مجلهٔ پژوهش فیزیک ایران، جلد ۲۳، شمارهٔ ۱، بهار ۱۴۰۲
DOI: 10.47176/ijpr.23.1.51457

محاسبهٔ رسانش حرارتی $UO_{2\pm0/25}$ با حل معادلهٔ ترابرد بولتزمن

سمیرا شیخی، محمود پیامی شبستر، و محمدرضا باسعادت

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

پست الکترونیکی: ssheykhi@aeoi.org.ir

(دریافت مقاله: ۰۲/ ۰۳/ ۱۴۰۱ ؛ دریافت نسخهٔ نهایی: ۱۱/ ۰۷/ ۱۴۰۱)

چکیده:

در این مطالعه اثر نقیصه‌های نقطه‌ای بر رسانش حرارتی دی‌اکسید اورانیوم بررسی شده است. به طور خاص اثر اکسیژن بین‌نشین و تهی‌جای مورد توجه بوده است. با حل معادلهٔ ترابرد فونون بولتزمن با استفاده از تقریب زمان واهلش، رسانش حرارتی دی‌اکسید اورانیوم برای ابرسلول‌های UO_2 ، $UO_{2+0/25}$ و $UO_{2-0/25}$ به دست آمده است. نتایج نشان دادند که افزودن هر نقیصه‌ای در ساختار شبکهٔ دی‌اکسید اورانیوم، رسانش حرارتی را به طرز چشمگیری کاهش می‌دهد. همچنین نتایج نشان دادند که تغییرات رسانش حرارتی ابرسلول $UO_{2-0/25}$ در بازهٔ دمایی ۳۰۰ تا ۱۰۰۰ کلوین، بسیار کمتر از آن $UO_{2+0/25}$ است.

واژه‌های کلیدی: دی‌اکسید اورانیوم، معادلهٔ فونون بولتزمن، رسانش حرارتی، مسافت آزاد میانگین فونونی، نقیصه

۱. مقدمه

سال‌هاست که دی‌اکسید اورانیوم متداول‌ترین سوخت راکتورهای هسته‌ای است. ۱۵ درصد برق کل جهان توسط راکتورهای هسته‌ای تولید می‌شود. سوخت باید بتواند سال‌ها در برابر آسیب‌های متنوع ناشی از تابش‌های مختلف کار کند. به دلیل نقش حیاتی سوخت در راکتور درک سازوکارهای حرارتی در سوخت از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است. در این میان رسانش حرارتی کلیدی‌ترین پارامتر در تعیین توزیع دماست. به دلیل این که مطالعات آزمایشگاهی در این زمینه با محدودیت همراه است، مطالعات نظری از ارزش بالایی برخوردار هستند.

دی‌اکسید اورانیوم تحت شرایط عملکردی راکتور و یا حتی بعد از ساخت، اغلب به شکل $UO_{2\pm X}$ یافت می‌شود. نقیصه‌های نقطه‌ای در سوخت‌های اکسیدی اثرات مضری بر انتقال حرارت در سوخت‌های اکسیدی دارند؛ چون آنها مدهای ارتعاشی ساختارهای کریستالی را تغییر می‌دهند [۱، ۲ و ۳] نقیصه‌های نقطه‌ای می‌توانند به شکل تهی‌جای، انواع بین‌نشینی و اتم‌های جایگزینی وجود داشته باشند. در میان آنها بین‌نشین‌های اکسیژن مهم‌ترین محصول فرعی چرخهٔ سوخت هسته‌ای است. از آنجایی که بین‌نشین‌های اکسیژن انرژی تشکیل منفی دارند سوخت‌های اکسیدی می‌توانند به راحتی اکسید شده و هایپراستوکیومتری شوند. اثر بین‌نشین‌های اکسیژن روی اکسیدهای اکتینیدی و فرایند پخش آنها ، سال‌ها از مهم‌ترین موضوعات مطالعاتی مورد توجه بوده است. در سال ۱۹۷۸ بریتانگ [۴] نتایج آزمایشگاهی ضرایب پخش بین‌نشین‌های اکسیژن در $UO_{2\pm X}$ را ارائه کرد. در سال ۱۹۸۱ کیم و الاندر [۵] گزارش کردند که بین‌نشین‌ها و تهی‌جای‌های اکسیژن سهم به‌سزایی در پخش اکسیژن در UO_2 استوکیومتری دارند. به طور ویژه خواص انتقال حرارت اکسیدهای اکتینیدی با نقیصه‌های مختلف بارها مورد مطالعه قرار گرفته است. برای مثال

