

第一原理計算による MOX 燃料の物性評価

First-principles calculations of physical properties of MOX fuels

*中村 博樹¹, 町田 昌彦¹

¹原子力機構

核燃料の熱物性の数値シミュレーションによる評価には、経験的なパラメータを必要としない第一原理計算が多くの場合、有効である。しかしながら、MOX 燃料のような固溶体に対しては、原子数の少ない系にしか適用できない第一原理計算を用いるのは難しい。本発表では、合金の解析などに使われている Special Quasirandom Structure 法を用いた MOX 燃料の物性評価の有効性について議論する。

キーワード：MOX 燃料，第一原理計算

1. 緒言

MOX 燃料を始めとする核燃料物質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。物性評価のための数値計算手法としては、経験的なパラメータを必要としない第一原理計算を用いるのが最も信頼性が高いと考えられる。しかしながら、MOX 燃料のような固溶体に対しては、比較的小さな系しか扱えない第一原理計算を用いて物性を直接、評価するのは困難である。この問題に対して、合金などでは Special Quasirandom Structure (SQS)[1]と呼ばれる方法を用いた解析が行われている。本発表では、SQS 法を用いた第一原理計算が MOX 燃料の物性評価に有効かどうかを確認する。

2. 計算方法

対象とする物質は $\text{Th}_{1-x}\text{Pu}_x\text{O}_2$ とした。これは、他のアクチニド酸化物と違い、磁性を持つ可能性が低いからである。この物質に対して $2 \times 2 \times 2$ のスーパーセル（アクチニド原子 32 個、酸素原子 64 個）を用意し、SQS 法によりアクチニド原子の位置に Th と Pu を最適に配置した構造を作成した（図 1）。これらに対して第一原理計算を実行し、格子定数などの x 依存性を調べた。

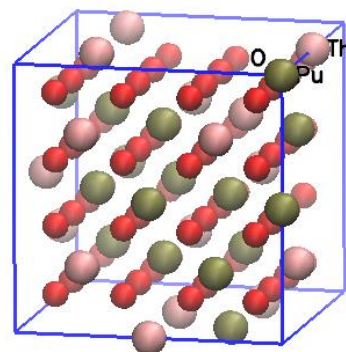


図 1 : $\text{Th}_{16}\text{Pu}_{16}\text{O}_{64}$ の SQS

3. 結果・考察

計算によって得られた格子定数などの物性値は実験値をよく再現する結果が得られたが、一部においては期待と異なる結果も見られた。発表では、SQS 法の適用可能性などを議論する。

参考文献

[1] A. Zunger, S.-H. Wei, L. G. Ferreira, and J. E. Bernard, Phys. Rev. Lett. 65, 353 (1990).

*Hiroki Nakamura¹, and Masahiko Machida¹

¹Japan Atomic Energy Agency.