

## بررسی خواص نقیصه‌های نقطه‌ای در ساختار زیرکونیوم خالص و آلیاژ Zr-۱٪Nb با استفاده از نظریه تابعی چگالی و شبیه‌سازی اتمی

محمد رضا باسعادت و محمود پیامی شبستر

پژوهشکده فیزیک و شتابگرها، پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای، سازمان انرژی اتمی ایران، تهران

پست الکترونیکی: mpayami@aeoi.org.ir

(دریافت مقاله: ۱۳۹۸/۰۶/۱۸؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۳۹۸/۰۹/۲۰)

### چکیده

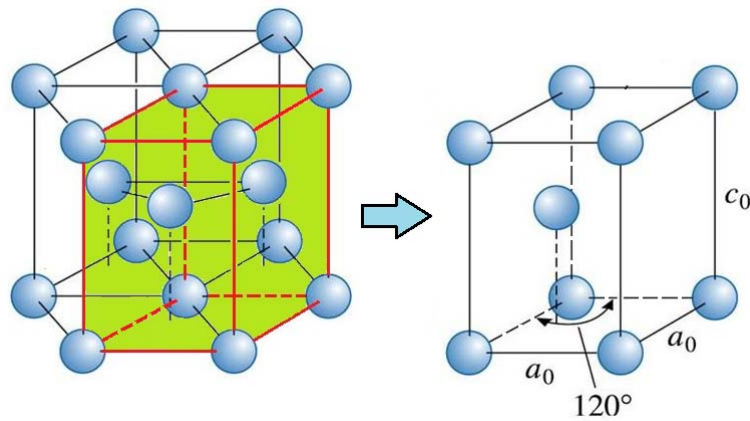
نقیصه‌های بلوری نقش بسیار مؤثری در استحکام و خواص مکانیکی مواد دارند. آلیاژ Zr-۱٪Nb به دلیل سطح مقطع جذب پایین برای نوترون‌های حرارتی، مقاومت در برابر خوردگی در آب، و همچنین خواص مکانیکی مناسب، کاربرد وسیعی در راکتورهای هسته‌ای دارد. این آلیاژ در دماهای پایین و به ازای غلظت‌های کم نیوبیوم، ساختار HCP دارد. در این پژوهش ما با استفاده از محاسبات ابتدا به ساکن نظریه تابعی چگالی و همچنین استفاده از پتانسیل بین اتمی در دینامیک مولکولی، به بررسی خواص نقیصه‌های نقطه‌ای مانند تھی-جای و خود-بین-نشین در ساختار زیرکونیوم خالص پرداخته‌ایم. انرژی و حجم تشکیل تھی-جای و خود-بین-نشین محاسبه شده‌اند و نتایج توافق خوبی با تجربه دارد. کمیت‌های فوق در مورد آلیاژ Zr-۱٪Nb نیز به دست آمده‌اند و نتایج تفاوت چندانی با مورد Zr خالص نشان نمی‌دهند. همچنین برهم‌کنش بین دو تھی-جای بررسی شده و با محاسبه انرژی پیوندی خوشه‌های تھی-جای دوتایی برای پیکربندی‌های متفاوت نشان داده شده که فقط خوشه‌هایی پایدارند که در آنها تھی-جای‌ها در همسایگی اول قرار داشته باشند. در نهایت انرژی جابه‌جایی یک تھی-جای در صفحه قاعده نیز محاسبه شد که توافق خوبی با مقدار تجربی دارد.

واژه‌های کلیدی: راکتور هسته‌ای، آلیاژ زیرکونیوم-نیوبیوم، نقیصه بلوری، نظریه تابعی چگالی، دینامیک مولکولی

### ۱. مقدمه

غلاف سوخت یکی از مهم‌ترین اجزای راکتور است که درون قلب راکتور قرار دارد. به دلیل سطح مقطع پایین جذب نوترون، سختی زیاد، شکل پذیری مناسب و مقاومت در برابر خوردگی، مواد غلاف را از آلیاژهای زیرکونیومی تهیه می‌کنند

[۱]. ایمنی و کنترل راکتور و قطعات آن یک نیاز مبرم در طراحی راکتورها است. تحول میکروساختاری در ساختار یک ماده تحت تابش تا حد زیادی وابسته به خصوصیات آن ماده و نحوه جابه‌جایی نقیصه‌ها درون آن است که این موضوع می‌تواند کیفیت ماده مورد نظر را از لحاظ خواص مکانیکی



شکل ۱. (رنگی در نسخه الکترونیکی) شبکه HCP مربوط به ساختار زیرکونیوم خالص در دماهای پایین.