لوکاتا و همکارانش [۶] پراکندگی نقیصه‌های نقطه‌ای از بین‌نشین‌های اکسیژن را در هایپراستوکیومتری SIMFUEL[1] بررسی کردند. پاکارینن و همکارانش [۷] کاهش رسانش حرارتی UO_2 را تحت تابش یون He^{2+} گزارش کردند. بررسی اثرات بین‌نشین‌های اکسیژن بر رسانش حرارتی سوخت‌های اکتینیدی بسیار کم است. در سال ۲۰۰۹ واتانبل و همکارانش [۸] رسانش حرارتی UO_2 با استوکیومتری-بالا و -پایین را با غلظت‌های متفاوتی از نقیصه‌های مختلف محاسبه کردند. در سال ۲۰۲۰ میشل و همکارانش [۹] رسانش حرارتی اکسیدهای اکتینیدی را با غلظت‌های متفاوت و با استفاده از روش دینامیک مولکولی غیرتعادلی محاسبه کردند. ما در این کار اثر تهی‌جای و بین‌نشین اکسیژن بر رسانش حرارتی UO_2 را با حل معادلهٔ ترابرد فونون بولتزمن و با تقریب زمان واهلش بررسی کردیم. بدین ترتیب که ابتدا رسانش حرارتی UO_2 خالص [۱۰] را محاسبه کرده و با داده‌های موجود مقایسه کردیم. در ادامه، رسانش حرارتی برای ابرسلول‌های $UO_{2+0/25}$ [۱۱] و $UO_{2-0/25}$ [۱۲] جداگانه محاسبه و بررسی شد. لازم به ذکر است که نتایج ارائه شده در این مقاله نسبت به مراجع [۱۰ و۱۱] بهبود یافتند. در این مطالعه سعی شده است که با بررسی مسافت آزاد میانگین فونونی در هر مورد، رسانش حرارتی بررسی شود. در بخش ۲ این مقاله، مبانی نظری کار ارائه شده، در بخش ۳ نتایج محاسبات و بحث و در بخش ۴ نیز نتیجه‌گیری و جمع‌بندی و در بخش آخر مراجع آمده است.

۲. مبانی نظری

این محاسبات شامل دو قسمت است: اول محاسبهٔ ثابت‌های نیرو، دوم به کار بردن ثابت‌های نیرو برای محاسبهٔ خواص فونونی و سپس رسانش حرارتی. در این مطالعه، برای محاسبهٔ ثابت‌های نیروی مرتبهٔ دوم و سوم از روش جابه‌جایی محدود استفاده کردیم.

۲. ۱. تقریب هارمونیک

در دماهای پایین‌تر از نقطهٔ ذوب، اتم‌های بلور حول مکان تعادلی‌شان ارتعاش می‌کنند. با بسط انرژی پتانسیل سامانه حول مکان‌های تعادلی اتم‌ها خواهیم داشت [۱۳]:

$$\tau_\lambda^a = \tau_\lambda^\circ (1+\Delta_\lambda^a) \qquad (۱)$$

که در آن

$$\Pi_i^\alpha = \frac{\partial U}{\partial u_i^\alpha} = -F_i^\alpha, \qquad (۲)$$

$$\Phi_{ij}^{\alpha\beta} = \frac{\partial^2 U}{\partial u_i^\alpha \partial u_j^\beta}, \qquad (۳)$$

$$\Psi_{ijk}^{\alpha\beta\gamma} = \frac{\partial^3 U}{\partial u_i^\alpha \partial u_j^\beta \partial u_k^\gamma}, \qquad (۴)$$

