



**TiC, ZrC VE SiC BİLEŞİKLERİNİN MEKANİK, TERMODİNAMİK VE  
NÖTRONİK ÖZELLİKLERİNİN TEORİK OLARAK İNCELENMESİ**

**Sabahattin AKBAŞ**

**DOKTORA TEZİ  
FİZİK ANA BİLİM DALI**

**GAZİ ÜNİVERSİTESİ  
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**OCAK 2020**

Sabahattin AKBAŞ tarafından hazırlanan “TiC, ZrC VE SiC BİLEŞİKLERİNİN MEKANİK, TERMODİNAMİK VE NÖTRONİK ÖZELLİKLERİNİN TEORİK OLARAK İNCELENMESİ” adlı tez çalışması aşağıdaki jüri tarafından OY BİRLİĞİ ile Gazi Üniversitesi Fizik Ana Bilim Dalında DOKTORA TEZİ olarak kabul edilmiştir.

**Danışman:** Prof. Dr. Mustafa Kemal ÖZTÜRK

Fizik Ana Bilim Dalı, Gazi Üniversitesi

Bu tezin, kapsam ve kalite olarak Doktora Tezi olduğunu onaylıyorum. ....

**Başkan:** Prof. Dr. Semran SAĞLAM

Fizik Ana Bilim Dalı, Gazi Üniversitesi

Bu tezin, kapsam ve kalite olarak Doktora Tezi olduğunu onaylıyorum. ....

**Üye:** Prof. Dr. Hamit ALYAR

Fizik Ana Bilim Dalı, Çankırı Karatekin Üniversitesi

Bu tezin, kapsam ve kalite olarak Doktora Tezi olduğunu onaylıyorum. ....

**Üye:** Doç. Dr. Saime Şebnem AYDIN

Fizik Ana Bilim Dalı, Gazi Üniversitesi

Bu tezin, kapsam ve kalite olarak Doktora Tezi olduğunu onaylıyorum. ....

**Üye:** Doç. Dr. Tevfik Raci SERTBAKAN

Fizik Ana Bilim Dalı, Kırşehir Ahi Evran Üniversitesi

Bu tezin, kapsam ve kalite olarak Doktora Tezi olduğunu onaylıyorum. ....

Tez Savunma Tarihi: 31/01/2020

Jüri tarafından kabul edilen bu tezin Doktora Tezi olması için gerekli şartları yerine getirdiğini onaylıyorum.

.....

Prof. Dr. Sena YAŞYERLİ

Fen Bilimleri Enstitüsü Müdürü

## ETİK BEYAN

Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Tez Yazım Kurallarına uygun olarak hazırladığım bu tez çalışmada;

- Tez içinde sunduğum verileri, bilgileri ve dokümanları akademik ve etik kurallar çerçevesinde elde ettiğimi,
  - Tüm bilgi, belge, değerlendirme ve sonuçları bilimsel etik ve ahlak kurallarına uygun olarak sunduğumu,
  - Tez çalışmada yararlandığım eserlerin tümüne uygun atıfta bulunarak kaynak gösterdiğimi,
  - Kullanılan verilerde herhangi bir değişiklik yapmadığımı,
  - Bu tezde sunduğum çalışmanın özgün olduğunu,
- bildirir, aksi bir durumda aleyhime doğabilecek tüm hak kayıplarını kabullendiğimi beyan ederim.

Sabahattin AKBAŞ

31/01/2020



TiC, ZrC VE SiC BİLEŞİKLERİNİN MEKANİK, TERMODİNAMİK VE NÖTRONİK  
ÖZELLİKLERİNİN TEORİK OLARAK İNCELENMESİ

(Doktora Tezi)

Sabahattin AKBAŞ

GAZİ ÜNİVERSİTESİ  
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

Ocak 2020

ÖZET

Bu çalışmada kübik yapılı 3C-SiC, TiC, ZrC karbür bileşiklerin mekanik, termodinamik ve nötronik özellikleri incelendi. Karbür bileşiklerin mekanik ve termodinamik özellikleri Genelleştirilmiş Gradient Yaklaşımı (GGA) ve norm-korunumlu pseudopotansiyel kullanarak yoğunluk fonksiyoneli teorisine (DFT) dayanan ab-initio metoduyla hesaplandı. Diğer taraftan, karbür bileşiklerin nötronik özellikleri farklı koşullar ve yüksek sıcaklıklarda nötron transport teorisine dayanan metot ile hesaplandı. Özellikle, incelenen karbür bileşiklerin bağ yapıları, örgü parametreleri, elastik sabitler, elastik modüller (Bulk, Young, Shear), Poisson oranı, sertlik, Debye sıcaklığı ve sıcaklık dağılımı, ısı kapasitesi, entropi, entalpi, serbest enerji dağılımları, nötron yakalama tesir kesiti, nötron akısı, yanma analizi, nötron çoğaltma faktörü gibi temel fiziksel parametreler hesaplanıp sonuçlar tartışıldı. Ayrıca fonon durum yoğunlukları hesaplandı. Elde edilen sonuçlar teorik ve deneysel sonuçlar ile karşılaştırıldı. Hesaplamalarda kullanılan yöntemlerin bileşiklerin fiziksel özelliklerini belirlemede doğru sonuçlar verdiği görüldü.

Bilim Kodu : 20203  
Anahtar Kelimeler : Karbür bileşikler, TiC, ZrC, SiC, Mekanik, Termodinamik,  
Nötronik, DFT, Ab- initio  
Sayfa Adedi : 94  
Tez Yöneticisi : Prof. Dr. Mustafa Kemal ÖZTÜRK

THEORETICAL INVESTIGATION ON THE MECHANICAL, THERMODYNAMICAL  
AND NEUTRONICS PROPERTIES OF TiC, ZrC AND SiC COMPOUNDS

(Ph.D.Thesis)

Sabahattin AKBAŞ

GAZİ UNIVERSITY

GRADUATE SCHOOL OF NATURAL AND APPLIED SCIENCES

January 2020

ABSTRACT

In this study, mechanical, thermodynamic and neutronic properties of cubic 3C-SiC, TiC, ZrC carbide compounds were investigated. The mechanical and thermodynamic properties of carbide compounds were calculated using Generalized Gradient Approach (GGA) and non-conserving pseudopotential via density functional theory (DFT) based on ab-initio method. On the other hand, the neutronic properties of carbide compounds were calculated with the method based on neutron transport theory at different conditions and high temperatures. Particularly, the fundamental physical properties of the investigated carbide compounds such as, bonding structures, lattice parameters, elastic constants, elastic modules (Bulk, Young, Shear), Poisson ratio, hardness, Debye temperature and temperature distribution, heat capacity, entropy, enthalpy, free energy distributions, neutron capture cross-section, neutron flux, neutron effective multiplication factor and burnup were calculated and the results were discussed. Phonon state densities were also calculated. The results were compared with the theoretical and experimental results. It was seen that the methods used in the calculations gave accurate results in determining the physical properties of the compounds.

Science Code : 20203

KeyWords : Carbide compounds, TiC, ZrC, SiC, Mechanical, Thermodynamical,  
Neutronics, DFT, Ab-initio

Page Number : 94

Supervisor : Prof. Dr. Mustafa Kemal ÖZTÜRK

## TEŞEKKÜR

Tez çalışmamın hazırlık çalışmalarında değerli bilgi ve desteklerini esirgemeyen ve çalışmamın her aşamasında beni yönlendiren tez danışman hocam Prof. Dr. Mustafa Kemal ÖZTÜRK'e teşekkürü borç bilirim.

Çalışmalarımın hesaplamalarında benden bilgi ve yardımlarını esirgemeyen Prof. Dr. Guy MARLEAU; çalışmalarımın daha verimli bir şekilde tamamlamamı sağlayan Prof. Dr. Semran SAĞLAM, Prof. Dr. Hamit ALYAR, Doç. Dr. Saime Şebnem AYDIN ve Doç. Dr. Tevfik Raci SERTBAKAN'a teşekkür ederim.

Çalışmalarım sırasında her zaman yanımda olan ve daima yardımlarını, desteğini ve dualarını eksik etmeyen eşime çok teşekkür ediyorum.



## İÇİNDEKİLER

	<b>Sayfa</b>
ÖZET .....	iv
ABSTRACT.....	v
TEŞEKKÜR.....	vi
İÇİNDEKİLER .....	vii
ÇİZELGELERİN LİSTESİ.....	x
ŞEKİLLERİN LİSTESİ .....	xi
SİMGELER VE KISALTMALAR.....	xii
1. GİRİŞ.....	1
2. YOĞUNLUK FONKSİYONELİ TEORİSİ .....	5
2.1. Çok Cisim Problemi .....	5
2.2. Born-Oppenheimer Yaklaşımı.....	6
2.3. Hartree Yaklaşımı.....	7
2.4. Hartree-Fock Yaklaşımı .....	8
2.5. Yoğunluk Fonksiyoneli Yaklaşımı.....	9
2.5.1. Thomas-Fermi teorisi .....	10
2.5.2. Hohenberg-Kohn teoremleri .....	11
2.5.3. Kohn-Sham eşitlikleri .....	13
2.5.4. Yerel yoğunluk yaklaşımı (LDA) .....	15
2.5.5. Genelleştirilmiş gradyent yaklaşımı (GGA) .....	16
2.5.6. Pseudopotansiyel metot.....	17
2.6. CASTEP Programı .....	17
3. NÖTRON TRANSPORT TEORİSİ .....	21
3.1. Nötron Transport Denklemi .....	21

	<b>Sayfa</b>
3.2. Nötron Difüzyon Denklemi .....	23
3.3. DRAGON Programı .....	28
<b>4. TEMEL ÖZELLİKLER</b> .....	<b>35</b>
4.1. Mekanik Özellikler .....	35
4.1.1. Elastik sabitler .....	35
4.1.2. Elastik modüller .....	38
4.1.3. Poisson oranı .....	38
4.1.4. Sertlik .....	39
4.1.5. Mekanik özelliklerin hesaplanması .....	39
4.2. Termodinamik Özellikler .....	40
4.2.1. Debye sıcaklığı .....	40
4.2.2. Isı kapasitesi, entropi, entalpi, serbest enerji.....	41
4.2.3. Termodinamik özelliklerinin hesaplanması .....	42
4.3. Nötronik Özellikler.....	44
4.3.1. Nötron tesir kesiti .....	44
4.3.2. Nötron çoğaltma faktörü .....	47
4.3.3. Nötron akısı .....	48
4.3.4. Fisyon .....	50
4.3.5. Nötronik özelliklerin hesaplanması.....	53
<b>5. BULGULAR VE TARTIŞMA</b> .....	<b>55</b>
5.1. Kübik Yapılı Karbür Bileşiklerin Mekanik Özellikleri.....	56
5.2. Kübik Yapılı Karbür Bileşiklerin Termodinamik Özellikleri .....	61
5.3. Karbür Yakıt Zarf Malzemelerin Nötronik Özellikleri .....	69
<b>6. SONUÇLAR VE ÖNERİLER</b> .....	<b>79</b>

**Sayfa**

KAYNAKLAR ..... 83

ÖZGEÇMİŞ ..... 91



## ÇİZELGELERİN LİSTESİ

<b>Çizelge</b>	<b>Sayfa</b>
Çizelge 4.1. $c_{\alpha\beta}$ - $c_{ijkl}$ tensörlerinin indisleri arasındaki Voigt bağıntıları .....	37
Çizelge 4.2. Nükleer reaktörlerdeki önemli nükleer reaksiyonların sınıflandırılması .....	45
Çizelge 4.3. Son nötronun kritik enerjisinin ve bağlanma enerjisi .....	51
Çizelge 4.4. PWR yakıt demeti değerleri.....	53
Çizelge 5.1. Karbür bileşiklerin DFT ile elde edilen kristal yapı, bağ uzunlukları .....	57
Çizelge 5.2. Örgü sabiti (a), elastik sabitler (C <sub>ij</sub> ), Cauchy basıncı (C.P.) .....	58
Çizelge 5.3. Shear modülü (G), Bulk modülü (B) ve Young modülü (E), G/B oranı, ....	60
Çizelge 5.4. Karbür bileşiklerin poisson oranı ve sertlik değerleri.....	61
Çizelge 5.5. Karbür bileşiklerin enine, boyuna, ortalama dalga hızları ve Debye sıcaklığı.....	61
Çizelge 5.6. Yakıt zarf malzemelerinin bileşenlerinin yoğunluk değerleri .....	70
Çizelge 5.7. Yakıt zarf malzemelerin fiziksel özellikleri.....	71
Çizelge 5.8. Bazı yakıt zarf malzemeleri oluşturan elementlerin nötron soğurma .....	72
Çizelge 5.9. Yakıt demetlerini oluşturan yakıt hücrelerinin konfigürasyonu .....	72

## ŞEKİLLERİN LİSTESİ

<b>Şekil</b>	<b>Sayfa</b>
Şekil 3.1. Nötron difüzyon hesaplamaları için enerji grupları .....	27
Şekil 3.2. Yakıt hücresi, yakıt demeti ve tam kor modellemesi .....	28
Şekil 4.1. Fisil çekirdeklerin mikroskobik tesir kesitlerinin değişim .....	46
Şekil 4.2. $^{233}\text{U}$ , $^{235}\text{U}$ , $^{239}\text{Pu}$ ve $^{241}\text{Pu}$ çekirdeklerin fisyonundaki ürünlerin kütle dağılımı .....	51
Şekil 4.3. Bazı fisil çekirdeklerin fisyon başına yayımlanan ortalama nötron sayısı .....	52
Şekil 4.4. Yakıt demeti 1/8 simetrik geometrisi .....	54
Şekil 5.1. DFT ile elde edilen kübik TiC, ZrC ve SiC bileşiklerinin kristal yapıları .....	56
Şekil 5.2. Karbür malzemelerin erime sıcaklığı ile elastik sabiti arasındaki ilişki .....	58
Şekil 5.3. SiC, TiC ve ZrC bileşiklerin Debye sıcaklık dağılım eğrileri .....	63
Şekil 5.4. SiC bileşiğinin fonon durum yoğunluğu frekansa bağlı değişimi .....	63
Şekil 5.5. TiC bileşiğinin fonon durum yoğunluğu frekansa bağlı değişimi .....	64
Şekil 5.6. ZrC bileşiğinin fonon durum yoğunluğu frekansa bağlı değişimi .....	64
Şekil 5.7. ZrC bileşiğin sıcaklığa bağlı $C_v$ değişim eğrisinin referans değerler ile karşılaştırılması .....	65
Şekil 5.8. TiC bileşiğin sıcaklığa bağlı $C_v$ değişim eğrisinin referans değerler ile karşılaştırılması .....	66
Şekil 5.9. SiC, TiC ve ZrC bileşiklerin sıcaklığa bağlı ısı kapasitesi değişim eğrilerinin karşılaştırılması .....	66
Şekil 5.10. SiC, TiC ve ZrC bileşiklerin sıcaklığa bağlı serbest enerji değişim eğrileri .....	67
Şekil 5.11. SiC, TiC ve ZrC bileşiklerin sıcaklığa bağlı entropi değişim eğrileri .....	68
Şekil 5.12. SiC, TiC ve ZrC bileşiklerin sıcaklığa bağlı entalpi değişim eğrileri .....	68
Şekil 5.13. PWR tipi 17x17 yakıt demeti .....	69

<b>Şekil</b>	<b>Sayfa</b>
Şekil 5.14. SiC, TiC ve ZrC ile diğer yakıt zarf malzemelerinin varlığında yakalama tesir kesitinin nötron enerjisine göre değişimi.....	73
Şekil 5.15. Başlangıç durumunda çarpışma başına nötron akı spektrumu (t=0) .....	74
Şekil 5.16. Referans durumunda $k_{eff}$ -yakıt ömrü değerlerinin değişim eğrileri .....	75
Şekil 5.17. Yakıt yanma (burnup)'ın yakıt ömrüne göre değişimi .....	76
Şekil 5.18. Referans durumunda yakıt zarf malzemelerin $k_{eff}$ değişim eğrileri.....	76
Şekil 5.19. $c_2$ durumunda SiC, TiC, ZrC ve Zr-II malzemelerin $k_{eff}$ değişim eğrileri....	77
Şekil 5.20. $c_3$ durumunda SiC, TiC, ZrC ve Zr-II malzemelerin $k_{eff}$ değişim eğrileri....	78

## SİMGELER VE KISALTMALAR

Bu çalışmada kullanılmış bazı simgeler ve kısaltmalar, açıklamaları ile birlikte aşağıda sunulmuştur.

<b>Simgeler</b>	<b>Açıklamalar</b>
<b>a</b>	Örgü sabiti
<b>Å</b>	Angstrom
<b>B</b>	Bulk Modülü
<b>C</b>	Karbon
<b>Cr</b>	Krom
<b>C<sub>ij</sub></b>	Elastik sabiti
<b>C<sub>v</sub></b>	Sabit hacimde ısı kapasitesi
<b>E</b>	Young modülü
<b>E</b>	Kristalin sıcaklığa bağlı enerjisi
<b>E<sub>zp</sub></b>	Sıfır noktasındaki titreşim enerjisi
<b>Fe</b>	Demir
<b>G</b>	Shear modülü
<b>Ĥ</b>	Hamiltonyen işlemcisi
<b>H</b>	Entalpi
<b>Hf</b>	Hafniyum
<b>H<sub>v</sub></b>	Sertlik
<b>F</b>	Serbest enerji
<b>F-43m</b>	Yüzey merkezli kübik yapı
<b>h</b>	Planck sabiti
<b>k<sub>B</sub></b>	Boltzman sabiti
<b>k<sub>eff</sub></b>	Etkin çoğaltma faktörü
<b>M</b>	Moleküler ağırlığı
<b>Mn</b>	Manganez
<b>Mo</b>	Molibden
<b>n</b>	Moleküldeki atom sayısı
<b>N<sub>A</sub></b>	Avogadro sayısı
<b>Ni</b>	Nikel

**Simgeler****Açıklamalar**

$\rho(r)$	Parçacık durum yoğunluğu
<b>S</b>	Entropi
<b>Si</b>	Silisyum
<b>SiC</b>	Silisyum karbür
<b>Ti</b>	Titanyum
<b>TiC</b>	Titanyum karbür
$\nu$	Poisson oranı
$\nu_m$	Ortalama dalga hızı
$\nu_s$	Enine dalga hızı
$\nu_l$	Boyuna dalga hızı
$V_{iyon}(r)$	İyon potansiyeli
$V_H(r)$	Hartree potansiyeli
<b>W</b>	Tungsten
$Z_I$	Atom numarası
<b>Zr</b>	Zirkonyum
<b>ZrC</b>	Zirkonyum karbon
$\Sigma$	Makroskobik tesir kesiti
$\sigma$	Mikroskobik tesir kesiti
$\theta_D$	Debye sıcaklığı
$\phi$	Nötron akısı

**Kısaltmalar****Açıklamalar**

<b>CASTEP</b>	Cambridge Sequential Total Energy Package
<b>DFT</b>	Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi
<b>DOS</b>	Durum yoğunluğu
<b>GGA</b>	Genelleştirilmiş Gradyent Yaklaşımı
<b>LDA</b>	Yerel Yoğunluk Yaklaşımı
<b>PWR</b>	Basıncılı su reaktörü
<b>VRH</b>	Voight-Rusess-Hill yaklaşımı
<b>XC</b>	Değiş-Tokuş



## 1. GİRİŞ

Yeni nesil teknolojik sistemlerin tasarımında ve uygulamalarında kullanılan yüksek sıcaklığa dayanıklı malzemelerin geliştirilmesi ile bu malzemelere olan ilgi artmaktadır. Önemli fiziksel ve kimyasal özelliklerinin bilinmesi, bu malzemelerin mekanik, termodinamik, elektrik, elektronik, yarıiletken, optik, nükleer gibi birçok alanda kullanılmasına imkan sağlamaktadır. Yüksek sıcaklıklara ( $>1000^{\circ}\text{C}$ ) dayanıklı seramik yapıları karbür malzemeler, sahip oldukları yüksek sertlik, yüksek elastik modül, düşük sürtünme, yüksek erime sıcaklığı, yüksek termal ve elektrik iletkenliği, düşük nötron soğurma oranı, yüksek korozyon direnci ve aşınma gibi birçok fiziksel ve kimyasal özelliklerden dolayı teknolojik birçok alanda kullanılmaktadır [1-8]. Bu özelliklere sahip karbür bileşikler araştırma ve geliştirme konusunda ilgi çekmektedir. Titanyum karbür (TiC), zirkonyum karbür (ZrC), silisyum karbür (SiC) gibi bazı karbür bileşiklerin geliştirilmesi için son yıllarda önemli çalışmalar yapılmaktadır [9-14].

