем идеальной ячейки, состоящей из  $N$  атомов ванадия,  $\Omega^{Vac}(V_{N-1})$  - объем ячейки, состоящей из  $(N-1)$  атомов ванадия и содержащей вакансию.

Расчет объема растворения атомов замещения и объема образования межузельного атома в решетке ванадия:

$$\Omega_s^X = \Omega^X(V_{N-1} + X) - \Omega(V_N), \quad (6)$$

$$\Omega_f^{SIA} = \Omega^{SIA}(V_{N+1}) - \left[ \frac{(N+1)}{N} \right] \Omega(V_N). \quad (7)$$

где  $\Omega(V_N)$  - объем идеальной ячейки, состоящей из  $N$  атомов ванадия,  $\Omega^X(V_{N-1} + X)$  - объем ячейки, состоящей из  $(N-1)$  атомов ванадия и одного дефекта  $X$  ( $X$  = вакансия, Ti, Cr).

### Точечные дефекты в ванадии

Расчитанные нами параметры решётки для чистого ОЦК ванадия и ОЦК хрома составляют 2.98 Å и 2.85 Å, что находится в хорошем согласии с экспериментальными значениями 3.03 Å[15] при 300 К и 2.88 Å[16] при 300 К (при 20 К отличие в 3 знаке не сильное), соответственно. Для чистого титана мы получили  $a$  и  $c$  2.94 Å и 4.65 Å, что также хорошо согласуется с экспериментом 2.95 Å и 4.69 Å[17] при 300 К.

Прежде чем перейти к изучению комплексов дефектов, мы рассмотрели вакансию, межузельный атом и примеси замещения Ti и Cr в сверхячейках ОЦК ванадия, детально исследуя сходимость энергий образования в зависимости от размера сверхячеек, содержащих 54, 128, 250 и 432 атома (см. таблицу).

Мы получили, что энергия образования вакансии ( $E_f$ ) слабо зависит от размера ячейки; адекватное значение даёт даже самая маленькая сверхячейка (разброс 140 мэВ). При этом в согласии с другими теоретическими данными, рассчитанные  $E_f$  выше экспериментального значения 2.1-2.2 эВ[18] на 0.4-0.5 эВ.

В отличие от единственной конфигурации для вакансии, в случае межузельного атома известны три основных конфигурации - гантели, отличающиеся направлениями, вдоль которых они расположены. Мы получили, что в случае межузельных атомов ячейка 3×3×3 достаточно сильно завьщает  $E_f^{SIA}$  (на ~0.3 эВ), однако уже для ячейки 4×4×4 обеспечивается сходимость на уровне 70 мэВ. В согласии с экспериментом и ТФП расчетами других авторов[19] наиболее выгодной является гантель <111>.

Наконец, мы также определили объемы образования рассмотренных дефектов, величины которых важны для понимания механизмов распухания (см. таблицу). Как и ожидается, межузельный атом оказывает наибольшее влияние, увеличивая объём системы на 18 Å<sup>3</sup>. Вакансия приводит к меньшему в два раза эффекту (7 Å<sup>3</sup>). Растворение атома титана увеличивает объём на 3.5 Å<sup>3</sup>, в то время как растворение хрома его уменьшает на 4.5 Å<sup>3</sup>.

### Дивакансия в ванадии

В связи с возможным влиянием комплексов титана с дивакансиями на радиационное распухание мы установили наиболее выгодную конфигурацию дивакансии в ОЦК ванадии и соответствующую энергию связи. На рис. 1 показаны рассчитанные энергии взаимодействия двух вакансий в сверхячейке ОЦК ванадия 5×5×5. Видно, что при увеличении расстояния между вакансиями взаимодействие уменьшается вплоть до нулевых значений на расстоянии 8 Å.

Наиболее выгодной является конфигурация, при которой вторая вакансия находится на второй координационной сфере по отношению к первой (в ОЦК железе на первой сфере 0.16 эВ, а на второй 0.23[20]).

Образование дивакансии можно рассматривать в качестве первого шага к образованию поры[20]. Так, сравнение чистого ОЦК ванадия и железа показывает, что для железа энергия связи дивакансии в два раза меньше (0.23[20] против 0.45 эВ) При этом оказывается, что и



распухание чистого ванадия также выше, чем железа для одинаковых условий (430°C, 20 дпа): 2 %[21] и 0.8 %[22], соответственно.