در روابط فوق، i و j و k جمع روی اتم‌ها و α، β و γ جمع روی مختصات کارتزین هستند. $U_\circ$ انرژی مرجع است که صفر در نظر گرفته می‌شود و u_i^α جابه‌جایی کوچک اتم i در جهت α است و Π_i^α نیروی خالص وارد بر اتم i (با علامت منفی) در جهت α است که در نقطهٔ تعادل صفر است. مسئلهٔ ارتعاشات اتمی با در نظر گرفتن جابه‌جایی‌های کوچک در حجم ثابت و در نظر گرفتن جملات مرتبهٔ دوم، که به آن تقریب هارمونیک گفته می‌شود، حل می‌شوند. هدف ما در محاسبات دینامیک شبکه در تقریب هارمونیک، تعیین مجموعهٔ بسامدهای فونونی ω و ویژه بردارهای e مرتبط با بردار موج q است. در تقریب هارمونیک، بسامدها و ویژه مقادیر برای بردار موج q را از حل معادلهٔ ویژه مقداری

$$\omega^2(q,\nu)e(q,\nu) = D(q)e(q,\nu), \qquad (۵)$$

به دست می‌آوریم که در آن ماتریس دینامیکی $D(q)$ بعد $3N_{unitcell} \times 3N_{unitcell}$ دارد. عنصر ماتریسی $D(q)$ مرتبط با بر هم کنش اتم‌های b و b' برای حالتی که اگر b در جهت α حرکت کند و b' در جهت β، به وسیلهٔ زیر داده می‌شود:

$$D_{3(b-1)+\alpha,3(b'-1)+\beta}(bb',q) = \frac{1}{(m_b m_{b'})^{1/2}} \sum_l \Phi_{b0,b'l}^{\alpha\beta} \exp\{iq.[r(l)-r(0)]\}, \qquad (۶)$$

در شاخص $D(q)$، α و β برای x مساوی یک، برای y برابر ۲ و برای z مساوی ۳ هستند، m جرم اتم‌ها، $r(l)$ متناظر با مرکز جرم سلول واحد، و l روی تمامی سلول‌های واحد جمع زده می‌شود. ثابت نیروی هارمونیک متناظر با بر هم کنش α-β بین اتم b در سلول واحد مرکزی (متناظر با $l=0$) و اتم b' در سلول واحد l است. با داشتن بسامدها و ویژه بردارها به ازای

۱. Simulated Spent Nuclear Fuel

تمام بردارهای موج غیرتبهگن در منطقهٔ بریلوئن، می‌توان خواص فونونی در تقریب هارمونیک را محاسبه کرد.

۲. ۲. رسانش حرارتی

رسانش حرارتی از حل معادلهٔ ترابرد بولتزمن به دست می‌آید. با حل این معادله، جمعیت مدها محاسبه می‌شود. تحت تقریب زمان واهلش[۱] فرض می‌شود که جمعیت از توزیع تعادلی ابتدایی‌اش پیروی می‌کند. فرض اصلی تقریب RTA این است که هم فرایندهای نرمال و هم فرایندهای اومکلپ فرایندهای مقاومتی هستند، در حالی که فرایندهای نرمال غیر مقاومتی هستند. در محاسباتی که فرایندهای نرمال مهم هستند (برای مثال در دماهای پایین و یا در مواد با رسانش حرارتی بالا)، این تقریب به رسانش حرارتی پایین‌تر منجر می‌شود. طبق قانون فوریهٔ رسانش حرارتی، نسبت شارگرمایی Q در یک ماده به گرادیان دمایی ∇T، به شکل زیر تعریف می‌شود:

$$Q = -k\nabla T, \qquad (۷)$$

رسانش حرارتی یک تانسور مرتبهٔ دوم است که عناصر غیر قطری آن صفر است. در جامد کریستالی حامل‌های انتقال حرارت الکترون‌ها و فونون‌ها هستند که در این کار به دلیل عایق بودن UO_2 تمرکز ما بر روی فونون هاست. دینامیک حاکم بر فونون‌ها از معادلهٔ ترابرد فونون بولتزمن پیروی می‌کند. رسانش حرارتی از حل معادلهٔ خطی شدهٔ ترابرد فونون بولتزمن[۲] برای تابع توزیع فونون حالت پایا f_λ به دست می‌آید:

$$\nabla T.v_\lambda \frac{\partial f_\lambda}{\partial T} = \frac{\partial f_\lambda}{\partial t}\Big|_{scattering}, \qquad (۸)$$

به گونه‌ای که طرف چپ معادله متناظر با پخش فونونی ناشی از گرادیان دمایی است و طرف راست نرخ تغییر تابع توزیع فونونی ناشی از فرایندهای پراکندگی مجاز است. در اینجا v_λ سرعت گروه فونون در مد $\lambda \equiv (q,s)$ است (s و q به ترتیب شاخص شاخهٔ فونونی و بردار موج در فضای معکوس هستند). در معادلهٔ BTEخطی شده، توزیع f_λ، تابع توزیع بوز–اینشتین $f_\lambda^\circ = ۱/(exp(\beta\hbar\omega_\lambda)-۱)$ است به اضافهٔ یک جمله که به طور خطی با ∇T متناسب است.

ما سهم‌های پراکندگی ناشی از ایزوتوپ‌ها و تمام فرایندهای سه فونونی را در نظر گرفتیم که پایستگی انرژی و شبه تکانه را ارضا می‌کنند

$$\omega_\lambda \pm \omega_{\lambda'} = \omega_{\lambda''}, \qquad (۹)$$

$$q \pm q' = q'' + Q, \qquad (۱۰)$$

به طوری که Q بردار شبکهٔ معکوس است. هنگامی که تنها منابع پراکندگی فرایندهای دو- و سه-فونونی باشند، معادلهٔ BTE خطی شده می‌تواند بر حسب مجموعه‌ای از معادلات جفت شده برای طول عمر فونونی خود-سازگار، τ_λ، نوشته شود [۱۴، ۱۵، ۱۶ و ۱۷].

$$\tau_\lambda^a = \tau_\lambda^\circ(۱+\Delta_\lambda^a), \qquad (۱۱)$$

که در آن τ_λ° طول عمر فونون در تقریب زمان واهلش تک مد است و به شکل زیر تعریف می‌شود:

$$\frac{۱}{\tau_\lambda^\circ} = \frac{۱}{N}, \qquad (۱۲)$$

که در آن N تعداد سلول‌های واحد است و τ_λ^α زمان واهلش متناظر با مدهای فونونی منتشر شده در جهت α است. کمیت Δ_λ^α در رابطهٔ بالا به شکل زیر تعریف می‌شود:

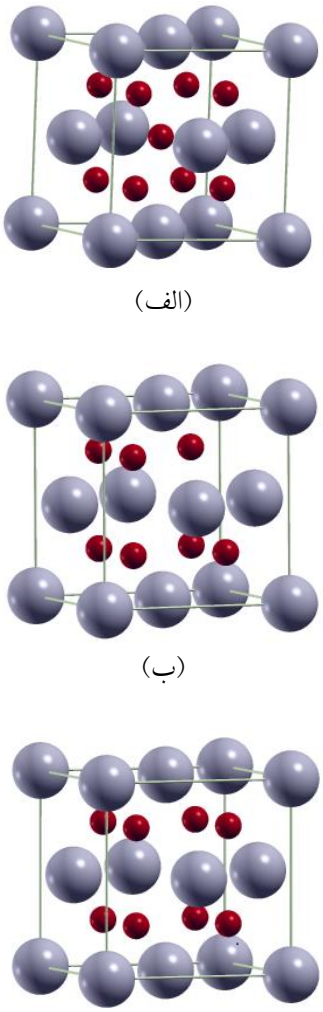
$$\Delta_\lambda^a = \frac{۱}{N}, \qquad (۱۳)$$