TiC, ZrC ve SiC karbür malzemelerin bazı özelliklerinin araştırılması kapsamında yapılan çalışmalar: elastik olmayan nötron saçılma ölçümleri yapılarak TiC ve ZrC malzemelerin fonon dağılımları [15]; TiC ve ZrC malzemelerin termal genleşme hesaplamaları [16]; tek eksenli deformasyon ve çubuk genişletme yaklaşımları kullanılarak SiC malzemesinin yapısal, titreşim, direnç, dayanıklılık hesaplamaları [17]; nokta kusurların etkisinde  $\beta$ -SiC bileşiğinin termal iletkenlik hesaplamaları [18]; TiC bileşiğinde genleşme-stres ilişkisi ve mikro-sertlik hesaplamaları [19]; düşük sıcaklıklarda TiC ve ZrC malzemelerin elastik hesaplamaları [20] farklı yaklaşımlar kullanılarak yapılmıştır. Malzemelerin mekanik ve termodinamik özelliklerini deneysel sonuçlar ile uyumlu hesaplamalar Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi (DFT)'deki ab-initio (ilk-prensip) yaklaşımı güçlü ve sürekli güncellenen bir hesaplama tekniğidir.

İlk olarak Thomas [21] ve Fermi [22] tarafından tanımlanan ve daha sonra Hohenberg-Kohn [23] ve Kohn-Sham [24] tarafından geliştirilen yoğunluk fonksiyoneli teorisi (DFT) kuantum mekaniksel hesaplamaların temelini oluşturmaktadır. DFT yaklaşımında, çok cisim dalga fonksiyonu yerine tek cisim dalga fonksiyonu kullanılarak hesaplamalar yapılmaktadır. Kuantum mekaniksel hesaplamalara dayanan bu yaklaşımlar ab-initio (ilk-prensip) yöntemler olarak tanımlanır. Bu yaklaşıma dayanan CASTEP, VASP, ABINIT,

SIESTA bilgisayar programları kristal yapıların geometrik optimizasyonu, yapısal mekanik özellikler, termodinamik özellikler, manyetik moment, fonon dağılımları, yük yoğunluğu, durum yoğunluğu gibi özelliklerin belirlenmesinde aktif olarak kullanılmaktadır. İncelenen karbür malzemelerin mekanik özellikleri ve yüksek sıcaklıklardaki termodinamik özelliklerinin hesaplanmasında CASTEP (Cambridge Sequential Total Energy Package) [25] paket programı kullanıldı. Karbür malzemelerin nötronik özelliklerinin incelenmesinde ise nötron transport teorisine dayanan nötron difüzyon yaklaşımı kullanıldı.

Nükleer fisyon reaktörler, atom çekirdeğinin bir nötron ile etkileşime geçip daha hafif çekirdeklere bölünmesi sonucu oluşan enerjinin yer aldığı kontrollü nükleer reaksiyonlar ( $^{235}\text{U}$  ve  $^{239}\text{Pu}$ ) temeline dayanır. Bu reaksiyonlardaki fisyon atomları,  $\alpha$  ve  $\beta$  parçacıkları ile nötronların yanısıra  $\gamma$  ışınlarını yayan radyoaktif materyaller de ( $^{110}\text{Ag}$ ,  $^{134}\text{Cs}$ ,  $^{137}\text{Cs}$ ,  $^{90}\text{Sr}$ ,  $^{107}\text{Pa}$ , gibi) üretirler [26]. Bu parçacıklar insanlar için öldürücü etkiler oluşturabilir. Bundan dolayı nükleer yakıt zarfı (kaplama) olarak kullanılan malzemeler, bu radyoaktif malzemelerin yakıt çevresindeki soğutma ve kontrol amaçlı kullanılan soğutucu/moderatör ile etkileşmesini izole eder. Nükleer reaktörlerde, yakıt ve zarf malzemelerin nötronik analizleri için gerekli olan nötron tesir kesiti, difüzyon katsayısı, saçılma matrisleri, yanma analizleri gibi hesaplamalar MCNP, SERPENT, KENO, DRAGON, HELIOS, CASMO, NEWT ve MPACT bilgisayar simülasyonları ile yapılmaktadır. İncelenen karbür malzemeler ve diğer yakıt zarf malzemelerin nötronik davranışı DRAGON programı ile elde edildi.

Hafif sulu reaktörlerin çoğunda yakıt zarf malzemesi olarak zirkonyum katkı (%98-99) alaşımlar son 50-60 yıldır yaygın olarak kullanılmaktadır. Zirkonyum katkı alaşımların en önemli dezavantajlarından biri yüksek sıcaklıklarda (>1200C) su ile reaksiyonunda hızlı bir şekilde oksitlenmesidir [27]. Artan oksitlenme oranı sonucunda, Japonya'daki Fukushima Daiichi gibi şiddetli nükleer kazalara neden olabilen hidrojen üretimi ve patlamalar meydana gelebilir. Fukushima Daiichi şiddetli nükleer santral kazasında Zr-temelli alaşımların yüksek sıcaklıkta oksitlenmenin artması ile hidrojen üretimi ve patlamalar meydana gelmiştir [28]. Fukushima Daiichi kazasından sonra nükleer reaktör teknolojisindeki yapısal materyal ve yakıt-zarf sistemleri gibi uygulamalarda kullanılan alternatif yakıt zarf malzemelerin geliştirilmesi önemli bir çalışma alanını oluşturmuştur. Şiddetli kazalar ağır koşullar içerdiğinden, yakıt-zarf sistemleri için birçok kriter

tanımlanmaktadır. Yüksek erime noktası, yüksek kırılma dayanıklılığı, çoğaltma faktörü, tesir kesitleri (düşük yakalama-soğurma), yüksek iletkenlik ve kararlılık gibi nötronik, mekanik ve termodinamik özellikler bu kriterlerden bazılarını oluşturmaktadır. Yeni alternatif yakıt-zarf sistemleri, yüksek sıcaklıklarda iyi bir yapısal bütünlük sergilerler. Zirkonyum-II dışında paslanmaz çeliklerin (310SS ve 304SS), ferritik alaşımların (FeCrAl ve APMT™), karbür yapıların (TiC, ZrC ve SiC), nükleer yakıt zarf malzemesi olarak kullanılması için geliştirilmesine ihtiyaç vardır [29-31].

TiC, ZrC ve SiC karbür yapıları bileşikler, yakıt zarf malzemesi olarak geliştirilme aşamasındadır. Bu bileşikler, reaktör ve enerji sistemlerinde yapısal malzeme olarak uygulanmaktadır. Son yıllarda bu malzemelerin birer yakıt zarf malzemesi olarak kullanılması için çalışma ve testler yapılmaktadır [26, 32, 33]. Karbür malzemelerin, yüksek sıcaklıktaki reaktör yakıtları için yakıt zarf malzemesi [4, 34], füzyon reaktörlerin yapısal bileşenlerinde, yüksek sıcaklıktaki gaz soğutmalı reaktörlerde radyasyona dayanıklı yapısal malzeme [35] olarak kullanılması amaçlanmaktadır. Özellikle teorik olarak geliştirme aşamasında olan yeni nesil reaktör türlerinde yakıt zarfı ve reaktör kor bileşeni olarak uygulanması düşünülmektedir [26, 35].

Yüksek sıcaklıklara dayanıklı karbür malzemeler, yeni geliştirilen ve zirkonyum katkılı zarf malzemelerin yerine kullanılabilecek önemli birer alternatif yakıt zarf malzemeleridir. Her ne kadar farklı reaktör türü için SiC kompozit şeklinde yakıt zarf malzemesinin nötronik davranışını inceleyen birkaç çalışma [30, 31] olsa da alternatif yakıt zarf malzemesi olarak TiC ve ZrC karbür malzemelerin nötronik davranışı ile ilgili mevcut çok fazla veri olmayıp bu çalışmada elde edilen sonuçlar referans niteliğindedir. Son yıllarda geliştirilen TiC, ZrC ve SiC karbür malzemelerin, sahip oldukları önemli özelliklerden dolayı mevcut ve geliştirilmekte olan yeni nesil nükleer reaktör teknolojisinde alternatif yakıt zarf malzemesi olarak kullanılması amaçlanmaktadır.

Bu çalışmanın amacı, kübik yapıları TiC, ZrC ve SiC karbür bileşiklerinin mekanik, termodinamik ve nötronik özelliklerini incelemektir. CASTEP programı kullanılarak kübik yapıları TiC, ZrC ve SiC bileşikler elde edilerek mekanik ve termodinamik özellikleri teorik olarak incelendi. Bu bileşiklerin mekanik özellikleri; örgü parametreleri, elastik sabitleri, elastik modülleri (Bulk modülü, Young modülü, Shear modülü), sertlik ve poisson oranı hesaplandı. Kübik yapıları karbür bileşiklerinin termodinamik özellikleri sabit basınç ve sabit

hacimde 0-2500 K aralığında incelendi. Bu kapsamda, Debye sıcaklığı ve dağılımı, ısı kapasitesi, entalpi, entropi ve serbest enerji dağılımları elde edildi. Alternatif yakıt zarf malzemesi olarak kullanılması amaçlanan TiC, ZrC ve SiC malzemelerin nötronik davranışını incelemek için bir PWR tipi 17x17 yakıt demeti modellenmesi yapıldı. Yakıt demetinin modellenmesi için DRAGON nötronik programı kullanıldı. Nötron etkin çoğaltma faktörü, nötron yakalama tesir kesitleri, nötron akısı, yanma analizlerinin zaman ve enerjiye bağlı değişimleri elde edildi. TiC, ZrC ve SiC karbür malzemeler için elde edilen mekanik, termodinamik ve nötronik sonuçlar mevcut teorik ve deneysel sonuçlar ile karşılaştırıldı.

Bu tez çalışmasının 2. Bölümünde Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi ve dayandığı temel yaklaşımlar ile CASTEP programı hakkında bilgi verildi. 3. Bölümünde Nötron Transport Teorisi ile Nötron Difüzyon Teorisi ve hesaplamalarda kullanılan DRAGON programı açıklandı. 4. Bölümünde temel mekanik, termodinamik ve nötronik özellikler ile hesaplama hakkında detaylı bilgi verildi. 5. Bölümde kullanılan malzeme ve metotlar tartışıldı. 6. Bölümde ise elde edilen sonuçlar ve öneriler verildi.

## 2. YOĞUNLUK FONKSİYONELİ TEORİSİ

Günümüzde atom, molekül ve katı yapıların taban durumunu belirlemek için kullanılan en yaygın yaklaşım Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi (DFT)'dir. Bu yaklaşımda, çoklu elektron etkileşim sistemini tanımlamak için çok-elektronlu dalga fonksiyonu yerine tek-elektron yoğunluğu  $\rho(r)$  tanımlanmıştır. Çoklu elektron etkileşim sisteminde, elektron yük yoğunluğu  $\rho(r)$  taban durum özelliklerini belirlemek için tek değişken olarak kabul edilmektedir. Bu yaklaşım ilk olarak Thomas [21] ve Fermi [22] tarafından tanımlanmıştır. Daha sonra geliştirilen Hohenberg-Kohn [23] ve Kohn-Sham [24] teoremleri yoğunluk fonksiyoneli teorisi (DFT)'nin temellerini oluşturmuştur.

### 2.1. Çok Cisim Problemi

Bir atom veya molekül elektronlar ve çekirdeklerden oluşmaktadır. Bu elektron ve çekirdekler aralarında veya birbirleriyle etkileşimli çoklu bir sistem oluştururlar. Bu sistemin toplam enerjisini hesaplamak için Schrödinger denklemi kullanılır. Bir sistemi tanımlamak için Schrödinger denklemi,

$$\hat{H}\Psi = E\Psi \quad (2.1)$$

eşitliği ile ifade edilir.  $\Psi$  Dalga fonksiyonu,  $E$  sistemin toplam enerjisi,  $H$  ise Hamiltonyen işlemcisidir.  $N_e$  tane elektron ve  $N_i$  tane çekirdeğin oluşturduğu sistemin  $H$  işlemcisi;

$$\hat{H} = -\sum_{i=1}^{N_e} \frac{1}{2} \nabla_i^2 - \sum_{I=1}^{N_i} \frac{1}{2M_I} \nabla_I^2 - \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{I=1}^{N_i} \frac{Z_I}{|\vec{r}_i - \vec{R}_I|} + \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{j>i}^{N_e} \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} + \sum_{I=1}^{N_i} \sum_{J>I}^{N_i} \frac{Z_I Z_J}{|\vec{R}_I - \vec{R}_J|} \quad (2.2)$$

şeklinde verilir. Burada  $M_I$  kütle,  $Z_I$  çekirdeklerin atom numarası  $r_i$  ve  $R_I$  sırasıyla elektron ve çekirdeğin konum koordinatlarıdır. Birinci ile ikinci terimler sırasıyla elektronun ve çekirdeğin kinetik enerjisidir. Üçüncü terim; çekirdek ve elektronlar arasındaki Coulomb çekim alanı, dördüncü terim elektronlar arasındaki Coulomb itme etkileşimi, beşinci terim çekirdekler arasında meydana gelen Coulomb itme etkileşimidir.  $N_e$  tane elektron ve  $N_i$  tane çekirdeğin oluşturduğu bir sistemin Schrödinger denkleminin çözümü taban durum özelliklerini belirler.

$$H\Psi\left(\{\vec{r}_i\},\{\vec{R}_I\}\right)=E\Psi\left(\{\vec{r}_i\},\{\vec{R}_I\}\right) \quad (2.3)$$

Burada  $\Psi\left(\{\vec{r}_i\},\{\vec{R}_I\}\right)$ , çok cisimli sistemin dalga fonksiyonu,  $E$  ise sistemin enerjisidir. Eş. 2.2 ile verilen denklemin çözümünü kolaylaştırmak için farklı yaklaşımlar geliştirilmiştir. En çok kullanılan yaklaşımlardan biri de Born-Oppenheimer yaklaşımıdır. Bu yaklaşımda, elektron ve çekirdeklerin hareketi ayrı ayrı incelenir.

## 2.2. Born-Oppenheimer Yaklaşımı

Birden fazla elektron ve çekirdeğin oluşturduğu çok parçacıklı sistemin Schrödinger denklemini çözmek için geliştirilen yaklaşımlardan biri de Born-Oppenheimer yaklaşımıdır [36]. Bu yaklaşıma göre, elektron kütlesi çekirdek kütlesinden çok küçük olduğundan çekirdeğin hareketi ihmal edilebilecek kadar yavaş olduğu kabul edilir. Çekirdeğin sabit ve hareketsiz olduğu sistemde elektronlar hareket halindedir. Bu yaklaşımda çekirdek hareketsiz olarak kabul edildiğinden, Eş. 2.2'de çekirdeğin kinetik enerjisini ifade eden ikinci terim ihmal edilebilir. Ayrıca, çekirdekler arasındaki Coulomb itme etkileşmesi sabit düşünülebilir. Bu durumda Eş. 2.2,

$$H_e = -\sum_{i=1}^{N_e} \frac{1}{2} \nabla_i^2 - \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{I=1}^{N_i} \frac{Z_I}{|\vec{r}_i - \vec{R}_I|} + \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{j>1}^{N_i} \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \quad (2.4)$$

ifadesine indirgenir. Burada Hamilton denklemini,  $N_e$  tane elektronun  $N_i$  tane çekirdeğin alanında hareketini tanımlar. Sistemdeki elektronların hareket ve enerjisi sırasıyla;

$$\Psi_e = \Psi_e(r, R) \quad (2.5)$$

$$\varepsilon_e = \varepsilon_e(R) \quad (2.6)$$

eşitlikleri ile ifade edilir. Çekirdeklerin itme ve toplam enerji ise

$$\varepsilon_{top}(\mathbf{R}) = \varepsilon_e(\mathbf{R}) + \sum_{\alpha=1}^{N_i} \sum_{\beta>\alpha}^{N_i} \frac{Z_\alpha Z_\beta}{|\mathbf{R}_\alpha - \mathbf{R}_\beta|} \quad (2.7)$$

denklemleri ile verilir. Bu ifade potansiyel enerji yüzeyini oluşturur. Bu yaklaşım her zaman geçerli olmayıp sistemi oluşturan elektron ve çekirdeğin hareketinin ayrı ayrı düşünülmediği durumda geçersizdir. Yani bu yaklaşımda elektron ve çekirdeğin hareketi ayrı ayrı düşünülmelidir.

### 2.3. Hartree Yaklaşımı

Bir katıyı oluşturan sistemdeki elektronların kuantum mekaniksel davranışını tanımlamak için çok-elektronlu dalga fonksiyonunu hesaplamak gerekir. Çözüm zamandan bağımsız Schrödinger denkleminde elde edilir. Sistem potansiyeli elektron davranışıyla belirlenir. Sistemdeki yakın elektronlar uzak olan elektronlara göre daha güçlü etkileşim içindedir. Bu durumda sistemdeki tüm elektronların etkisi olduğu Schrödinger denklemini çözmek için çok sayıda diferansiyel denklem çözmek gerekir. Çözüm için ilk adım Hartree tarafından atılmıştır. Sistemde N tane elektron varsa N tane de denklem vardır. Toplam elektron dalga fonksiyonu tek-elektron dalga fonksiyonlarının çarpımı şeklinde yazılır. Bu durumda dalga fonksiyonu;

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \prod \quad (2.8)$$

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \prod_{i=1}^N \Psi_i(r_i) \quad (2.9)$$

ile verilir. Burada  $i$ . elektrona etki eden potansiyel

$$V_i(\vec{r}) = V_{iyon}(\vec{r}) + V_H(\vec{r}) \quad (2.10)$$

ile ifade edilir. Bu denklemde  $V_{iyon}(\vec{r})$  iyon potansiyeli,  $V_H(\vec{r})$  ise Hartree potansiyelidir. Eş.

2.8'i kullanarak  $V_{iyon}$  ve  $V_H$  potansiyelleri,

$$V_{iyon}(\vec{r}) = -\sum_{\alpha} \frac{Z_{\alpha}}{|\vec{r} - \vec{r}_{\alpha}|}, V_H(\vec{r}) = -\int d\vec{r}' \frac{r(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \quad (2.11)$$

şeklinde elde edilir. i. elektrona etkiyen Hartree potansiyelindeki yoğunluk terimi,

$$\rho(\vec{r}') = \sum_{i \neq j} |\Psi_j(\vec{r}')|^2 \quad (2.12)$$

ile verilir.

$$\hat{H} = -\sum_{i=1}^N \frac{1}{2} \nabla_i^2 + V_i(\vec{r}) \quad (2.13)$$

şeklinde ifade edilen Hamiltonyen'in Eş. 2.9 ile alınan beklenen değerini minimum yapan tek-elektron dalga fonksiyonların Hartree denklemi,

$$\left[ -\frac{1}{2} \nabla^2 + V_{iyon}(\vec{r}) \right] \Psi_i(\vec{r}) + \sum_{j \neq i} \int d\vec{r}' \frac{|\Psi_j(\vec{r}')|^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \Psi_i(\vec{r}) = \varepsilon_i \Psi_i(\vec{r}) \quad (2.14)$$

ile verilir. Hartree denklemi ile Eş. 2.9 birlikte orbitaller için öz uyumlu çözüldüğünde sistemin dalga fonksiyonu elde edilmiş olacaktır. Hartree yaklaşımında değiş-tokuş korelasyon etkileri hesaba katılmadığı için pek tercih edilmemektedir.

#### 2.4. Hartree-Fock Yaklaşımı

Hartree-Fock yaklaşımı [37], birbirleriyle ve çekirdekler ile etkileşmeyen elektron orbitallerine karşılık gelen dalga fonksiyonlarını tanımlamak için kullanılan bir yaklaşımdır. Sistemi tanımlamak için kullanılacak dalga fonksiyonu asimetrik olacak şekilde seçilir. Sistemin dalga fonksiyonu Pauli dışarlama ilkesine göre ve iki elektronun yer değiştirmesi düşünülerek,

$$\Psi(\dots, \vec{r}_i, \dots, \vec{r}_j, \dots) = -\Psi(\dots, \vec{r}_j, \dots, \vec{r}_i, \dots) \quad (2.15)$$



asimetrik olmalıdır. Slater determinanı kullanılarak dalga fonksiyonu daha basit bir şekilde ifade edilebilir.

$$D(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \begin{vmatrix} \Psi_1(\vec{r}_1) & \Psi_1(\vec{r}_2) & \dots & \Psi_1(\vec{r}_N) \\ \Psi_2(\vec{r}_1) & \Psi_2(\vec{r}_2) & \dots & \Psi_2(\vec{r}_N) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \Psi_N(\vec{r}_1) & \Psi_N(\vec{r}_2) & \dots & \Psi_N(\vec{r}_N) \end{vmatrix} \quad (2.16)$$

Hartree denklemine benzer olarak tek elektron dalga fonksiyonu için enerji beklenen deęerini minimum yapan Hartree-Fock denklemi

$$\left[ -\frac{1}{2} \nabla^2 + V_{iyon}(\vec{r}) \right] \Psi_i(\vec{r}) + \sum_j \int d\vec{r}' \frac{|\Psi_j(\vec{r}')|^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \Psi_i(\vec{r}) - \sum_j \delta_{\sigma_i, \sigma_j} \int d\vec{r}' \frac{\Psi_j^*(\vec{r}') \Psi_i(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \Psi_j(\vec{r}) = \varepsilon_i \Psi_i(\vec{r}) \quad (2.17)$$

ile verilir. Burada son terim deęiş-tokuş terimidir ve  $\sigma_i$  ve  $\sigma_j$  spinleri aynı olduęunda sıfırdan farklıdır.