آنجا ساختار خوشه‌های پایدار را تعیین خواهیم کرد. در نهایت، به بررسی نحوه تحول تهی- جای در درون یک ابرسلول ۳۶- اتمی زیرکونیوم خالص می‌پردازیم که از اینجا مقدار انرژی جابه جایی تهی- جای در این ساختار نیز به دست خواهد آمد.

## ۲. روش‌های محاسباتی

محاسبات انجام شده در فاز اول این مقاله مبتنی بر روش ابتدا به ساکن نظریه تابعی چگالی [۴] و حل خود سازگار معادلات کوهن- شم [۵] با به کارگیری بسته نرم‌افزاری Quantum- Espresso [۶] است. در انجام محاسبات از تقریب گرادیان تعمیم‌یافته PBE [۷] و همچنین شبه پتانسیل نرم- پایسته استفاده شده است. آزمون‌های همگرایی برای انرژی قطع تابع موج و همچنین تعداد نقاط مش در فضای وارون برای ساختار زیرکونیوم خالص بدون نقیصه و با نقیصه انجام شد که مقدار انرژی قطع و تعداد نقاط مش در فضای وارون برای سلول واحد و ابرسلول‌های  $2 \times 2 \times 2$ ،  $3 \times 3 \times 3$  و  $4 \times 4 \times 4$  به ترتیب برابر با  $50$  و  $6 \times 6 \times 4$ ،  $50$  و  $4 \times 4 \times 3$ ،  $60$  و  $4 \times 4 \times 2$  و  $60$  و  $4 \times 4 \times 2$  به دست آمد.

همچنین محاسبات انجام شده از طریق شبیه‌سازی اتمی با استفاده از بسته نرم‌افزاری LAMMPS [۸] انجام شده است. در این مورد از دو نوع پتانسیل بین اتمی  $FS^3$  و  $ADP^4$  استفاده شده است که پتانسیل  $ADP$  پتانسیل جدیدی است که

نشان دهد. تهی- جای<sup>۱</sup> و خود- بین- نشین<sup>۲</sup> دو تا از مهم‌ترین نقیصه‌های نقطه‌ای هستند. مطالعه انرژی‌های تشکیل تهی- جای و خود- بین- نشین و همچنین نحوه تحول تهی- جای در ساختار Zr می‌تواند اطلاعات ارزشمندی را در مورد تحول خواص مکانیکی این فلز در اختیار قرار دهد.

زیرکونیوم دارای سه ساختار بلوری اصلی است: فاز- آلفا در دماهای پایین‌تر از  $860$  درجه سانتی‌گراد، که ساختار HCP دارد (شکل ۱)؛ فاز- بتا در دماهای بالاتر از  $860$  درجه سانتی‌گراد، که ساختار BCC دارد. همچنین، فاز- امگا [۲]- [۳]، که ساختار شش گوشه با گروه فضایی  $P6/mmm$  و شماره ۱۹۱ دارد، مستقیماً با اعمال فشار ۲ تا ۷ گیگا پاسکال از فاز آلفا حاصل می‌شود. آلیاژ  $Zr-1\%Nb$  به ازای غلظت‌های پایین نیوبیم (تا ۲۰ درصد) و دمای کمتر از  $860$  درجه سانتی‌گراد، ساختار HCP دارد.

در فاز اول این پژوهش، ابتدا به بررسی ساختار Zr و  $Zr-1\%Nb$  در دماهای پایین پرداخته و پارامترهای شبکه تعادلی را برای آنها محاسبه می‌کنیم. سپس به محاسبه انرژی‌های تشکیل تهی- جای، خود- بین- نشین، و زوج فرنکل خواهیم پرداخت و در مرحله بعد، حجم‌های تشکیل تهی- جای و خود- بین- نشین را به دست خواهیم آورد. در فاز دوم این پژوهش، انرژی‌های پیوندی خوشه‌های متشکل از دو تهی- جای را در ترکیب بندی‌های مختلف محاسبه کرده و از