۳. نتایج محاسبات و بحث

دی‌اکسید اورانیوم به دلیل اهمیت آن در صنعت سوخت هسته‌ای، سال‌ها تحت مطالعات تجربی و محاسباتی بوده است. خواص پیچیدهٔ فیزیکی و شیمیایی این ماده سبب شده که از لحاظ تجربی و محاسباتی ماده‌ای چالش برانگیز باشد.

دی‌اکسید اورانیوم به دلیل وجود اوربیتال نیمه پر f، یک مادهٔ همبسته قوی است و به دلیل وجود حالات نیمه پایدار، یافتن حالت پایهٔ صحیح الکترونی کار دشواری است. ساختار UO_2

۱. Relaxation Time Approximation (RTA)
۲. Boltzmann Transport Equation (BTE)



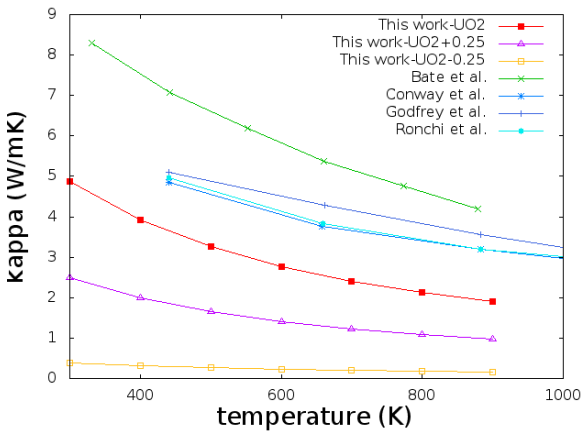
شکل ۱. ساختار کریستال: (الف) $UO_۲$ خالص، (ب) $UO_{۲+۰/۲۵}$ و (ج) $UO_{۲-۰/۲۵}$

به صورت مکعبی مرکز سطحی (FCC) و کاملاً متقارن است. طبق بررسی‌های آزمایشگاهی بلور دی‌اکسید اورانیوم یک عایق مات است که در دمای زیر ۳۰ کلوین خاصیت پادفرومغناطیسی غیرهم خط دارد و در دماهای بالاتر یک پارامغناطیس است. ساختار کپه‌ای این بلور خالص فلوئوریت با ثابت شبکهٔ $a=b=c=۵/۴۷$ آنگستروم است [۱۸].