Bu yaklaşımda, tek elektron dalga fonksiyonunu içeren Slater determinantının kullanılması, toplam enerjiyi minimize eden bir deneme dalga fonksiyonu kullanılması açısından avantajlıdır. Fakat Hartree-Fock yaklaşımı, elektronlar arasındaki ilişki dikkate alınmadığından, kullanılan denklemin karmaşık ve çözümü çok zor olması nedeniyle toplam enerji hesaplamalarında yetersiz kalır.

## 2.5. Yoęunluk Fonksiyoneli Yaklaşımı

Bir malzemeyi oluşturan electron-çekirdek sisteminin kuantum mekaniksel davranışı, sistemin çoklu-çekirdek, çoklu-elektron dalga fonksiyonunu hesaplanmasını gerektirir. Schrödinger denklemini yaklaşık olarak çözmek için Born-Oppenheimer, Hartree, Hartree-Fock gibi yaklaşımlar geliştirilmiştir. Bu yaklaşımlar genel olarak çok-cisimli dalga fonksiyonuna dayanmaktadır. Eđer dalga fonksiyonu bilinirse sistemin enerjisi ve sistem ile ilgili dięer özellikler belirlenebilir. Fakat dalga fonksiyonu  $3N$  uzaysal deęişkenlere ve

spin deęişkenlerine baęlı karmaşık bir yapıya sahiptir. Burada N sistemdeki elektronların sayısıdır. Bundan dolayı, dalga fonksiyonuna baęlı çözümlerde sistem boyutlarını sınırlandırır. Örneęin, yüzlerce atom ve molekül veya büyük veri setlerinde dalga fonksiyonuna dayanan metotların uygulanması ile çözüme erişilemez [38].

$\rho(r)$  elektron yoğunluęunu kullanan yoğunluk fonksiyoneli teorisi (DFT), dalga fonksiyonuna dayanan metotlardan farklıdır. Yoğunluk fonksiyoneli teorisinde temel deęişken çok-cisimli dalga fonksiyonu yerine elektron yoğunluęudur. Elektron yoğunluęunu kullanmanın avantajı, N elektronlu sistem üzerinden N tane tek elektronlu sisteme indirgenmiş boyutlarıdır. Sistemde kaç tane elektron olduęuna bakılmaksızın, electron yoğunluęu her zaman üç boyutludur. Bundan dolayı DFT, yüzlerce hatta binlerce atom içeren sistemlere uygulanabilir. Bu yaklaşım ilk kez Thomas-Fermi [21, 22] tarafından tanımlanmıştır. Bu tanımdaki elektron yoğunluęu yaklaşımını baz alarak Hohenberg-Kohn [23] ve daha sonra da Kohn-Sham [24] tarafından yoğunluk fonksiyoneli teorisinin temelleri oluşturulmuştur.

### 2.5.1. Thomas-Fermi teorisi

Yoğunluk fonksiyoneli teorisi ile ilgili ilk çalışmalar Thomas-Fermi teorisine dayanmaktadır [21, 22]. Bir sistemi oluşturan çoklu elektron sistemini tanımlamak için elektron yoğunluęu temel deęişken olarak önerilmektedir. Elektron yoğunluęu [38],

$$\rho(r) = N \int \dots \int |\psi(x_1, x_2, \dots, x_N)|^2 dx_1, x_2, \dots, x_N \quad (2.18)$$

ile verilir. Burada  $\rho(r)$ ,  $r$  hacmi içerisindeki her bir elektronun bulunma olasılıęını belirler. Üç boyutlu (x, y, z) toplam elektron sayısı,

$$\int \rho(r) dr = N \quad (2.19)$$

şeklindedir. Thomas-Fermi teorisinde sistemdeki elektronların kinetik enerjisi, elektron-gaz modeline dayanan kuantum istatistiksel teoriden üretilir. Bu modelde elektronların kinetik enerjisi,

$$T[\rho] = C_F \int \rho^{5/3}(r) dr, \quad C_F = \frac{3}{10} (3\pi^2)^{2/3} = 2.871 \quad (2.20)$$

şeklinde tanımlanır. Eşitliklerde görüldüğü gibi kinetik enerji sadece elektron yoğunluğuna bağlıdır. Elektron-çekirdek ve elektron-elektron etkileşimleri ilave edildiğinde elektron yoğunluğu cinsinden toplam enerji

$$E[\rho] = C_F \int \rho^{5/3}(r) dr - Z \int \frac{\rho(r)}{r} dr + \frac{1}{2} N \iint \frac{\rho(r_1)\rho(r_2)}{|r_1 - r_2|} dr_1 dr_2 \quad (2.21)$$

ile verilir. Burada, ikinci ve üçüncü terimler sırasıyla elektron-çekirdek ve elektron-elektron etkileşimleridir.

Yoğunluk fonksiyoneli teorisinin en temeli olan Thomas-Fermi teorisinde, elektronların temel durum ve enerjilerinden ziyade, sistemin enerjisi elektron yoğunluğu kullanılarak elde edilebilir. Thomas-Fermi teorisi, değiş-tokuş korelasyon enerji etkilerini dikkate almaz. Bu teori, atom ve moleküllerin birçok temel özelliğini açıklamada yetersiz kalır.

### 2.5.2. Hohenberg-Kohn teoremleri

Hohenberg-Kohn, Thomas-Fermi teorisindeki elektron yoğunluğu yaklaşımından yola çıkarak 1964'de bir dış potansiyel  $V(r)$  içerisindeki elektronların bulunduğu parçacık sistemi ile ilgili yayınladıkları çalışmada yoğunluk fonksiyoneli teorisinin temellerini atmışlardır [23]. Hohenberg-Kohn yaptıkları çalışmada iki tane teorem geliştirmişler.

Birinci teoreme göre; Schrödinger denkleminin temel durum enerjisi, elektron yoğunluğunun bir fonksiyoneli [23, 39]. Bu teorem, temel durum dalga fonksiyonu ile temel durum elektron yoğunluğu arasında bire bir eşleşmenin bulunduğunu belirtir. Bir sistemde etkileşen parçacıkların bulunduğu  $V(r)$  dış potansiyelde,  $V(r)$  dış potansiyel temel durumdaki elektron yoğunluğunu tanımlar. Başka bir deyişle,  $V(r)$  dış potansiyel, temel durumdaki elektron yoğunluğu tarafından belirlenir. Temel durumdaki elektron yoğunluğu ile  $V(r)$  dış potansiyel arasındaki ilişki [40],

$$E_{gs} = E_{gs} [\rho(r)] = E[\rho[V(r)]] \quad (2.22)$$

şeklinde verilir. Bu teoremi ispatlamak için, sistemin elektron yoğunluğu biliniyorsa  $V(r)$  dış potansiyel belirlenir. Parçacık sisteminde temel durum için aynı elektron yoğunluğuna sahip farklı bir  $V(r)$ ' dış potansiyel var olduğu düşünülürse iki farklı dalga fonksiyonu tanımlanır ( $\Psi$  ve  $\Psi'$ ). Böylelikle temel durum elektron yoğunluğu aynı olan iki tane farklı Hamiltonyen'e ( $\hat{H}$  ve  $\hat{H}'$ ) sahip olunur.

$$\begin{aligned} E_0 < \langle \Psi' | H | \Psi' \rangle &= \langle \Psi' | H' | \Psi' \rangle + \langle \Psi' | H - H' | \Psi' \rangle \\ &= E_0' + \int \rho(r) [V(r) - V(r)'] dr \end{aligned} \quad (2.23)$$

Burada,  $E_0$  ve  $E_0'$ , sırasıyla  $\hat{H}$  ve  $\hat{H}'$  Hamiltonyen'e karşılık gelen temel durum enerjileridir. Benzer şekilde;

$$\begin{aligned} E_0' < \langle \Psi | H | \Psi \rangle &= \langle \Psi | H | \Psi \rangle + \langle \Psi | H' - H | \Psi \rangle \\ &= E_0 - \int \rho(r) [V(r) - V(r)'] dr \end{aligned} \quad (2.24)$$

elde edilir. Bu iki eşitlikten,

$$E_0 + E_0' < E_0' + E_0 \quad (2.25)$$

olduğu görülmektedir. Bu durum açıkça bir çelişkidir. Bundan dolayı aynı elektron yoğunluğunu verebilen iki farklı dış potansiyel yoktur. Böylece,  $\rho(r)$  temel durum elektron yoğunluğu,  $N$  elektron sayısı,  $T[\rho(r)]$  ve  $V(r)$  dış potansiyel ile beraber sistemin diğer özelliklerini belirlenebilir. Buna göre  $\rho(r)$  temel durum elektron yoğunluğuna bağlı sistemin enerjisi, Eş. 2.20 ile verilen Thomas-Fermi teorisi enerji fonksiyoneli yerine

$$\begin{aligned} E[\rho(r)] &= T[\rho(r)] + V[\rho(r)] + V_{ee}[\rho(r)] \\ &= \int \rho(r)V(r)dr + F_{HK}[\rho(r)] \end{aligned} \quad (2.26)$$

ifadesi yazılabilir. Burada,

$$F_{HK} [\rho(r)] = T [\rho(r)] + E_{ee} [\rho(r)] \quad (2.27)$$

sadece  $\rho(r)$  temel durum elektron yoğunluğuna bağlı olup herhangi bir dış potansiyele bağlı değildir. Burada  $F_{HK} [\rho(r)]$ , temel durum elektron yoğunluğunun bir fonksiyoneli. Etkileşen elektronların kinetik enerjisi ve elektron-elektron etkileşimlerinin enerjisi şeklinde ifade edilebilir.

Hohenberg ve Kohn'un ikinci teoremi, enerji varyasyon ilkesine dayanır. Bir  $V(r)$  dış potansiyel içerisinde  $\rho(r)$  temel durum elektron yoğunluğuna bağlı,  $E[\rho(r)]$  enerjisi evrensel bir fonksiyonele göre tanımlanmaktadır. Bu teoreme göre, tüm fonksiyonelin enerjisini minimize eden elektron yoğunluğu, Schödinger denkleminin tam çözümüne karşılık gelen gerçek elektron yoğunluğudur.

$$E_0 [\rho_0(r)] \leq E_v [\rho(r)] \quad (2.28)$$

Denklemdaki  $E_v [\rho(r)]$ , Eş. 2.25'teki toplam enerji fonksiyoneli. Burada,  $\rho(r)$  temel durum elektron yoğunluğu  $V(r)$  dış potansiyeli tanımlamıştır. Eğer keyfi olarak başka bir dalga fonksiyonu varsa ve bunun elektron yoğunluğu  $\rho'(r)$  ise;

$$\langle \Psi' | H | \Psi' \rangle = \int \rho'(r) v(r) dr + F_{HK} [\rho'(r)] = E[\rho'(r)] \geq E[\rho(r)] \quad (2.29)$$

ifadesi elde edilebilir. Elektron yoğunluğu, temel durum elektron yoğunluğu olduğunda enerji minimum olacaktır.

### 2.5.3. Kohn-Sham eşitlikleri

Çok-elektronlu bir sistemin Hohenberg-Kohn enerji fonksiyoneli minimize etmek ve temel durum elektron yoğunluğunu ile enerjiyi elde etmek için Kohn ve Sham pratik bir çözüm önermiştir [24]. Kohn-Sham, Eş. 2.25'teki enerji ifadesinin çözümü için bir referans

sisteminde etkileşmeyen elektronların kinetik enerjilerini tanımlamışlardır. Tek-elektronlu Schrödinger denkleminin benzeri olarak Kohn-Sham denklemi;

$$\left( -\frac{1}{2}\nabla^2 + V_{dış} + \int \frac{\rho(r')}{|r-r'|} dr' + v_{xc}(r) \right) \Psi_i = \epsilon \Psi_i \quad (2.30)$$

şeklinde verilir. Bu ifadede, sırasıyla etkileşmeyen referans sistemin kinetik enerjisi, dış potansiyel, Hartree potansiyeli, değiş-tokuş korelasyon potansiyelidir. Burada  $\epsilon$ , Kohn-Sham yörünge enerjisidir.  $\rho(r)$  elektron yoğunluğu ise,

$$\rho(r) = \sum_i^N |\Psi_i|^2 \quad (2.31)$$

ile ifade edilir. Değiş-tokuş korelasyon potansiyeli,

$$V_{xc}(r) = \frac{\delta E_{xc}[\rho(r)]}{\delta \rho(r)} \quad (2.32)$$

ile verilir. Burada,  $E_{xc}[\rho(r)]$  değiş-tokuş korelasyon fonksiyoneldir. Etkin potansiyel,

$$V_{etk}(r) = V(r) + \int \frac{\rho(r')}{|r-r'|} dr' + V_{xc}(r) \quad (2.33)$$

Eş. 2.30 tekrar yazılırsa,

$$\left( -\frac{1}{2}\nabla^2 + V_{etk}(r) \right) \Psi_i = \epsilon \Psi_i \quad (2.34)$$

elde edilir. Bu tek parçalı Hartree-Fock denklemdir. Elektron yoğunluğunun çözülmesi ile toplam enerji,

$$E = \sum_i^N \varepsilon_i - \frac{1}{2} \iint \frac{\rho(r)\rho(r')}{|r-r'|} dr dr' + E_{xc}[\rho(r)] - \int V_{xc}(r)\rho(r) dr \quad (2.35)$$

şeklinde bulunur. Eş. 2.31, Eş. 2.32 ve Eş. 2.34 Kahn-Sham denklemleri olarak bilinir. Eğer Kahn-Sham enerji fonksiyonelindeki tüm terimler bilinirse Eş. 2.35'ten gerçek temel durum yoğunluğu ve toplam enerji elde edilebilir.  $E_{xc}[\rho(r)]$  değiş-tokuş ve korelasyon enerjisi kinetik enerji ifadesinden;

$$E_{xc}[\rho(r)] = T[\rho(r)] - T_S[\rho(r)] + E_{ee}[\rho(r)] - E_H[\rho(r)] \quad (2.36)$$

elde edilebilir.  $E_{xc}[\rho(r)]$  enerjisi, kuantum mekanik çok parçacıklı etkileşimleri içeren değiş-tokuş korelasyon enerjisini ifade eder. Burada ilk iki terim, etkileşen ve etkileşmeyen elektronların kinetik enerjisi arasındaki fark, üçüncü ve dördüncü terimler de electron-electron etkileşim ve Hartree enerjileridir.  $E_{xc}[\rho(r)]$  değiş-tokuş korelasyon enerjisi, Kohn-Sham denklemlerinin çözümünde önemlidir. Sistemin taban durumu, durum yoğunluğunun fonksiyoneli olarak ifade edilmesine rağmen  $E_{xc}[\rho(r)]$  değiş-tokuş korelasyon enerjisi tam olarak bilinmemektedir.  $E_{xc}[\rho(r)]$  değiş-tokuş korelasyon enerjisinin ifade etmek için iki tane basit yaklaşım kullanılmaktadır: Yerel Yoğunluk Yaklaşımı (LDA) veya Genelleştirilmiş Gradyent Yaklaşımı (GGA) [41, 42].

#### 2.5.4. Yerel yoğunluk yaklaşımı (LDA)

Bir önceki kısımda tanımlanan Kohn-Sham denkleminin çözümü,  $E_{xc}[\rho(r)]$  değiş-tokuş korelasyon enerjisinin bilinmesi ile elde edilir. Bu  $E_{xc}[\rho(r)]$  değiş-tokuş korelasyon enerjisi DFT'nin en önemli parametrelerden biridir.  $E_{xc}[\rho(r)]$  tanımlamak için kullanılan yaklaşımlardan biri de yerel yoğunluk yaklaşımı (LDA)'dır [24, 47].

Malzemelerin taban durum yoğunluğu ve toplam enerji durumlarını tanımlamak için  $E_{xc}[\rho(r)]$  belirlemede en basit ve kullanışlı yaklaşım 'yerel yoğunluk yaklaşımı (LDA)'dır. LDA yaklaşımı, Kohn ve Sham [24] tarafından tanımlanmıştır. LDA yaklaşımına göre uzaysal dağılımın herhangi bir noktasında sistemin değiş-tokuş korelasyon enerjisi o

noktadaki elektron yoğunluğuna bağlıdır. Bu yaklaşımda  $E_{xc}[\rho(r)]$  değiş-tokuş korelasyon enerjisi elde edilirken sistem için homojen elektron gazı bağıntıları kullanılır.

$$E_{XC}^{LDA}[\rho] = \int \rho(r) \varepsilon_{xc}(\rho(r)) dr \quad (2.37)$$

Burada  $\varepsilon_{xc}$ ,  $\rho(r)$  yoğunluktaki homojen bir elektron gaz sisteminde elektron başına düşen değiş-tokuş enerjisidir. Homojen elektron gaz sisteminde elektron gazının değiş-tokuş enerjisi [43, 44],

$$\varepsilon_x^{\text{hom}} = -\frac{3}{4} \left( \frac{3}{\pi} \right)^{1/3} \rho(r)^{1/3} \quad (2.38)$$

olarak bilinir. Etkileşen homojen bir elektron gaz sisteminin korelasyon enerjisini belirlemek biraz daha karmaşıktır.  $E_{xc}[\rho(r)]$ 'yi elde etmek için değiş-tokuş korelasyon enerjisinin ikinci kısmı Monte Carlo hesaplamalarına dayanan Ceberley-Alder [44] yaklaşımları kullanılır.

LDA yaklaşım son yıllarda özellikle homojen sistemlerde iyi sonuçlar vermektedir. Malzemelerin toplam enerji ve bant yapısı hesaplamalarında kullanılır.  $E_{xc}[\rho(r)]$  değiş-tokuş korelasyon enerjisini elde etmek için kullanılan LDA yaklaşımı bazı durumlarda yetersiz kalmaktadır. Her bir gerçek elektron sistemi genel olarak homojen değildir ve elektron yoğunluğu hızlı bir şekilde değişmektedir. LDA yaklaşımı, elektron sistemindeki hızlı elektron yoğunluğunu tanımlamakta yetersiz kalmaktadır. Özellikle elektron yoğunluğu, homojen olmayan sistemlerin yerel enerji ifadesine bağlı olarak değişmektedir. Bu durumlar için 'genelleştirilmiş gradyent yaklaşımları' (GGA) yaklaşımı geliştirilmiştir.

### 2.5.5. Genelleştirilmiş gradyent yaklaşımı (GGA)

Elektron sistemindeki hızlı elektron yoğunluk değişimini ve homojen olmayan sistemlerdeki tüm elektronların  $E_{xc}[\rho(r)]$  değiş-tokuş korelasyon enerjisine etkisini dikkate alan "genelleştirilmiş gradyent yaklaşımı" (GGA) geliştirilmiştir [45]. GGA yaklaşımının sistemin elektron yoğunluğundaki değiş-tokuş korelasyon enerjisinin yerel elektron yoğunluğu ve gradyent ( $\nabla\rho$ ) bağlı olarak ifadesi,



$$E_{XC}^{GGA}[\rho] = \int \rho(r) \varepsilon_{xc}(\rho(r), \nabla\rho(r)) dr \quad (2.39)$$

ile verilir. GGA yaklaşımı, uygulamalarda LDA yaklaşımına göre daha iyi performans gösterebilir. Homojen olmayan sistemlerin enerji hesaplamalarında doğru sonuçlar üretir. Büyük örgü sabiti ve düşük bağlanma enerjisine sahip sistemlerde LDA'ya göre daha doğru sonuçlar verir. Atomizasyon ve yüzey enerjilerinin geliştirir. Elektron yoğunluğunun varyasyon hızına bağımlılığı için  $\rho(r)$  'nin gradientini kullanır. Yoğunluk gradyenti farklı durumlarda bu yaklaşıma avantaj sağlar.