۳. Finnis-Sinclair

۴. Angular-Dependent Potential

۱. Vacancy

۲. Self-interstitial

جدول ۱. ثابت‌های شبکه زیرکونیوم خالص و آلیاژ Zr- ۱٪Nb

	<i>a</i>	<i>c</i>	<i>ca</i>
Pure- Zr			
DFT- PBE	۳,۲۳۴	۵,۱۴۳	۱,۵۹۰
MD- #۳	۳,۲۳۴	۵,۱۶۸	۱,۵۹۸
MD- ADP	۳,۲۱۵	۵,۱۷۳	۱,۶۰۹
Exp. [۱۰]	۳,۲۳۳	۵,۱۵۰	۱,۵۹۳
Zr- ۱٪Nb			
DFT- PBE	۳,۲۳۲	۵,۱۶۲	۱,۵۹۷
MD- ADP	۳,۲۱۳	۵,۱۶۴	۱,۶۰۷

انرژی و آنتالپی تشکیل یک تهی- جای و خود- بین- نشین و همچنین حجم تشکیل آنها برای یک دستگاه بلوری در فشارهای مختلف از رابطه‌های زیر تعیین می‌شوند [۳]:

$$E_V^f(P) = E(N-1; P) - \frac{(N-1)}{N} E(N; P), \quad (۱)$$

$$E_{SI}^f(P) = E(N+1; P) - \frac{(N+1)}{N} E(N; P), \quad (۲)$$

که در آن  $E_V^f(P)$  و  $E_{SI}^f(P)$  به ترتیب انرژی‌های تشکیل تهی- جای و خود- بین- نشین و  $E(N \pm 1; P)$  انرژی دستگاه با یک اتم اضافی یا یک اتم کمتر هستند و همچنین  $E(N; P)$  انرژی دستگاه بدون نقص است. انرژی تشکیل زوج فرنکل برابر مجموع انرژی‌های تشکیل تهی- جای و خود- بین- نشین است. یعنی:

$$E_{Fr}^f(P) = E_V^f(P) + E_{SI}^f(P). \quad (۳)$$

همچنین حجم‌های تشکیل نیز برای تهی- جای و خود- بین- نشین از روابط زیر به دست می‌آیند:

$$\Omega_V^f(P) = V(N-1; P) - \frac{(N-1)}{N} V(N; P), \quad (۴)$$

$$\Omega_{SI}^f(P) = V(N+1; P) - \frac{(N+1)}{N} V(N; P). \quad (۵)$$

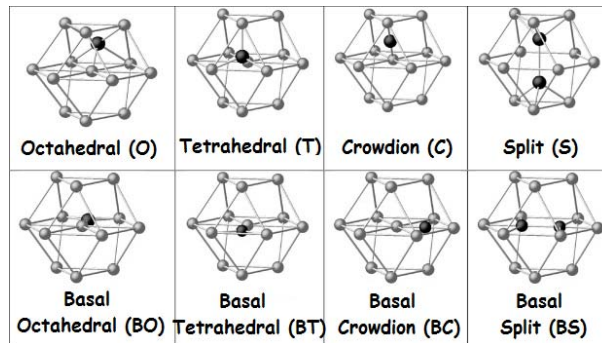
که در آن  $\Omega_V^f(P)$  و  $\Omega_{SI}^f(P)$  به ترتیب حجم‌های تشکیل تهی- جای و خود- بین- نشین هستند و  $V(N \pm 1; P)$  حجم دستگاهی با یک اتم اضافه/ کم است و همچنین  $V(N; P)$  انرژی دستگاه کامل است و نهایتاً:

برای آلیاژ Zr- ۱٪Nb به کار می‌رود و ویژگی‌های این آلیاژ را به درستی پیش‌بینی می‌کند [۹]. تعداد اتم‌های موجود در سلول واحد برای این آلیاژ ۹۶ و این تعداد برای ابرسلول  $2 \times 2 \times 2$  برابر ۷۶۸ است. همچنین تعداد اتم‌های موجود در ابرسلول زیرکونیوم خالص برای محاسبات دینامیک مولکولی نیز ۷۶۸ در نظر گرفته شده است.

### ۳. نتایج و بحث

در فاز اول این محاسبات، ابتدا ساختار هندسی به طور کامل بهینه شده و پارامترهای شبکه به دست آمده‌اند. نتایج پارامترهای ثابت‌های شبکه برای ساختار زیرکونیوم خالص و آلیاژ Zr- ۱٪Nb در جدول ۱ آمده‌اند.