Таблица  
Table

Рассчитанные энергии образования (эВ) и объемы (Å³) для вакансии и трех конфигураций межузельных атомов; энергии растворения (эВ) и объемы (Å³) для титана и хрома в ОЦК ванадия; атомный объем ОЦК ванадия (Å³)  
Calculated formation energies (eV) and volumes (Å³) for vacancy and three dumbbell configurations; solution energies (eV) and volumes (Å³) for Ti and Cr in bcc V; atomic volume of bcc V (Å³)

	3×3×3	4×4×4	5×5×5
Количество атомов	54	128	250
$E_f^v$ (ат), эВ	2.50	2.36	2.47
	-	-	2.44*
	-	-	2.51 <sup>[5]</sup>
$\Omega^v$ , Å³	6.2	6.9	6.6
$E_f^{(100)}$ , эВ	4.13	3.70	3.77
	-	3.57 <sup>[19]</sup>	-
$E_f^{(110)}$ , эВ	3.81	3.52	3.58
	-	3.48 <sup>[19]</sup>	-
$E_f^{(111)}$ , эВ	3.44	3.22	3.29
	-	3.14 <sup>[19]</sup>	-
$\Omega_{(100)}$ , Å³	-	-	18.0
$E_s(Ti)$ , эВ	0.31	0.32	0.33
$\Omega_s(Ti)$ , Å³	3.4	3.5	3.1
$E_s(Cr)$ , эВ	-0.10	-0.10	-0.09
$\Omega_s(Cr)$ , Å³	-4.5	-4.4	-5.0
$\Omega(V)$ , Å³	-	-	13.5

\* - сверхячейка 6×6×6

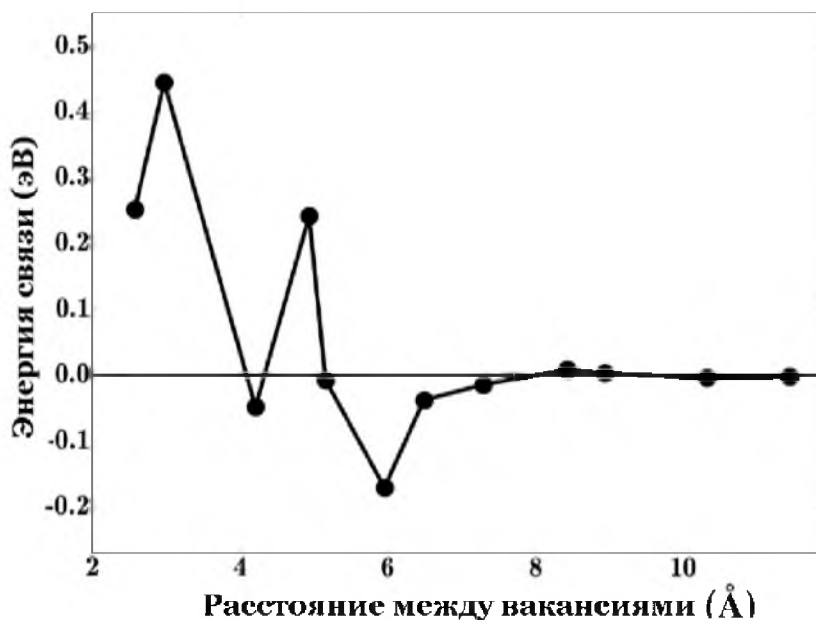


Рис. 1. Энергия связи дивакансии в зависимости от расстояния, рассчитанная по формуле 4. Ячейка 5×5×5 ОЦК ванадий

Fig. 1. The binding energy between two vacancies in dependence of distance between them. Points mean nn positions between vacancies. The energy was calculated using eq. (4) and 5×5×5 bcc V supercells

Рассмотренные конфигурации комплексов атомов титана и хрома с вакансиями и межузельными атомами для 1-4 координационных сфер представлены на рис. 2.