### 2.5.6. Pseudopotansiyel metot

Bir katının çoğu fiziksel özellikleri, çekirdeğe yakın kor elektronlarından ziyade en dış enerji seviyesinde yer alan valans (değerlik) elektronları tarafından belirlenir. Kor elektronları çekirdek etrafında toplanmıştır ve çekirdeğe sıkı bir şekilde bağlıdır. Düzlem-dalga denklem setlerinde, kor elektronlarını tanımlamak için birçok temel fonksiyonları içeren tanımlamalara ihtiyaç duyulur. Bu tanımlamalar çok büyük zaman ve hesaplamalar gerekmektedir. Bundan dolayı katıların kimyasal bağlanma ve diğer fiziksel özelliklerini belirlerken bu kor elektronların etkisi ihmal edilebilir. DFT hesaplamalarında, kor elektronları hareketsiz (frozen) olduğu kabul edilir. Bu sözde-potansiyel yaklaşımı olarak bilinir. Bu yaklaşım, kor elektronlarına bağlı hesaplama yükünü azaltmada önemli rol oynar.

Genel olarak sözde-potansiyel (pseudopotansiyel) yaklaşımı iki temel amacı vardır. i) birçok düzlem-dalga temel fonksiyonun tanımlanması gerekli olan kor elektronları yerine daha zayıf bir pseudopotansiyel kullanmak, ii) kor bölgesindeki değerlik elektron dalga fonksiyonunun hızlı salınımlarını ortadan kaldırmak [38]. Bu yaklaşıma göre, çekirdeğe yakın kor elektronlarının oluşturduğu gerçek ve güçlü Coulomb potansiyeli yerine daha zayıf ve daha düzleştirici olan valans elektronlarını etkileyen bir potansiyel kullanılır.

### 2.6. CASTEP Programı

CASTEP (Cambridge Sequential Total Energy Package) programı, elektronların ve çekirdeklerin ilk-prensip (first-principles) kuantum mekaniksel tanımına dayanan malzeme

modelleme programıdır [25]. Kuantum mekanik hesaplamalar, elektron ve atom çekirdeğinin herhangi bir durumda davranışını belirlemede önemli bir yaklaşımdır. Elektron davranışı, malzemelerin birçok özelliğini belirler. Kuantum mekanik yaklaşımda kimyasal bağların davranışı tanımlandığından malzemedeki atom ve atom dizilimindeki elektron davranışı önemlidir. Bundan dolayı temel fizik kanunlarına dayanan ilk-prensip yaklaşımından her bir malzemenin özellikleri hakkında bilgi elde edilebilir.

Kuantum mekanik yoğunluk fonksiyonel teorisindeki ab-initio metoduna dayanan CASTEP programı, deneysel veriler ile kristal yapısı modellenen yapının; geometrik optimizasyonunu, toplam enerji, örgü parametreleri, elastik sabitleri ve elastik modülleri, fonon dağılım eğrileri, manyetik moment, elektronik bant yapısı, atomik kuvvetler, durum yoğunluğu, yük yoğunluğu, mekanik, termodinamik ve optik gibi özelliklerin hesaplamalarını başarıyla yapabilen bir hesaplama programıdır. Hesaplamalar reel ve ters uzayda yapılabilir.

CASTEP programı hesaplamalarında, süper hücre yaklaşımı kullanılarak sınır şartları belirlenir. Bu program, düzlem-dalga setini tanımlar ve Hamiltönyen terimi için hızlı Fourier dönüşümleri kullanır. Ayrıca bu program, elektron-çekirdek etkileşimini sözde-potansiyeli tanımlar. Bu programda, öz uyumlu elektronik minimizasyon için iteratif bir yaklaşım vardır. Değiş-tokuş potansiyelleri belirlenirken DFT yaklaşımlarının uygulamaları esas alınır.

CASTEP programı kuantum mekaniksel hesaplamalarda değiş-tokuş korelasyon etkisi için LDA ve GGA yaklaşımlarını kullanır. LDA yaklaşımlarında Ceperley-Alder (CA) [44] kullanılırken GGA yaklaşımları da ise PBE (Perdew-Burke-Ernzerhof) [45] ve PW91 (Perdew-Wang) [46] kullanılır. Hesaplamalarda sözde-potansiyel (pseudopotansiyel) kullanırken değerlik elektronları ve çekirdek arasındaki etkileşmeler için çok yumuşak (ultrasoft) ve norm-korunumlu potansiyelleri uygulanabilir [47-49]. Kristal yapıların birim hücre ve geometrik optimizasyonu için BFGS (Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanon) [25, 47, 51] metodu kullanılabilir. CASTEP tüm bu yaklaşımları kullanırken isteğe bağlı olarak kristal yapıların simetrik özelliklerini tanımlar ve uygular.

Bu tez çalışmasında kübik yapılı karbür bileşiklerin mekanik ve termodinamik hesaplamaları CASTEP 6.0 programı ile yapıldı.





### 3. NÖTRON TRANSPORT TEORİSİ

Nötronik (nötron kinetik), bir nükleer reaktörde nötronların yakıt materyalindeki nükleer çekirdekler arasındaki etkileşmelerle ilgilenir. Reaktör kordaki nötron dağılımı, geçiş hesaplamaları, yakıt materyaller ve yakıt zarf malzemeleri ile fisyon sonucu oluşan nötronların çevresiyle yaptığı etkileşimler tanımlanmalıdır. Kor içerisindeki nötronik davranışın tanımlanması, nükleer reaktörlerin tasarlanması, çalıştırılması ve güvenlik analizleri için çok önemlidir. Reaktör kor içerisinde nötronlar, nükleer çekirdek ve ortamdaki diğer nötronlar ile farklı çarpışmalar yaparlar. Çarpışmalar sonucunda nötronlar farklı doğrultular ile bir noktadan diğerine geçerler. Nötronların, kor içerisindeki hareketi ve ortamda bulunan yakıt ve diğer materyaller ile yapılan etkileşimleri karakterize eden nötron transport denklemi (Boltzmann transport denklemi) mevcuttur. Bu denklem, farklı doğrultu, zaman, açı ve enerji değişkenlerine bağlı olduğundan analitik olarak çözülmesi zordur. Farklı çözüm yaklaşımları kullanılarak bu denklemi daha basit hale indirgeyerek çözmek için son yıllarda farklı metotlar geliştirilmektedir [51-54].

Nötron transport denklemini çözerek reaktör korunda nötronların iletimini ve etkileşmesini modelleyen yaklaşımlar genel olarak Deterministik (belirleyici) ve Stokastik (Monte Carlo) olmak üzere iki gruba ayrılır. Deterministik yaklaşımda, nötron transport denklemi nötron difüzyon denklemine indirgeyip nötronların kor içerisindeki davranışı nümerik olarak çözülür. Bu yaklaşımda, nötron difüzyon denklemini çözmek için üç boyutlu çok-gruplu nötron bilgileri, tesir kesitleri ve basit geometriler kullanılır. Monte Carlo yaklaşımında ise nötron transport denklemini her bir serbest nötronun hareketi modellenerek istatistiksel olarak ortalama nötron davranışı belirlenir. Monte Carlo yaklaşımında, kor içerisindeki nötronik hesaplamaları için çok fazla hesaplama ve zaman gerektiğinden deterministik yaklaşıma göre daha az tercih edilmektedir. Özellikle nötron davranışının karışık olduğu bir sistemde hızlı ve etkili çözüm üretmek için deterministik kodlar tercih edilmektedir.

#### 3.1. Nötron Transport Denklemi

Reaktördeki nötron etkileşimleri ve serbest hareketini tanımlamak için nötronların nasıl bir dağılım göstereceğini bilmek gerekmektedir. Bundan dolayı serbest nötronların; konum, zaman, enerji ve hareket doğrultusuna göre dağılımını bilmek önemlidir. Etkileşimler

sonucunda nötronlar saçılır ve bundan dolayı enerji kazanabilir veya kaybedebilirler. Soğurulan nötronlar fisyon reaksiyonlarına neden olur veya ortamdaki materyallerin özelliklerini değiştirebilirler. Bazı nötronlar ise saçılma reaksiyonları sonucu reaktör dışına kaçabilir. Nötronun bulunduğu ortam ve sıcaklığı ile enerjisine bağlı olarak serbest hareket mesafesi, doğrultusu, gibi parametreler değişebilir. Matematiksel olarak nötronların farklı değişkenlere göre dağılımı, nötron transport denklemi olarak bilinen nötron denge denkleminin dayandır. Bu denklem kinetik gaz teorisinden bilinen Boltzman denkleminin doğrusallaşmış formudur. Nötronların zaman, konum, enerji ve hareket doğrultularını tanımlamak için kullanılan nötron transport denklemi [52],

$$\frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial t} \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t) = S(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t) - \vec{\Omega} \cdot \nabla \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t) - \Sigma_t(\vec{r}, E, t) \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t) \quad (3.1)$$

ile verilir. Burada  $S$  nötron kaynağını,  $\Sigma_t$  toplam makroskobik tesir kesitini ve  $\phi$  açısal nötron akısını ifade eder. Bu denklem birim hacimdeki kayıp ve elde edilen nötronlar arasındaki dengeyi ifade eder. Burada nötronların, belli bir kinetik enerji  $E$  ( $v$  hızı) ve belli bir  $\Omega$  doğrultusunda,  $t$  anında ve  $r$  durumunda hareket ettiği varsayılmıştır. Denklemin sol tarafındaki terim hedef nötronların zamana göre değişimini, sağ tarafındaki ilk terim  $S$  nötron kaynağından elde edilen nötronları, ikinci terim nötron hareketindeki net nötron kaybını ve üçüncü terim de nükleer çarpışmalardan kaynaklanan nötron kayıplarınıdır.

$S$  hedef nötronları, saçılma, fisyon ve dış nötron kaynaklarından elde edilir.  $S$  nötron kaynakları,

$$\begin{aligned} S(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t) &= \int_0^{\infty} dE' \int_{4\pi} \Sigma_s(\vec{r}, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}, E' \rightarrow E, t) \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}', E', t) d\Omega' \\ &+ \frac{\chi(E)}{4\pi} \int_0^{\infty} dE' \int_{4\pi} \chi(E) v \Sigma_f(\vec{r}, E', t) \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}', E', t) d\Omega' \\ &+ S_{ex} \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t) \end{aligned} \quad (3.2)$$

şeklinde ifade edilir.  $\Sigma_s$  saçılma ve  $\Sigma_f$  fisyon makroskobik tesir kesitleri,  $\chi(E)$  fisyon spektrumu,  $v$  fisyon başına salınan ortalama nötronların sayısıdır. Denklemin sağ

tarafındaki ilk terim saçılma kaynağı, ikinci terim fisyon kaynağı ve üçüncü terim de dış nötron kaynağıdır. Çok gruplu, üç boyutlu geometri ve zamana bağlı nötron transport denklemi çok fazla terim ve değişkene bağlı olduğundan çözülmesi zaman alır ve zordur. Bundan dolayı gazların difüzyon denkleminden esinlenerek nötron difüzyon denklemi geliştirilmiştir.

### 3.2. Nötron Difüzyon Denklemi

Nötron transport denklemi çok fazla değişkene bağlı olduğundan ve çok fazla matematiksel hesaplamalar gerektirdiğinden bu denklemin yerine nötron difüzyon denklemi yaygın olarak kullanılmaktadır. Reaktör kor içerisinde nötronlar, gaz parçacıklarının hareketine benzer bir davranış sergiler. Nötron difüzyon yaklaşımında, sanki bir gazın bir diğerinin içinde difüzyonunda olduğu gibi nötronların bu çarpışmaların toplam etkisi ile reaktör içerisinde bir tür difüzyona uğradığından bahsedilebilir [53]. Nötronların bir ortamda serbest gaz moleküllerine benzer hareket ettikleri varsayımından yola çıkarak nötron difüzyon teorisi geliştirilmiştir. Nötron difüzyon denklemi, transport denkleminin bir formudur. Bu teoride, nötron davranışını tanımlamak için nötron difüzyon denklemi kullanılmaktadır.

$V$  hacmi içerisinde yer alan nötronları göz önüne alalım. Bu  $V$  hacim dışına veya içine doğru net bir nötron akışı varsa, nötronların bir bölümü  $V$  içinde soğrulursa veya  $V$  içinde nötron yayan kaynak varsa, nötronların sayısı zamanla değişebilir [53].  $V$  hacmi içerisindeki nötron değişimlerini matematiksel olarak ifade edilmesi süreklilik eşitliğini verir [53]:

$$\left[ \begin{array}{c} V \text{ deki nötron} \\ \text{sayısının değişim hızı} \end{array} \right] = \left[ \begin{array}{c} V \text{ deki nötronların} \\ \text{üretim hızı} \end{array} \right] - \left[ \begin{array}{c} V \text{ deki nötronların} \\ \text{soğurulma hızı} \end{array} \right] - \left[ \begin{array}{c} \text{nötronların } V \text{ den} \\ \text{kaçış hızı} \end{array} \right] \quad (3.3)$$

$V$  hacmi içerisindeki herhangi bir nokta ve zamandaki nötron yoğunluğu  $n$  ise hacim içerisindeki toplam nötron sayısı,

$$\int_V n dV \quad (3.4)$$

ile verilir. Nötronların toplam sayısındaki değişim hızı ise,

$$\frac{d}{dt} \int_V n dV \quad (3.5)$$

$$\int_V \frac{\partial n}{\partial t} dV \quad (3.6)$$

$V$  hacmi içerisindeki nötronların  $\text{cm}^3$  başına üretim hızını  $s$  ile ifade edersek, nötronların  $V$  hacmindeki üretim hızı,

$$\int_V s dV \quad (3.7)$$

şeklinde ifade edilir.  $\Sigma_a$  soğurma makroskopik tesir kesiti ve  $\phi$  nötron akısı olup nötronların soğurma yoluyla  $\text{cm}^3 \cdot \text{sn}$  başına yok olma hızı  $\Sigma_a \phi$ 'dir.  $V$  hacminde saniye başı yok olma hızı,

$$\int_V \Sigma_a \phi dV \quad (3.8)$$

ile verilir.  $V$  hacminden içeri ve dışarı nötron akışını ele alalım.  $\vec{J}$ ,  $V$  hacminin yüzeyindeki nötron akım yoğunluğu vektörü,  $\vec{n}$  yüzeyden dışarı doğru yönelmiş birim normal vektör ise yüzeyden  $\text{cm}^2 \cdot \text{sn}$ 'de  $\vec{n}$  yönünde geçen nötronların net sayısı,

$$\vec{J} \cdot \vec{n} \quad (3.9)$$

ve nötronların hacmin  $A$  yüzeyünden toplam sızma hızı (negatif veya pozitif),

$$\int_V \vec{J} \cdot \vec{n} dA = \int_V \text{div} \vec{J} dV \quad (3.10)$$



ile verilir. Elde ettiğimiz eşitlikleri ile süreklilik denklemi,

$$\int_V \frac{\partial n}{\partial t} dV = \int_V s dV - \int_V \sum_a \phi dV - \int_V \text{div} \vec{J} dV \quad (3.11)$$

şeklinde yazılabilir. Elde edilen denklemde integral aynı hacim üzerinden alındığından,

$$\frac{\partial n}{\partial t} = s - \sum_a \phi - \text{div} \vec{J} \quad (3.12)$$

şeklinde süreklilik denklemi elde edilir. Süreklilik denklemi, nötron yoğunluğu ve nötron akım yoğunluğu vektörleri şeklinde iki bilinmeyeni vardır. Akı ve akım arasındaki bağlantı Fick Kanunu ile kurulur. Bu bağlantı;

$$\vec{J} = -D \text{grad} \phi = -D \nabla \phi \quad (3.13)$$

şeklinde ifade edilir. Bu eşitliği kullanarak nötronların difüzyonu,

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D \nabla^2 \phi - \sum_a \phi + s \quad (3.14)$$

şeklinde yazılır. Burada  $D$ 'nin konumun fonksiyonu olmadığı kabul edilir.  $v$  nötron hızı, nötron akısı  $\phi = nv$  olmak üzere nötron difüzyon denklemi elde edilir.

$$\frac{1}{v} \frac{\partial \phi}{\partial t} = D \nabla^2 \phi - \sum_a \phi + s \quad (3.15)$$

Üç boyutlu, çok-gruplu zamana bağlı nötron difüzyon denklemi ve fisyon reaksiyonları sonucu oluşan ürün çekirdek (precursor) denklemleri [54],

$$\begin{aligned} \frac{1}{v_g} \frac{\partial}{\partial t} \phi_g(r, t) = \nabla^2 D_g \phi_g(r, t) - \Sigma_{rg} \phi_g(r, t) + \sum_{g'=1}^G \Sigma_{rg' \rightarrow g} \phi_{g'}(r, t) \\ + \chi_{pg} (1 - \beta) \sum_{g'=1}^G v_{g'} \Sigma_{fg'} \phi_{g'}(r, t) + \chi_{dg} \sum_{d=1}^D \lambda_d C_d(r, t) \end{aligned} \quad (3.16)$$

$$g' = 1, 2, \dots, G, \quad d = 1, 2, \dots, D, \quad g = 1, 2, \dots, G$$

$$\frac{\partial}{\partial t} C_d(r, t) = \beta_d \sum_{g=1}^G v_g \Sigma_{fg} \phi_g(r, t) - C_d(r, t) \quad (3.17)$$

$v_g$  = g enerjisi grubunun nötron hızı

$\phi_g(r, t)$  = g enerjisi grubu nötronların zaman ve konuma bağlı nötron akısı

$D_g$  = g enerjisi grubu nötronların difüzyon katsayısı

$\Sigma_{rg}$  = g enerjisi grubunun çıkarma (removal) tesir kesiti

$\Sigma_{rg' \rightarrow g}$  = g' grubundan g grubuna nötron saçılma olasılığı

$\chi_{pg}$  = g grubuna giren ani (prompt) fisyon nötronların kesri

$\chi_{dg}$  = g grubuna giren gecikmiş (delayed) fisyon nötronların kesri

$v_{g'}$  = bir fisyonunda g' grubunda üretilen ortalama nötron sayısı

$\Sigma_{fg'}$  = g' grubunun fisyon tesir kesiti

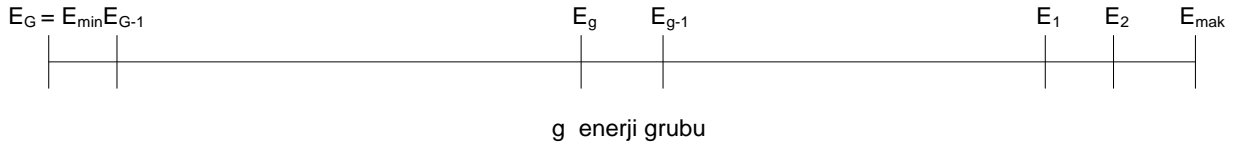
$C_d(r, t)$  = d nötron ürün çekirdeğin zaman ve konuma bağlı konsantrasyonu

$\beta_d$  = d grubu nötron öncülerini üreten fisyon olaylarının kesri

$$\beta = \sum_{d=1}^D \beta_d$$

$\lambda_d$  = d grubu nötron ürün çekirdek için bozunma sabiti

Bu denklemlerin pratik ve doğru bir şekilde çözülmesi için farklı yaklaşımlar kullanılmaktadır. Fisyon sonucu açığa çıkan nötronlar sürekli bir enerji aralığına sahiptir. Grup-difüzyon yaklaşımı, nötron difüzyon denkleminin çözümünde kullanılan en etkin yaklaşımlardan biridir. Çok-gruplu yaklaşımında [55] sürekli enerji bölgesi, özel enerji gruplarına (G) ayrılır.