چنان که از جدول ۱ ملاحظه می‌شود، نتایج محاسبات DFT همخوانی بسیار خوبی با تجربه دارند. نتایج حاصل از کاربست پتانسیل‌های بین اتمی نیز کمابیش به تجربه نزدیک هستند و لذا ما محاسبات ابرسلولی را با به کارگیری پتانسیل ADP نیز انجام خواهیم داد. در مرحله بعد محاسبات جهت تعیین مقادیر انرژی‌های تشکیل تهی- جای و خود- بین- نشین انجام گرفت. در این مرحله، با توجه به این که مقدار این انرژی‌ها به اندازه ابرسلول (تعداد اتم‌های موجود در آن) بستگی دارند، سه ابر سلول  $2 \times 2 \times 2$  (شامل ۱۶ اتم)،  $3 \times 3 \times 3$  (شامل ۵۴ اتم) و  $4 \times 4 \times 4$  (شامل ۱۲۸ اتم) در نظر گرفته شده و محاسبات برای این ابرسلول‌ها انجام شد.



شکل ۲. (رنگی در نسخه الکترونیکی) هشت جایگاه ممکن بین نشینی در ساختار زیرکونیوم HCP.

جدول ۲. انرژی و حجم تشکیل برای زیرکونیوم خالص. انرژی تشکیل بر حسب eV و حجم تشکیل نسبت به  $\Omega = 164/0 (a.u.)^3$  برای محاسبات DFT و  $\Omega = 155/0 (a.u.)^3$  برای محاسبات MD وابسته به اندازه ابرسلول در نظر گرفته شده‌اند.

$\Omega_{SI}^f(P)$	$\Omega_V^f(P)$	$E_{Fr}^f(P)$	$E_{SI}^f(P)$	$E_V^f(P)$	تعداد اتم‌ها
DFT					
$-1/00\Omega$	$0/04\Omega$	۲۸۰٫۲۳	۲۷۹٫۸۰	۰٫۴۳	۲
$0/22\Omega$	$0/59\Omega$	۵٫۵۰	۳٫۳۲	۲٫۱۸	۱۶
$0/19\Omega$	$0/57\Omega$	۵٫۰۹	۳٫۱۱	۱٫۹۸	۵۴
$0/20\Omega$	$0/60\Omega$	۴٫۹۵	۳٫۰۲	۱٫۹۳	۱۲۸
MD (۷۶۸ atoms)					
$0/04\Omega$	$0/69\Omega$	۵٫۳۹	۳٫۶۳	۱٫۷۶	۳#
$0/50\Omega$	$0/68\Omega$	۵٫۸۸	۴٫۰۹	۱٫۷۹	ADP
$0/16\Omega [11]$	$0/95\Omega [11]$		۲٫۸۴ [۱۲]	۱٫۸۶ [۱۲]	کارهای دیگران

به سمت مقدار مشخصی میل می‌کنند. به عنوان مثال برای ساختار دو اتمی، انرژی تشکیل تهی - جای ۰٫۴۳ الکترون-ولت و انرژی تشکیل خود-بین-نشین ۲۷۹٫۸ الکترون-ولت به دست آمده است در حالی که مقادیر این کمیت‌ها باید به ترتیب حدود ۱٫۸۶ و ۲٫۸۴ الکترون-ولت شوند. همچنین حجم تشکیل تهی - جای و خود-بین-نشین به ترتیب برابر  $0/04\Omega$  و  $0/69\Omega$  - برای ساختار دو اتمی محاسبه شده‌اند که با مقدار واقعی آنها یعنی  $0/95\Omega$  و  $0/16\Omega$  فاصله زیادی دارند. علت تفاوت فاحش در این مقادیر، کوچک بودن سلول شبیه‌سازی است؛ زیرا محدوده اثر نیروهای بین اتمی بزرگ‌تر از اندازه‌های ساختار دو اتمی است. در حالی که، به دلیل بزرگ بودن سلول ۱۲۸ اتمی، این اختلاف بسیار کمتر است. در شکل ۳، رفتار انرژی‌های تشکیل تهی - جای و خود-بین-نشین نسبت به تعداد اتم‌های ابرسلول نشان داده شده

