

核物理主题数据: 实验、理论与应用专题

基于第一性原理的氢化锆量子效应与热散射律计算*

唐家玄¹⁾ 刘萍¹⁾ 张环宇¹⁾ 吴小飞^{1)†} 冯万祥^{2)‡} 续瑞瑞^{1)††}

1) (中国原子能科学研究院, 中国核数据中心, 北京 102413)

2) (北京理工大学物理学院, 北京 100081)

(2025 年 12 月 19 日收到; 2026 年 2 月 4 日收到修改稿)

氢化锆作为一种广泛应用的慢化剂材料, 其热散射律数据对于反应堆设计具有重要影响. 现有基于晶格动力学或分子动力学的第一性原理计算通常基于简谐近似或经典力学, 未考虑氢原子显著的量子非谐性. 本文采用了一种结合准谐近似、多项式机器学习势、随机自洽谐波近似的计算方法, 系统研究了量子效应对氢化锆的声子态密度和热散射律数据的影响. 研究表明, 仅考虑量子效应对晶格体积膨胀的准谐近似会导致声子态密度软化; 而进一步引入随机自洽谐波近似的量子修正后, 该软化趋势会受到明显抑制. 对于 ϵ -ZrH₂, 相较于简谐近似, 引入量子效应后的声子态密度与实验数据的一致性显著提升, 对圆柱形与平板状样品实验数据的 χ^2 分别降低了 64.1% 与 37.7%. 基于量子效应的声子态密度计算得到的氢化锆的双微分散射截面峰值与 ENDF/B-VIII.1 评价库更为一致, 计算的总散射截面在趋势上与现有理论结果相符, 且与实验测量值展现出良好的一致性. 此外, 临界基准验证表明, 考虑量子效应能在部分工况下进一步改善 k_{eff} 的计算精度. 本文数据集可在 <https://doi.org/10.57760/sciencedb.33601> 中访问获取.

关键词: 氢化锆, 热散射律, 量子效应, 随机自洽谐波近似

DOI: 10.7498/aps.75.20251741

CSTR: 32037.14.aps.75.20251741

1 引言

热散射律数据是计算热能区中子数据的重要组成部分. 获取高精度的热中子散射律数据对于提高反应堆设计的精度和安全性具有重要意义^[1]. 氢化锆因其优异的热稳定性、低中子俘获截面、高温耐受性及良好的抗辐照性能, 作为中子慢化剂材料被广泛用于包括 TRIGA^[2] 和 SNAP^[3] 在内的多种反应堆.

目前, 热散射律数据的计算主要依赖于材料的声子态密度. 声子态密度一般通过实验数据的参数化模型或基于第一性原理计算获得. 在参数化

模型方面, CF 模型^[4] 和 DG 模型^[5] 通过直接拟合实验数据来构建声子态密度, 计算效率较高但并未经过基于实验数据的评价^[6]. 为了提高拟合精度, 研究者们发展出基于参数化声子 (PP) 模型的优化方法, 如 Zheng 和 McClarren^[7] 采用的高斯过程回归与贝叶斯多变量自适应回归方法, 以及 Wang 等^[6] 提出的基于随机抽样的统一蒙特卡罗拟合方法.

近年来, 基于第一性原理的氢化锆热散射律数据计算取得了重要进展. Wormald 等^[8] 采用第一性原理晶格动力学 (AILD) 和第一性原理分子动力学 (AIMD) 方法重新计算了 ϵ -ZrH₂ 和 δ -ZrH_x 的声子态密度, 并借助核数据处理软件 FLASSH^[9]

* 国家自然科学基金重点项目 (批准号: 1243000472, W2511003) 和国家自然科学基金 (叶企孙)(批准号: U2541242) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: wuxiaofei@ciae.ac.cn‡ 通信作者. E-mail: wxfeng@bit.edu.cn†† 通信作者. E-mail: xuruirui@ciae.ac.cn

首次将此前被忽略的锆的相干弹性散射贡献纳入计算. Zu 等^[10] 同样利用 AILD 方法重新计算了 ϵ -ZrH₂ 和 δ -ZrH_{1.5} 的声子态密度, 并通过 NECP-Atlas^[11] 程序生成了相应的热散射律数据, 系统分析了不同模型声子态密度在散射截面、双微分散射截面以及基准检验中的差异. 在化学计量比和晶相结构影响方面, Mehta 等^[12] 和马宇图等^[13] 计算了不同化学计量比下 δ -ZrH_x 和 ϵ -ZrH₂ 的声子态密度及相应的热中子散射截面. 研究发现, 化学计量比对热散射的影响相对较小, 而晶相结构的影响较为显著. 在非谐性影响方面, Zhang 等^[14] 结合非弹性中子散射 (INS) 与密度泛函理论计算研究了氢化锆的非谐声子行为. 研究发现, 简谐近似无法解释实验 INS 谱中显示的峰分裂现象, 而将二维薛定谔方程求解得到的本征频率与仪器分辨率函数卷积后, 能够很好地描述材料中的非谐性特征. 进一步地, Trainer 等^[15] 结合分子动力学与机器学习势 MLP^[16] 计算了不同温度下 δ -ZrH_x 和 ϵ -ZrH₂ 的声子态密度, 发现温度升高会导致声子态密度的峰向低能区移动并展宽, 基于该温度依赖声子态密度分布的反应堆模拟表明, 其对 k_{eff} 、中子通量分布及反应性系数均有显著影响.

尽管基于第一性原理计算的热中子散射截面在整体上与实验结果符合良好, 但由于氢原子质量较小, 即使在 0 K 下它仍表现出显著的量子零点运动, 而 AILD 的简谐近似 (HA) 和 AIMD 方法难以准确描述这类量子效应^[17]. Errea 等^[18] 提出了一种基于 Born-Oppenheimer 近似的随机自洽谐波近似 (SSCHA) 方法, 该方法以非微扰的方式考虑了原子核的量子与热振动非谐效应.

本文采用一种集成 AILD、准谐近似 (QHA)、多项式机器学习势 (MLPs)^[19] 与 SSCHA 的综合计算方法. 首先, 利用 QHA 确定氢化锆在 0 K 下的平衡晶格参数; 其次, 通过 AILD 方法计算大量不同原子位移构型下的能量、原子力, 构建高精度的训练数据集, 进而训练出能够高精度描述 Born-Oppenheimer 势能面与 Hellmann-Feynman 力的 MLPs; 最后, 在 SSCHA 框架^[17] 下, 利用训练所得的 MLPs 对大规模采样系综进行 Helmholtz 自由能计算, 并通过变分优化自由能获得包含量子效应的声子态密度. 该方法能够有效修正 HA 计算中被忽略的量子效应, 为评估量子效应对氢化锆热散射律数据影响提供依据.

2 理论方法

2.1 热中子散射截面计算方法

在热中子能区 (< 5 eV), 采用自由气体模型计算的热中子散射截面有较大的误差. 因为热中子的德布罗意波长和晶体原子间距在一个数量级、热中子能量与材料激发能量在一个数量级、热中子能量小于材料原子间自身的束缚键^[20]. 在评价核数据库 (ENDF) 中热中子散射律数据用来描述特定晶体材料的结合效应. 热能区中子散射双微分散射截面可以表示为^[21]

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE'} = \frac{1}{4\pi k_B T} \sqrt{\frac{E'}{E}} (\sigma_{\text{coh}} S(\alpha, \beta) + \sigma_{\text{inc}} S_s(\alpha, \beta)), \quad (1)$$

式中 E 是入射中子能量; E' 是出射中子在方向 Ω 上的能量; σ_{coh} 和 σ_{inc} 分别是束缚核的相干散射截面和束缚核的非相干散射截面; k_B 是玻尔兹曼常数; T 是温度; $S(\alpha, \beta)$, $S_s(\alpha, \beta)$ 分别是热散射函数和自散射函数; α, β 分别是无量纲的动量转移和能量转移,

$$\alpha = \frac{E' + E - 2\mu\sqrt{E'E}}{Ak_B T}, \quad (2)$$

$$\beta = \frac{E' - E}{k_B T}, \quad (3)$$

其中 μ 是出射角余弦, A 是散射核质量与中子质量的比值.