Şekil 3.1. Nötron difüzyon hesaplamaları için enerji grupları

Her bir enerji grubu için çok-gruplu açılal nötron akısı, fisyon spektrumu, kaynak terimi ve makroskobik tesir kesiti [52],

$$\phi_g(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \int_{E_g}^{E_{g-1}} \phi_g(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) dE \quad (3.18)$$

$$\chi_g(\vec{r}) = \int_{E_g}^{E_{g-1}} \chi_g(\vec{r}, E) dE \quad (3.19)$$

$$Q_g(\vec{r}) = \int_{E_g}^{E_{g-1}} Q_g(\vec{r}, E) dE \quad (3.20)$$

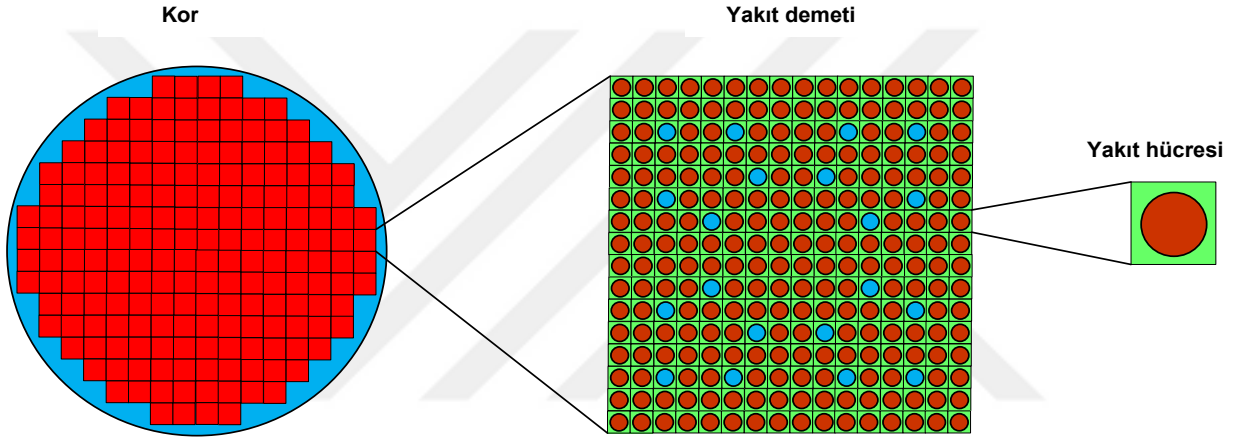
$$\Sigma_g(\vec{r}) = \frac{\int_{E_g}^{E_{g-1}} \Sigma_g(\vec{r}, E) \phi_g(\vec{r}, \vec{\Omega}) dE}{\int_{E_g}^{E_{g-1}} \phi_g(\vec{r}, \vec{\Omega}) dE} \quad (3.21)$$

şeklinde tanımlanır. Uzaysal ayrıklaştırma, tüm reaktör kor hacmini yakıt elemanlarının bulunduğu sonlu  $V_i$  birim hücrelere ayırır. Yukarıda ifade edilen enerji gruplarına benzer olarak  $i$  yakıt elemanlarının  $V_i$  hacmi üzerinden nötron akısı ve nötron tesir kesiti,

$$\phi_i = \int_{V_i} \phi_i(\vec{r}) d\vec{r} \quad (3.22)$$

$$\Sigma_i = \frac{\int_{V_i} \Sigma_i(\vec{r}) \phi_i(\vec{r}) dE}{\phi_i} \quad (3.23)$$

şeklinde ifade edilir. Şekil 3.2’de görüldüğü gibi reaktör kor farklı yakıt demetleri ve yakıt hücrelerinden oluşmaktadır. Kor içerisindeki yakıt ve yakıt zarf malzemelerinin özellikleri, nötron difüzyon yaklaşımıyla nötronik davranış ile belirlenebilir. Bu yöntem ile yakıt hücresi, yakıt demetleri ve tüm reaktör korunun nötronik hesaplamaları yapılabilir.



Şekil 3. 2. Yakıt hücresi, yakıt demeti ve tam kor modellemesi

### 3.3. DRAGON Programı

DRAGON deterministik program, nötron transport denklemini nükleer reaktörlerin farklı yakıt geometrilerinin çözümü için Montreal Politeknik Okulu (École Polytechnique de Montréal) tarafından geliştirilmektedir. Bu kod, nükleer reaktördeki yakıtın birim hücresi veya yakıt demetinin nötronik davranışını modellemek için kullanılan modüller setinden oluşmaktadır [56]. DRAGON programı, basit geometrileri kullanarak makroskobik ve mikroskobik tesir kesitlerini, çok gruplu ve boyutlu nötron akısı, izotopik tüketim, yakıt yanma oranları, vb. hesaplamalarını değişen geometri, yakıt yoğunluğu, yakıt türü, yakıt zarf malzemesi, yakıt sıcaklığı, moderatör (soğutucu/yavaşlatıcı) yoğunluğu ve sıcaklığı gibi değişkenlere bağlı olarak yapmamıza olanak sağlar [57]. İstenen parametreleri hızlı ve doğru bir şekilde hesaplar.

Reaktör kordaki nötron dağılımı ile ilgili hesaplamaları yapabilmek için birkaç-gruplu nötron difüzyon denkleminin çözülmesi gerekmektedir. Bundan dolayı kor'un her bir bölgesindeki hesaplamalar için birkaç-gruplu nötronun tesir kesitleri ve difüzyon katsayılarına ihtiyaç duyulur [58].

DRAGON programında, Çarpışma Olasılığı Metodu ve Karakteristikler Metodu kullanılarak her bir hücre hacmindeki soğurma ve saçılma tesir kesitlerini, fisyon ürünleri, fisyon spektrumu, nötron akısını elde etmek için nötron transport denklemi nümerik olarak çözülür [59]. Nötronik hesaplamalar için DRAGLIB, MATXS (TRANSX-CTR), WIMSD4, and WIMS-AECL formatlardaki standart mikroskopik tesir kesiti kütüphanelerini kullanılmaktadır. DRAGON programı ile üretilen tesir kesitleri, veri girişi üzerinden nötronik hesaplamalarında kullanılır.

Nötron transport denkleminin İntegral-diferansiyel şeklindeki ifadesi [60],

$$\left[ \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} + \Sigma^s(\vec{r}) \right] \phi^s(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \frac{1}{4\pi} Q^s(\vec{r}) \quad (3.24)$$

ile verilir. Burada  $Q$  kaynak terimi bir  $Q_s$  saçılma terimi içerisinde ayrılabilir.

$$Q_s^g(\vec{r}) = \sum_h \Sigma_s^{h \rightarrow g}(\vec{r}) \phi^h(\vec{r}) \quad (3.25)$$

Burada fisyon terimi,

$$Q_f^g(\vec{r}) = \frac{\chi^g}{k_{eff}} \sum_h \nu \Sigma_f^h(\vec{r}) \phi^h(\vec{r}) \quad (3.26)$$

ile verilir.  $k_{eff}$  etkin çoğaltma faktörüdür. Nötron akısı,

$$\phi^g(\vec{r}) = \int d^2\Omega \phi^g(\vec{r}, \vec{\Omega}) \quad (3.27)$$

ile ifade edilir. Bu denklem [61],

$$\phi^g(\vec{r}, \vec{\Omega}) = e^{-\tau^g(R_s)} \phi^g(\vec{r}_s, \vec{\Omega}) + \frac{1}{4\pi} \int_0^R e^{-\tau^g(R')} Q_s^g(\vec{r}) dR' \quad (3.28)$$

integral denklemi forma dönüştürülebilir.

$$\tau^g = \int_0^R \Sigma^g(\vec{r} - R' \vec{\Omega}) dR' \quad (3.29)$$

Burada  $r_s, s$  yüzey sınırındaki bir noktayı gösterir.

*Çarpışma Olasılığı Metodu (CPM):* Çarpışma olasılığı metodu, nötron akısı için nötron transport denklemini numerik olarak çözen genel bir yöntemdir. Bu yaklaşıma göre nötron akısı:

$$\phi(\vec{r}) = \int_s \frac{e^{-\tau(R_s)}}{R_s^2} (\vec{\Omega} \cdot \vec{N}_s) \phi(\vec{r}_s, \vec{\Omega}') d^2 r' + \int_V \frac{e^{-\tau(R)}}{4\pi R^2} Q^g(\vec{r}') d^3 r' \quad (3.30)$$

ile verilir. Bu denklem, Eş. 3.28'in tüm açısalları üzerinden integral alınması ile elde edilir.  $\phi(\vec{r}_s, \vec{\Omega}')$ ,  $S$  yüzeyinden gelen açısallarıdır. Burada tesir kesitlerinin ve kaynağın yerel olarak sabit olduğu çözüm alanının  $V_i$  hacmini  $N_v$  bölgesine ayırırsak,

$$\begin{aligned} \Sigma(\vec{r}) &= \Sigma_j, & \vec{r} \in V_j \\ Q(\vec{r}) &= Q_j, & \vec{r} \in V_j \end{aligned} \quad (3.31)$$

şeklinde ifade edilebilir. Daha sonra her bir  $V_i$  hacmi üzerinden Eş. 3.30 integral alınabilir.

$$V_i \phi_i = \sum_{j=1}^{N_v} \left[ \int_{V_i} \int_{V_j} \frac{e^{-\tau(R)}}{4\pi R^2} d^3 r' d^3 r \right] Q_j \quad (3.32)$$

Her bir bölge içerisindeki  $\phi_i$  ortalama akı,

$$\phi_i = \frac{1}{V_i} \int_{V_i} \phi(\vec{r}) d^3 r \quad (3.33)$$

ve basitlik olarak  $S$  yüzeyinde  $\phi_-(\vec{r}_s)$  açısız akı kaybolur. Bu durumda çarpışma olasılığı,

$$p_{ij} = \frac{1}{V_i} \int_{V_i} \int_{V_j} \frac{e^{-\tau(R)}}{4\pi R^2} d^3 r' d^3 r \quad (3.34)$$

şeklinde tanımlanır. Transport denklemi,

$$\phi_i = \sum_{j=1}^{N_V} p_{ij} Q_j \quad (3.35)$$

ile ifade edilebilir. Üç boyutlu (3D) problemlerde basitlik olarak Eş. 3.34,

$$p_{ij} = \frac{1}{4\pi \sum_i \sum_j V_i} \int_{(4\pi)} d^2 \Omega \int_{\pi_{\hat{\Omega}}} d^2 p \sum_k \delta_{i,N_k} \times \sum_h \delta_{i,N_k} \left[ 1 - e^{-\Sigma_i L_k} \right] e^{-\tau_{k,h}} \left[ 1 - e^{-\Sigma_i L_h} \right] \quad (3.36)$$

şeklinde verilir.

$$\tau_{k,h} = \sum_{l=k+1}^{h-1} \Sigma_{N_l} L_l \quad (3.37)$$

Burada  $L_k$ , bir nötronun  $p$  noktasında üretildiği ve  $\Omega$  açısı yönünde hareket ettiği mesafedir.

*Karakteristikler Metodu (MOC):* Karakteristikler metodu, genel olarak her bir kısmi differansiyel denklemi sıradan bir denkleme indirgeyen üç boyutlu uzaydaki yörüngeleri bularak çözmeyi amaçlamaktadır. Bölge içerisindeki kaynak terim ve bölgeye giren açısız nötron akı, bölge başına ve enerji grubu başına nötron akısını oluşturur.

Bir nötron yörüngesi boyunca temel transport işlemcisi (Eş. 3.24) toplam diferansiyel işlemciye dönüşür.

$$C(s) = \frac{d}{ds} + \Sigma(\vec{p} + s\vec{\Omega}) \quad (3.38)$$

Burada  $C(s)$ , karakteristik transport operatörüdür.  $s$ , ayırt edici özellik çizgisi boyunca değişkeni ifade eder. Yerel karakteristikler denklemi,

$$C(s)\phi(\vec{p} + s\vec{\Omega}, \vec{\Omega}) = Q(\vec{p} + s\vec{\Omega}) \quad (3.39)$$

Burada  $k$  bölümü,  $j$  bölgesinden geçer. Daha sonra giren ve çıkan açısız nötron akısı arasındaki ilişki,

$${}^{out}\phi_j(k) = {}^{in}\phi_j(k) + \left[ \frac{Q_j}{\Sigma_j} - {}^{in}\phi_j(k) \right] E(\Sigma_j L_k) \quad (3.40)$$

ile verilir.  $E(x) = 1 - e^{-x}$ .  $j$  bölgesindeki toplam nötron akısı tüm yönler üzerinden integre edilmesi ile hesaplanır.

$$\phi_j = \frac{Q_j}{\Sigma_j} + \frac{1}{4\pi\Sigma_j V_j} \int_{(4\pi)} d^2\Omega \int_{\pi\Omega} d^2p \sum_k \delta_{j,N_k} \Delta k \quad (3.41)$$

$k$  bölümündeki açısız nötron akısı farkı ise,

$$\Delta k = {}^{in}\phi_j(k) - {}^{out}\phi_j(k) \quad (3.42)$$

ile verilir.



DRAGON programı ile nükleer yakıt demetini modellemek için kartezyen, silindirik ve hekzagon geometrik yapılar kullanılabilir. Bu geometrik yapılar modellenirken yakıt demetinin özelliğine ve geometrik yapısına göre simetrik özellikler kullanılır.

DRAGON programı ile 1/8 simetrik geometrisi kullanılarak kartezyen geometrisine sahip PWR tipi 17x17'lik yakıt demetinin farklı yakıt zarf malzemelerine bağlı nötronik özellikleri hesaplandı.





## 4. TEMEL ÖZELLİKLER

Tez çalışmasının bu bölümünde, incelenen malzemelerin temel yapısal mekanik, termodinamik ve nötronik özellikleri tanımlandı. Daha sonra temel özellikleri ve hesaplama yöntemleri hakkında detaylı bilgi verildi.

### 4.1. Mekanik Özellikler

Elastik sabitleri, elastik modülleri (Bulk modül, Shear modül, Young modül), poisson oranı ve sertlik, malzemelerin önemli bazı mekanik özelliklerini oluşturur.

#### 4.1.1. Elastik sabitler

Elastik sabitler ( $C_{ij}$ ), katı malzemelerin kristal yapısının özelliklerinin anlaşılması için önemli parametrelerdir. Bu sabitler, malzemelerin kristal yapısının dış kuvvetlere karşı mekanik özelliklerini belirlemede önemli rol oynamaktadır. Elastik sabitleri malzemelerin kararlılığı ve sertliği ile ilgili önemli bilgi verir [62].

Kristallerin elastik sabitleri, kristal yüzeye uygulanan zor (stress) ile kristalin verdiği tepkinin zorlanma (strain) bir ölçüsüdür. Yani, kristalin elastik sabiti zor ile zorlanmanın oranı şeklinde ifade edilir. Zor-zorlanma ilişkisinden esnekliğin doğrusal olduğu kabul edilirse, kristalin elastik sabiti,  $\sigma_{ij}$  zor tensörü ile  $\varepsilon_{ij}$  zorlanma tensörü olmak üzere,

$$\sigma_i = c_{ij} \varepsilon_j \quad (4.1)$$

şeklinde ifade edilir. Bu ifadede zor tensöründeki  $\sigma_{ij}$  kuvvet yönünü ve  $j$  indisi uygulandığı yüzeyi gösterir. Elastik sabitler, zor ve zorlanmada üç gerilme ve üç kayma toplam altı bileşene sahiptir.

Kristalde tersinir bir deformasyon meydana geldiğinde, enerji korunumlu olduğundan, uygulanan bir zorun yaptığı iş, kristalin iç enerji artışına eşit olmalıdır. Bu durum Einestein'in "toplam kuralı" ilkesine dayanarak,

$$dW = \sigma_{ij} d\varepsilon_{ij} = dU \equiv \frac{\partial U}{\partial \varepsilon_{ij}} d\varepsilon_{ij} \quad (4.2)$$

eşitliği ile ifade edilir. Bu eşitlikte,

$$\sigma_{ij} = \frac{\partial U}{\partial \varepsilon_{ij}} \quad (4.3)$$

olduğu görülür. Zorun büyüklüğü uygulanan kuvvetin yüzey alanına oranıdır. Zor tensörünün diagonal elemanları kristali germe ya da sıkıştırma eğilimindedir. Bu diagonal elemanlar germe eğiliminde ise pozitif, sıkıştırma eğiliminde ise negatif olur. Negatif bir diagonal eleman basıncı temsil eder. Katıdaki deformasyonlar zorlanma matrisi ile tanımlanır. Numuneye zor uygulandığında kristal  $r'=r+u$  kadar yer değiştirir. Bir zorlanmış katının farklı kısımları farklı miktarda yer değiştirir. Bundan dolayı  $u$  yer değiştirmesi kristalin orijinal konumunun fonksiyonudur. Eş. 4.2'yi  $\varepsilon_{kl}$ 'ye göre türev alıp, Eş. 4.3'de elde edilen  $\sigma_{ij}$  yerine konulursa,

$$c_{ijkl} = \frac{\partial^2 U}{\partial \varepsilon_{kl} \partial \varepsilon_{ij}} \quad (4.4)$$

eşitliği elde edilir. Burada  $c$  esneklik tensörü olup 81 elemanlıdır. Zor ve zorlanma tensörleri simetrik olduğundan indisler birbirlerinin yerini alıp  $c_{ijkl} = c_{jikl} = c_{ijlk}$  şeklinde ifade edilebilir. Bu durumda  $c$ 'nin bağımsız bileşen sayısı 36'ya düşer. Buna ilaveten, elastik deformasyon sırasında yapılan iş, yalnızca zorlanmanın fonksiyonu olup alınan mesafeden bağımsız olduğundan,

$$\frac{\partial^2 U}{\partial \varepsilon_{ij} \partial \varepsilon_{kl}} = \frac{\partial^2 U}{\partial \varepsilon_{kl} \partial \varepsilon_{ij}} \quad (4.5)$$

şeklinde kısmi türevli olarak ifade edilebilir. Eş. 4.4 ve Eş. 4.5 birlikte düşünüldüğünde  $c_{ijkl} = c_{klij}$  olacağı görülür. Buradan da  $c$ 'nin bağımsız bileşen sayısı 21'e düşer. Kristal yapının simetrisinden dolayı bağımsız bileşen sayısı azalır. Genel olarak bu bileşenler

kısaca 6x6'lık  $c_{\alpha\beta}$  matrisi şeklinde gösterilir.  $c_{\alpha\beta}$  -  $c_{ijkl}$  matrisleri arasındaki ilişki Çizelge 4.1'de verilmiştir.

Çizelge 4.1.  $c_{\alpha\beta}$  -  $c_{ijkl}$  tensörlerinin indisleri arasındaki Voigt bağıntıları

Tensör notasyon (ij veya kl)	11	22	33	23 veya 32	13 veya 31	12 veya 21
Matris notasyon ( $\alpha$ veya $\beta$ )	1	2	3	4	5	6

Yukarıdaki çizelgeye bakıldığında, örneğin  $C_{1122}$  yerine  $C_{12}$  alınabilir. Matrisler arasındaki ilişkilerden Eş. 4.1,

$$\sigma_{\alpha} = \sum_{\beta=1}^6 c_{\alpha\beta} \varepsilon_{\beta} \quad (4.6)$$

şeklinde yazılabilir. Burada

$$\sigma_{\alpha} = \sigma_{ij} \quad (4.7)$$

$$\varepsilon_{\beta} = \begin{cases} \varepsilon_{kl}, & \beta \in \{1,2,3\}; \\ 2\varepsilon_{kl}, & \beta \in \{4,5,6\}. \end{cases} \quad (4.8)$$

bağıntıları geçerlidir. Eşitliklerde görüldüğü gibi sistemin kristal yapısının simetrik durumundan dolayı  $c_{\alpha\beta}$ 'nin bağımsız bileşen sayısı azalır. Örneğin kübik kristaller için üç tane;  $c_{11} \equiv c_{22} \equiv c_{33}$ ;  $c_{12} \equiv c_{13} \equiv c_{23}$ ;  $c_{44} \equiv c_{55} \equiv c_{66}$ ; diğerleri için  $c_{\alpha\beta} \equiv 0$ , elastik sabiti olabilir [63]. Bundan dolayı kübik kristallerin yapısal özelliklerini belirlemek için üç tane bağımsız elastik sabiti ( $c_{11}$ ,  $c_{12}$ ,  $c_{44}$ ) yeterlidir.

Bağımsız elastik sabitler pozitif olup mekaniksel olarak kararlı yapılar için kararlılık şartlarını sağlamalıdır. Born kararlılık kriterleri olarak bilinen kübik yapıların mekanik kararlılık şartları aşağıda verilmiştir [64-66].

$$C_{11} > 0, C_{12} > 0, C_{44} > 0, C_{12} > C_{44}, C_{11} + 2C_{12} > 0, C_{11} - C_{12} > 0$$

#### 4.1.2. Elastik modüller

Elastik sabiti tek kristal yapıları, elastik modüller ise çoklu kristal yapıların tanımlanmasında önemli parametrelerdir. Bulk modül (B), shear modül (G) ve Young modül (E) elastik modülleri olarak bilinir. Bulk modülü, uygulanan basınç ile hacimdeki değişime karşı tepkinin bir ölçüsüdür. Yani uygulanan basınç ile malzemenin sıkıştırılma özelliğini belirten bir niceliktir. Shear modülü, shear (kayma) zorlanması üzerine tersinir deformasyonlara karşı tepkinin bir ölçüsüdür. Bir bakıma shear zorlaması altındaki kristalin gösterdiği tepkidir. Young modülü ise, malzemeye uygulanan gerilme kuvvetine karşı oluşan tepkinin bir ölçüdür. Young modülü, malzeme üzerinde oluşan zor/zorlanma oranı olarak da tanımlanabilir.

