

文章编号: 1007-4627(2017)03-0661-06

过渡金属锆铁对钨中氢氦行为的影响

张 崢¹, 赵 强^{1,†}, 李 洋¹, 张 浩¹, 符精品¹, 欧阳晓平^{1,2,3}

(1. 华北电力大学核科学与工程学院, 非能动核能技术北京市重点实验室, 北京 102206;

2. 西北核技术研究所, 西安 710024;

3. 湘潭大学材料科学与工程学院, 湖南 湘潭 411105)

摘要: 钨被广泛地认为是最具潜力的面向等离子体材料。钨在聚变堆中的服役过程中, 会受到强束低能的氢氦粒子流的影响, 其结果是钨的性能下降。本工作通过第一性原理计算的方法研究了过渡金属锆铁对钨中氢氦行为的影响。研究表明, 锆或铁的掺入会使钨的机械强度降低, 延展性增加; 锆铁的掺入不会改变氢氦在钨中的最佳占位, 但是它们对氢氦在钨中的稳定性有一定影响; 锆和铁对钨中氢氦的捕获作用存在一个最佳作用半径; 铁原子在短距离 ($< 3.626 \text{ \AA}$) 时对氦有捕获作用, 在长距离 ($> 3.626 \text{ \AA}$) 时存在排斥作用, 而锆对钨中氢氦均具有捕获作用; 钨中氢表现为亲电子的性质, 而氦表现出疏电子的特性。总体来讲, 锆对钨中氢氦的捕获作用要强于铁对钨中氢氦的捕获作用。本研究工作能够为钨基面向等离子体材料制备提供理论指导。

关键词: 过渡金属; 面向等离子体材料; 钨; 锆; 第一性原理

中图分类号: TL62⁺7; O4-39; **文献标志码:** A **DOI:** 10.11804/NuclPhysRev.34.03.661

1 引言

由于钨具有高熔点 (3695 K)、在高温下高强度、高溅射阈能、优良的导热性能以及较低的热膨胀系数等特点, 因此它被广泛地认为是最具有潜力的面向等离子体材料^[1]。除此之外, 钨也被考虑在聚变堆中用作结构材料和屏蔽材料。由于聚变堆中存在着强束低能的氢氦粒子流, 氢氦粒子不可避免地会进入钨基面向等离子体材料中, 而且钨在聚变中子的辐照下会由于嬗变产生氢原子。氢氦存在于钨中会使其机械性能下降^[2]、材料脆化以及脆性转化温度升高, 因此如何减缓钨中氢氦所带来的不利影响是钨基面向等离子体材料的研究重点。材料性能与其化学组分和微观结构紧密相关, 合金化被认为不仅能够改善钨基材料物理性能, 而且也能起到作为钨中氢氦的形核中心的作用。

国内外有关钨基面向等离子体材料的研究工作一直在持续进行, 主要研究包括实验研究和理论计算, 由于实验研究受到许多限制, 所以有关钨基面向等离子体材料在理论计算方面的研究蓬勃发展, 并且也取得了丰富的成果。理论计算研究主要包括两个方面, 分子动力学模拟和第一性原理计算, 它们已经被广泛地应用于钨基面向等离子体材料的相关研究。Becquart 团队通过第

一性原理计算、分子动力学模拟以及动力学蒙特卡洛等方法研究了粒子辐照对钨的影响, 重点研究了微观结构的演化、缺陷对钨的性能影响以及钨中点缺陷间的相互作用^[3-13]。罗广南研究组采用第一性原理计算与实验研究相结合的方法系统地研究了空位、自间隙原子、掺杂原子和晶界与钨中氢氦间的相互作用, 同时也研究它们对钨中氢氦扩散行为的影响^[14-22]。中国科学院合肥物质研究院刘长松团队基于第一性原理计算研究了 16 种元素 (包括常见嬗变/合金元素) 与 H, He 之间的相互作用以及 H, He 在杂质元素周围的扩散性质^[23-26]。基于上述第一性原理数据, 结合热力学模型分析方法研究了 Re, Os, Ta 等杂质对氢的溶解和扩散行为的影响, 定性解释了近期钨合金中氢滞留实验结果^[27-29]。吕广宏研究组通过第一性原理计算和分子动力学模拟的方法成功揭示了氢氦在钨中的形核机理、应力对钨中氢氦原子行为的影响、氢氦在钨中的扩散机制等^[30-41]。虽然科研人员对钨基面向等离子体材料进行了大量的研究, 但是有关过渡金属锆、铁对钨中氢氦行为的报道还相对较少。

