

第一原理計算による核燃料の熱伝導率評価

First-principles calculations of thermal conductivity of nuclear fuels

*中村 博樹, 町田 昌彦

日本原子力研究開発機構

核燃料の熱物性に関する知見を得ることは燃料開発において重要な役割を果たす。特に熱伝導率は最も重要な熱物性の1つである。本研究では、経験的なパラメータを必要としない第一原理計算によって、核燃料の主要成分である二酸化プルトニウムなどの熱伝導率を評価した。

キーワード：酸化物燃料、第一原理計算、熱伝導率

1. 緒言

MOX 燃料を始めとする二酸化アクチニドは取り扱いの制限や高温での実験の困難さのため、測定によって詳細な物性を得ることが簡単ではない。それゆえに、数値計算によって測定された物性値の精度を補間していくことは燃料開発やシビアアクシデントの解析において重要な役割を担ってくる。特に燃料開発において重要となってくる熱物性値は熱伝導率である。これまでも、分子動力学計算を用いた熱伝導率の評価が多く行われてきた、しかし、通常の古典分子動力学計算では原子間ポテンシャルを経験的に決めることが多く、定量的な評価に関してはポテンシャル依存性が強い結果となっていた。前回の学会では、第一原理計算を用いて二酸化トリウムの熱伝導率を評価し、実験をよく再現することを確認した。そこで、本発表では、同様の手法を二酸化プルトニウムなどの主要な核燃料成分に応用し、その定量的な信頼性を調べる。

2. 計算方法

熱伝導率は、前回の学会発表と同様に第一原理計算で非調和格子振動を算出し、それを基に熱伝導率を評価した。第一原理計算に対しては強相関効果とスピン軌道相互作用の効果を考慮した方法を用いた。第一原理計算に対しては VASP コード[1]、フォノンの非調和項と熱伝導率の評価には ALAMODE パッケージ[2]を採用した。

3. 結果・考察

二酸化プルトニウムの熱伝導率の計算結果を図に示した。図にあるように文献値[3]と同程度の値を計算できた。発表では二酸化プルトニウム以外の二酸化アクチニドや MOX 燃料についても考察する。

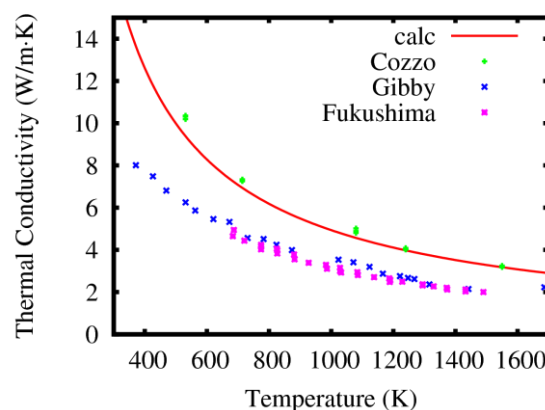


図 1 : PuO₂ の熱伝導率の計算結果

参考文献

- [1] G. Kresse and J. Furthmüller, Phys. Rev. B54, 11169 (1996).
- [2] T. Tadano, Y. Gohda, and S. Tsuneyuki, J. Phys.: Condens. Matter 26, 225402 (2014).
- [3] J. Cozzoe et al., J. Nucl. Mater. 416 (2011) 135; R.L. Gibby, J. Nucl. Mater. 38 (1971) 163; S. Fukushima et al., J. Nucl. Mater. 114 (1983) 260.

*Hiroki Nakamura¹, and Masahiko Machida¹

¹Japan Atomic Energy Agency.