Bağımsız elastik sabitleri kullanılarak Voight-Ruess-Hill (VRH) yaklaşımı ile Bulk modül, Shear modül ve Young modül aşağıdaki denklemlerden [67],

$$B = \frac{1}{2} B_V + \frac{1}{2} B_R \quad (4.9)$$

$$G = \frac{1}{2} G_V + \frac{1}{2} G_R \quad (4.10)$$

$$E = \frac{9BG}{3B + G} \quad (4.11)$$

elde edilir. Burada V ve R, Voight ve Reuss yaklaşımlarını ifade eder.

#### 4.1.3. Poisson oranı

Bir kristalin, yanal deformasyonunun eksensel deformasyonuna oranı, Poisson oranı ( $\nu$ ) olarak bilinir [68]. Poisson oranı, bileşiklerin bağlanma dereceleri ve karakteri hakkında bilgi verir. Bulk ve shear modülleri kullanarak Poisson oranı ( $\nu$ ),

$$\nu = \frac{3B - 2G}{2(3B + G)} \quad (4.12)$$

eşitliğinden hesaplanabilir.  $\nu$  değeri 0.1'e yakın ise güçlü kovalent, 0.25 değerine yakın olduğunda ise iyonik bileşikler olduğu söylenebilir [69]. Hesaplanan bu değerlerden bileşiklerin kovalent veya iyonik bağlanma karakteri gösterdiği söylenebilir. Ayrıca, bileşiklerin Shear ve Bulk modüllerinin oranı (G/B) 1.1 civarında ise kovalent, 0.8 civarında ise iyonik karakterin baskın olduğu söylenebilir.

#### 4.1.4. Sertlik

Sertlik, katı malzemelerin kalıcı veya plastik deformasyona karşı direncini ifade eden karakteristik bir özelliğidir. Sertlik malzemelerin bulk ve shear modülleri ile ilişkilendirilebilir. VRH yaklaşımından,

$$H_V = 0.92G^{0.708}(G/B)^{1.137} \quad (4.13)$$

ifadesi elde edilir. Burada, G shear modülü ve B bulk modülüdür.

Pugh modülü (B/G) [68] ve Cauchy basıncı (C.P.=C<sub>12</sub>-C<sub>44</sub>) [70] malzemelerin kırılmalık ve sünek özelliği hakkında bilgi verir. Kırılmalık ve sünek malzemelerin B/G oranının kritik değeri 1.75'dir. B/G oranı 1.75'ten küçük ise kırılmalık, 1.75'ten büyük olduğunda ise sünek özellik gösterdiği söylenebilir.

Benzer şekilde Cauchy basıncı (C.P.) değeri negatif ise kırılmalık, pozitif olduğu durumda ise bileşiklerin sünek özelliğini gösterdiği söylenebilir.

#### 4.1.5. Mekanik özelliklerin hesaplanması

SiC, TiC ve ZrC kübik yapıların elastik sabitleri ve modülleri belirlendikten sonra VRH metodu kullanarak poisson oranı ve sertlik (H<sub>V</sub>) değerleri hesaplandı.

Bu çalışmada, elastik sabitler, elastik modüller, poisson oranı ve sertlik gibi malzemelerin mekaniksel özellikleri ab initio metodu kullanılarak kristalin birim hücrenin hacmini koruyacak şekilde küçük bir deformasyon uygulanıp enerjideki değişimden yararlanarak hesaplandı.

## 4.2. Termodinamik Özellikler

Debye sıcaklığı ( $\theta_D$ ) ve sıcaklığa bağlı dağılımı, ısı kapasitesi ( $C_V$ ), entalpi (H), entropi (S) ve serbest enerji (F) dağılımları kübik yapılu bileşiklerin termal davranışlarını belirleyen temel termodinamik özellikleri hesaplandı.

### 4.2.1. Debye sıcaklığı

Debye sıcaklığı; kristalin en yüksek titreşim modunun sıcaklığıdır ve  $\theta_D$  ile gösterilir. Elastik sabitler ve erime sıcaklığı ile ilgili önemli bir temel fiziksel özelliktir. Katıları yüksek ve düşük sıcaklık bölgelerine göre sınıflandırmada kullanılır. Katının sıcaklığı  $T$  ve Debye sıcaklığı  $\theta_D$  olmak üzere,  $T > \theta_D$  iken bütün modların  $k_B T$  enerjisine sahip olduğunu, fonon titreşimlerinin dalga boylarını küçük olduğunu,  $T < \theta_D$  iken dalga boylarının büyük olduğu söylenir. Akustik titreşimlerden dolayı düşük sıcaklıklarda titreşimsel uyarılma olur ve bu sayede düşük sıcaklıklarda Debye sıcaklığı elastik sabitlerden elde edilebilir. Yani düşük sıcaklıklarda fonon eğrisinde akustik titreşimlerin eğimi dalga hızını verir buradan da elastik sabitler elde edilerek Debye sıcaklığı hesaplanır.

Debye sıcaklığı, ısı kapasitesi, elastik sabit ve modüller, termal genleşme, bağ kuvveti ve erime sıcaklıkları ile ilişkili temel fiziksel parametrelerden biridir [71-74]. Debye sıcaklığı [71],

$$\theta_D = \frac{h}{k} \left[ \frac{3n}{4\pi} \left( \frac{N_A \rho}{M} \right) \right]^{1/3} v_m \quad (4.14)$$

denklemleri ile hesaplanır. Burada  $k_B$  Boltzman sabiti,  $h$  Planck sabiti,  $N_A$  Avogadro sayısı,  $M$  molekül ağırlık,  $n$  moleküldeki atom sayısı,  $\rho$  yoğunluk ve  $v_m$  malzemedeki ortalama dalga hızıdır. Ortalama dalga hızı,



$$v_m = \left[ \frac{1}{3} \left( \frac{2}{v_t^3} + \frac{1}{v_l^3} \right) \right]^{-1/3} \quad (4.15)$$

eşitliğinden hesaplanabilir. Aşağıdaki eşitliklerde  $v_l$  ve  $v_s$  sırasıyla boyuna ve enine dalga hızlarıdır.

$$v_l = \sqrt{\frac{(3B+4/3G)}{\rho}} \quad (4.16)$$

$$v_s = \sqrt{\frac{G}{\rho}} \quad (4.17)$$

$$G = \frac{1}{2} \left[ \frac{(C_{11} - C_{12}) + C_{44}}{5} + \frac{5C_{44}(C_{11} - C_{12})}{4C_{44} + 3(C_{11} - C_{12})} \right] \quad (4.18)$$

Burada, G ise shear modülü,  $C_{11}$ ,  $C_{12}$  ve  $C_{44}$  elastik sabitleridir. Shear(kayma) modülü, elastik sabitleri cinsinden ifade edilmiştir.

#### 4.2.2. Isı kapasitesi, entropi, entalpi, serbest enerji

Malzemelerin diğer önemli bir termodinamik parametresi ısı kapasitedir. Isı kapasitesi (C), malzemedeki kristallerin oluşturduğu sistemin sıcaklığını 1 derece arttırmak için gerekli olan ısı miktarı olarak tanımlanabilir. Sabit basınç altındaki ısı kapasitesi  $C_p$  ve sabit hacim altındaki ısı kapasitesi  $C_v$  şeklinde ifade edilir.

Isı kapasitesi, ısı iletim süreci, titreşim hakkında temel bilgiler sağlar ve sistemin doğasını yansıtır [75]. Fonon durum yoğunluk spektrumundan quasi-harmonik Debye model yaklaşımını kullanarak bir kristalin ısı kapasitesi, entalpi, serbest enerji ve entropi gibi termodinamik parametreler incelenebilir [76]. Debye modele göre ısı kapasitesi,

$$C_v(T) = 9Nk_B \left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3 \int_0^{\theta_D} \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} dx \quad (4.19)$$

şeklinde ifade edilir [77]. Burada  $N$  hücre başına düşen atom sayısı,  $k_B$  Boltzman sabiti,  $x = \hbar\omega/k_B T$  and  $\theta_D$  Debye sıcaklığıdır.

Isı kapasitesi, fonon durum yoğunluğunu kullanarak bir quasi-harmonik yaklaşımı yardımıyla

$$C_v = k \int \frac{\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right)^2 \exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right)}{\left[\exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right) - 1\right]^2} F(\omega) d\omega \quad (4.20)$$

ifadesi ile de elde edilebilir.

Termodinamik yasalarına göre bir termodinamik sistemin enerjisinin ölçüsü olan entalpi (H), entropi (S) ve serbest enerji (F) bir quasi-harmonik yaklaşımı ve fonon durum yoğunluğunu kullanılarak hesaplanabilir.

#### 4.2.3. Termodinamik özelliklerinin hesaplanması

Bir kristalin sıcaklığa bağlı enerji (E), entalpi (H), entropi (S), serbest enerji (F) ve ısı kapasitesi gibi termodinamik özellikleri kristalin frekansın bir fonksiyonu olarak fonon durum yoğunluğundan hesaplanabilir [76]. Termodinamik özellikleri belirlerken bir quasi-harmonik yaklaşımı uygulandı. Bu hesaplamalarda, dengede olmayan (non-equilibrium) Gibbs fonksiyonu ( $G^*$ );

$$G^*(V; P, T) = E(V) + PV + F_{fonon}(x; T) \quad (4.21)$$

denklemleri ile verilir. Burada  $E(V)$  birim hücrenin toplam enerjisi,  $P$  hidrostatik basınç sabiti,  $F_{fonon}$  titreşimsel Helmholtz serbest enerjisidir. Sıcaklığa bağlı enerji,

$$E(T) = E_{tot} + E_{zp} + \int \frac{\hbar\omega}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_{\beta}T}\right) - 1} F(\omega) d\omega \quad (4.22)$$

ifadesinden elde edilir. Burada,  $E_{zp}$  sıfır noktasındaki titreşim enerjisi,  $k_{\beta}$  Boltzman sabiti,  $\hbar$  Planck sabiti,  $F(\omega)$  fonon durum yoğunluğudur. Sıfır noktasındaki titreşim enerjisi ( $E_{zp}$ );

$$E_{zp} = \frac{1}{2} \int F(\omega) \hbar\omega d\omega \quad (4.23)$$

eşitliği ile elde edilir. Titreşim etkileri dikkate alınarak serbest enerji ( $F$ ), entropi ( $S$ ), entalpi ( $H$ ) ve ısı kapasitesi ( $C_v$ ),

$$F(T) = E_{tot} + E_{zp} + k_{\beta}T \int F(\omega) \ln \left[ 1 - \exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_{\beta}T}\right) \right] d\omega \quad (4.24)$$

$$S(T) = k_{\beta} \left\{ \int \frac{\frac{\hbar\omega}{k_{\beta}T}}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_{\beta}T}\right) - 1} F(\omega) d\omega - \int F(\omega) \ln \left[ 1 - \exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_{\beta}T}\right) \right] d\omega \right\} \quad (4.25)$$

$$H(T) = E_{tot} - E_{zp} + \int \frac{\hbar\omega}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_{\beta}T}\right)} F(\omega) d\omega \quad (4.26)$$

$$C_v = k_{\beta} \int \frac{\left(\frac{\hbar\omega}{k_{\beta}T}\right)^2 \exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_{\beta}T}\right)}{\left[\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_{\beta}T}\right) - 1\right]^2} F(\omega) d\omega \quad (4.27)$$

eşitlikleri kullanılarak elde edilir. Karbür bileşiklerin, Debye sıcaklığı ve sıcaklık dağılımı, ısı kapasitesi, entropi, entalpi ve serbest enerji dağılımları sabit basınçta ve hacimde 0-2500 K sıcaklık aralığında hesaplandı.

### 4.3. Nötronik Özellikler

Nükleer fisyon reaksiyonlarında, nötronlarla beraber radyoaktif  $\gamma$ ,  $\alpha$  ve  $\beta$  parçacıkları da yayımlanır. Bu parçacıklar insan ve diğer canlılar üzerinde öldürücü etkiler oluşturabilir. Bundan dolayı nükleer reaktörlerde kullanılan yakıtların en dış katmanında bulunan zarf malzemeleri, fisyon reaksiyonları sonucu oluşan radyoaktif materyal ve parçacıkları izole eder ve dış etkenlerle temas etmesine engel olur. Yakıt zarfı olarak kullanılacak malzemelerin etkisinde nötron soğurma-yakalama tesir kesitleri, nötron akısı, nötron çoğaltma faktörü, yakıt yanma (burnup) gibi nötronik özellikler fisyon reaksiyonları için son derece önemlidir.

#### 4.3.1. Nötron tesir kesiti

Nötronların yakıt materyaldeki çekirdekler ile etkileşme olasılığını ifade etmek için tesir kesiti kavramı kullanılmaktadır. Başka bir deyişle, tesir kesiti, bir nükleer reaksiyonun gerçekleşme olasılığının bir ölçüsüdür. Reaktör içerisinde gerçekleşen nükleer reaksiyonlardaki nötron tesir kesiti hesaplamalar oldukça önemlidir. Tesir kesiti hesaplamalarında reaktör kor içerisinde farklı doğrultulardaki nötron demetlerinin etkisi dikkate alınır. Nötron tesir kesiti, nötronun enerjisine ve hedef çekirdeğin özelliğine bağlıdır. Nötron-çekirdek reaksiyon tesir kesiti, nükleer yakıt materyalin seçimi-testleri, reaktör tasarımı ve analizleri açısından önemli bir yer tutar. Nötron tesir kesiti, mikroskobik ve makroskobik tesir kesiti şeklinde ikiye ayrılır.

*Mikroskobik tesir kesiti*; belirli bir enerjiye sahip nötronun bir çekirdek ile etkileşmesidir. Mikroskobik tesir kesiti  $\sigma$  ile gösterilir. Birimi barn ( $10^{-24}$  cm<sup>2</sup>) ya da cm<sup>2</sup>'dir. Birim zamanda gelen parçacıkların akımı  $I_a$ , birim alandaki hedef çekirdek sayısı  $N$ , çıkan parçacıkların sayısı  $R_b$  ise reaksiyon tesir kesiti [78],

$$\sigma = \frac{R_b}{I_a N} \quad (4.28)$$

şeklinde tanımlanır. Nötron-çekirdek etkileşme reaksiyonlarının her biri karakteristik bir tesir kesiti ile ifade edilir. Tesir kesiti hesaplamalarında [53]: esnek saçılma reaksiyonlarında, esnek saçılma tesir kesiti,  $\sigma_e$ ; esnek olmayan saçılma reaksiyonlarında,

esnek olmayan saçılma tesir kesiti,  $\sigma_i$ ;  $(n,\gamma)$  tepkimesinde, ışımlı yakalama tesir kesiti,  $\sigma_\gamma$ ; fisyon reaksiyonlarında, fisyon tesir kesiti  $\sigma_f$ , vb. şekilde gösterilebilir. Olası tüm nükleer reaksiyon toplam tesir kesitlerinin toplamı ise toplam tesir kesiti şeklinde ifade edilir. Toplam mikroskopik tesir kesiti;

$$\sigma_T = \sigma_a + \sigma_s \quad (4.29)$$

$$\sigma_T = \sigma_\gamma + \sigma_e + \sigma_i + \sigma_f + \dots \quad (4.30)$$

şeklinde gösterilebilir. Burada  $\sigma_a$  reaksiyondaki tüm soğurma tesir kesitlerinin toplamı yani soğurma tesir kesitini gösterirken, reaksiyondaki saçılma tesir kesitlerinin toplamı ise  $\sigma_s$  saçılma tesir kesiti şeklinde ifade edilir. Toplam  $(n,p)$ ,  $(n,\alpha)$ , yakalama, fisyon vb. tesir kesitlerini içeren toplam soğurma tesir kesiti ile esnek ve esnek olmayan mikroskopik tesir kesitlerini içeren toplam saçılma tesir kesitleri;

$$\sigma_a = \sigma_\gamma + \sigma_f + \sigma_p + \sigma_\alpha + \dots \quad (4.31)$$

$$\sigma_s = \sigma_i + \sigma_e \quad (4.32)$$

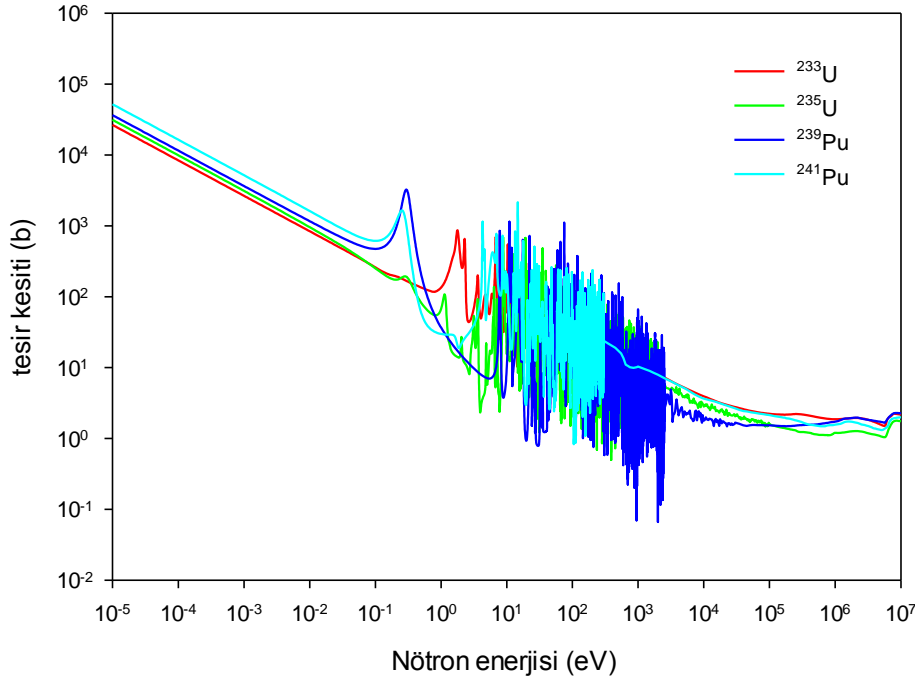
şeklinde tanımlanabilir. Kimyasal bir elementin bir izotopunun nötron soğurma tesir kesiti, nötron yakalama olasılığının bir ölçüsüdür. Reaktör kor hesaplamalarında en önemli parametrelerden olan bu karakteristik tesir kesitlerin farklı metot ve yaklaşımlar ile hesaplanabilir. Hesaplanan tesir kesitleri, saçılma matrisleri, difüzyon katsayıları gibi parametreler nötronik denklemlerinin çözümünde kullanılır. Çizelge 4.2'de reaktörlerde gerçekleşen önemli nükleer reaksiyonlar ve tesir kesitleri gösterilmiştir.

Çizelge 4.2. Nükleer reaktörlerdeki önemli nükleer reaksiyonların sınıflandırılması [53]

	Nükleer reaksiyon	gösterim	Tesir kesiti sembol	Örnek reaksiyon
Saçılma ( $\sigma_s$ )	elastik	$(n, n)$	$\sigma_e$	${}^1\text{H}(n, n)$
	inelastik	$(n, n')$	$\sigma_{in}$	${}^{238}\text{U}(n, n')$
Soğurma ( $\sigma_a$ )	Işımlı yakalama	$(n, \gamma)$	$\sigma_\gamma$	${}^{238}\text{U}(n, \gamma)$
	fisyon	$(n, f)$	$\sigma_f$	${}^{235}\text{U}(n, f)$
	Yüklü-parçacık yayınlama	$(n, p)$	$\sigma_p$	${}^{14}\text{N}(n, p)$
		$(n, \alpha)$	$\sigma_\alpha$	${}^{10}\text{B}(n, \alpha)$
	Nötron yayınlama	$(n, 2n)^a$	$\sigma_{(n, 2n)}$	${}^9\text{Be}(n, 2n)$

Çizelge 4.2’de gösterilen reaksiyonlardan reaktör kor hesaplamaları için en önemlileri fisyon reaksiyonları ve bu reaksiyonların tesir kesitleridir. Reaktör kor içerisinde gerçekleşen nötron-çekirdek etkileşmelerinden fisil materyallerin çekirdeklerine ait fisyon tesir kesitleri Şekil 4.1’de gösterilmiştir. Tesir kesitleri, fisyon ürün çekirdek verimi ve toplam nötron üretimi verileri JANIS (Java-based Nuclear Data Information Software) kullanarak ENDF/B-VI.8 kütüphanesinden elde edilmiştir.

Tesir kesiti hesaplamalarında, özellikle birden fazla nükleer yakıt izotop çekirdeğin bulunduğu reaktör kor içerisinde sadece bir nötronun belli bir çekirdekle etkileşmesi değil belli hacim içerisindeki tüm çekirdeklerle olan etkileşmeler dikkate alınmalıdır.