在晶体材料中, 热散射函数以声子展开的形式表示, $n = 0$ 对应于弹性散射, $n > 0$ 时对应非弹性散射, 表示产生或湮灭 n 个声子. 在 ENDF 库中氢化锆采取非相干近似, 用自散射函数近似散射函数

$$\sigma(E \rightarrow E', \mu) = \sigma_{\text{coh}} S^0(\alpha, \beta) + \sigma_{\text{inc}} S_s^0(\alpha, \beta) + \sigma_b \sum_{n=1}^{+\infty} S_s^n(\alpha, \beta). \quad (4)$$

这里 σ_b 是束缚核的散射截面, 自散射函数展开第 n 项表示为

$$S_s^n(\alpha, \beta) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\beta t} e^{-\alpha\lambda} \frac{1}{n!} \times \left(\alpha \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\rho(\beta)}{2\beta \sinh(\beta/2)} e^{-\beta/2} e^{-i\beta t} d\beta \right)^n dt, \quad (5)$$

式中 \hat{t} 为无量纲的时间, λ 通过下式计算:

$$\lambda = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\rho(\beta)}{2\beta \sinh(\beta/2)} e^{-\beta/2} d\beta. \quad (6)$$

对于弹性散射截面部分, 此时没有能量转移, 对于非相干散射部分有

$$\sigma(E) = \frac{\sigma_b}{2} \left\{ \frac{1 - e^{-4WE}}{2WE} \right\}, \quad (7)$$

其中德拜-沃勒系数由下式给出:

$$W = \frac{\lambda}{Ak_B T}. \quad (8)$$

对于相干弹性部分, 有

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\text{coh-el}} = N \frac{(2\pi)^3}{\nu_0} \sum_{\boldsymbol{\tau}} \delta(\boldsymbol{\kappa} - \boldsymbol{\tau}) |F(\boldsymbol{\kappa})|^2, \quad (9)$$

式中 $\boldsymbol{\kappa}$ 是散射矢量; $\boldsymbol{\tau}$ 是倒格子矢量; $F(\boldsymbol{\kappa})$ 是材料的结构因子, 定义为

$$F(\boldsymbol{\kappa}) = \sum_d \bar{b}_d e^{i\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{d}} e^{-W_d}, \quad (10)$$

其中 d 是散射核序号, \bar{b}_d 是散射核 d 的平均散射长度, \mathbf{d} 是散射核 d 在晶胞中的平衡位置. 对于立方近似, 忽略掉晶格各个方向力的不一致性将其视作立方晶格, 则 (10) 式中德拜-沃勒函数计算只需要声子态密度, 有

$$W_d = \frac{\hbar^2 \kappa^2}{4M_d k_B T} \int_0^{\beta_{\max}} \frac{\rho_d(\beta)}{\beta} \coth\left(\frac{\beta}{2}\right) d\beta. \quad (11)$$

2.2 随机自洽谐波近似

SSCHA [17,18,22] 是一种在 Born-Oppenheimer 近似框架下的非微扰理论方法, 它能有效处理由原子核的量子振动和热振动引起的非谐效应. 基于变分原理, SSCHA 利用 Gibbs-Bogoliubov 不等式来最小化一个变分自由能泛函 \mathcal{F} :

$$F \leq \mathcal{F} = F_{\mathcal{H}} + \langle V - V_{\mathcal{H}} \rangle_{\mathcal{H}}, \quad (12)$$

式中, F 是真实非谐系统的 Helmholtz 自由能; \mathcal{F} 是自由能的变分泛函; $F_{\mathcal{H}}$ 和 $V_{\mathcal{H}}$ 分别是试探谐波哈密顿量 \mathcal{H} 对应的自由能和势能; V 是真实势能面; $\langle \dots \rangle_{\mathcal{H}}$ 是基于试探哈密顿量 $H_{\mathcal{H}}$ 对应的量子统计平均值. 试探谐波哈密顿量 \mathcal{H} 由原子的平均位置 \mathbf{R} 和在 \mathbf{R} 附近的量子热振动 $\boldsymbol{\Phi}$ 定义. 其形式为

$$\mathcal{H} = K + \frac{1}{2} \sum_{st} (\mathbf{R}_s - \mathbf{R}_s) \cdot \boldsymbol{\Phi}_{st} \cdot (\mathbf{R}_t - \mathbf{R}_t), \quad (13)$$

式中, s, t 是任意原子序号; K 是动能项; $\boldsymbol{\Phi}_{st}$ 是辅助力常数; \mathbf{R}_s 是原子 s 的平均位置. 试探哈密顿

量 \mathcal{H} 下系综的原子构型 \mathbf{R} 的概率定义为

$$\rho_{\mathcal{H}}(\mathbf{R}) = A_{\mathcal{H}} \exp\left(-\sum_{st\alpha\beta\mu} \frac{\sqrt{M_s M_t}}{2a_{\mu\mathcal{H}}^2} \epsilon_{\mu\mathcal{H}}^{s\alpha} \epsilon_{\mu\mathcal{H}}^{t\beta} u^{s\alpha} u^{t\beta}\right), \quad (14)$$

其中振幅相关量为

$$\frac{a_{\mu\mathcal{H}}^2}{\sqrt{M_s M_t}} = \frac{1}{\sqrt{M_s M_t}} \frac{\hbar}{\omega_{\mu\mathcal{H}}} \frac{1}{e^{\hbar\omega_{\mu\mathcal{H}}/k_B T} - 1} + \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{M_s M_t}} \frac{\hbar}{\omega_{\mu\mathcal{H}}}, \quad (15)$$

其中的符号含义与文献 [18] 一致. 第一项为热振动贡献项, 第二项为量子效应贡献项.

SSCHA 首先根据 HA 给出的试探哈密顿量定义密度矩阵 $\rho_{\mathcal{H}}$, 并依此分布进行随机采样, 生成大量的原子构型 $\{\mathbf{R}^{(s)}\}$. 然后, 在这些采样点上计算真实势能 $V(\mathbf{R}^{(s)})$ 及力 $\mathbf{F}(\mathbf{R}^{(s)})$, 进而可得到系综自由能 \mathcal{F} . SSCHA 通过最小化 \mathcal{F} 来更新参数 \mathbf{R} 和 $\boldsymbol{\Phi}$, 随后更新密度矩阵重新迭代采样. 整个计算过程构成一个自洽迭代循环, 直至 \mathbf{R} 和 $\boldsymbol{\Phi}$ 收敛. 最终收敛得到的 $\mathbf{R}_{\text{SSCHA}}$ 和 $\boldsymbol{\Phi}_{\text{SSCHA}}$ 定义了一个在温度 T 下最优的有效谐波哈密顿量 H_{eff} , 该哈密顿量隐式地包含了量子效应和热振动的贡献. 基于 H_{eff} 计算得到的声子频率和本征矢量, 可以计算包含量子效应的声子态密度.

3 第一性原理计算

氢化锆作为一种重要的中子慢化剂材料, 其晶体结构随氢原子浓度的变化而转变, 主要呈现为面心立方的 δ 相与体心四方的 ϵ 相 [23]. 近期研究表明, 在晶相确定的前提下, H/Zr 化学计量比的微小变化对热中子散射律的影响相对有限 [12]. 基于此, 本文选取 ϵ -ZrH₂ (四方结构, 图 1(a)) 和 δ -ZrH_{1.5} (面心立方结构, 图 1(b)) 作为研究对象.

为获得这两种相在 0 K 下的稳定结构, 采用基于密度泛函理论的 VASP 软件包 [24,25] 进行结构优化. 计算使用投影缀加平面波 (PAW) 方法和 PBE 参数化的广义梯度近似泛函, 平面波截断能设为 675 eV. 布里渊区积分采用 Monkhorst-Pack 方法, k 点网格为 $12 \times 12 \times 12$ (Γ 中心). 电子自洽收敛标准设为 10^{-8} eV/atom, 离子弛豫的力收敛标准为 0.001 eV/Å, 并确保应力张量充分收敛以获得平衡晶格常数.