过渡金属锆和铁被认为是优良的储氢材料^[42], 因此本文采用第一性原理计算的方法对过渡金属锆铁对钨中氢氦行为的影响进行了系统的研究。本文从以下几个

收稿日期: 2016-11-20; 修改日期: 2017-05-09

基金项目: 中央高校基本科研业务费专项资金资助项目(2017MS079); 国家自然科学基金资助项目(11275071, 11305061)

作者简介: 张崢(1990-), 男, 四川平昌人, 硕士研究生, 从事反应堆材料模拟研究; E-mail: z Zhang@ncepu.edu.cn

† 通信作者: 赵强, E-mail: qzhao@ncepu.edu.cn.

方面进行研究：锆铁掺入钨中对其机械性能的影响；锆铁对钨中氢氦形成能的影响；锆铁与钨中氢氦间的结合能随它们之间距离的变化关系，并通过电子密度的变化探究它们的作用机理。

2 计算模型和方法

氢氦进入钨中有两种情况，替位取代和间隙位，间隙位又包括四面体间隙位 (Tetrahedral interstitial site, TIS) 和八面体间隙位 (Octahedral interstitial site, OIS)，它们在钨中的具体情况如图 1 所示。H_{TIS}、H_{OIS}、He_{TIS} 和 He_{OIS} 在本文中分别表示氢氦原子位于钨中四面体位或八面体位。过渡金属锆铁掺入钨中有替位掺杂和间隙掺杂两种情况，经过计算我们发现替位掺杂时的形成能更低更容易形成，因此本文的所有研究工作都是在锆铁替位掺杂钨的基础展开的。为了探究锆铁与钨中氢氦原子间的相互作用随它们间距离的变化情况，本文研究了 8 种不同距离 (1.759~6.943 Å)，具体情况如图 1 所示。本文中的计算工作是在一个 2×3×2 的超晶胞中进行，它包含 24 个钨原子。过渡金属锆或铁在钨中掺杂的质量分数分别为 1.306% 和 2.105%。

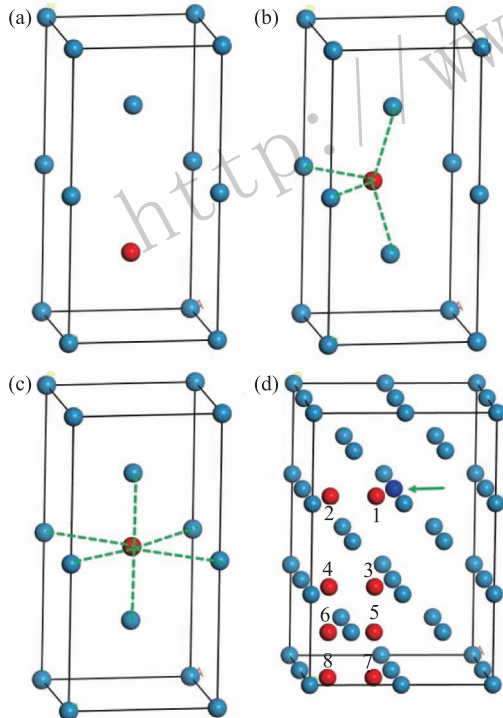


图 1 (在线彩图) 氢氦在钨中不同位置的示意图

图中蓝色球表示钨原子，红色球表示氢或氦原子，深蓝色球表示锆或铁原子。(a) 氢或氦位于替位位置；(b) 氢或氦位于四面体位；(c) 氢或氦位于八面体位；(d) 氢或氦位于距锆或铁原子不同距离的四面体位。