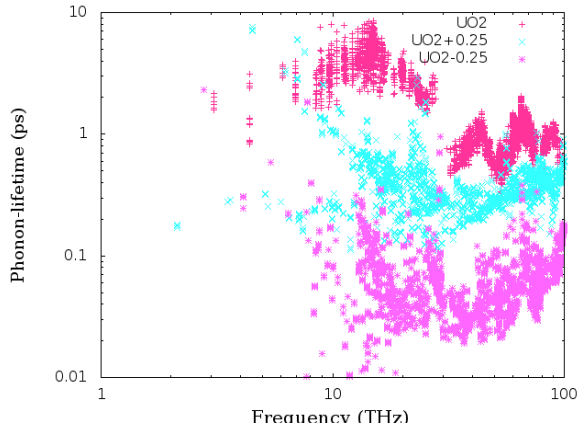
در کارهای پیشین ما رسانش حرارتی دی‌اکسید اورانیوم را ، با مدل‌سازی حالت پارامغناطیس توسط محاسبات غیر-اسپین-قطبیده، و صرفنظر کردن از اعمال تصحیح هابارد و با حل معادلهٔ BTE به دست آوردیم [۱۹، ۲۰ و ۲۱] در این پژوهش، رسانش حرارتی بلور دی‌اکسید اورانیوم را با در نظر گرفتن حالت اسپینی پادفرومغناطیس با دمای K ۱ و همچنین با احتساب تقریب هابارد و با حل معادلهٔ BTE به دست آوردیم. این محاسبات شامل سه قسمت است: اول، بهینه کردن کامل ساختار و به دست آوردن ثابت‌های تعادلی بهینه. دوم، محاسبهٔ ثابت‌های نیروی مرتبهٔ دوم و سوم. سوم، به کار بردن ثابت‌های نیرو برای محاسبهٔ خواص فونونی و سپس رسانش حرارتی. برای انجام محاسبات در این پژوهش از دو بستهٔ نرم‌افزاری GULP [۲۲] و ALAMODE [۲۳] استفاده شده است. GULP بر اساس روش‌های میدان نیرو[۱] محاسبات را انجام می‌دهد و بستهٔ نرم افزاری ALAMODE برای تحلیل رسانش حرارتی طراحی شده است. در هر مرحله، بهینه سازی ساختار و محاسبهٔ نیروها در پیکربندی‌های با اتم‌های جابه‌جاشده با استفاده از کد GULP انجام شده است و محاسبهٔ ثابت‌های نیرو و در نتیجه رسانش حرارتی با استفاده از کد ALAMODE صورت گرفته است.

سلول واحد $UO_۲$ استوکیومتری و $UO_{۲+۰/۲۵}$ و $UO_{۲-۰/۲۵}$ غیراستوکیومتری در شکل ۱ نشان داده شده‌اند. درهر سه محاسبه از ابرسلول ۲×۲×۲ استفاده شده است. هر ساختار به ترتیب حاوی ۹۶ اتم، ۱۰۴ اتم و ۸۸ اتم هستند. در هر مرحله، ابرسلول ابتدا بهینه شده و ثابت های تعادلی محاسبه شده‌اند. سپس با استفاده از روش جابه‌جایی محدود، ثابت های نیروی مرتبهٔ دوم و سوم محاسبه شدند. بدین منظور مقدار جابه‌جایی برای محاسبهٔ ثابت نیروی مرتبهٔ دوم برابر ۰/۰۱ آنگستروم بود و همچنین هیچ شعاع قطعی برای محاسبهٔ نیروی وارد بر اتم ها در نظر گرفته نشد؛ بدین معنی که تمام جابه‌جایی های ممکن به حساب آورده شدند. تعداد ساختارهای با اتم های جابه‌جا شده برای محاسبهٔ ثابت نیروی مرتبهٔ دوم به ترتیب برای ابرسلول ۹۶ اتمی برابر ۲ پیکربندی، برای ابرسلول ۱۰۴ اتمی برابر ۶ پیکربندی و برای ابرسلول ۸۸ اتمی برای ۷ پیکربندی بود. نیروی وارد بر اتم‌های آنها محاسبه شد و ثابت های نیروی مرتبهٔ دوم به دست آمد.

۱. Force-field method



شکل ۲ . رسانش حرارتی بر حسب دما محاسبه شده با تقریب RTA برای ابرسلول های UO_2 ، $UO_{2+0/25}$ و $UO_{2-0/25}$ و مقایسهٔ آنها داده های تجربی [۲۴، ۲۵، ۲۶ و ۲۷].



شکل ۳. زمان واهلش فونونی محاسبه شده بر حسب بسامد برای ساختارهای UO_2، $UO_{2+0/25}$ و $UO_{2-0/25}$ در دمای ۳۰۰ کلوین.