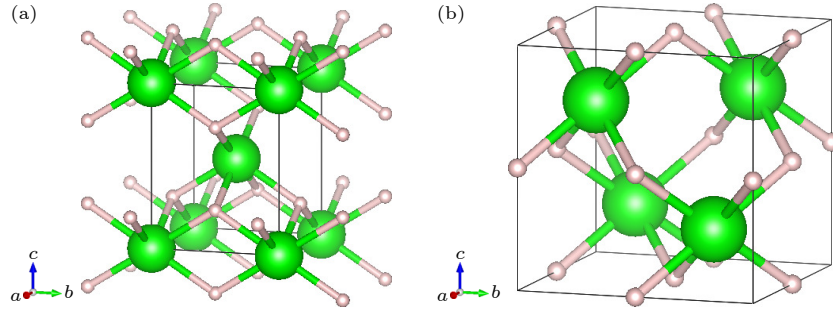

 图 1 ϵ -ZrH₂ (a) 和 δ -ZrH_{1.5} (b) 的晶胞图 (Zr 原子为绿色, H 原子为玫瑰色)

 Fig. 1. Unit cell diagrams of ϵ -ZrH₂ (a) and δ -ZrH_{1.5} (b); Zr atoms in green and H atoms in pink.

为考虑晶格的膨胀效应, 本文采用 QHA 确定包含量子修正的晶格参数. 在优化后的晶格常数基础上, 施加 -2% 至 +4% 的体积形变 (步长为 0.5%), 计算不同缩放比例下的静态电子能及声子频率. 随后基于 Phonopy 软件^[26,27], 通过拟合 QHA 状态方程, 得到了包含零点振动能贡献在 0 K 下的平衡体积, 并反推得到相应的晶格常数. 计算结果与实验值对比见表 1.

 表 1 δ -ZrH_{1.5} 和 ϵ -ZrH₂ 的晶格常数计算值 (HA 与 QHA) 与实验值的对比

 Table 1. Comparison of calculated (HA and QHA) and experimental lattice parameters for δ -ZrH_{1.5} and ϵ -ZrH₂.

相	晶格常数/Å	HA	QHA	ENDF/B-VIII.1 ^[8]	实验 ^[28]
δ -ZrH _{1.5}	$a = b = c$	4.776	4.818	4.77	4.779
ϵ -ZrH ₂	$a = b$	3.539	3.574	3.54	3.522
	c	4.409	4.453	4.4	4.451

基于 QHA 确定的晶格参数, 本文计算了声子态密度. 利用 Phonopy 软件, 分别构建了 ϵ -ZrH₂ 的 $3 \times 3 \times 3$ 超胞和 δ -ZrH_{1.5} 的 $2 \times 2 \times 2$ 超胞, 采用有限位移法计算力常数矩阵, 进而导出动力学矩阵和声子频率. 超胞计算的电子结构参数与原胞优化保持一致 (截断能 675 eV, 力收敛标准 0.001 eV/Å). 在此基础上, 采用与 QHA 相同的计算流程, 基于 HA 进一步计算了氢化锆的声子态密度. 然而, HA 忽略了氢原子的量子振动, 这对于准确描述氢化物体系的量子涨落至关重要. 为纳入量子效应, 我们结合 MLPs 与 SSCHA 方法计算了含量子效应的声子态密度. 首先基于 QHA 的晶格参数生成数据集. 对于 ϵ -ZrH₂, 构建了 120 个 $3 \times 3 \times 3$ 的超胞构型; 对于 δ -ZrH_{1.5}, 构建了 480 个 $2 \times 2 \times 2$ 的超胞构型. 为了充分采样, 在 0.01—0.8 Å 的范围内对原子

施加了随机位移. 随后的 Born-Oppenheimer 能量和原子受力通过密度泛函理论计算获得. 数据集被随机划分为训练集和测试集: ϵ -ZrH₂ 选取 100 个构型用于训练, 20 个用于测试; δ -ZrH_{1.5} 选取 400 个构型用于训练, 80 个用于测试. MLPs 模型使用 pypolympl^[29] 程序包进行训练. 相互作用的截断半径 (r_c) 设定为 8.0 Å. 在特征表示方面, 采用了高斯型径向基函数, 并将旋转不变量的最大角动量 (l_{\max}) 设定为 8, 多项式展开的最大阶数被限制为 2. 训练完成后, 使用独立测试集评估了生成的多项式 MLPs 的精度. 对于 ϵ -ZrH₂, 能量和原子受力的均方根误差 (RMSE) 分别为 0.89 meV/atom 和 0.15 eV/Å. 对于 δ -ZrH_{1.5}, 其能量和受力的 RMSE 分别为 3.26 meV/atom 和 0.15 eV/Å.

随后, 使用 Phonopy 中的 SSCHA 模块 (固定晶格常数), 分别计算了 ϵ -ZrH₂ 在 0 K 和 δ -ZrH_{1.5} 在 600 K 下的力常数矩阵, 并进一步计算其声子态密度. 其中 δ -ZrH_{1.5} 的温度设为 600 K, 是为了消除 0 K 下声子谱中出现的虚频. 根据 (15) 式, 对于声子频率较高的氢化锆体系, SSCHA 方法的原子振动主要由量子效应主导. 不同近似方法下的声子态密度与 Evans 等^[30] 的中子散射实验数据对比如图 2 和图 3 所示. 其中, ENDF/B-VIII.1 评价库中氢化锆的声子态密度数据引自文献 [8]. 该数据基于 300 K 下第一性原理分子动力学 (AIMD) 模拟的原子平衡轨迹, 通过对速度自相关函数进行傅里叶变换计算得到.

对于 ϵ -ZrH₂, 在低能区 (<0.05 eV), 量子效应引起的晶格膨胀导致力常数减小, 使得 Zr 的声子态密度出现软化. 在高频区 (>0.1 eV), QHA 考虑零点能引起的晶格膨胀导致 H 的声子态密度峰位整体向低能区移动约 0.005 eV. 在此基础上, SSCHA

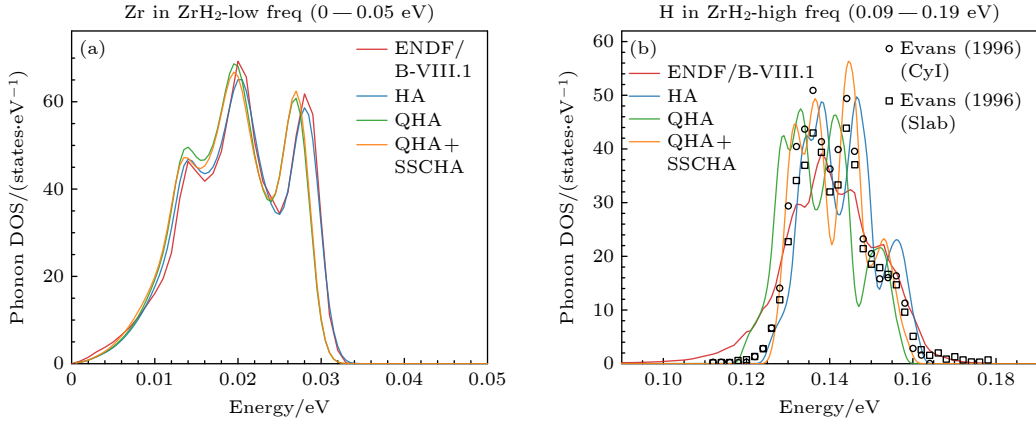

 图 2 ϵ -ZrH₂ 中 Zr (a) 和 H (b) 的声子态密度

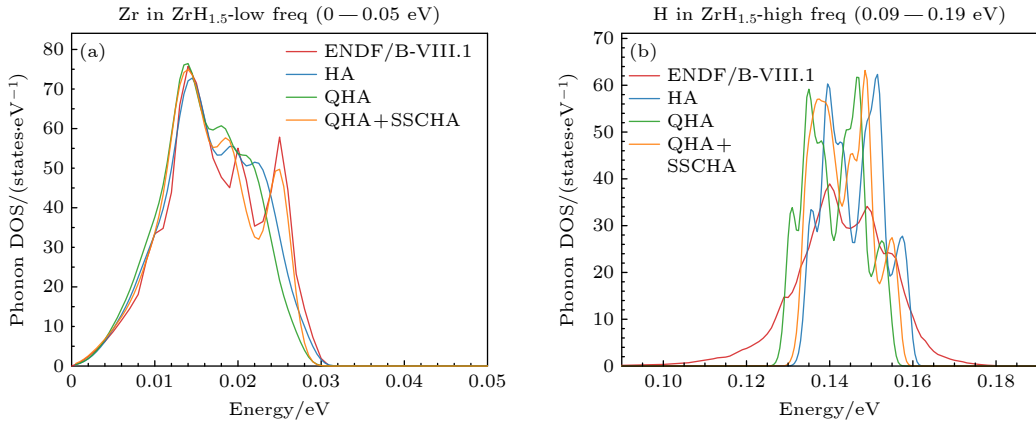
 Fig. 2. Phonon density of states of Zr (a) and H (b) in ϵ -ZrH₂.