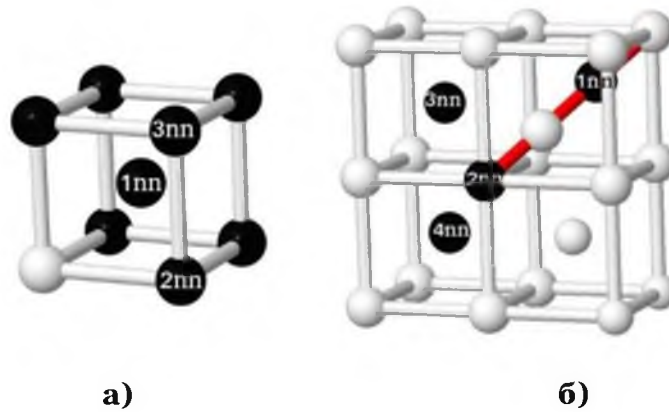


Рис. 2. Схематическое изображение координационных сфер: а) первая, вторая и третья координационные сферы вокруг вакансии (показана белым цветом); б) первая, вторая, третья и четвертая координационные сферы вокруг межузельного атома в гантели  $\langle 111 \rangle$  (выделена красной линией)  
 Fig. 2. The considered nearest-neighboring (nn) atomic configurations: a) 1nn-3nn positions (black atoms) near the vacancy (white atom); b) 1nn-4nn positions near the  $\langle 111 \rangle$  dumbbell highlighted with space diagonal

Так как комплексы растворенных элементов с межузельными атомами в ванадии до нас ранее не изучались, мы первым делом решили рассмотреть их. В первую очередь было интересным проверить может ли титан и хром изменить предпочтительность образования гантелей. Однако, согласно нашим результатам во всех случаях, как титан, так и хром не только не меняют предпочтительности гантели  $\langle 111 \rangle$ , но и способствуют перестройке гантелей  $\langle 100 \rangle$  и  $\langle 110 \rangle$  в  $\langle 111 \rangle$ . Поэтому на рис. 3 (б) мы приводим энергии взаимодействия комплексов X-межузельный атом (где X = Ti, Cr) только для гантели  $\langle 111 \rangle$ . Согласно нашим результатам, титан и хром испытывают притяжение к межузельному атому. В случае титана это происходит на второй сфере (0.17 эВ), а в случае хрома на первой сфере (0.19 эВ). Подобные значения энергий связи с межузельными атомами являются очень низкими и согласно имеющимся представлениям не могут оказать заметного влияния на процесс распухания ванадия[23].