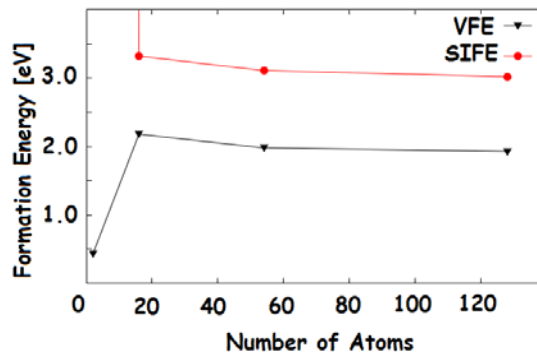
$$H_V^f(P) = E_V^f(P) + P\Omega_V^f(P), \quad (6)$$

$$H_{SI}^f(P) = E_{SI}^f(P) + P\Omega_{SI}^f(P). \quad (7)$$

که در آن  $H_V^f(P)$  و  $H_{SI}^f(P)$  آنتالپی تشکیل تهی - جای و خود-بین-نشین دستگاه است. با توجه به این که محاسبات در فشار صفر انجام می‌شوند تفاوتی میان انرژی و آنتالپی تشکیل نخواهد بود.

هشت جایگاه مختلف برای حضور نقیصه خود-بین-نشین می‌تواند وجود داشته باشد که در شکل ۲ آمده است:

در این پژوهش، از بین تمام جایگاه‌های فوق تنها به بررسی خود-بین-نشین در جایگاه هشت وجهی پرداخته‌ایم. نتایج حاصل برای انرژی‌ها و آنتالپی‌ها و حجم‌های تشکیل به ازای ابرسلول‌های مختلف در جدول ۲ نشان داده شده‌اند. چنانکه ملاحظه می‌شود، با افزایش اندازه ابرسلول از مقادیر تغییرات انرژی‌های تشکیل و حجم‌های تشکیل کاسته شده و



شکل ۳. (رنگی در نسخه الکترونیکی) تغییر انرژی‌های تشکیل تهی- جای و خود- بین- نشین نسبت به تعداد اتم‌های موجود در ابر سلول.

جدول ۳. انرژی و حجم تشکیل محاسبه شده از روش دینامیک مولکولی و برای آلیاژ ۱٪Nb-Zr. انرژی تشکیل بر حسب eV و حجم تشکیل نسبت به  $\Omega = 155/0 (a.u.)^3$  در نظر گرفته شده‌اند.

	$E_V^f(P)$	$E_{SI}^f(P)$	$E_{Fr}^f(P)$	$\Omega_V^f(P)$	$\Omega_{SI}^f(P)$
Zr- 1%/Nb					
ADP	۲,۴۵	۳,۳۶	۵,۸۱	۰,۸۵ $\Omega$	۰,۳۰ $\Omega$

خوشه‌ها در ساختار زیرکونیوم خالص می‌پردازیم. با توجه به شکل ۴ می‌خواهیم بررسی کنیم که رفتار تهی- جای‌ها به صورت ترکیب‌بندی‌های مختلف در این ساختار چگونه است. بر این اساس مفهوم انرژی پیوندی مربوط به خوشه را به صورت تفاوت بین انرژی‌های تشکیل دو تهی- جای مجزا و انرژی تشکیل یک خوشه دوتایی تعریف می‌کنیم [۱۴]:

$$E^b(V_T) = 2E^f(V_T) - E^f(V_T) = 2E(V_T) - E(V_T) - E(bulk). \quad (8)$$

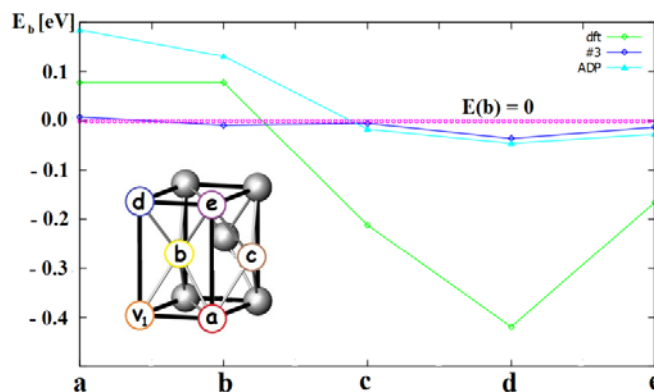
که در آن  $E(V_T)$ ،  $E(bulk)$  و  $E(V_T)$  به ترتیب انرژی سلول شبیه‌سازی با یک تهی- جای، دو تهی- جای و دستگاه کامل هستند.