本文的计算工作采用密度泛函理论和平面波赝势的方法^[43,44]，所有计算工作均是在 CASTEP 软件包上完成的。离子实和价电子间的作用采用投影缀加平面波方法描述，电子间的相互交换关联作用由 PBE (Perdew-Burke-Ernzerhof) 形式的广义梯度近似 (generalized gradient approximation, GGA) 方法描述^[45-49]。文中计算工作的具体参数设置如下：平面波截断能量为 350 eV，自洽收敛精度为每原子 5×10^{-7} eV，原子间相互作用力收敛标准为 0.01 eV/nm，单原子能量收敛标准为 5×10^{-6} eV，晶体应力收敛标准为 0.02 GPa，布里渊区的积分采取 $5 \times 5 \times 5$ 的特殊 K 点对全布里渊区求和，能量的计算都在倒易空间中进行。

3 计算结果与讨论

3.1 基态性质

为了系统地研究过渡金属锆铁对钨中氢氦行为的影响，本文首先对锆铁掺入钨中对其基态性能的影响进行研究，主要包括掺杂形成能、晶格常数、弹性常数以及弹性模量。表 1 是过渡金属锆铁以不同形式掺入钨中的形成能，从表 1 中可以看出替位掺杂的形成能较间隙掺杂的形成能低，因此锆、铁掺杂钨以替位掺杂的方式为主，本文所有的计算都是在替位掺杂的基础上进行的。掺杂后体系的晶格常数相应发生了一些变化，这是由于钨、锆和铁三种原子的尺寸不同。钨是体心立方晶体，它的机械性能可以通过三个独立的弹性常数 (C_{11} 、 C_{12} 、 C_{44}) 表示。通过这三个相互独立的弹性常数，进行计算能够得到晶体的体积模量 (B)、剪切模量 (G)、杨氏模量 (E) 以及泊松比 (ν)。从表 2 中可以看出，对于纯钨本文计算得到的结果，与其他学者得到的理论计算结果^[50]和实验数据^[51]相比均一致。当钨中掺入锆或铁后三个独立弹性常数 C_{11} 、 C_{12} 、和 C_{44} 均变小，因此掺杂后体积模量、剪切模量和杨氏模量均比纯钨的相应参数要低，说明锆和铁的掺入会使得钨的机械强度有所下降。泊松比和比值 G/B 均反映了立方材料的延展性，泊松比越大，材料的延展性越好。 G/B 的值小于 0.57 时，材料表现为韧性，其值大于 0.57 时，材料表现为脆性。从泊松比和 G/B 的变化情况，可以发现锆或铁的掺入会使钨的延展性增加。为了揭示掺杂锆和

表 1 锆铁以不同方式掺入钨中的形成能 (eV)

掺杂元素	间隙掺杂	替位掺杂
Zr	14.400	1.801
Fe	6.719	0.787

表 2 钨铁掺杂对钨的晶格常数、弹性常数以及弹性模量的影响

晶体结构	$a/\text{Å}$	C_{11}/GPa	C_{12}/GPa	C_{44}/GPa	B/GPa	G/GPa	E/GPa	ν	G/B
W	3.15	526.48	197.60	175.80	307.23	171.16	418.63	0.27	0.56
W 理论计算 ^[50]	3.17	536.32	202.25	138.70	313.61	149.42	386.83	0.29	0.48
W 实验数据 ^[51]	3.15	533	205	163	314.33	163.40	417.80	0.28	0.54
W(Zr)	3.19	439.4	197.3	126.1	296.0	134.9	351.3	0.30	0.46
W(Fe)	3.18	503.2	203.4	135.7	303.3	141.4	367.1	0.30	0.47