 图 3 δ -ZrH_{1.5} 中 Zr (a) 和 H (b) 的声子态密度

 Fig. 3. Phonon density of states of Zr (a) and H (b) in δ -ZrH_{1.5}.

引入的非谐量子振动修正使 H 的声子态密度峰位向高能区移动, 但整体结果相较于 HA 仍表现为向低能移动. 具体而言, HA 计算中位于 0.138, 0.146 和 0.156 eV 处的三个特征峰, 在考虑非谐效应后分别移动至 0.136, 0.145 和 0.152 eV. 同时将理论计算的声子态密度与 Evans 等^[30]关于平板状和圆柱形样品的实验数据进行 χ^2 分析. 此处 χ^2 定义为

$$\chi^2 = \sum_i^n (X_i - X_{\text{exp},i})^2, \quad (16)$$

其中, X_i 为理论计算的声子态密度值, $X_{\text{exp},i}$ 为实验测量值, n 为实验点个数.

基于 (16) 式的分析结果 (见表 2) 表明, QHA + SSCHA 方法显著优于 HA 方法: 圆柱形和平板状样品的 χ^2 分别降低了 64.1% 和 37.7%. 这说明引入量子效应能提高声子态密度与实验测量值的一致性.

表 2 不同计算方法所得 ϵ -ZrH₂ 声子态密度的 χ^2 对比
Table 2. χ^2 comparison of the phonon density of states of ϵ -ZrH₂ from different calculation methods.

实验数据	ENDF/B-VIII.1	HA	QHA	QHA+SSCHA
Evans(1996)(Cyl)	1397.06	1712.04	2837.01	614.88
Evans(1996)(Slab)	656.24	1399.91	2882.70	833.85
Evans(1996)(Total)	2053.30	3111.95	5719.72	1448.73

对于 δ -ZrH_{1.5}, 在低能区考虑量子效应后再现了 Zr 在 0.025 eV 处峰, 这与 ENDF/B-VIII.1 结果一致. 该峰在 $3 \times 3 \times 3$ 超胞的 HA 计算中虽出现但伴随虚频, 而 SSCHA 方法通过其变分框架有效处理了非谐性, 即使在较小超胞中也能物理合理地重现该峰位. 在高频区, QHA 计算的 H 的声子态峰位相较于 HA 向低能移动约为 0.005 eV. 其中考虑量子效应后, HA 结果中位于 0.139, 0.152 和 0.157 eV 处的三个峰位分别移动至 0.137, 0.149 和 0.154 eV. 上述频移主要源于氢原子的轻质量及

其显著的量子零点运动. QHA 通过晶格膨胀 (体积效应) 部分纳入量子非谐性, 引起声子软化; SSCHA 则进一步通过势能面系综平均, 考虑量子涨落与非谐相互作用. 氢原子的量子运动使其更易探测势能面的非谐区域, 这种量子振动与体积效应相互竞争, 最终使得计算结果更精确地描述了真实晶格的声子性质.

进一步地, 图 4 展示了氢化锆的声子色散关系. 对于主要由氢原子振动贡献的高频支 (>120 meV), QHA 计算结果相较于 HA 下降了约 5 meV, 表现出显著的声子软化现象; SSCHA 方法在一定程度上抑制了 QHA 的软化, 但相比 HA 仍表现出一定的软化特征. 对于主要由锆原子振动贡献的低频支 (<40 meV), 由于锆原子质量较大且振幅较小, ϵ -ZrH₂ 的软化效应并不明显. 值得注意的是, 对于 δ -ZrH_{1.5}, 量子涨落效应的引入使其能够复现

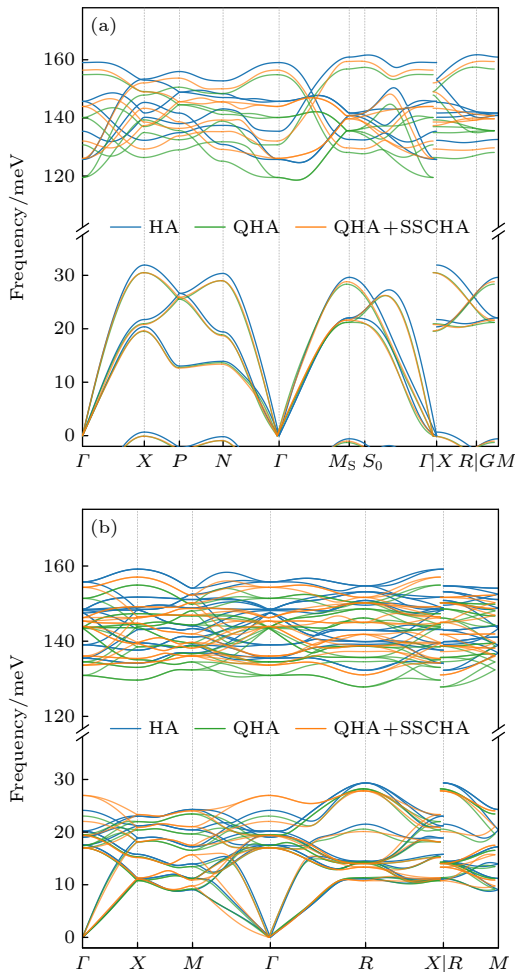


图 4 ϵ -ZrH₂ (a) 和 δ -ZrH_{1.5} (b) 的声子色散关系
Fig. 4. Phonon dispersion relations of (a) ϵ -ZrH₂ and (b) δ -ZrH_{1.5}.

$3 \times 3 \times 3$ 超胞计算中的峰位, 这也是与 HA 和 QHA 的声子色散关系结果出现显著偏差的原因. 综上所述, 量子效应对色散关系的影响规律与声子态密度的分析结论保持一致.

同时, 还计算了氢化锆由声子振动引起的比热容, 结果如图 5 所示. 引入量子效应引起的声子软化, 使得在相同温度下更多声子模式被激发, 从而导致体系吸收的能量增加, 最终表现为声子对比热容贡献的升高. 然而, 由于氢化锆的声子软化发生在较高频区, 且在 Dulong-Petit 定律^[31]的限制下, 总体上量子效应对比热容的最终影响程度相对有限.

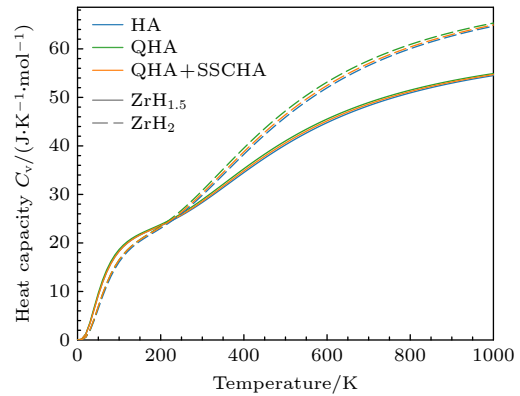


图 5 氢化锆由声子振动引起的比热容参数
Fig. 5. Phonon contribution to the heat capacity of zirconium hydride.

4 热散射截面

4.1 实验数据分析

实验测量是核反应理论计算验证的基础. 本文基于国际核反应实验数据库 (EXFOR)^[32], 系统收集了氢化锆双微分截面及其中氢的热中子反应截面的现有实验测量数据.

在双微分截面方面, 现有实验数据主要来源于以下工作: 1967 年, 美国伦斯勒理工学院的 Purohit 等^[33] 在伦斯勒直线加速器上, 利用 RPI-KAPL 高分辨中子散射装置和 ³He 正比计数器, 采用飞行时间法测量了 ZrH₂ 在 295 K 下 (入射能量 0.572 eV, 出射角度 25°, 40°, 60°, 90°, 120°) 以及 77 K 下 (入射能量 0.232 eV, 出射角度 25°, 40°, 60°, 90°, 120°, 150°) 的双微分截面. 1964 年, 美国海湾能源与环境系统公司的 Boehm 等^[34] 在通用原子直线加速器上, 利用 BF₃ 正比计数器和 ³He 中子能谱仪, 采用飞行时间法测量了 ZrH 在 300 K 下 (入射能

量 0.24 eV, 出射角度 90°) 的双微分截面. 结合本研究关注的 ϵ -ZrH₂ 相及文献 [8, 10] 的参考, 本文选取 Purohit 等在 295 K (入射能量 0.572 eV、出射角度 40°) 和 77 K (入射能量 0.232 eV、出射角度 60°) 下测量的双微分截面作为理论计算的参考值.