اگر مقدار انرژی بستگی از رابطه (۸) مثبت به دست آید به این معناست که برهم‌کنش بین تهی- جای‌ها به صورت جاذبه بوده و آن خوشه تهی- جای پایدار خواهد بود. بر این اساس برای ساختار زیرکونیوم پنج نوع خوشه دوتایی تهی- جای بر اساس شکل ۴ در نظر گرفته شده است و نتایج انرژی بستگی حاصل از طریق روش‌های تابعی چگالی و دینامیک مولکولی در شکل ۴ نشان داده شده‌اند. از نتایج محاسبات انجام شده توسط نظریه تابعی چگالی می‌توان

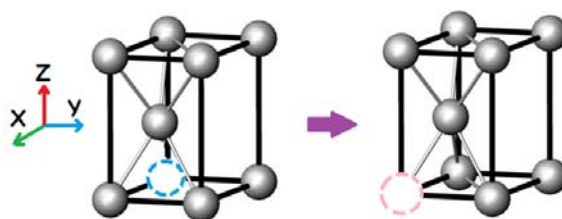
است. ملاحظه می‌شود که مقدار انرژی‌های تشکیل به شدت به تعداد اتم‌های حاضر در درون ابرسلول شبیه‌سازی شده بستگی دارند و هر چه تعداد اتم‌ها افزایش می‌یابند از میزان انرژی تشکیل نیز کاسته می‌شود. علت این موضوع این است که حضور یک نقیصه درون دستگاه، میدان کرنشی که با  $r^{-2}$  متناسب است را تولید می‌کند [۱۳]. بنابراین دستگاهی با اندازه کوچک (تعداد کم اتم‌ها در ابرسلول) بسیار تحت تأثیر حضور نقیصه قرار خواهد گرفت. باید توجه داشت که  $\Omega$  در جدول‌های ۲ و ۳ به ترتیب مقادیر ۱۶۴ و ۱۵۵ واحد اتمی را برای محاسبات DFT و MD دارد که متوسط مقدار حجم به ازای یک اتم در یک سلول واحد است و تمام حجم‌ها به آن مقیاس شده‌اند.

در جدول ۳ نتایج محاسبات مربوط به انرژی‌های تشکیل و حجم‌های تشکیل برای آلیاژ ۱٪Nb-Zr آمده‌اند. چنانکه ملاحظه می‌شود، نتایج این کمیت‌ها تفاوت چشمگیری با نتایج بلور زیرکونیوم خالص ندارند.

در فاز دوم محاسبات، با توجه به بررسی انرژی‌های تشکیل مربوط به تهی- جای‌ها که در بخش قبل مورد بررسی قرار گرفتند اکنون به بررسی نحوه خوشه شدن تهی- جای‌ها به صورت خوشه‌های دوتایی و پایداری این



شکل ۴. (رنگی در نسخه الکترونیکی) نحوه تغییر انرژی بستگی خوشه تهی - جای دو تایی با تغییر فاصله بین دو تهی - جای. تهی - جای اول ( $V_1$ ) در مبدأ قرار داده شده و تهی - جای دوم در یکی از مکان‌های a-e قرار داده می‌شود.



شکل ۵. (رنگی در نسخه الکترونیکی) جابه‌جایی تهی - جای درون ساختار HCP زیرکونیوم که در اینجا تهی - جای در راستای X یعنی در صفحه قاعده حرکت کرده است.

شده [۱۵] فرایند اتمی جابه‌جایی تهی - جای، شامل جابه‌جایی یک اتم و پریدن آن از جای خود به جای خالی مجاورش است که تولید تهی - جای در محل خود خواهد کرد (شکل ۵) که این پرش می‌تواند با ارتعاش گرمایی اتم‌ها تولید شود. بر اساس این تعریف محاسبات از طریق روش NEB [۱۶] برای یافتن میزان انرژی جابه‌جایی تهی - جای در ساختار HCP Zr انجام شد. برای این منظور ابر سلول  $3 \times 3 \times 2$  از این ساختار را که شامل ۳۶ اتم است در نظر گرفتیم. همچنین تعداد ۹ تصویر برای کل مسیر جابه‌جایی انتخاب شد و از روش برویدن<sup>۲</sup> برای بهینه‌سازی تصاویر در مسیر استفاده شد. خطای موجود در محاسبات  $0.01 \text{ eV}/\text{\AA}$  است.