برای محاسبهٔ ثابت نیروی مرتبهٔ سوم مشابه کاری را که برای ثابت نیروی مرتبهٔدوم انجام شد ا تکرار کردیم با این تفاوت که مقدار جابه‌جایی را برابر ۰/۰۳ آنگستروم در نظر گرفتیم و مجدداً هیچ شعاع قطعی در نظر گرفته نشد. تعداد ساختارهای با اتم‌های جابه‌جا شده به ترتیب برای ابرسلول ۹۶ اتمی برابر ۱۶۵ پیکربندی ، برای ابرسلول ۱۰۴ اتمی برابر ۷۵۲ پیکربندی و برای ابرسلول ۸۸ اتمی برای ۸۶۵ پیکربندی بود که نیروی وارد بر اتم‌های آنها محاسبه شد و ثابت های نیروی مرتبهٔ سوم و در نتیجه رسانش حرارتی به دست آمد. تعداد ثابت‌های نیروی مجزا به اندازه و تقارن سلول واحد بستگی دارد. از آنجایی که در هر ابرسلول تعداد اتم‌ها و عملگرهای تقارنی متفاوت هستند بنابراین تعداد پیکربندی‌های با اتم‌های جابه‌جا شده و تعداد ثابت های نیرو مختلف هستند.

لازم به ذکر است که در مرحلهٔ مقادیر جابه‌جایی، بر اساس آزمون همگرایی انتخاب شده اند. رسانش حرارتی محاسبه شده از روش RTA بر حسب دما در شکل ۲ با مقادیر تجربی مقایسه شده است. همانطوری که از شکل ۲ دیده می شود نمودار رسانش حرارتی بلور دی اکسید اورانیوم خالص، چنانچه انتظار داشتیم، پایین‌تر از مقادیر تجربی است که ناشی از استفاده از تقریب RTA است. همچنین رسانش حرارتی $UO_{2+0/25}$ پایین‌تر از دی اکسید اورانیوم خالص است که به دلیل وجود نقیصه در ساختار است. رسانش حرارتی UO_2 و $UO_{2+0/25}$ با افزایش دما روند کاهشی دارد. در شکل ۳ زمان واهلش فونونی بر حسب بسامد در دمای ۳۰۰ کلوین برای هر سه ساختار UO_2، $UO_{2+0/25}$ و $UO_{2-0/25}$ رسم شده است. همانطوری که در شکل ۳ دیده می شود، زمان واهلش فونونی در ابرسلول $3N_{unitcell} \times 3N_{unitcell}$ پایین‌تر از بلور خالص است. نقیصه در ساختار سبب می شود که زمان واهلش فونونی پایین‌تر (پراکندگی فونونی بالاتر) باشد و بنابراین رسانش حرارتی پایین‌تر است. در مورد ابرسلول $UO_{2-0/25}$ ، همانگونه که در شکل ۳ دیده می‌شود زمان واهلش فونونی نسبت به دو ابرسلول UO_2 و $UO_{2+0/25}$ کاهش یافته است و بنابراین رسانش حرارتی پایین‌تری دارد. همچنین تغییرات رسانش حرارتی ابرسلول $UO_{2-0/25}$ بسیار کمتر از $UO_{2+0/25}$ در بازهٔ دمایی ۳۰۰ تا ۱۰۰۰ کلوین است (شکل ۲).

۴. نتیجه‌گیری و جمع‌بندی

در این پژوهش، رسانش حرارتی کریستال UO_2، $UO_{2+0/25}$ و $UO_{2-0/25}$ را با حل معادلهٔ ترابرد فونون- بولتزمن و با استفاده از تقریب زمان واهلش به دست آوردیم. ثابت‌های نیروی مرتبهٔ دوم و سوم با استفاده از روش جابه‌جایی محدود محاسبه شدند. همانگونه که مشاهده شد افزودن هر نقیصه در ساختار دی اکسید اورانیوم خالص باعث می‌شود که رسانش حرارتی به طرز چشمگیری کاهش یابد. پایین‌تر بودن رسانش حرارتی خالص در مقایسه با مقادیر تجربی نیز به دلیل استفاده از تقریب RTA بود. رسانش حرارتی UO_2 و $UO_{2+0/25}$ با افزایش دما روند کاهشی داشتند در حالی که تغییرات رسانش حرارتی $UO_{2-0/25}$ در مقایسه با دو ابرسلول دیگر ناچیز بود.