在氢化锆中氢的热中子反应截面测量方面, 主要实验包括: 1964 年, 美国海湾能源与环境系统公司的 Whittimore 等 [35] 利用通用原子直线加速器、BF₃ 正比计数器和 ³He 中子能谱仪, 测量了 296 K 下 ZrH_{0.5}, ZrH, ZrH_{1.5} 中氢的热中子总截面. 1967 年, 德国基尔大学的 Schmidt [36] 使用 Pb(111) 和 Cu(200) 单色器, 测量了 ZrH_{0.56}, ZrH_{1.38}, ZrH_{1.63}, ZrH_{1.84} 中氢的热中子总截面; 此外, 该研究还测量了 ZrH_{1.63} 在 120, 160, 265, 350, 480, 560, 640, 710, 790 和 890 K 等多个温度下的热中子总截面. 结合本研究关注的 δ -ZrH_{1.5} 相及文献 [8] 的参考, 本文选取 Whittimore 等在 296 K 下测量的 ZrH_{1.5} 热中子截面作为理论计算的参考值.

4.2 结果分析

基于上述方法得到的氢化锆中氢和氢化锆中锆的声子态密度, 利用核数据处理软件 NJOY2016 [37] 计算热散射律数据和热中子散射截面. 首先, 采用 NJOY2016 中的 LEAPR 模块计算热散射律数据; 然后, 采用 NJOY2016 中的共振重造模块 RECONR、温度展宽模块 BROADR、中子热化处理模块 THERMR 根据固定的能量-角度网格处理成双微分散射截面. 为了计算晶体的相干弹性散射截面, 本文对 LEAPR 模块中的相干弹性散射计算部分进行了针对性修改.

计算需输入参数包括氢和锆的自由原子散射

截面 [38,39], 详见表 3. 其中, 自由原子相干散射截面是通过先对各同位素的相干散射长度进行丰度加权平均, 再将其平方后乘以 4 π 计算得到的.

表 3 H 和 Zr 元素中子质量数、自由原子相干散射截面、自由原子非相干散射截面与总自由原子散射截面
Table 3. Neutron mass number, coherent, incoherent, and total free atom scattering cross sections of H and Zr elements.

核素	靶核质量与中子质量之比	$\sigma_{\text{coh,free}}$	$\sigma_{\text{inc,free}}$	σ_{free}
Zr-0	90.4399	6.520118	0.0164639	6.6339
H-1	0.9999	—	19.99687	20.43608

首先比较了 ϵ -ZrH₂ 和 δ -ZrH_{1.5} 在 295 K 下 (入射能 0.572 eV, 散射角 40°) 和 77 K 下 (入射能 0.232 eV, 散射角 60°) 的双微分散射截面, 如图 6 和图 7 所示. 对比发现, 考虑量子效应的峰位与 ENDF/B-VIII.1 更一致, HA 会相对偏左, 而 QHA 则相对偏右. 双微分散射截面的峰位主要与能量转移量相关, 对于固定入射能的双微分散射截面而言, 其峰位相对位置与声子态密度的相反, 这也与前面计算的声子态密度的结果一致.

接着, 比较了 δ -ZrH_{1.5} 与 ϵ -ZrH₂ 中 H 和 Zr 在 296 K 下的热中子散射截面. 首先, 图 8 展示了氢化锆中氢的总散射截面、弹性散射截面与非弹性散射截面. 结果表明, 在不同计算方法与不同晶相之间, 氢的总散射截面在 Bragg 截断之后的能区差异约为 1—2 barns. 两相截面差异主要体现在 0.1 eV 以下的非弹性散射部分, 其中 δ -ZrH_{1.5} 的非弹性散射截面整体高于 ϵ -ZrH₂. 由于非弹性散射在总截面中所占比重较小, 因此总散射截面未表现出显著区别.

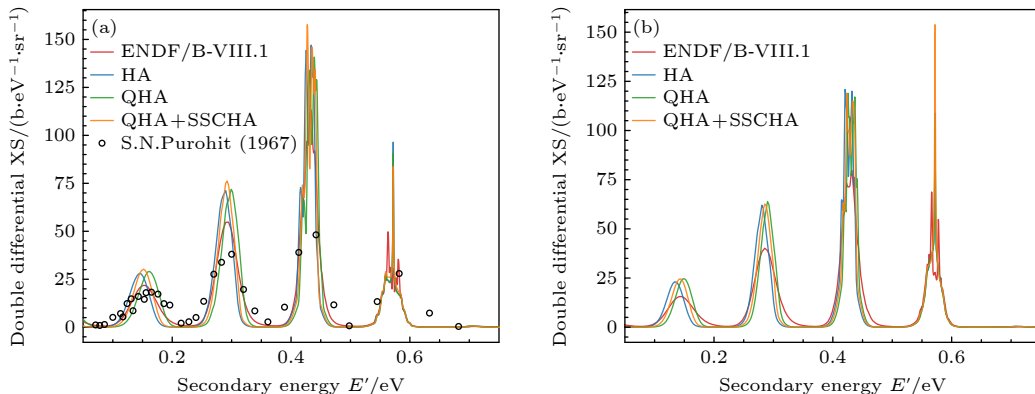


图 6 295 K 下 ϵ -ZrH₂ (a) 和 δ -ZrH_{1.5} (b) 在入射能 0.572 eV、散射角 40° 时的双微分散射截面对比图

Fig. 6. Double differential scattering cross section comparison for ϵ -ZrH₂ (a) and δ -ZrH_{1.5} (b) (0.572 eV, 40°) at 295 K.

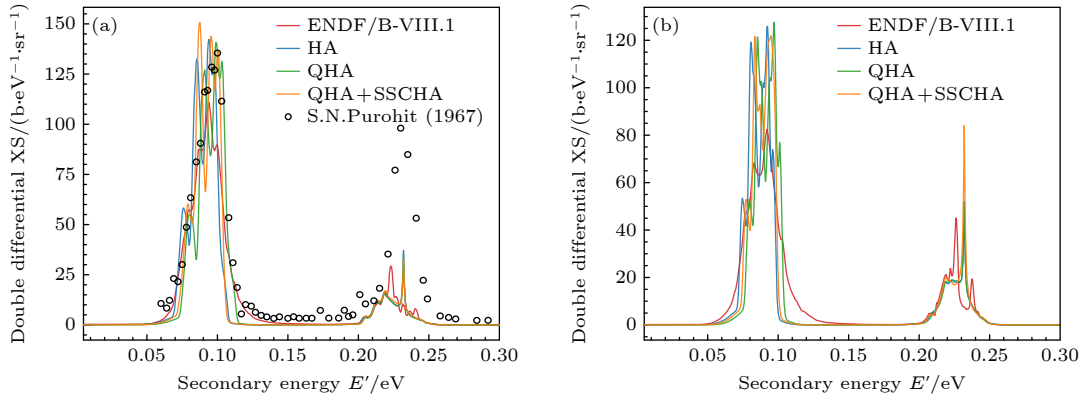


图 7 77 K 下 ϵ -ZrH₂ (a) 和 δ -ZrH_{1.5} (b) 在入射能 0.232 eV、散射角 60° 时的双微分散射截面对比图
Fig. 7. Double differential scattering cross section comparison for ϵ -ZrH₂ (a) and δ -ZrH_{1.5} (b) (0.232 eV, 60°) at 77 K.