نتیجه مربوط به جابه‌جایی در صفحه قاعده<sup>۳</sup> در شکل ۶ نشان داده شده است. مقدار تجربی مربوط به جابه‌جایی تهی - جای در درون صفحه قاعده شش ضلعی برابر با  $0.58 \text{ eV}$

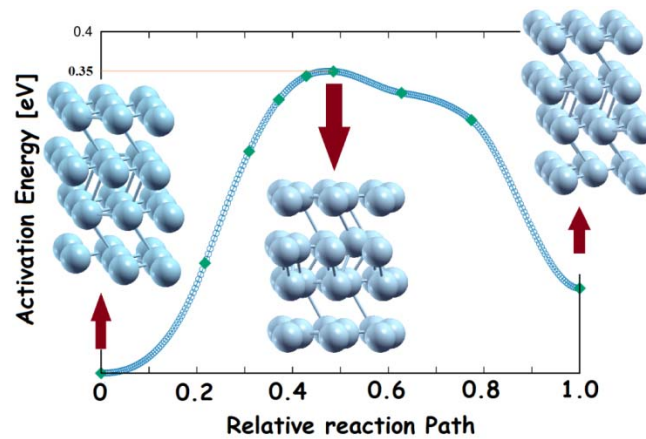
ملاحظه کرد که انرژی بستگی تهی - جای‌های خوشه‌ای دو تایی در مکان‌های a و b تنها دارای مقادیر مثبت و یعنی پایدارند. این مطلب بدان معناست که تنها تهی - جای‌ها زمانی که در نزدیک‌ترین فاصله‌ها نسبت به یکدیگر قرار می‌گیرند می‌توانند یکدیگر را جذب کرده و تولید خوشه‌ای با دو تهی - جای کنند و این مطلب برای همسایگی‌های بعدی صحیح نیست. این محاسبات از طریق روش دینامیک مولکولی با پتانسیل‌های بین اتمی موجود (#۳ و ADP) نیز انجام پذیرفت. در مورد #۳ نتایج با نتایج تابعی چگالی متفاوت بوده و بدین معنی است که این پتانسیل برهم‌کنش‌های تهی - جای‌ها درون ساختار زیرکونیوم را به خوبی توصیف نمی‌کند اما در مورد پتانسیل بین اتمی ADP نتایج همانند نتایج تابعی چگالی به دست آمده است. از اینجا نیز می‌توان پی برد که استفاده از این پتانسیل در پیش‌بینی کمیت‌های مربوط به خوشه شدن تهی - جای‌ها می‌تواند مورد اطمینان باشد.

در بخش انتهایی نیز به بررسی نحوه تحول تهی - جای در ساختار زیرکونیوم خالص می‌پردازیم. بر اساس تعریف ارائه

۱. Nudge Elastic Band

۲. Broyden

۳. Basal plane



شکل ۶. (رنگی در نسخه الکترونیکی) انرژی جابه‌جایی لازم برای حرکت تهی - جای از مبدأ به درون صفحه XY.

باشد. علت این تفاوت آن است که ابرسلول به اندازه کافی بزرگ در نظر گرفته نشده است. برای محاسبات NEB از روش تصویر صعود کننده (CI) استفاده شده است و در نتیجه تعداد تصاویر در نزدیکی نقطه زینی بیشتر است.

#### ۴. نتیجه‌گیری

در این مطالعه، ساختار HPC - Zr به طور کامل بهینه شده و ثابت‌های شبکه آن به دست آمد. سپس انرژی و حجم تشکیل تهی - جای و خود - بین - نشین محاسبه شدند. آنتالپی تشکیل را نیز مورد بررسی قرار دادیم. نتایج محاسبه شده با نتایج تجربی توافق خوبی نشان داد. این محاسبات در مورد آلیاژ Zr- ۱٪Nb نیز به کار گرفته شد و بررسی نتایج حاصل نشان داد که تفاوت‌های چندانی بین نتایج زیرکونیوم خالص و این آلیاژ وجود ندارد. همچنین برهم‌کنش بین دو تهی - جای مورد بررسی قرار گرفته و انرژی پیوندی خوشه‌های تهی - جای دوتایی به ازای پیکربندی‌های مختلف محاسبه شده و ملاحظه شد که تهی - جای‌هایی که تنها در همسایگی اول یکدیگر قرار دارند می‌توانند پایدار باشند. در نهایت نحوه تحول تهی - جای در شبکه زیرکونیوم خالص مورد بررسی قرار گرفت و مقدار انرژی جابه‌جایی در صفحه قاعده به دست آمد که توافق خوبی با تجربه دارد.