Şekil 4.1. Fisil çekirdeklerin mikroskobik tesir kesitlerinin değişim

*Makroskobik tesir kesiti*; makroskobik tesir kesiti ise nötronların etkileşebileceği materyal hacmi içindeki tüm çekirdeklerin etkin alanını temsil eder.  $\Sigma$  ile gösterilir ve birimi  $\text{cm}^{-1}$ ’dir. Bir  $r$  konumundaki bir  $i$  çekirdeğinin mikroskobik tesir kesiti ( $\sigma_x^i$ ) ve  $N^i$  atom yoğunluğu olmak üzere  $x$  reaksiyonun makroskobik tesir kesiti,

$$\Sigma_x(\vec{r}, E, t) = \sum_i N^i(\vec{r}, t) \sigma_x^i(E) \quad (4.33)$$

ve  $N^i$  atom yoğunluğu;

$$N^i(\vec{r}, t) = \frac{\rho^i(\vec{r}, t)}{M^i} N_A \quad (4.34)$$

şeklinde ifade edilir [52]. Burada,  $M^i$  atom kütlesi,  $\rho^i$  madde içerisindeki  $i$  yoğunluğu ve  $N_A$  Avagadro sayısıdır. Toplam Makroskopik tesir kesiti ise saçılma ve soğurma tesir kesitlerinin toplamına eşittir.

$$\Sigma_t(\vec{r}, E, t) = \Sigma_s(\vec{r}, E, t) + \Sigma_a(\vec{r}, E, t) \quad (4.35)$$

Nötron transport denklemi ve difüzyon denkleminin çözümlerinde genel olarak makroskopik tesir kesitleri kullanılır.

#### 4.3.2. Nötron çoğaltma faktörü

Reaktör sonsuz büyüklükte bir ortam olarak değerlendirildiğinde nötron çoğaltma faktörü olarak  $k_\infty$  tanımlanır (burada yüzey boyunca nötron kaçağı kaybı ihmal edilir). Reaktör kor içerisinde soğurulan ve kor dışına kaçan nötronların sayısı ile yeni üretilen nötronlar arasındaki oran etkin çoğaltma faktörü olarak ifade edilebilir. Kısaca  $k_\infty$ , ortalama olarak bir fisyonun diğerine üretilen nötron sayısıdır. Sonlu büyüklükteki bir ortam için etkin nötron çoğaltma faktörü ( $k_{eff}$ ) ifadesi kullanılır. Çoğaltma faktörü, nükleer reaktör tasarım ve hesaplamaları için en temel parametrelerden biridir. Etkin çoğaltma faktörü, reaktörün kritikliğini belirlemek için önemli bir parametredir [52, 53].

Reaktör kor içerisinde fizyon zincir reaksiyonlarının devam edebilmesinde nötronlar önemli rol oynar. Zincir reaksiyonlarının devamı için  $k_{eff} \geq 1$  olmalıdır. Fisyon veya dış kaynak tarafından üretilen nötronların bir kısmı fisil olmayan maddeler tarafından soğurulur ve bir kısmı da reaktör kor içerisinde dışarı sızar. Fisyon reaksiyonları sonucunda üretilen nötronların hepsi yeni bir fisyon reaksiyonunu gerçekleştirme fırsatı olmayabilir. Üretilen nötronların, soğurulan ve sızan nötronların sayısal oranından etkin çoğaltma faktörü yazılabilir [53].

$$k_{eff} = \frac{\text{Fisyondan üretilen nötronların}}{\text{Soğurulan nötronlar + reaktör dışına sızan nötronlar}} \quad (4.36)$$

$k_{eff}=1$  durumu; üretilen nötron sayısı ile soğurulan ve sızan nötron sayısı eşit olduğundan zincir reaksiyonu zamana bağlı değildir. Bu durumda, fisyon zincir reaksiyonları kendiliğinden sürdürülebilir.  $k_{eff}=1$  durumu kritik durum olarak bilinir ve reaktörde enerji çıkışını kararlı tutmak için istenen bir durumdur.

$k_{eff} < 1$  durumu; üretilen nötron sayısı, soğurulan ve sızan nötronların sayısından daha düşüktür. Bu durumda, zincir reaksiyonları kendiliğinden sürdürülemez ve belli bir zamandan sonra reaksiyonlar biter.  $k_{eff} < 1$  durumu, kritik altı durum olarak bilinir.

$k_{eff} > 1$  durumu; üretilen nötron sayısı, soğurulan ve sızan nötronların sayısından fazladır. Nötron akısı artar ve zincir reaksiyonlarında artış olur.  $k_{eff} > 1$  durumu, süperkritik (kritik üstü) durum olarak bilinir.

### 4.3.3. Nötron akısı

$I$  şiddetindeki nötron demeti hedefe çarptığında,  $\text{cm}^3/\text{sn}$  başına çarpışma sayısı

$$F = \Sigma_t I \quad (4.37)$$

ile verilir. Burada  $\Sigma_t$  toplam makroskobik tesir kesitidir. Nötron demetinin şiddetleri farklı olsa da, tüm nötron demetlerinin aynı enerjide olduğu varsayılır [53]. Nötronların çekirdek ile etkileşimi geliş yönünden (açıdan) bağımsızdır. Toplam etkileşim oranı;

$$F = \Sigma_t (I_A + I_B + I_C + \dots) \quad (4.38)$$

Nötronların aynı enerjiye sahip oldukları varsayıldığından toplam nötron etkileşim oranı,

$$F = \Sigma_t (n_A + n_B + n_C + \dots)v \quad (4.39)$$



şeklinde de ifade edilir. Burada,  $n_A$ ,  $n_B$ ,  $n_C$  çeşitli nötron demetlerindeki nötronların yoğunluğu ve  $v$  nötron hızıdır. Hedefe çarpan nötronların yoğunluğu  $n$ ,

$$n = n_A + n_B + n_C + \dots \quad (4.40)$$

ile ifade edildiğinden Eş. 4.39,

$$F = \sum_t n v \quad (4.41)$$

ile gösterilebilir. Bu ifadede  $n v$ , nötron akısı olarak tanımlanır ve nötron akısı,

$$\phi = n v \quad (4.42)$$

ile ifade edilebilir [53]. Nötron akısının birimi nötron/cm<sup>2</sup>.sn'dir. Bu ifade, bir enerji dağılımına sahip nötronlar için genişletilebilir. Birim enerji başına nötron yoğunluğu ( $n(E)$ ) ve enerjileri  $E$  ile  $E+dE$  aralığında nötronların cm<sup>3</sup> başına sayısı ( $n(E)dE$ ) olmak üzere tek enerjili nötronların etkileşme hızı,

$$dF = \sum_t(E) \times n(E) dE \times v(E) \quad (4.43)$$

ile gösterilir. İntegral üzerinden toplam etkileşme hızı ifade edilirse, bu etkileşme hızı

$$F = \int_0^{\infty} \sum_t(E) n(E) v(E) dE = \int_0^{\infty} \sum_t(E) \phi(E) dE \quad (4.44)$$

şeklini alır [53]. Burada integral tüm nötron enerji grupları üzerinden alınmaktadır. Farklı reaksiyonlar için benzer tepkime hızları elde edilebilir. Sırasıyla cm<sup>3</sup>.s başına saçılma ve soğurma çarpışmalarının sayısı,

$$F_s = \int_0^{\infty} \sum_s(E) \phi(E) dE \quad (4.45)$$

$$F_a = \int_0^{\infty} \Sigma_a(E) \phi(E) dE \quad (4.46)$$

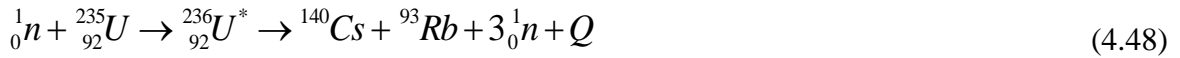
olacaktır. Reaktör güç ( $P$ ), verilen bir  $V$  hacminde, nötron akısı, makroskopik fisyon tesir kesiti ve fisyon başına salınan enerji üzeriden

$$P = \phi \Sigma_f V E_R \quad (4.47)$$

şeklinde ifade edilir [53]. Burada reaktör güç nötron akısı ve nötron yoğunluğuyla doğru orantılıdır. Reaktör kontrol için bu parametreler nötron akısının seviyesinin durumuna göre kontrol edilir.

#### 4.3.4. Fisyon

Nükleer fisyon reaksiyonlarında, bir nötronun  $^{235}\text{U}$  ve  $^{239}\text{Pu}$  gibi ağır çekirdekler tarafından soğurulması sonucu meydana gelen birleşik çekirdeğin iki ya da daha fazla parçaya bölünmesidir [52, 53]. Fisyon reaksiyonları sonucu meydana gelen ürün çekirdekler belli bir olasılık dağılımına göre meydana gelirler. Fisyonun ürün çekirdeklerinin olasılık dağılımı, kütle dağılım eğrisi şeklinde verilmiştir (Şekil 4.2). Fisyon reaksiyonu sonucunda bir ya da birden fazla ürün çekirdek, nükleer parçacık ve bir miktar enerji meydana gelir:

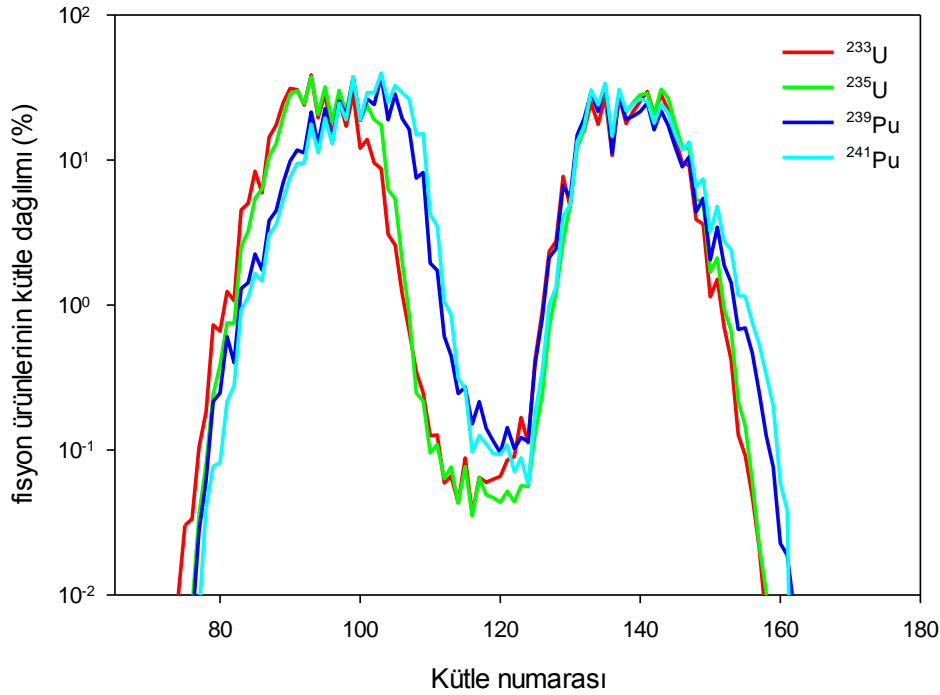


Burada  $Q$ , reaksiyonda açığa çıkan enerjiyi göstermektedir. Bu enerji, reaksiyona giren çekirdeklerle reaksiyon sonucu oluşan çekirdeklerin kütle farkıdır. Bu reaksiyonlarda gelen nötron, hedef çekirdek ile çarpışıp bileşik çekirdek formuna geçer. Bu durumda fisyon oluşması için bileşik çekirdeğin bağlanma enerji ile kinetik enerjisinin toplamı (uyarılma enerjisi) kritik enerjiden büyük olmalıdır. Kritik enerji ( $E_k$ ), fisyonun gerçekleşmesi için gerekli olan minimum uyarılma enerjisidir. Bileşik çekirdeğin bağlanma enerjisi, fisyon için gerekli  $E_k$  enerjiden büyükse, hiç kinetik enerjisi olmayan sahip nötronlarla da fisyonu gerçekleştirebilir [53]. Çizelge 4.3'de bazı radyoaktif hedef çekirdeklerin  $E_k$  ve son nötronun bağlanma enerjileri gösterilmiştir.

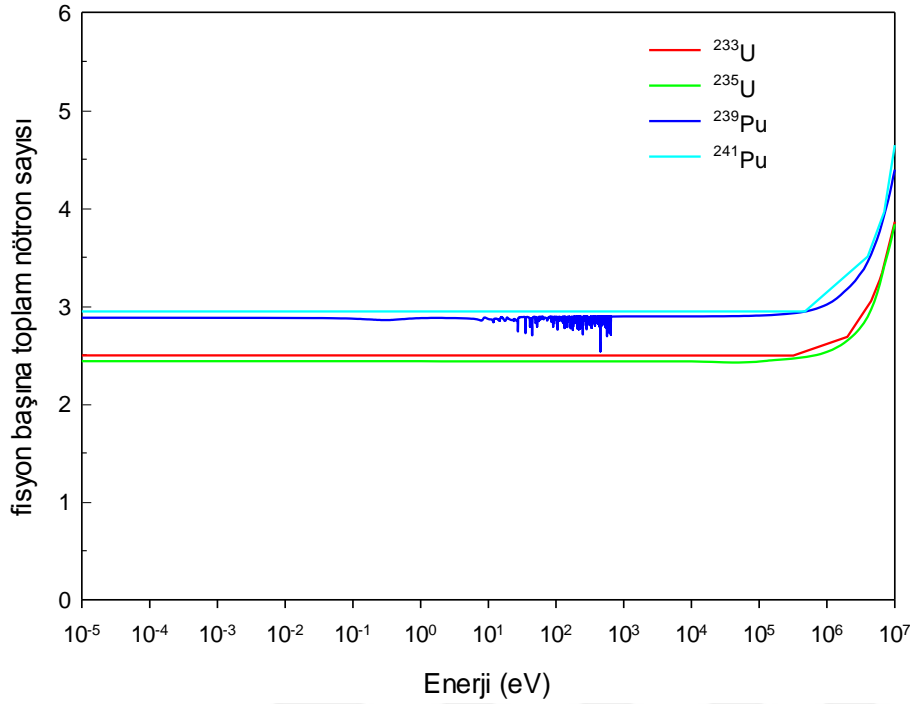
Çizelge 4.3. Son nötronun kritik enerjisinin ve bağlanma enerjisi [53]

Hedef çekirdek	Kritik enerji ( $E_k$ )	Son nötronun bağlanma enerjisi ( $E_{Bn}$ )	$E_{Bn} - E_k$
$^{232}\text{Th}$	7,5 MeV	5,4 MeV	-2,1 MeV
$^{238}\text{U}$	7,0 MeV	5,5 MeV	-1,5 MeV
$^{235}\text{U}$	6,5 MeV	6,8 MeV	0,3 MeV
$^{233}\text{U}$	6,0 MeV	7,0 MeV	1,0 MeV
$^{239}\text{Pu}$	5,0 MeV	6,6 MeV	1,6 MeV

$^{235}\text{U}$  için tipik nötron-çekirdek fisyon reaksiyonu Eş. 4.48'de verilmiştir. Diğer fisil yakıt çekirdeklerin fisyon reaksiyonları da benzer özellikler gösterir. Fisil yakıt çekirdeklerin fisyon reaksiyonundaki fisyon ürünleri arasında Şekil 4.2'deki gibi bir dağılım vardır.

Şekil 4.2.  $^{233}\text{U}$ ,  $^{235}\text{U}$ ,  $^{239}\text{Pu}$  ve  $^{241}\text{Pu}$  çekirdeklerin fisyonundaki ürünlerin kütle dağılımı

Şekil 4.2 fisil çekirdeklerin fisyon reaksiyonu sonucu fisyon ürünlerinin olasılığını verir. Fisyon reaksiyonu sonucunda olasılık açısından oluşan önemli fisyon ürünleri; Brom (Br), Rubidyum (Rb), Iyot (I), Sezyum (Cs), Kripton (Kr) ve Ksenon (Xe) gibi çekirdeklerdir. Oluşan bu nükleer çekirdekler fisyon reaksiyonundan belli bir süre sonra meydana gelen gecikmiş nötronların kaynağını oluşturur.



Şekil 4.3. Bazı fisil çekirdeklerin fisyon başına yayımlanan ortalama nötron sayısı

Fisyon ve diğer tür nükleer reaksiyonlar ile çeşitli nötron kaynaklarından nötronlar elde edilebilir. Nötronlar, yüklü parçacıklar gibi hızlandırılmaz, fakat yüksek enerjili enerjili nötronlar farklı çarpışmalar yaparak yavaşlatılabilir [52, 53, 78]. Elde edilen nötron demetleri sahip oldukları enerjiye göre sınıflandırılabilir:

Termal nötronlar:  $E \sim 0,025 \text{ eV}$

Epitermal nötronlar:  $E \sim 1 \text{ eV}$

Hızlı Nötronlar:  $E = 100 \text{ keV}-10 \text{ MeV}$

Fisyon reaksiyonu sonucunda yüksek enerjili nötronlar meydana gelir. Bu nötronlar daha sonra yakıt, soğutucu ve reaktor kor içerisindeki diğer maddeler ile etkileşerek enerjisini kaybedip yavaşlama (slowing down) davranışı gösterir. Yavaşlama süresince nötronlar ya soğurular ya da reaktör kor yapısına göre termal denge durumuna ulaşır.

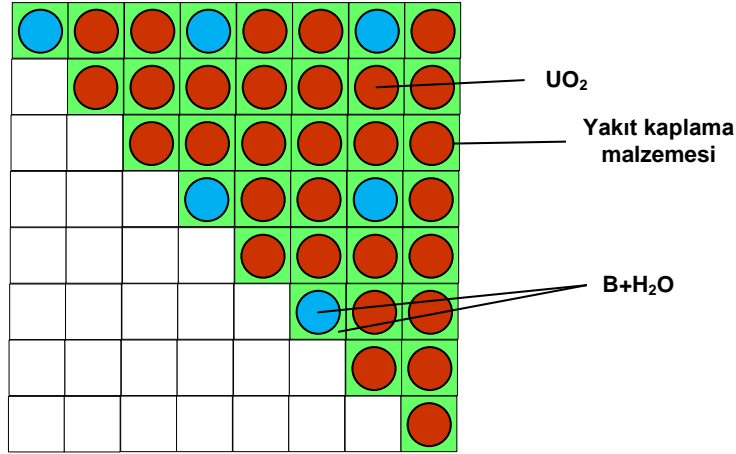
#### 4.3.5. Nötronik özelliklerin hesaplanması

Nötronik hesaplamaları yapabilmek için referans olarak Westinghouse türü bir 17x17 PWR yakıt demeti modellemesi DRAGON (3.06) programı [79] ile yapıldı. Doğru sonuçlar elde etmek ve iyi bir modelleme için yakıt demetinin: yakıt sıcaklığı, moderatör/soğutucu sıcaklığı,  $^{235}\text{U}$  zenginleştirme oranı, bor konsantrasyonu, moderatör/soğutucu yoğunluğu gibi referans değerler kullanıldı. Tipik PWR reaktörünün referans değerleri Tablo 4.3'de verilmiştir.

Çizelge 4.4. PWR yakıt demeti değerleri [80]

Parametre	Değer
Yakıt sıcaklığı, K	900
Yakıt yoğunluğu, g/cm <sup>3</sup>	10,0701
Yakıt hücreler arası, cm	1,265
Yakıt birim hücre yarıçapı, cm	0,4025
Yakıt zarfı dış yarıçapı, cm	0,475
Moderatör yoğunluğu, g/cm <sup>3</sup>	0,72
Moderatör sıcaklığı, K	600
Yakıt zarf malzemesi	TiC, ZrC, SiC, Zr-II, 304SS, 310SS, FeCrAl, APMT <sup>TM</sup>
Zarf malzemesinin sıcaklığı, K	600
Control çubuk pozisyonu iç yarıçapı, cm	0,573
Control çubuk pozisyonu dış yarıçapı, cm	0,613
Ortalama boron konsantrasyonu, ppm	630

Yakıt demetinin 1/8 simetrik geometrisini kullanarak PWR yakıt demeti modellendi (Şekil 4.4). Yakıt demetinin bileşenleri UO<sub>2</sub>, zarf malzemesi ve moderatör/soğutucu karışım şeklinde tanımlandı.



Şekil 4.4. Yakıt demeti 1/8 simetrik geometrisi

Nötronik hesaplamalar için SiC, TiC ve ZrC karbür malzemeler ile birlikte Zr-II, öztenitik tür 310 (310SS), paslanmaz çelik tür 304 (304SS), FeCrAl alaşımı, APMT™ alaşımı zarf malzemelerin modellenmesi yapıldı. Karbür malzemelerin  $k_{eff}$ , yakalama tesir kesitleri ve nötron akı değerleri farklı enerji gruplarına bağlı olarak hesaplandı.