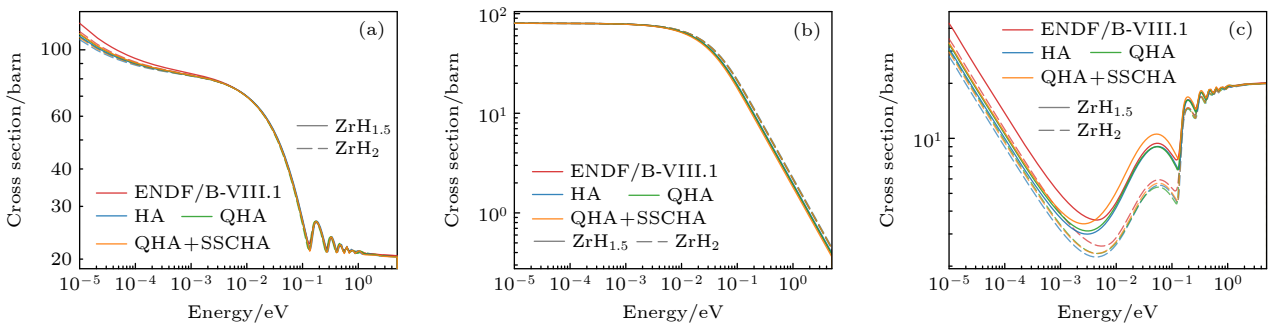


图 8 296 K 下 δ -ZrH_{1.5} 和 ϵ -ZrH₂ 中 H 的总散射截面 (a)、弹性散射截面 (b) 及非弹性散射截面 (c)
Fig. 8. Total (a), elastic (b) and inelastic (c) scattering cross sections of H in δ -ZrH_{1.5} and ϵ -ZrH₂ at 296 K.

其次, 图 9 展示了氢化锆中锆的总散射截面、相干弹性散射截面、非相干弹性散射截面以及非弹性散射截面. 可以看出, 当入射能量高于 0.5 eV 后, 总散射截面逐渐趋于稳定, 约为 6.6 barn, 这与实验研究中常将其视为常数的处理方式一致 [35]. 从锆的相干弹性散射截面中可观察到, Bragg 截断位于 0.0026—0.0027 eV 之间. 此外, 锆的相干弹性散射截面远大于其非相干弹性散射截面, 且不同相在相干弹性散射、非相干弹性散射与非弹性散射截面上均表现出明显差异. 图 10 进一步给出了氢化锆中 H 的总散射截面与实验数据 [35] 的对比. 在 0.06—0.6 eV 范围内, 不同近似方法得到的总散射截面均与实验值符合较好. 需要说明的是, 文献 [35] 对实验数据的处理因能区而异: 在 0.004 eV 之前未作特殊处理; 在 0.004—0.03 eV 区间扣除了 Zr 弹性散射截面; 在 0.06—0.6 eV 区间则扣除了 Zr 的常数截面. 为确保比较基准一致, 本工作以 ENDF/B-VIII.1 评价库中 δ -ZrH_{1.5} 的 Zr 弹性散射截面与自由散射截面为基准, 计算得到了图 10 所示的 δ -ZrH 的理论总散射截面. 同时将不同方法所得总散射截面与

实验值进行 χ^2 分析, 此处 χ^2 定义为

$$\chi^2 = \sum_i^n \frac{(X_i - X_{\text{exp},i})^2}{X_{\text{exp},i}}, \quad (17)$$

其中, X_i 为理论计算的总散射截面值, $X_{\text{exp},i}$ 为实验测量值, n 为实验点个数.

基于 (17) 式的分析结果 (见表 4) 表明, QHA + SSCHA 方法与实验值的一致性与其他方法相当.

表 4 不同计算方法所得总散射截面的 χ^2 对比
Table 4. χ^2 comparison of total scattering cross sections from different calculation methods.

总散射截面	HA	QHA	QHA + SSCHA
H in δ -ZrH _{1.5}	6.5964	6.6978	6.5456
δ -ZrH	4.8565	4.7744	4.6647

为进一步验证不同计算方法计算的氢化锆热散射律数据在临界装置宏观参数计算中的适用性, 选取对氢化锆热散射律数据高度敏感的 HCM003 和 HCM004 临界基准实验开展宏观检验, 以 CENDL-3.2 [40] 为快中子评价库, 系统分析不同近似方法及晶相对有效增殖因子 (k_{eff}) 的影响. 这两组实验为

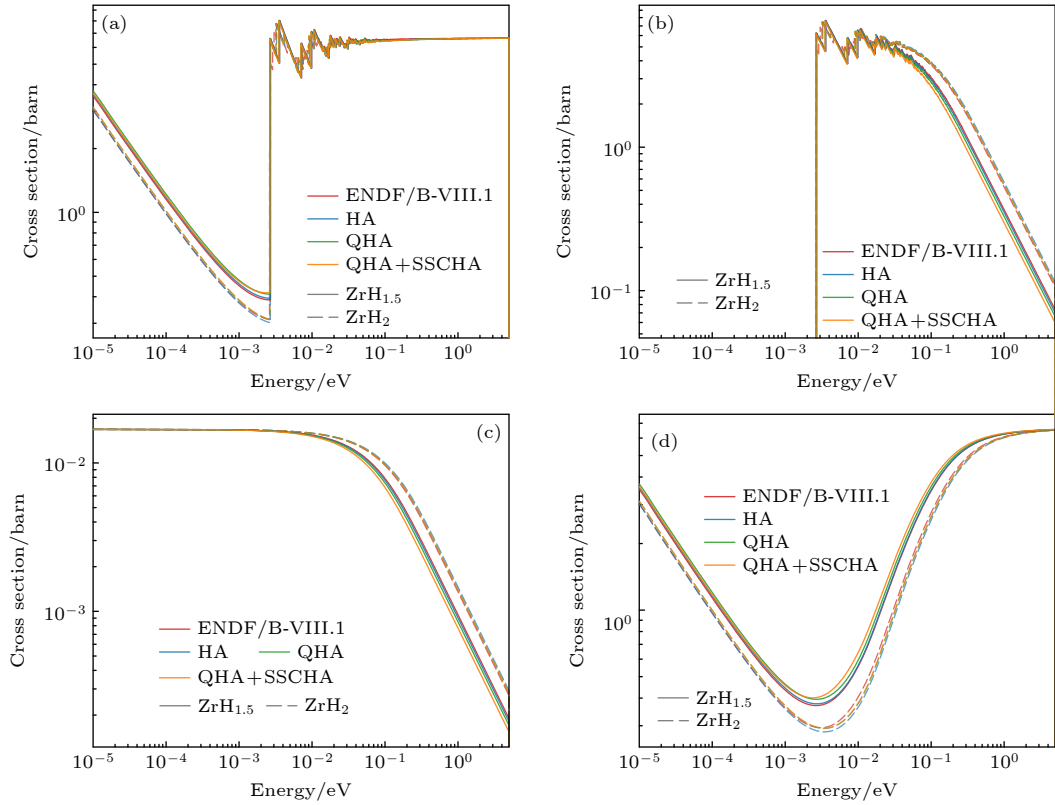


图 9 296 K 下 δ -ZrH_{1.5} 和 ϵ -ZrH₂ 中 Zr 的总散射截面 (a)、相干弹性散射截面 (b)、非相干弹性散射截面 (c) 及非弹性散射截面 (d)
 Fig. 9. Total (a), coherent elastic (b), incoherent elastic (c) and inelastic (d) scattering cross sections of Zr in δ -ZrH_{1.5} and ϵ -ZrH₂ at 296 K.

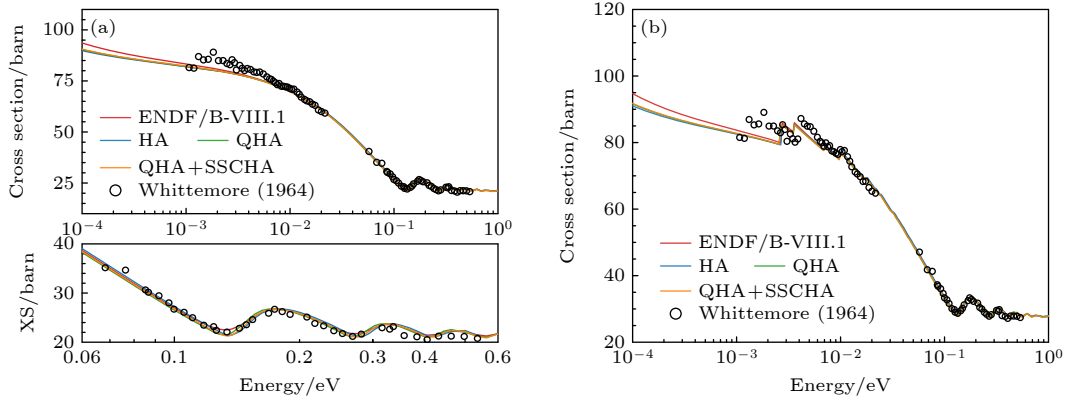


图 10 296 K 下 δ -ZrH_{1.5} 中 H 的散射总截面 (a) 及 δ -ZrH 的散射截面 (b)

Fig. 10. (a) Total scattering cross section of H in δ -ZrH_{1.5} and (b) total scattering cross section for δ -ZrH at 296 K.