铁引起钨的机械性能变化的深层原因, 本文计算了不同体系中键布居的分布。在纯钨中, 钨原子间的键布居为 0.34。钨掺杂钨, 钨原子间的键布居在 0.34~0.40 间分布, 钨钨原子间的键布居仅为 0.08。铁掺杂钨, 钨原子间的键布居在 0.31~0.38 范围内分布, 铁钨原子间的键布居为 0.23 和 0.24。根据键布居值的变化, 可以发现无论是掺杂前还是掺杂后, 原子间的键布居数均为正值, 但是掺杂原子与钨原子间的键布居较钨原子间的键布居数小。键布居数的变化表明掺杂原子与钨原子间的相互作用比钨原子间的相互作用弱, 因此钨铁掺杂会使钨的体积模量、剪切模量以及杨氏模量变小, 从而使钨的延展性增加。

3.2 氢或氦在钨中的形成能

通过计算氢氦在钨中的形成能, 能够分析过钨和铁掺杂对氢氦在钨中形成点缺陷的难易程度以及稳定性的影响。氢氦原子在钨中的形成能采用如下公式计算:

$$E(X_S) = E(nW + M + X_S) - E(nW) - E(M) - E(X), \quad (1)$$

式中: X、W 和 M 分别表示氢氦原子、钨原子和钨铁原子; S 表示氢或氦在钨中的位置, 当 S 为 TIS 或 OIS 时, 分别表示氢氦原子位于钨中四面体位和八面体位; $E(nW + M + X_S)$ 表示包含 n 个钨原子、1 个 M 原子以及 1 个 X 原子的系统的总能量; $E(nW)$ 表示包含 n 个钨原子的系统的总能量; $E(M)$ 表示 M 元素单晶体中一个原子的能量; $E(X)$ 表示一个自由的 X 原子的能量。某种晶体构型的形成能越小, 表示这种结构越容易形成, 反之越不容易形成。

表 3 为掺杂过渡金属钨或铁前后, 氢氦在钨中的形成能。从表 3 中可以看出, 本文计算得到的氢或氦在纯钨中的形成能与其他学者的理论计算结果^[52]符合较好。从氢氦位于钨中间隙位时的形成能的角度来看, 氢和氦都倾向于占据钨中四面体位。钨原子的掺入对钨中氢的形成能的影响比铁原子对氢的影响要大, 掺杂钨原子使得氢在钨中形成的间隙点缺陷更加稳定, 铁原子对氢在钨中的点缺陷的稳定性几乎没有影响。过渡金属钨和铁掺入钨中对氦原子在钨中形成的间隙点缺陷的稳定性有

较大的影响, 钨或铁的掺入都会使氦原子在钨中形成的间隙点缺陷的稳定性下降。掺杂钨或铁后, 氢或氦原子在钨中仍然倾向于占据四面体位。

表 3 过渡金属钨或铁掺杂对钨中氢或氦的形成能 (eV) 的影响

缺陷种类	H_{TIS}	H_{OIS}	He_{TIS}	He_{OIS}
W	-2.536	-2.212	5.775	5.984
W 理论计算 ^[52]	-2.47	-2.07	6.23	6.48
W(Zr)	-2.872	-2.254	6.479	7.057
W(Fe)	-2.393	-2.391	6.109	6.398

3.3 结合能

钨铁原子与氢氦原子间的结合能可以描述它们之间的相互作用, 由于掺杂钨铁前后, 氢氦原子在钨中均倾向于占据四面体间隙位, 所以本文仅考虑了掺杂钨铁后氢氦原子位于四面体间隙位的情况。钨铁与钨中氢氦原子间的结合能由以下公式计算得到:

$$E_b(M, X) = E(mW + X) + E(nW + M) - E(nW + M + X) - E(nW), \quad (2)$$

式中: $E(mW + X)$ 表示一个包含 m 个钨原子和 1 个四面体位间隙 X 原子体系的总能量; $E(nW + M)$ 表示一个包含 n 个钨原子和 1 个过渡金属 M 原子体系的总能量; $E(nW + M + X)$ 表示一个包含 n 个钨原子、1 个 M 原子以及 1 个四面体位间隙 X 原子体系的总能量; $E(nW)$ 表示一个包含 n 个钨原子体系的总能量。当结合能为正值时, 它表示过渡金属原子与钨中氢氦间存在一个吸引作用, 且值越大吸引作用越强烈。当结合能为负值时, 它表示过渡金属原子对钨中氢氦间存在一个排斥作用, 且绝对值越大排斥作用越强。由于氦原子是闭壳层原子性质较为稳定, 不易于其他原子发生相互作用, 在计算过渡金属与氦原子间的结合能时本文计算过程中考虑了范德华力。

图 2 为过钨铁原子与钨中氢氦原子间的结合能随它们之间距离的变化情况。从图中可以看出, 钨铁对钨中氢氦的影响都有一个最佳作用半径。从整体上看, 钨铁

与钨中氢氦的相互作用均随距离的增加而减弱。锆原子与钨中氢氦原子间的结合能均为正值,说明锆原子对钨中的氢原子和氦原子均具有捕获(吸引)作用。锆原子对钨中氢原子的最佳捕获作用半径小于 4.261 \AA , 锆原子对钨中氦原子的最佳捕获半径小于 3.626 \AA 。铁原子对钨中氢氦原子都具有捕获作用,且最佳作用半径小于 2.853 \AA 。铁原子对钨中氦原子的作用在两者距离小于 3.626 \AA 时表现为捕获作用,当两者之间距离大于 3.626 \AA 时表现为排斥作用。综上所述,锆原子掺杂钨中对氢氦原子的捕获作用比铁原子的作用要大,因此

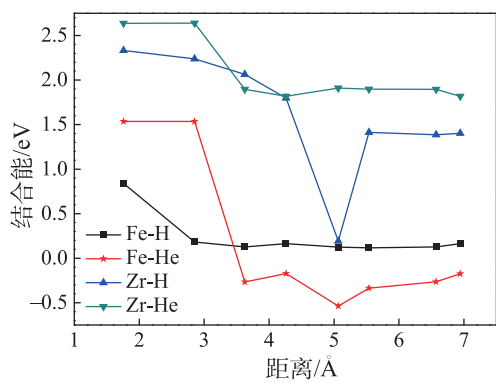


图 2 (在线彩图) 过渡金属锆和铁与氢氦间的结合能随距离变化

在过渡金属掺杂对钨中氢氦的捕获方面, 锆原子较铁原子更具有发展潜力。锆原子的掺入能够起到作为钨中氢氦形核中心的作用。

3.4 电荷密度分布

为了进一步揭示锆铁对钨中氢氦行为的影响的深层机理, 本文计算了过渡金属锆、铁掺杂后钨基合金超晶胞中的电荷密度分布, 具体结果如图 3 所示。从图 3 中可以看出掺杂的过渡金属附近存在着一个电荷密度较低的区域, 锆与铁掺杂带来的电荷密度分布的影响也有一些不同, 铁掺杂时有一个高电荷密度的核心而锆原子有过一个密度较高的壳层。氢原子外部只有一个电子, 它通过从超晶胞中其他原子处得到一部分电子而保持较为稳定的状态, 即亲电子性。在钨中锆原子失电子的能力要强于铁原子, 因此锆原子对氢的吸附能力要强于铁原子。氦原子为闭壳层原子, 它表现出来的更多的是一种远离高电荷密度区域的特性, 即疏电子性。由于过渡金属掺杂形成了一个电荷密度较低的区域, 因此过渡金属对其附近的氢原子有捕获作用。

