

第一原理計算による二酸化アクチニドの熱伝導率評価

A Study of thermal conductivity of actinide dioxides based on first-principles molecular dynamics

*中村 博樹¹, 町田 昌彦²

¹ 日本原子力研究開発機構

燃料の主要成分である二酸化アクチニドの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熱伝導率を評価した。方法としてはフォノンの非調和効果を第一原理計算で算出し、それを用いて熱伝導率を計算した。得られた結果は実験値を十分な精度で再現した。

キーワード: 二酸化アクチニド, 第一原理計算, 熱伝導率, フォノン

1. 緒言

MOX燃料の主要構成要素であ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医結果となっていた。そこで、本研究では、経験的なパラメータにはよらない第一原理計算を用いて、フォノンの非調和効果による熱伝導率を評価し、その定量的な信頼性を調べる。

2. 計算方法

計算の対象とする物質としては、二酸化トリウムを選択した。これは第一原理計算での電子状態計算の負荷を軽減するために最も単純な電子状態を持っている物資を選んだためである。計算に用いたプログラムはVASPコード[1]で、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]を用いた。

3. 結果・考察

二酸化トリ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]をよく再現している。発表では二酸化トリウム以外の二酸化アクチニドについても考察する。

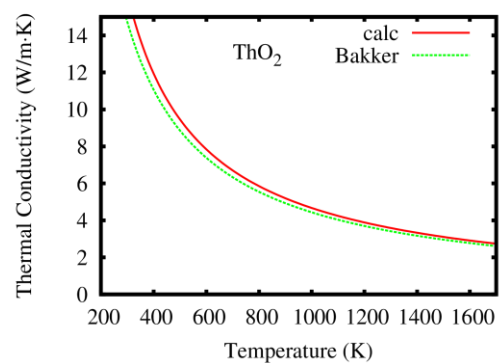


図 1: ThO₂ の熱伝導率。計算結果(赤)と文献値(緑)を比較した。

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] K. Bakker, et al., J. Nucl. Mater., 250, 1 (1997).

*Hiroki Nakamura¹, and Masahiko Machida¹

¹Japan Atomic Energy Agency