俄罗斯库尔恰托夫研究所开展的高浓铀燃料临界组件实验 [41], 以氢化锆为慢化剂, 其 k_{eff} 对于氢化锆热散射律数据具有较高灵敏度, 能精准反馈热散射律数据精度. 实验覆盖轻水、石英砂等不同反射层场景, 可验证氢化锆热散射律数据在多样反应堆环境下的适用性. 各实验反射层及慢化剂材料等信息如表 5 所列.

实验采用的氢化锆慢化剂 H/Zr 原子比约为 1.92, 使用 ϵ -ZrH₂ 的热散射律数据更契合该实验

的实际材料配置, 而 δ -ZrH_{1.5} 仅作为对比项进行计算. 氢化锆热散射律数据的临界基准检验结果如图 11 所示. 从 HCM003 和 HCM004 实验的宏观检验结果来看, 在大多数工况下不同计算方法得到的氢化锆热散射律数据的 k_{eff} 计算结果偏差小于 100 pcm, 未呈现出 QHA + SSCHA 方法明显优于 HA 和 QHA 方法的规律性趋势. 这一结果表明, 在 CENDL-3.2 快中子系统下, 氢化锆热散射律数据的量子效应修正未对宏观 k_{eff} 计算精度产生可区

分的提升效果, 其影响被快中子数据的系统偏差及实验本身的灵敏度特征所掩盖^[42]. 氢化锆热散射律数据并非是影响临界宏观参数的核心因素, 但在部分工况中可一定程度改善计算准确性.

表 5 氢化锆热散射律数据临界基准实验信息
Table 5. List of criticality benchmark of ZrH TSL.

序号	基准实验	反射层	慢化剂	H/Zr 原子比	k_{eff} 基准值
1	HCM003_01	铍	氢化锆	1.92	1
2	HCM003_02	轻水	轻水, 氢化锆	1.92	1
3	HCM003_03	铍, 轻水	氢化锆	1.92	1
4	HCM003_04	铍, 轻水	氢化锆	1.92	1
5	HCM003_05	铍, 轻水	氢化锆	1.92	1
6	HCM003_06	铍, 轻水	氢化锆	1.92	1
7	HCM004_01	铍, 石英砂	轻水, 氢化锆	1.92	1
8	HCM004_02	铍, 石英砂	轻水, 氢化锆	1.92	1
9	HCM004_03	铍, 轻水	轻水, 氢化锆	1.92	1
10	HCM004_04	铍, 轻水	轻水, 氢化锆	1.92	1
11	HCM004_05	铍, 轻水	轻水, 氢化锆	1.92	1

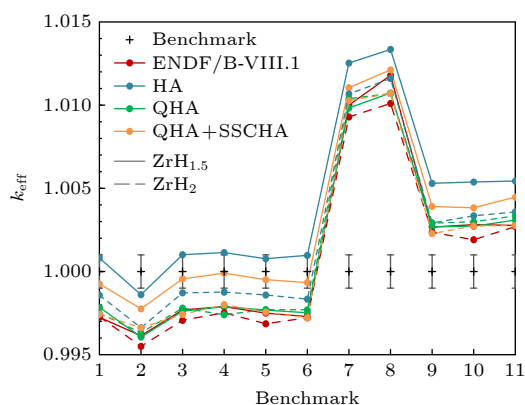


图 11 氢化锆热散射律数据临界基准检验结果
Fig. 11. Criticality benchmark results of ZrH TSL.

5 结论

本研究针对氢化锆这一重要慢化剂材料中由氢原子带来的量子效应, 为克服 AILD 的 HA 与 AIMD 在描述该效应上的固有缺陷, 采用了一套集成 AILD, QHA, MLPs 与 SSCHA 的计算方法, 并系统计算了不同近似方法对 ϵ -ZrH₂ 和 δ -ZrH_{1.5} 声子态密度和热散射律数据的影响. 计算结果表明, 氢化锆的声子态密度相较于 QHA 结果呈现硬化趋势, 但与 HA 下的声子态密度相比仍表现一定的软化. 对于 ϵ -ZrH₂, 相较于 HA, 引入量子效应后的声子态密度与实验数据的一致性显著提升, 对圆

柱形与平板状样品实验数据的 χ^2 分别降低了 64.1% 与 37.7%. 在热中子散射截面方面, 考虑量子效应后氢化锆的双微分散射截面峰位与 ENDF/B-VIII.1 评价库更为一致, 不同方法计算得到的热中子散射总截面均与实验值接近. 临界基准验证表明, 各方法计算的 k_{eff} 基本一致, 其中量子效应在部分工况下可进一步改善精度, 展现了数据优化的潜在价值; 对于宏观参数的快速检验, HA 已能满足基本需求. 本研究在实施 SSCHA 计算时采用了简化策略: 直接使用 QHA 确定的晶格常数, 而未进行复杂的晶格参数迭代弛豫. 该策略有效降低了计算成本, 但也在一定程度上引入了晶格参数的偏差. 这项工作可为其他氢化物慢化剂材料的量子效应研究与高精度热散射数据计算提供新的思路.

感谢中国原子能科学研究院核数据重点实验室吴海成、温丽丽, 西安交通大学祖铁军、马宇图等对本工作的讨论.

数据可用性声明

支撑本研究数据的数据集可在科学数据银行 <https://doi.org/10.57760/sciencedb.33601> 访问获取.

参考文献

- [1] Tang Y Q 2022 *Ph. D. Dissertation* (Xi'an: Xi'an Jiaotong University) (in Chinese) [汤勇强 2022 博士学位论文 (西安: 西安交通大学)]
- [2] Olander D 2009 *J. Nucl. Mater.* **389** 1
- [3] Lillie A F, McClelland D T, Roberts W J, Walter J H 1973 *Atomics International Division Tech. Rep. AI-AEC-13084*
- [4] Slaggie E L 1968 *J. Phys. Chem. Solids* **29** 923
- [5] Mattes M, Keinert J 2005 *Thermal Neutron Scattering Data for the Moderator Materials H₂O, D₂O and ZrH_x in ENDF-6 Format and as ACE Library for MCNP(X) Codes* International Atomic Energy Agency Tech. Rep. INDC(NDS)-0470
- [6] Wang L, Wan C, Cao L, Wu H, Sjöstrand H 2021 *Ann. Nucl. Energy* **151** 107920
- [7] Zheng W, McClarren R G 2016 *Nucl. Sci. Eng.* **183** 78
- [8] Wormald J, Zerkle M, Holmes J 2021 *J. Nucl. Eng.* **2** 105
- [9] Fleming N C, Manring C A, Laramée B K, Crozier J P, Lee E, Hawari A I 2023 *EPJ Web Conf.* **284** 17007
- [10] Zu T, Tang Y, Wang L, Cao L, Wu H 2021 *Ann. Nucl. Energy* **161** 108489
- [11] Zu T, Xu J, Tang Y, Bi H, Zhao F, Cao L, Wu H 2019 *Ann. Nucl. Energy* **123** 153
- [12] Mehta V K, Rehn D A, Olsson P A 2024 *J. Nucl. Eng.* **5** 330
- [13] Ma Y T, Zu T J, Wu H C, Cao L Z 2025 *Acta Phys. Sin.* **74** 222801 (in Chinese) [马宇图, 祖铁军, 吴宏春, 曹良志 2025 物理学报 **74** 222801]
- [14] Zhang J, Cheng Y, Kolesnikov A I, Bernholc J, Lu W,

