

عنوان مقاله:

بررسی خواص فونونی و رفتار حرارتی بلور UO₂ با استفاده از نظریه تابعی چگالی و نظریه اختلال تابعی چگالی

محل انتشار:

مجله پژوهش فیزیک ایران، دوره 20، شماره 1 (سال: 1399)

تعداد صفحات اصل مقاله: 8

نویسندگان:

محمود پیامی شبستر - پژوهشکده فیزیک و شتابگرها، پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای، سازمان انرژی اتمی، تهران

سمیرا شیخی - پژوهشکده فیزیک و شتابگرها، پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای، سازمان انرژی اتمی، تهران

خلاصه مقاله:

درک رفتار حرارتی و فرایندهای مرتبط با انتقال حرارت در سوخت هسته‌ای UO₂ در راکتور هسته‌ای اهمیت بسیاری در پیش‌بینی کارایی سوخت دارد. اگر انتقال حرارت، که یک پارامتر مهم در توزیع دما در سوخت هسته‌ای است، به خوبی صورت نگیرد، باعث بالا رفتن دما در سوخت شده و منجر به ذوب آن می‌شود که حوادث زیست محیطی را در پی خواهد داشت. در این پژوهش، با توصیف ساده حالت پارامغناطیس توسط محاسبات غیر-اسپین-قطبیده، و صرف‌نظر کردن از اعمال تصحیح هابارد، خواص حرارتی و فونونی بلور UO₂ محاسبه شده است. این محاسبات مبتنی بر روش‌های نظریه تابعی چگالی (DFT) و نظریه اختلال تابعی چگالی (DFPT) است. در تعیین خواص ارتعاشات شبکه با استفاده از روش جابه‌جایی محدود، ثابت‌های نیروی مرتبه دوم و مرتبه سوم را به دست آورده و با استفاده از آنها کمیت‌هایی مانند گرمای ویژه در حجم ثابت، پارامتر گرونایزن، نرخ پراکندگی سه فونونی، نرخ پراکندگی ناشی از درصدهای ایزوتوپی مختلف و در نهایت رسانش حرارتی انباشته را برای درصدهای ایزوتوپی مختلف محاسبه کرده‌ایم. نتایج نشان داد که گرمای ویژه محاسبه شده در تقریب هارمونیک تطابق خوبی با تجربه، به ویژه در دماهای زیر 400 کلوین، دارد. نتایج مربوط به نرخ پراکندگی سه فونونی به ازای دماهای مختلف نشان داد که افزایش دما باعث افزایش نرخ پراکندگی و در نتیجه کاهش رسانش حرارتی می‌شود. نتایج همچنین نشان داد که وجود ناخالصی ناشی از درصدهای ایزوتوپی مختلف تأثیر محسوسی در نرخ پراکندگی ندارد.

کلمات کلیدی:

دی اکسید اورانیوم، فونون، نرخ پراکندگی فونونی، پویش آزاد میانگین فونونی، معادله ترابرد بولتزمن

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/1157427>