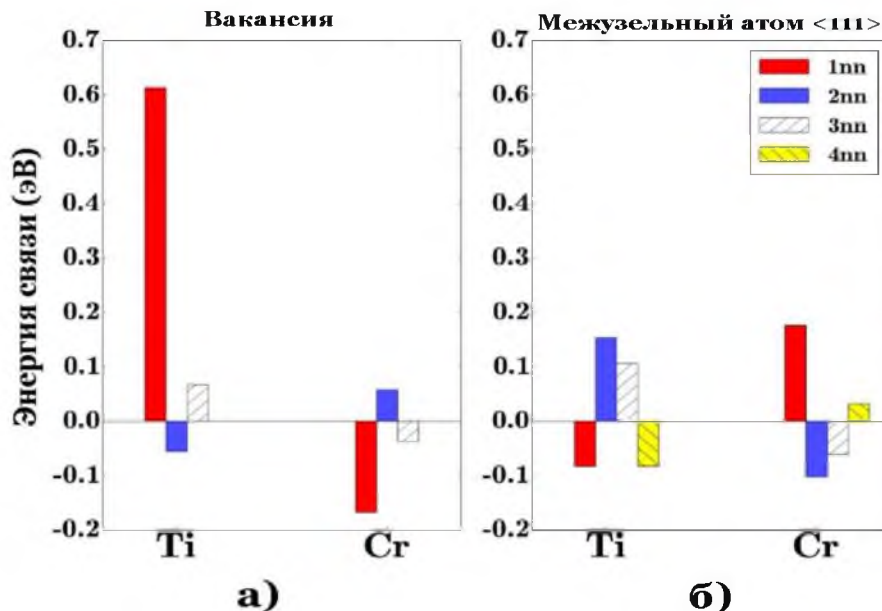


Рис. 3. а) Энергия взаимодействия, рассчитанная по формуле 4, для титана и хрома с вакансией, в зависимости от номера координационной сферы в ячейке  $5 \times 5 \times 5$ . (nn - координационная сфера). б) Энергия связи титана и хрома с межузельным атомом в положении  $\langle 111 \rangle$  в зависимости от номера координационной сферы, рассчитанные для ячейки  $4 \times 4 \times 4$   
 Fig. 3. a) Binding energy of X-vacancy (X = Ti, Cr) complexes calculated with  $5 \times 5 \times 5$  supercells using eq. (4). The first to third nearest neighboring positions are shown. b) Binding energy of X- $\langle 111 \rangle$  dumbbell (X = Ti, Cr) calculated with  $4 \times 4 \times 4$  supercells using eq. (4). The first to fourth nearest neighboring positions are shown



Маленькие энергии связи с межузельными атомами подтолкнули нас к более детальному исследованию комплексов с вакансиями. На рис. 3 (а) показаны рассчитанные энергии взаимодействия для комплексов титан-вакансия и хром-вакансия. Первое, что обращает на себя внимание, это очень сильное притяжение титана и вакансии на первой координационной сфере. Энергия связи 0.6 эВ для этой конфигурации существенно превышает имеющиеся в литературе значения 0.3 эВ[5] и 0.4 эВ[24] для титана в ванадии, и существенно отличается в большую сторону по сравнению с типичными энергиями связи других элементов в ОЦК ванадии[24]. В случае атома хрома на первой сфере наблюдается существенное отталкивание, и лишь небольшое притяжение на второй сфере (0.05 эВ). Для обоих атомов на третьей и четвертой сферах взаимодействие с вакансией существенно падает.

Установив выделяющиеся высокие значения энергии связи титана с моновакансией, мы решили рассмотреть возможность образования более сложного комплекса вакансии с двумя атомами титана, который изображен на рис. 4. Энергия связи такого комплекса составила 1.22 эВ, что является выдающимся значением. Также, были рассмотрены комплексы с расположением двух атомов титана на других позициях по отношению к вакансии и комплексы, содержащие 3 и 4 атома титана. Оказалось, что самой большой энергией связи обладает комплекс Ti-Vac-Ti.

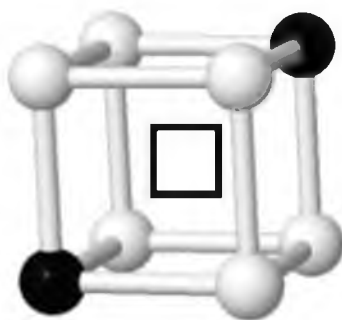


Рис. 4. Схематическое изображение комплекса Ti-Vac-Ti. Черным отмечены атомы титана, пустым квадратом – вакансия  
 Fig. 4. Schematic image of Ti-Vac-Ti complex. Black atoms are Ti, black rectangular is vacancy

### Распухание ванадия, легированного титаном

Скорость роста пор описывается следующей формулой[25]:

$$F(\eta) = \left(\frac{2}{\eta}\right) \left\{ (1 + \eta)^{\frac{1}{2}} - 1 \right\}, \eta = \frac{4R^{eff}G}{S_I D_I S_V D_V^{eff}}, \quad (8)$$

где  $F$  - доля дефектов, попадающих в стоки в единицу времени,  $R^{eff} = 4\pi r_0(D_i + D_V^{eff})$  - эффективная скорость рекомбинации дефектов,  $G$  - скорость образования дефектов,  $S_{I,V}$  - сила стока для межузельного атома/вакансии,  $D_{I,V}^{eff}$  - эффективный коэффициент диффузии межузельного атома/вакансии.