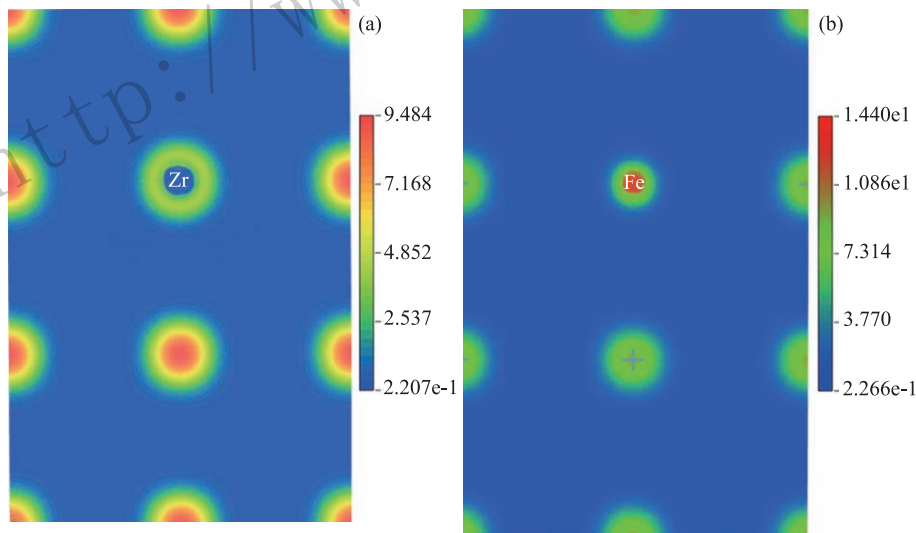


图 3 (在线彩图) 过渡金属铁、锆掺杂后钨中电荷密度分布
(a) 锆掺杂钨; (b) 铁掺杂钨。

4 结论

本文通过第一性原理计算的方法研究了过渡金属锆铁对钨中氢氦行为的影响, 具体研究结果如下:

(1) 由于锆铁与钨原子间的相互作用较钨原子间的相互作用弱, 因此过渡金属掺入使得钨的机械强度下

降, 延展性增加;

(2) 虽然过渡金属原子的掺入没有改变氢氦在钨中的最佳占位, 但是掺杂均会使氢原子的稳定性下降, 并且锆铁掺杂对氢原子的稳定性的影响较弱;

(3) 锆铁对钨中氢氦的捕获作用均有最佳作用半径, 铁原子对钨中氦原子在短距离 ($< 3.626 \text{ \AA}$) 时表现出捕

获作用, 长距离 ($<3.626 \text{ \AA}$) 时表现为排斥作用。钨原子对钨中氢氦均表现出捕获作用;

(4) 通过对掺杂前后超胞的电荷密度分析, 可以发现钨中氢原子表现为亲电子性, 而氦原子表现出疏电子的特性。

通过本文的研究工作发现, 就钨铁捕获钨中氢氦而言, 钨元素比铁元素更加具有发展潜力。本文的研究工作能够为钨基面向等离子体材料合金化的元素筛选和制备提供理论指导。

参考文献:

- [1] ITER Physics Basis Editors. Nucl Fusion 1999, **39**(12): 2137.
- [2] ZHANG Z, ZHAO Q, OUYANG X P. J Nucl Radio Chem, 2016, **38**(1): 19. (in Chinese)
(张峥, 赵强, 欧阳晓平. 核化学与放射化学, 2016, **38**(1): 19.)
- [3] BECQUART C S, DOMAIN C. J Nucl Mater, 2009, **385**(2): 223.
- [4] BECQUART C S, DOMAIN C, SARKAR U, *et al.* J Nucl Mater, 2010, **403**(1-3): 75.
- [5] HOU M, ORTIZ C J, BECQUART C S, *et al.* J Nucl Mater, 2010, **403**(1-3): 89.
- [6] BECQUART C S, BARTHE M F, DE BACKER A. Phys Scripta, 2011, **T145**: 014048.
- [7] WANG W J, KOBAYASHI M, KURATA R, *et al.* J Nucl Mater, 2011, **417**(1-3): 555.
- [8] DE BACKER A, LHUILLIER P E, BECQUART C S, *et al.* J Nucl Mater, 2012, **429**(1-3): 78.
- [9] BOISSE J, DOMAIN C, BECQUART C S. J Nucl Mater, 2014, **455**(1-3): 10.
- [10] LU G H, ZHOU H B, BECQUART C S. Nucl Fusion, 2014, **54**: 086001.
- [11] HODILLE E A, BONNIN X, BISSON R, *et al.* J Nucl Mater, 2015, **467**(1): 424.
- [12] HODILLE E A, FERRO Y, FERNANDEZ N, *et al.* Phys Scripta, 2016, **T167**: 014011.
- [13] DE BACKER A, SAND A, ORTIZ C J, *et al.* Phys Scripta, 2016, **T167**: 014018.
- [14] LIU Y L, ZHOU H B, ZHANG Y, *et al.* Comp Mater Sci, 2011, **50**(11): 3213.
- [15] YUAN Y, GREUNER H, BÖSWIRTH B, *et al.* J Nucl Mater, 2013, **433**(s1-3): 523.
- [16] HAN T, FAN Z Q, ZHAO S X, *et al.* J Nucl Mater, 2013, **433**(s1-3): 351.
- [17] YOU Y W, LI D, KONG X S, *et al.* Nucl Fusion, 2014, **54**(10): 103007.
- [18] HAO T, FAN Z Q, ZHANG T, *et al.* J Nucl Mater, 2014, **455**(1-3): 595.
- [19] LI C, GREUNER H, ZHAO S X, *et al.* J Nucl Mater, 2015, **466**: 357.
- [20] WANG S, KONG X S, WU X, *et al.* J Nucl Mater, 2015, **459**(6): 143.
- [21] XU H Y, TEMMERMAN G D, LUO G N, *et al.* J Nucl Mater, 2015, **463**: 308.
- [22] YANG X D, XIE Z M, MIAO S, *et al.* Fusion Eng Des, 2016, **106**: 56.
- [23] WU X B, KONG X S, YOU Y W, *et al.* Nucl Fusion, 2013, **53**(7): 073049.
- [24] WU X B, KONG X S, YOU Y W, *et al.* J Nucl Mater, 2014, **455**(s1-3): 151.
- [25] KONG X S, WU X, YOU Y W, *et al.* Acta Mater, 2014, **66**(2): 172.
- [26] KONG X S, WU X B, LIU C S, *et al.* Nucl Fusion, 2016, **56**(2): 026004.
- [27] TYBURSKA-PÜSCHEL B, ALIMOV V K. Nucl Fusion, 2013, **53**(12): 123021.
- [28] ZAYACHUK Y, HOEN M H J, ZEIJLMANSV, EMMI-CHOVEN P A, *et al.* Nucl Fusion, 2013, **53**(1): 013013.
- [29] ZAYACHUK Y, MANHARD A, HOEN M H J, *et al.* Nucl Fusion, 2014, **54**(12): 123013.
- [30] LIU Y L, ZHANG Y, LUO G N, *et al.* J Nucl Mater, 2009, **s390-391**(3): 1032.
- [31] ALKHAMEES A, LIU Y L, ZHOU H B, *et al.* J Nucl Mater, 2009, **393**(3): 508.
- [32] ZHOU H B, LIU Y L, JIN S, *et al.* Nucl Fusion, 2010, **50**(2): 275.
- [33] DUAN C, LIU Y L, ZHOU H B, *et al.* J Nucl Mater, 2010, **404**(2): 109.
- [34] JIN S, LIU Y L, ZHOU H B, *et al.* J Nucl Mater, 2011, **415**(1): S709.
- [35] ZHOU H B, JIN S, ZHANG Y, *et al.* Prog Nat Sci Mater, 2011, **21**(3): 240.
- [36] ZHOU H B, OU X, ZHANG Y, *et al.* J Nucl Mater, 2013, **440**(s1-3): 338.
- [37] ZHOU H B, LI Y H, LU G H. Comp Mater Sci, 2015, **112**: 487.
- [38] QIN S Y, JIN S, SUN L, *et al.* J Nucl Mater, 2015, **465**: 135.
- [39] WANG J, ZHANG Y, ZHOU H B, *et al.* J Nucl Mater, 2015, **461**: 230.
- [40] WU X B, YOU Y W, KONG X S, *et al.* Acta Mater, 2016, **120**: 315.
- [41] LI W Y, ZHANG Y, ZHOU H B, *et al.* Nucl Instr Meth B, 2011, **269**(14): 1731.
- [42] FENG J, CHEN J C, XIAO B. Mater Rev, 2005, **19**(f05): 239. (in Chinese)
(冯晶, 陈敬超, 肖冰. 材料导报, 2005, **19**(f05): 239.)
- [43] HOHENBERG P, KOHN W. Phys Rev, 1964, **136**: B864.
- [44] KOHN W, SHAM L J. Phys Rev, 1965, **140**: A1133.
- [45] CLART S J, SEGALL M D, PICKARD C J, *et al.* Z Krist-Cryst Mater, 2005, **220**(5/6): 567.
- [46] PERDEW J P, YUE W, Phys Rev B, 1986, **22**: 8800.
- [47] PERDEW J P, CHEVARY J, VOSKO S, *et al.* Phys Rev B, 1992, **46**: 6671.
- [48] PERDEW J P, BURKE K, ERNZERHOF M. Phys Rev Lett, 1996, **77**: 3865.
- [49] IIKURA H, TSUNEDA T, YANAI T, HIRAO K. J Chem