مراجع

1. A Resnick, K Mitchell, J Park, E B Farfán, T Yee, *Nucl. Eng. Technol. 51 (***2019)** 1398.
2. J Park, E B Farfán, K Mitchell, A Resnick, C Enriquez, T Yee, *J. Nucl. Mater. 504 (***2018)** 198.
3. J Park, E B Farfán, C Enriquez, *Nucl. Eng. Technol. 50 (***2018)** 731.
4. W Breitung, *J. Nucl. Mater.* **74** (1978)10.
5. K Kim, D Olander, *J. Nucl. Mater.* **102** (1981)192.
6. P Lucuta, H Matzke, R Verrall, *J. Nucl. Mater.* **223** (1995) 51.
7. J Pakarinen, M Khafizov, L He, C Wetteland, J Gan, A T Nelson, D H Hurley, A El-Azab, T R Allen, *J. Nucl. Mater.* **454** (2014) 283.
8. T Watanabe, S G Srivilliputhur, P K Schelling, J S Tulenko, S B Sinnott, S R Phillpot, *J. Am. Ceram. Soc.* **92** (2009) 850.
9. K Mitchell, J Park, A Resnic, H Horner, E B Farfan, *Appl. Sci.* **10** (2020) 1860.
10. S Sheykhi, M Payami, M R Basaadat, "Thermal Conductivity of UO2 with Considering Hubbard Approximation and Solving Photon-Boltzmann Transport Equation", Presented in the 5th computational physics conference, Iran, Qazvin, 1400. (Persion)
11. S Sheykhi, M Payami, M R Basaadat, "Calculation of Lattice Thermal Conductivity of UO2+0.25 by Solving Phonon Boltzmann Equation" , Presented in the ICNST, Iran, Tehran, 1400.
12. S Sheykhi, M Payami, M R Basaadat, "Study of Thermal Conductivity of $UO_{2-0.25}$ by Solving Phonon Boltzmann Equation" , Presented in the annual physics conference of Iran 1401, Zahedan (Persion).
13. W Neil Ashcroft, Solid State Physics, (Cambridge University Press), 1990.
14. M Omini, A Sparavigna, *Physica B: Condensed Matter* **212** (2) (1995) 101.
15. L Linsday, D A Broido, N Mingo, *Phys. Rev. B* **82** (2012) 161402.
16. W Li, L Linsday, D A Broido, D A Stewart, N Mingo, *Phys. Rev. B* **86** (2012) 174307.
17. N Mingo, D A Stewart, D A Broido, L Linsday, W Li, Ab initio thermal transport, *in Length-Scale Dependent Phonon Interactions* (Springer, 2014) 137.
18. M Idiri, T Le Bihan, S Heathman, J Rebizant, *Physical Review B* **70** (1) (2004) 014113.
19. S Sheykhi, M Payami, *IJPR* **20** (1) (1399) 65. (Persion)
20. S Sheykhi, M Payami, *Iran J Sci Technol Trans* **44** (2020) 1585.
21. S Sheykhi, M Payami, *Physica C: Superconductivity and its Applications* **549** (2018) 93.
22. J D Gale, A L Rohl, *Mol. Simul*. **29** (2003) 291**.**
23. T Tadano, Y Goha, and S Tsuneyuki, *J. Phys.: Condens. Matter* **26** (2014) 225402.
24. J B Conway, R M Fincel, and R A Hein, *Trans. Am. Nucl. Soc.* **6** (1963) 1553.
25. C Ronchi, M Sheindlin, M Musella and G J Hyland, *J. App. Phys.* **85** (1999) 776.
26. J L Bates, C E McNeilly, J J Rasmussen, *Matter.Sci. Res*. **5** (1971) 11.
27. T Godfrey, W Fulkerson, T Kollie, J Moore, D McElroy, *J. of the American Ceramic Society* **48** (6) (1965) 297.