گزارش شده است [۱۷] که نتیجه محاسبه شده در این قسمت ۰/۳۵ eV است. لازم به ذکر است که علت تفاوت نتیجه محاسبه شده و مقدار تجربی به دلیل وابستگی شدید انرژی جابه‌جایی به اندازه ابرسلول است. یعنی با توجه به این که حضور یک تهی - جای می‌تواند تا چند انگستروم اطراف آن را تحت تأثیر قرار دهد، با افزایش اندازه ابرسلول نقاط دور از تهی - جای دیگر تحت تأثیر آن نخواهند بود و مقدار انرژی جابه‌جایی به درستی پیش‌بینی خواهد شد. در اینجا به دلیل افزایش فراوان هزینه محاسباتی از ابرسلولی با ۳۵ اتم استفاده شده است که منجر به جواب‌های قابل قبولی می‌شود. باید توجه داشت که زمانی که تعداد اتم‌های موجود در سلول ۱۵ بود، مقدار این انرژی را ۲/۱ الکترون-ولت به دست آوردیم.

در شکل ۶ مسیر واکنش در جابه‌جایی تهی - جای از مبدأ به مکان جانبی آن نشان داده شده است. چنان که ملاحظه می‌شود، هر کدام از نقاط نشان دهنده یک تصویر در مسیر واکنش است و هر کدام یک پیکربندی از اتم‌های Zr دارند. در این شکل، تصاویر مربوط به پیکربندی‌های اولیه، نهایی، و نقطه زینی نشان داده شده است. چنان که در شکل ملاحظه می‌شود، سطح انرژی پیکربندی اولیه و نهایی بسیار نزدیک به هم است. در واقع این دو پیکربندی معادل هم هستند و نباید تفاوتی در سطح انرژی آنها وجود داشته

#### مراجع

1. B Cox, *Journal of Nuclear Materials* **336**, 2- 3 (2005) 331.
2. V O Kharchenko and D O Kharchenko, "Ab- initio calculations for structural properties of Zr- Nb alloys", arXiv preprint arXiv:1206.7035.
3. Q Peng, W Ji, J Lian, X -J Chen, H Huang, F Gao,

1. B Cox, *Journal of Nuclear Materials* **336**, 2- 3 (2005) 331.
2. V O Kharchenko and D O Kharchenko, "Ab- initio

12. C Domain and A Legris, *Philosophical Magazine* **85**, 4-7 (2005) 569.
13. J Barré, A R Bishop, T Lookman, and A Saxena, *Physical Review B* **74**, 2 (2006) 024104.
14. C Varvenne, O Mackain, and E Clouet, *Acta Materialia* **78** (2014) 65.
15. W Wolfer, 1.01 - fundamental properties of defects in metals, in: R. J. Konings (Ed.), “*Comprehensive Nuclear Materials*”, Elsevier, Oxford (2012).
16. Henkelman, Graeme, B P Uberuaga, and H Jónsson, *The Journal of Chemical Physics* **113**, 22 (2000) 9901.
17. H H Neely, *Radiation Effects* **3**, 2 (1970) 189.
- and S De, *Scientific Reports* **4** (2014) 5735.
4. P Hohenberg and W Kohn, *Phys. Rev.* **136** (1964) B864.
5. W Kohn and L J Sham, *Phys. Rev. A* **140** (1965) 113.
6. P Giannozzi, *et al.*, *Journal of Physics: Condensed Matter* **21**, 39 (2009) 395502.
7. J P Perdew, K Burke, and M Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.* **77** (1996) 3865.
8. <http://lammmps.sandia.gov>.
9. D Smirnova, S Starikov, *Computational Materials Science* **129** (2017) 259.
10. E S Fisher, C J Renken, *Phys. Rev.* **135** (1964) A482.
11. P Ehrhart, “*Atomic defects in metals*”, Landolt-Bornstein, New Series (1991).