Phys, 2001, **115**: 3540.

48: 5844.

[50] BECQUART C, DOMAIN C. Nucl Instr Meth B, 2007, **255**: 23.

[52] LEE S C, CHOI J H, LEE J G, J Nucl Mater, 2009, **383**: 244.

[51] SöDERLIND P, ERIKSSON O, WILLS J. Phys Rev B, 1993,

Effects of the Transition Metals Zirconium and Iron on Hydrogen and Helium Behavior in Tungsten

ZHANG Zheng¹, ZHAO Qiang^{1,†}, LI Yang¹, ZHANG Hao¹, FU Jingpin¹, OUYANG Xiaoping^{1,2,3}

(1. Beijing Key Laboratory of Passive Safety Technology for Nuclear Energy, School of Nuclear Science and Engineering, North China Electric Power University, Beijing 102206, China;

2. Northwest Institute of Nuclear Technology, Xi'an 710024, China;

3. School of Materials Science and Engineering, Xiangtan University, Xiangtan 411105, Hunan, China)

Abstract: Tungsten was widely considered as a highly promising candidate of plasma facing material, while the presence of hydrogen and helium has an adverse effect on the performance of the tungsten. The effects of transition metals (zirconium, iron) on the behavior of hydrogen and helium in tungsten were investigated by using the first-principles calculation method. The results show that doping of zirconium and iron decreases the mechanical strength of tungsten a little, but they increase the ductility of tungsten; zirconium and iron can't change the best occupied site of hydrogen and helium in tungsten, but they have some effect on the stability of the point defects formed by hydrogen and helium in tungsten; there is the best attraction radius between the transition metals (zirconium, iron) and hydrogen or helium in tungsten; there is an attractive interaction between iron and helium in a short distance ($<3.626 \text{ \AA}$), but a repulsion interaction in a long distance ($>3.626 \text{ \AA}$). An attractive interaction exists between zirconium and helium or hydrogen in tungsten whatever the distance is; the hydrogen that in tungsten has an electrophilic nature, while the helium has opposite features. The attraction interaction between zirconium and hydrogen or helium in tungsten is stronger than that of iron. Our works in this paper might provide a theory guide for the selection and preparation of the tungsten based alloy that is used as the plasma facing materials.

Key words: transition metal; plasma facing material; tungsten; zirconium; first-principle

Received date: 20 Nov. 2016; **Revised date:** 9 May 2017

Foundation item: Fundamental Research Funds for Central Universities(2017MS079); National Natural Science Foundation of China(11275071, 11305061)

† **Corresponding author:** ZHAO Qiang, E-mail: qzhao@ncepu.edu.cn.