Уменьшение мобильности вакансий увеличивает коэффициенты рекомбинации дефектов, снижая скорость роста пор. Так, на рис. 5 приведены скорости роста в зависимости от температуры облучения для случая отсутствия комплексов, комплексов Ti-Vac с энергией связи 0.3 эВ, как получено в работе[5], комплексов Ti-Vac с энергией связи 0.6 эВ, полученных в нашей работе, и впервые обнаруженных комплексов Ti-Vac-Ti[25] с энергией связи 1.2 эВ (при расчете учитывался вклад конфигурационной энтропии). Видно, что в первом случае происходит снижение скорости роста на один порядок, во втором случае уже на два порядка, а в третьем случае на четыре порядка. Настолько существенное снижение скорости роста пор позволяет с уверенностью говорить, что обнаруженный комплекс Ti-Vac-Ti играет ключевую роль в подавлении распухания и позволяет снять давнюю проблему чрезвычайно положительного влияния титана на радиационную стойкость ванадия.

### Причины образования сильной связи титана с вакансией

Начиная с работ [4,8] высказывались предположения об образовании комплексов титан-вакансия. В качестве причины для их образования используется объяснение, основанное на анализе объёмов, которое очень распространено в литературе [15]. Используя металлический радиус титана, который больше, чем у ванадия на 10% авторы [4] объясняют связывание с вакансией, имеющей отрицательный объём.

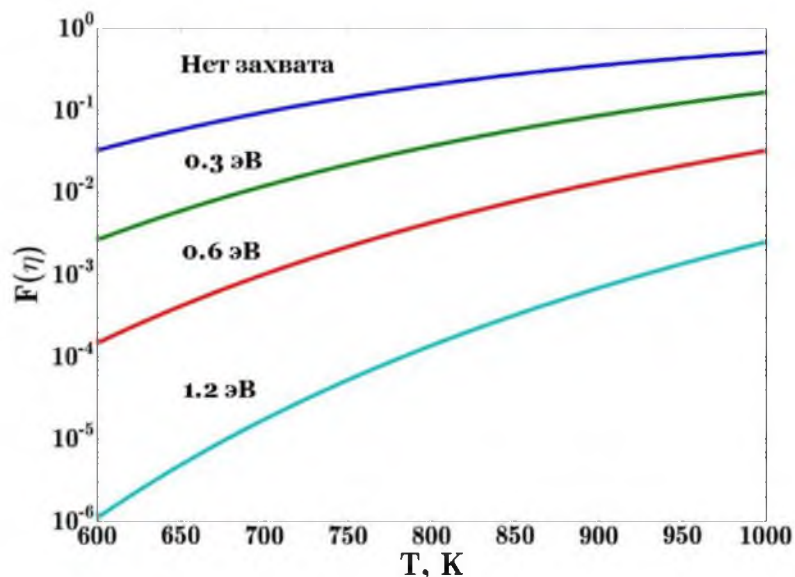


Рис. 5. Доля вакансий, уходящих в поры в зависимости от температуры, при различной энергии связи вакансии с атомом титана

Fig. 5. The fraction of point defects lost into sinks in unit time depending on temperature for different values of Ti-Vac binding energy

Действительно, согласно нашим расчётам, растворение титана в ванадии приводит к увеличению объёма на  $3.5 \text{ \AA}^3$ , в то время как вакансии уменьшает объём на  $6.6 \text{ \AA}^3$  (см. таблицу). Что интересно, образование комплекса Ti-Vac-Ti фактически в два раза выгоднее и имеет нулевой объём, в то время как присоединение третьего атома титана не является выгодным. Хотя анализ объёмов и позволяет качественно предсказать возможность образования связи, он не всегда точен.

Чтобы установить причину выигрыша в химической энергии, мы рассчитали плотность электронных состояний для сверхячейки, содержащей одну вакансию, и сверхячейки (A) с комплексом вакансии-титан (B). Чтобы получить вторую ячейку, в первой ячейке достаточно заменить один атом ванадия ( $V_1^A$ ), находящийся рядом с вакансией, на атом титана ( $Ti^B$ ). Далее мы выбираем 6 соответствующих друг другу атомов ванадия вокруг атомов  $V_1^A$  и  $Ti^B$ ,  $V_{2-8}^A$  и  $V_{2-8}^B$ , и суммируем по ним электронную плотность. Наконец, так как мы знаем, что атом хрома отталкивается от вакансии на первой сфере, для возможности сравнения мы рассчитываем аналогичным образом электронную плотность для ячейки с комплексом вакансии-хром (C) на атомах  $V_{2-8}^C$ . На рис. 6 (а) приведены парциальные электронные плотности d орбиталей для атомов  $V_{2-8}^A$  и  $V_{2-8}^B$ , а на рис. 6 (б) для атомов  $V_{2-8}^A$  и  $V_{2-8}^C$ . Видно, что для комплекса Vac-Ti на окружающих атомах ванадия происходит существенное снижение d-ППЭС на уровне Ферми. Подобное снижение говорит о стабилизации структуры и, как правило, сопровождается снижением полной энергией. Также, из графика видно, что происходит переброс электронной плотности на более низкие энергии, что сопровождается уменьшением полной энергией. В случае же комплекса Vac-Cr (Рис. 6(б)) описанные эффекты отсутствуют.

