

第一原理計算による(Th,Pu)O₂の機械的物性評価

First-principles calculations of mechanical properties of (Th,Pu)O₂

*中村 博樹¹, 町田 昌彦¹

¹原子力機構

核燃料の物性値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。本発表では、合金の解析などに使われている Special Quasirandom Structure 法を用いた第一原理計算により、(Th,Pu)O₂の弾性係数を評価した。

キーワード：MOX 燃料、第一原理計算、弾性係数

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。この SQS 法を用いた第一原理計算で(Th,Pu)O₂の相安定性や格子定数を評価した結果は学会で報告済である [2]。本発表では、同様の方法を用いて弾性係数の評価を試みる。

2. 計算方法

Th_{1-x}Pu_xO₂に対して2×2×2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。これらに対して歪みを加えた結晶構造を用い、第一原理計算を実行し応力を評価し、弾性係数のx依存性を調べた。

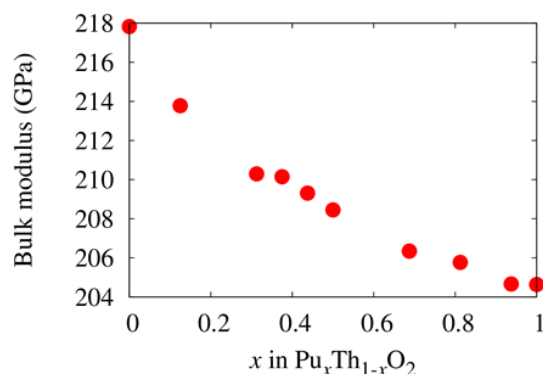


図1 : (Th,Pu)O₂の体積弾性率の計算結果

3. 結果・考察

計算によって得られた Pu_xTh_{1-x}O₂の体積弾性率は概ね x に対して単調減少する結果が得られた (図1)。発表では、その他の機械的特性についても議論する。

参考文献

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

[2] 中村 博樹、町田 昌彦 「第一原理計算による MOX 燃料の物性評価」 原子力学会 2017 年春の年会

*Hiroki Nakamura¹, and Masahiko Machida¹

¹Japan Atomic Energy Agency.