- Ramirez-Cuesta A J 2021 *Inorganics* **9** 29
- [15] Trainer A, Forget B, Holmes J, Wormald J, Zerkle M 2025 *Ann. Nucl. Energy* **212** 111034
- [16] Wormald J, Trainer A, Zerkle M 2025 *Ann. Nucl. Energy* **211** 110978
- [17] Monacelli L, Bianco R, Cherubini M, Calandra M, Errea I, Mauri F 2021 *J. Phys.: Condens. Matter* **33** 363001
- [18] Errea I, Calandra M, Mauri F 2014 *Phys. Rev. B* **89** 064302
- [19] Togo A, Seko A 2024 *J. Chem. Phys.* **160** 21
- [20] Squires G L 2012 *Introduction to the Theory of Thermal Neutron Scattering* (Cambridge: Cambridge University Press) p1
- [21] Hawari A 2014 *Nucl. Data Sheets* **118** 172
- [22] Errea I, Calandra M, Mauri F 2013 *Phys. Rev. Lett.* **111** 177002
- [23] Kempter C P, Elliott R O, Gschneidner K A 1960 *J. Chem. Phys.* **33** 837
- [24] Kresse G, Furthmüller J 1996 *Comput. Mater. Sci.* **6** 15
- [25] Kresse G G, Furthmüller J 1996 *Phys. Rev. B* **54** 11169
- [26] Togo A, Chaput L, Tadano T, Tanaka I 2023 *J. Phys. Condens. Matter* **35** 353001
- [27] Togo A 2023 *J. Phys. Soc. Jpn.* **92** 012001
- [28] Flotow H E, Osborne D W 1961 *J. Chem. Phys.* **34** 1418
- [29] Seko A 2023 *J. Appl. Phys.* **133** 011101
- [30] Evans A, Timms D, Mayers J, Bennington S 1996 *Phys. Rev. B* **53** 3023
- [31] Olsson P A T, Massih A R, Blomqvist J, Alvarez Holston A M, Bjerckén C 2014 *Comput. Mater. Sci.* **86** 211
- [32] Otuka N, Dupont E, Semkova V, et al 2014 *Nucl. Data Sheets* **120** 272
- [33] Purohit S N, Pan S S, Bischoff F, Bryant W A, Lajeunesse C, Yeater M L, Moore W E, Kirouac G J, Esch L J, Francis N C 1968 *Proceedings of the Symposium on Neutron Thermalization and Reactor Spectra* Ann Arbor, MI, USA, July 17–21, 1967 p407
- [34] Boehm S, Hom A K, Kronquist R, Parks D, Vieweg H, Whittemore W L 1964 *Differential Neutron Thermalization* General Atomic Division Tech. Rep. GA-5554
- [35] Whittemore W L 1964 *Neutron Interaction in Zirconium Hydride* General Atomic Tech. Rep. GA-4490
- [36] Schmidt U 1967 *ATKE* **12** 385
- [37] Macfarlane R, Muir D W, Boicourt R, Kahler III A C, Conlin J L 2017 *Los Alamos National Laboratory Tech. Rep. LA-UR-17-20093*
- [38] Coursey J S, Schwab D J, Tsai J J, Dragoset R A 2015 *Atomic Weights and Isotopic Compositions* (Version 4.1) (Gaithersburg: National Institute of Standards and Technology) <http://physics.nist.gov/Comp> (accessed on 14 October 2025)
- [39] Sears V F 1992 *Neutron News* **3** 26
- [40] Ge Z, Xu R, Wu H, Zhang Y, Chen G, Jin Y, Shu N, Chen Y, Tao X, Tian Y 2020 *EPJ Web Conf.* **239** 09001
- [41] Sapir J, Pelowitz D, Streetman J R, Glushkov Y S, Ponomarev-Stepnoi N N, Kompanietz G V, Lobynstev V A 1994 *AIP Conf. Proc.* **301** 1043
- [42] Wu H C, Zhang H Y 2024 *At. Energy Sci. Tech.* **58** 1271 (in Chinese) [吴海成, 张环宇 2024 *原子能科学技术* **58** 1271]

SPECIAL TOPIC—Thematic data in nuclear physics: Experimental, theoretical and applied research

First-principles investigation of quantum effects and thermal scattering laws of zirconium hydride*

TANG Jiaxuan¹⁾ LIU Ping¹⁾ ZHANG Huanyu¹⁾ WU Xiaofei^{1)†}
FENG Wanxiang^{2)‡} XU Ruirui^{1)††}

1) (*China Nuclear Data Center, China Institute of Atomic Energy, Beijing 102413, China*)

2) (*School of Physics, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081, China*)

(Received 19 December 2025; revised manuscript received 4 February 2026)

Abstract

Zirconium hydride serves as a critical moderator in advanced nuclear reactors, and its thermal scattering law (TSL) data are vital for reactor design. First-principles calculations based on lattice dynamics or molecular dynamics generally rely on the harmonic approximation (HA) or classical mechanics, thereby neglecting quantum effects (QEs), which remain significant for hydrogen atoms even at 0 K.

In this work, we employ an integrated computational approach that combines the quasi-harmonic approximation (QHA), polynomial machine learning potentials (MLPs), and the stochastic self-consistent harmonic approximation (SSCHA) to evaluate the phonon density of states (PDOS) and TSL of zirconium hydride. First, the equilibrium lattice parameters at 0 K are determined using QHA. Subsequently, *ab initio* lattice dynamics (AILD) is employed to compute energies and atomic forces for a broad set of atomic configurations, generating a high-quality training dataset. Based on this dataset, a polynomial MLPs is trained to accurately reproduce the Born-Oppenheimer energy and Hellmann-Feynman forces. Finally, within the SSCHA framework, the trained MLP enabled efficient sampling of large-scale ensembles, and the PDOS incorporating quantum effects is obtained through variational minimization of the free energy.

The results reveal that accounting only for quantum-induced volume expansion within QHA leads to a softening of the PDOS, whereas further inclusion of quantum corrections via SSCHA markedly suppresses this softening trend. For ϵ -ZrH₂, the quantum-corrected PDOS demonstrates significantly improved agreement with experimental data compared to the HA, reducing the χ^2 deviation for cylindrical and slab samples by 64.1% and 37.7%, respectively. The peak positions of the double-differential scattering cross-section, derived from this quantum-corrected PDOS, align more closely with the ENDF/B-VIII.1 evaluated library. Moreover, the calculated total scattering cross-section exhibits trends consistent with existing theoretical results and shows good agreement with experimental measurements. Furthermore, criticality benchmark validation indicates that incorporating quantum effects can enhance the accuracy of k_{eff} calculations under specific conditions. The datasets presented in this paper are openly available at <https://doi.org/10.57760/sciencedb.33601>.

Keywords: zirconium hydride, thermal scattering law, quantum effects, stochastic self-consistent harmonic approximation

DOI: [10.7498/aps.75.20251741](https://doi.org/10.7498/aps.75.20251741)

CSTR: [32037.14.aps.75.20251741](https://cstr.cn/32037.14.aps.75.20251741)

* Project supported by the Key Program of the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 1243000472, W2511003) and the National Natural Science Foundation of China (Ye Qisun)(Grant No. U2541242).

† Corresponding author. E-mail: wuxiaofei@ciae.ac.cn

‡ Corresponding author. E-mail: wxfeng@bit.edu.cn

†† Corresponding author. E-mail: xuruirui@ciae.ac.cn



基于第一性原理的氢化锆量子效应与热散射律计算

唐家玄 刘萍 张环宇 吴小飞 冯万祥 续瑞瑞

First-principles investigation of quantum effects and thermal scattering laws of zirconium hydride

TANG Jiaxuan LIU Ping ZHANG Huanyu WU Xiaofei FENG Wanxiang XU Ruirui

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 75, 090102 (2026) DOI: 10.7498/aps.75.20251741

CSTR: 32037.14.aps.75.20251741

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.75.20251741>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

亚化学计量金属氢化物热散射律数据计算分析

Calculation and analysis of thermal scattering law data of sub-stoichiometric metal hydrides

物理学报. 2025, 74(22): 222801 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250928>

合金元素Sn, Nb对锆合金腐蚀氧化膜相稳定性影响的第一性原理研究

First-principles study on effects of alloying elements Sn and Nb on phase stability of corrosion oxide films of zirconium alloys

物理学报. 2024, 73(15): 157101 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240602>

硼氢化物的热中子散射机理

Investigation of thermal neutron scattering mechanisms in borohydrides

物理学报. 2026, 75(2): 157101 <https://doi.org/10.7498/aps.75.20251314>

超导三元氢化物CaYH₁₂电子及空穴掺杂调控的第一性原理研究

First-principles study of regulation of electron and hole doping in superconducting ternary hydride CaYH₁₂

物理学报. 2025, 74(13): 137401 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250180>

高压下 α -铀热输运性质的第一性原理计算

First principles calculations of lattice dynamics and thermal transport properties of alpha uranium under high pressure

物理学报. 2025, 74(17): 174401 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250619>

基于随机动态掩模调制的幂律光场量子统计特性

Quantum statistical properties of power-law light field based on random dynamic mask modulation

物理学报. 2026, 75(4): 174401 <https://doi.org/10.7498/aps.75.20251403>