### Заключение

На основе ТФП расчетов энергий связи комплексов точечных дефектов мы проанализировали возможные механизмы влияния титана на радиационное распухание ванадия. Установлено, что ключевую роль играет образование комплексов титан-вакансия.

Мы получили, что комплекс вакансии-титан обладает выдающейся энергией связи 0.6 эВ. Более того, обнаружен ранее не известный тройной комплекс титан-вакансия-титан в направлении  $\langle 111 \rangle$  с энергией связи 1.2 эВ, который согласно нашим оценкам, должен вносить ещё более существенный вклад в увеличение коэффициента рекомбинации дефектов и снижения распухания ванадия, чем парный комплекс вакансии-титан. В дополнение к этому, мы установили, что образование комплекса титан-дивакансия также является крайней выгодным. Анализ плотности электронных состояний позволил объяснить причины образования комплексов с точки зрения оптимизации электронной структуры.

В отличие от вакансий взаимодействие титана и хрома с межузельными атомами не существенно и не может сильно влиять на процессы распухания.



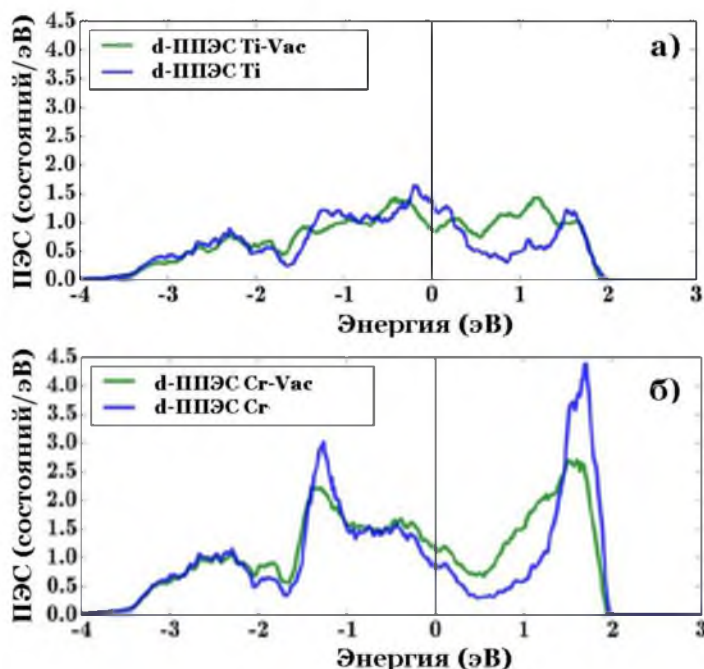


Рис. 6. Парциальная плотность состояний примесей и окружающих атомов ванадия вблизи вакансии. Уровень Ферми лежит при нулевой энергии

Fig. 6. The partial density of d-orbitals on Ti solute atom near the vacancy and Ti atom in vanadium volume (a) and on Cr solute atom near the vacancy and Cr atom in vanadium volume (b). The Fermi level lies at zero energy

### Список литературы References

1. Smith D. L. et al. 1996. Reference vanadium alloy V-4Cr-4Ti for fusion application. Journal of nuclear materials. T. 233: 356-363.
2. Zinkle S. J., Ghoniem N. M. 2000. Operating temperature windows for fusion reactor structural materials. Fusion Engineering and design. T. 51: 55-71.
3. Ivanov L. I., Platov Y. M. 2004. Radiation physics of metals and its applications. Cambridge Int Science Publishing.
4. Loomis B. A., Smith D. L., Garner F. A. 1991. Swelling of neutron-irradiated vanadium alloys. Journal of nuclear materials. T. 179: 771-774.
5. Zhang C. et al. 2013. Stability and migration of vacancy in V-4Cr-4Ti alloy: Effects of Al, Si, Y trace elements. Journal of Nuclear Materials. T. 442. №. 1: 370-376.
6. Matsui H., Nakajima H., Yoshida S. 1993. Microstructural evolution in vanadium alloys by fast neutron irradiation. Journal of nuclear materials. T. 205: 452-459.
7. Gelles D. S., Stubbins J. F. 1994. Microstructural development in irradiated vanadium alloys. Journal of nuclear materials. T. 212: 778-783.
8. Fukumoto K., Kimura A., Matsui H. 1998. Swelling behavior of V-Fe binary and V-Fe-Ti ternary alloys. Journal of nuclear materials. T. 258: 1431-1436.
9. Kohn W., Sham L. J. 1965. Self-consistent equations including exchange and correlation effects. Physical review. T. 140. №. 4A: 1133.
10. Perdew J. P., Burke K., Ernzerhof M. 1996. Generalized gradient approximation made simple. Physical review letters. T. 77. №. 18: 3865.
11. Kresse G., Furthmüller J. 1996. Efficiency of ab-initio total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set. Computational Materials Science. T. 6. №. 1: 15-50.
12. Methfessel M., Paxton A. T. 1989. High-precision sampling for Brillouin-zone integration in metals. Physical Review B. T. 40. №. 6: 3616.
13. Blöchl P. E. 1994. Projector augmented-wave method. Physical Review B. T. 50. №. 24: 17953.
14. Harding J. H., Stoneham A. M. 1981. Vibrational entropies of defects in solids. Philosophical Magazine B. T. 43. №. 4: 705-713.
15. Kittel C. 1996. Introduction to Solid State Chemistry.
16. Gordienko V. A., Nikolaev V. I. 1971. Magnetic Anomalies of the Thermal Expansion of Chromium. ZhETF Pisma Redaktsiiu. T. 14: 6.





17. Pawar R. R., Deshpande V. T. 1968. The anisotropy of the thermal expansion of  $\alpha$ -titanium. *Acta Crystallographica Section A: Crystal Physics, Diffraction, Theoretical and General Crystallography*. T. 24. №. 2: 316-317.
18. Ehrhart P., Jung P., Schultz H. 1991. Atomic Defects in Metals (Landolt-Börnstein, New Series, Group III vol 25) ed H Ullmaier.
19. Han S. et al. 2002. Self-interstitials in V and Mo. *Physical Review B*. T. 66. №. 22: 220101.
20. Ohnuma T., Soneda N., Iwasawa M. 2009. First-principles calculations of vacancy–solute element interactions in body-centered cubic iron. *Acta Materialia*. T. 57. №. 20: 5947-5955.
21. Garner F. A., Okita T., Sekimura N. 2011. Swelling of pure vanadium and V-5Cr at  $\sim 430^\circ\text{C}$  in response to variations in neutron flux-spectra in FFTF. *Journal of Nuclear Materials*. T. 417. №. 1.: 314-318.
22. Budylnin N. I. et al. 2008. Neutron-induced swelling and embrittlement of pure iron and pure nickel irradiated in the BN-350 and BOR-60 fast reactors. *Journal of Nuclear Materials*. T. 375. №. 3: 359-364.
23. Mansur L. K. 1981. Theoretical evaluation of a mechanism of precipitate-enhanced cavity swelling during irradiation. *Philosophical Magazine A*. T. 44. №. 4: 867-877.
24. Deng L. et al. 2016. First-principles study of the binding preferences and diffusion behaviors of solutes in vanadium alloys. *Journal of Alloys and Compounds*. T. 660: 55-61.
25. Yoo M. H. 1979. Growth kinetics of dislocation loops and voids—the role of divacancies. *Philosophical Magazine A*. T. 40. №. 2: 193-211.
26. Kartamyshev A.I. et al. 2016. Many-body interatomic potentials in ti-v system with angular dependence for molecular dynamics simulations. *Belgorod State University Scientific Bulletin Mathematics & Physics*. №20: 117-129.