## 5. BULGULAR VE TARTIŞMA

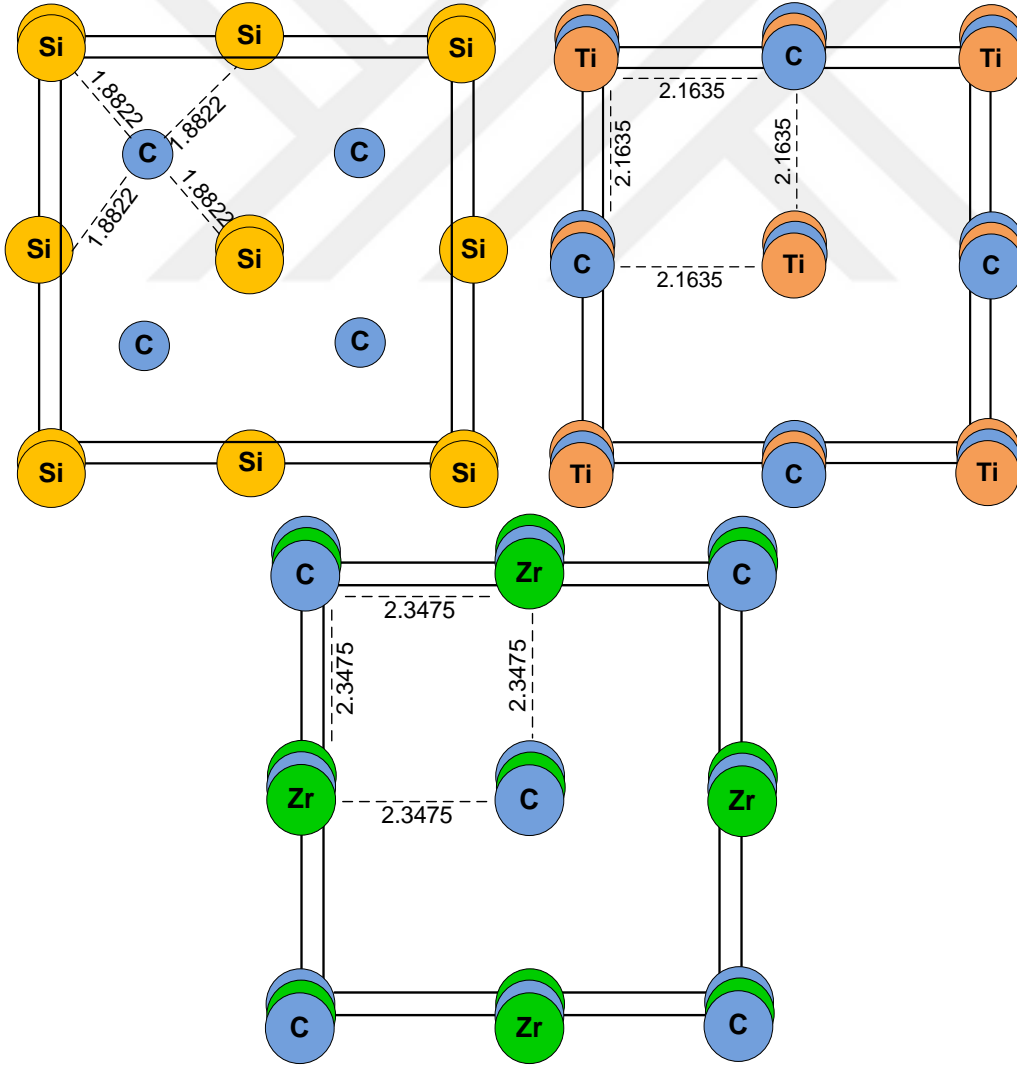
Bu tez çalışmasında, kübik yapılı SiC, TiC ve ZrC karbür bileşiklerin mekanik ve termodinamik özellikleri yoğunluk fonksiyonel teorisindeki (DFT) *ab initio* metodu ile incelendi. İncelenen kübik yapılı karbür bileşiklerin örgü parametreleri, elastik sabitleri, elastik modülleri, poisson oranı, sertlik, Cauchy basınç (C.P.), B/G, G/B oranları ve kübik yapıların sıkıştırılabilirliği hesaplandı. Kübik yapıların enine, boyuna ve ortalama dalga hızları hesaplandı ve elde edilen değerler kullanılarak Debye sıcaklığı hesaplandı. Daha sonra fonon durum yoğunluğu ve quasi-harmonik Debye yaklaşımı kullanılarak sıcaklığa bağlı Debye sıcaklık dağılımı, ısı kapasitesi, entalpi, serbest enerji ve entropi sıcaklık dağılımları elde edildi. Bu hesaplamalarda elektronlar ile çekirdek iyonları arasındaki etkileşim norm-korunumlu ve ultrasoft pseudo potansiyelleri kullanıldı. Değiş-tokuş korelasyon etkileri için GGA yaklaşımının Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) fonksiyoneli dikkate alındı. Atomik sözde-potansiyeller, Ti:  $3d^{10} 4s^2$ , Zr:  $4d^{10} 5s^2$ , Si:  $3s^2 3p^6$ , ve C:  $2s^2 2p^6$  atomların elektron dağılımları ile üretildi. Minimum enerji kullanarak kararlı yapıları elde etmek için Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno (BFGS) geometrik optimizasyon metodu uygulandı. Düzlem dalgaların geometrik optimizasyonu için 500 ile 600 eV cut-off değerleri ile 6x6x6 k-point değerleri kullanıldı.

Nükleer reaktörlerde yakıt zarfında alternatif malzeme olarak kullanılan karbür malzemelerin nötronik özellikleri DRAGON program ile hesaplandı. 1/8 simetri geometrisi kullanılarak bir 17x17 PWR reaktörün yakıt demeti modellendi. Yakıt demeti modellenirken kartezyen geometrisi kullanıldı. UO<sub>2</sub> yakıt yoğunluğu 10.07, yakıt sıcaklığı 900 K, yakıt zarf malzemesi ve soğutucu/moderator sıcaklığı da 600 K olarak uygulandı. UO<sub>2</sub> yakıtı, uranyumun <sup>238</sup>U, <sup>235</sup>U, <sup>234</sup>U izotopların farklı konsantrasyonundan oluşmaktadır. Yakıttaki <sup>235</sup>U izotopunun ağırlıkça farklı oranları kullanılarak sırasıyla % 3.00 (referans durum), % 4.00 ve % 4.90 yakıt zenginleştirme oranları uygulandı (Çizelge 5.6). SiC, TiC ve TiC karbür malzemeler ile Zirkonyum-II alaşımı (Zr-II), paslanmaz çelikler (310SS ve 304SS), ferritik alaşımlar (FeCrAl ve APMT™) aynı analiz koşulları uygulandı. Nötron difüzyon metodu kullanılarak karbür malzemelerin nötron yakalama (capture) tesir kesiti, yakıt yanma analizi (burnup), nötron akı spektrumu, nötron çoğaltma faktörü ( $k_{eff}$ ), farklı zenginleştirme oranına ve enerjiye bağlı olarak hesaplandı. Karbür malzemeler ile diğer beş farklı yakıt zarf malzeme için nötronik parametreler hesaplandı.

Karbür malzemeler için elde edilen değerler birbirleriyle ve diğer malzemeler ile karşılaştırıldı.

### 5.1. Kübik Yapılı Karbür Bileşiklerin Mekanik Özellikleri

Kübik yapılu TiC, ZrC ve SiC bileşiklerin denge durumundaki en kararlı yapı için geometrik optimizasyon yapıldı. Yüzey merkezli kübik yapılu (F-43M) SiC bileşiğinin birim hücreinde 8 tane (4 tane Si 4 tane C) atom vardır. Yüzey merkezli + cisim merkezli kübik yapılu (FM-3M) TiC ve ZrC bileşiklerin yapısında ise 8 tane (4 Ti 4 C ve 4 Zr 4 C) atom vardır. SiC, TiC ve ZrC bileşiklerinin elde edilen kristal yapıları, bağ uzunlukları ve hacimleri Şekil 5.1 ve Çizelge 5.1’de verildi.



Şekil 5.1. DFT ile elde edilen kübik TiC, ZrC ve SiC bileşiklerinin kristal yapıları ve bağ uzunlukları



Çizelge 5.1. Karbür bileşiklerin DFT ile elde edilen kristal yapı, bağ uzunlukları ve hacimleri

Bileşik	Yapı	Uzay grubu	Bağ yapı- uzunluğu (Å)	Hacim $V(\text{Å})^3$
SiC	Cubic	F-43M -216	Si-C ; 1,8822	82,19
TiC	Cubic	FM-3M -225	Ti-C ; 2,1635	81,01
ZrC	Cubic	FM-3M -225	Zr-C; 2,3475	103,49

Çizelge 5.1 incelendiğinde benzer kübik yapıdaki karbür bileşiklerin bağ uzunlukları hacim büyüklüğüne bağlı olarak  $ZrC > TiC > SiC$  şeklinde elde edildi.

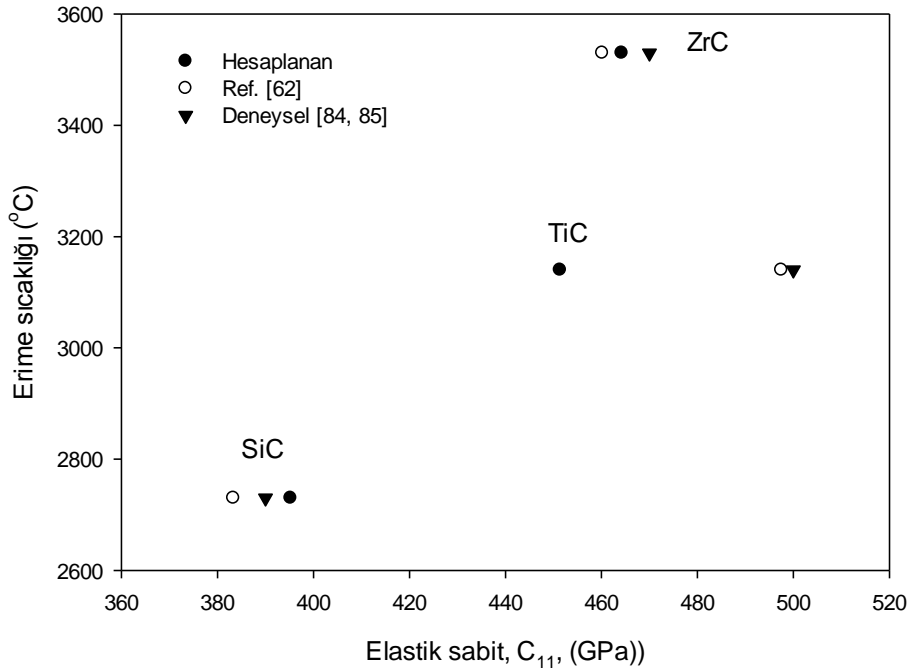
Kristal yapıları Şekil 5.1’de verilen kübik SiC, TiC ve ZrC yapıların hesaplanan örgü sabiti, elastik sabitleri ve C.P. değerleri ile diğer teorik ve deneysel sonuçlar Çizelge 5.2’de verildi. TiC, ZrC ve SiC bileşiklerin örgü parametreleri ( $a_0$ ) sırasıyla 4,38 Å, 4,33 Å ve 4,7 Å olarak bulundu. Hesaplanan  $a_0$  değerleri teorik ve deneysel sonuçlar ile uyumlu olduğu görülmektedir. Elastik sabitler sıfır sıcaklık ve sıfır basınç altında Born mekanik kararlılık şartlarını sağladığı görüldü. Elde edilen elastik sabitleri diğer teorik ve deneysel değerler ile karşılaştırıldı. Hesaplanan örgü sabiti ve elastik sabitlerinin diğer teorik ve deneysel sonuçlar ile karşılaştırıldığında elde edilen sonuçların uyumlu olduğu görülmektedir.

Kübik yapıların Cauchy basıncı (C.P.) değerlerine bakılarak yumuşaklık özellikleri belirlenebilir. C.P. değeri pozitif ise malzeme yumuşak, eğer negatif ise kırılğan özelliği gösterir [70]. Çizelge 5.2.’de TiC, ZrC ve SiC bileşikler için hesaplanan C.P. değerleri negatiftir. Hesaplanan C.P. değerler negatif olduğundan TiC, ZrC ve SiC bileşikler kırılğan özellikte olduğunu gösterir. Elde edilen sonuçlar diğer deneysel ve teorik sonuçlar ile karşılaştırıldığında uyumlu olduğu görüldü.

Şekil 5.2 karbür malzemeleri erime sıcaklığı ile elastik sabiti ( $C_{11}$ ) arasındaki ilişkiyi göstermektedir. Karbür malzemelerin erime sıcaklığının hesaplanan elastik sabitine bağlı olarak arttığı görülmektedir. Erime sıcaklığı  $ZrC > TiC > SiC$  ve  $C_{11}$  sabiti de benzer olarak  $ZrC > TiC > SiC$  olarak sıralandı.

Çizelge 5.2. Örgü sabiti ( $a_0$ ), elastik sabitler ( $C_{ij}$ ), Cauchy basıncı (C.P.)

	$a_0(\text{Å})$	$C_{11}(\text{GPa})$	$C_{12}(\text{GPa})$	$C_{44}(\text{GPa})$	C.P.
<u>SiC</u>					
Ref. [62]	4,34	383,3	125,2	239,6	-114,4
Hesaplanan	4,38	395,24	141,73	251,76	-110,03
Deney [81, 82]	4,36	390	125	256	-131
<u>TiC</u>					
Ref. [62]	4,29	497,5	143,7	143,9	-0,2
Hesaplanan	4,33	451,37	120,89	147,2	-26,31
Deney [83, 84]	4,32	500	113	175	-62,00
<u>ZrC</u>					
Ref. [62]	4,64	460,2	118,1	138,9	-28,00
Hesaplanan	4,7	464,229	113,376	146,1	-32,72
Deney [84-86]	4,68	470	100	160	-60,00



Şekil 5.2. Karbür malzemelerin erime sıcaklığı ile elastik sabiti arasındaki ilişki

Voigt-Reuss-Hill (VRH) yaklaşımı kullanılarak her bir karbür yapının elastik modüllerinin (Shear, Young ve Bulk modülleri) değerleri hesaplandı ve Çizelge 5.3.'de verildi. Kübik

yapılı SiC için;  $G= 201,7$  GPa,  $B= 226,2$  GPa,  $E=320$  GPa, TiC için;  $G= 154,4$  GPa,  $B= 231,1$  GPa,  $E= 400$  GPa, ve ZrC için;  $G= 157,8$  GPa,  $B= 230,3$  GPa,  $E=320$  GPa değerleri elde edildi. Elde ettiğimiz değerler diğer teorik ve deneysel sonuçlar ile uyumlu olduğu görülmektedir.

Hesaplanan elastik modül değerleri incelendiğinde karbür bileşiklerden TiC ve ZrC bileşiklerin, SiC bileşiğine göre daha yüksek Bulk modülü değerine ve daha düşük shear modülü değerlerine sahiptir. TiC, ZrC ve SiC bileşikler için Bulk modülü 100 GPa'dan daha büyük değerlere sahip sert malzemeler olup düşük sıkıştırılabilirliğe sahiptir. TiC, ZrC ve SiC karbür bileşiklerin sıkıştırılabilirliği sırasıyla 0,00432, 0,00434 ve 0,0044 olarak hesaplandı. Karbür bileşikler için elde edilen sonuçlardan, bileşiklerin sıkıştırılabilirliği SiC > ZrC > TiC şeklinde sıralanır. Burada incelenen bileşikler içerisinde SiC en düşük Bulk modülüne sahip olduğundan, en yüksek sıkıştırılabilirlik özelliği gösterir. Atomlar arası ortalama bağ şiddetinin bir ölçüsü olarak da kullanılan Bulk modülü sonuçlarından, SiC bileşiğin bağ şiddetinin daha zayıf olduğu söylenebilir [87].

Young modülü (E) ise, malzemeye uygulanan gerilme kuvvetine karşı oluşan tepkinin bir ölçüdür. Malzeme sert olduğundan Young modülü değerleri yüksektir. Çizelge 5.3 incelendiğinde tüm karbür malzemelerin Young modülü değerleri yüksektir.

B/G oranı malzemelerin kırılma özelliği ile ilgili önemli bir kriterdir [68]. Malzemeler için bu oran 1.75'ten küçük olursa kırılma, büyük olursa da sünek olduğunu gösterir. SiC, TiC ve ZrC malzemeler için B/G oranı sırasıyla 1,12, 1,49 ve 1,16 olarak hesaplandı. İncelenen tüm karbür bileşiklerin B/G değerleri 1.75'ten küçük olduğundan bu bileşikler kırılma bir yapıda olduğu söylenebilir.

Çizelge 5.3. Shear modülü (G), Bulk modülü (B) ve Young modülü (E), G/B oranı, Pugh modülü (B/G)

	G (GPa)	B (GPa)	E (GPa)	B/G	G/B	Sıkıştırılabilirlik (1/GPa)
<u>SiC</u>						
Ref. <sup>[62]</sup>	186,9	211,3	432,9	1,13	0,88	
Hesaplanan	201,7	226,2	320	1,12	0,89	0,0044
Deney <sup>[81, 82]</sup>	192	225	448	1,17	0,85	
<u>TiC</u>						
Ref. <sup>[62]</sup>	156,3	261,6	391	1,67	0,59	
Hesaplanan	154,4	231,1	400	1,49	0,66	0,00432
Deney <sup>[83, 84]</sup>	182	242	437	1,32	0,75	
<u>ZrC</u>						
Ref. <sup>[62]</sup>	150,9	232,02	372,3	1,54	0,65	
Hesaplanan	157,8	230,3	419,7	1,46	0,68	0,00434
Deney <sup>[84-86]</sup>	162	208	386	1,28	0,77	

Karbür bileşikler için hesaplanan G/B oranları Çizelge 5.3’de verildi. Hesaplanan G/B oranı ve poisson oranı bileşiklerin bağ yapıları hakkında fikir verir. Bileşiklerin  $G/B \approx 0,6$  ise iyonik,  $G/B \approx 1,1$  kovalent karakterin baskın olduğunu gösterir. SiC, TiC ve ZrC için bu oran sırasıyla 0,89, 0,66 ve 0,68 olarak hesaplandı. Burada, TiC ve ZrC bileşiklerin iyonik, SiC ise kovalent karakterinin baskın olduğu söylenebilir.

Poisson oranı ( $\nu$ ), bileşiklerin bağlanma yapısı ve kuvvetleri hakkında bilgi verir.  $\nu$  oranı kovalent ve iyonik malzemeler için sırasıyla 0,1 ve 0,25’dir. Çizelge 5.4’de verildiği gibi SiC için poisson oranı ( $\nu$ ) 0,16, TiC için 0,23 ve ZrC için 0,22 olarak hesaplandı. Elde edilen değerler diğer teorik ve deneysel sonuçlar ile karşılaştırıldı. SiC için hesaplanan  $\nu$  oranı, TiC ve ZrC değerlerinden daha küçüktür. Elde edilen  $\nu$  değerlerinden, SiC için S-C bağ yapısının kovalent, TiC ve ZrC için Ti-C ve Zr-C bağ yapılarının ise iyonik yapıda olduğu söylenebilir. Erime noktası ile malzemelerin sertliği ile sıcaklığa karşı gösterdiği direnç arasında bir ilişki gösterilebilir. Genel olarak, yüksek erime sıcaklığına sahip malzemeler yüksek sertliğe sahiptir. İncelenen karbür bileşikler  $T > 2700$  °C erime sıcaklığına sahip olduğundan çok sert malzemeler oldukları söylenebilir. Eş. 4.13

kullanılarak  $H_v$  hesaplamalarında elde edilen değerler de karbür bileşiklerin sert malzemeler olduğunu göstermektedir. Karbür bileşikler için hesaplanan sertlik ( $H_v$ ) değerleri ile teorik ve deneysel değerler Çizelge 5.5.'de listelendi. İncelenen kübik karbür yapılar için hesaplanan  $H_v$  değerleri diğer sonuçlar ile uyumlu olduğu görüldü.

Çizelge 5.4. Karbür bileşiklerin poisson oranı ve sertlik değerleri

Bileşik	Poisson oranı ( $\nu$ )		Sertlik (GPa)	
	Hesaplanan	Ref. [29]	Hesaplanan	Ref. [88, 89]
SiC	0,16	0,14	33,65	31,0
TiC	0,23	0,19	20,61	18,8
ZrC	0,22	0,19	21,54	22,19

## 5.2. Kübik Yapılı Karbür Bileşiklerin Termodinamik Özellikleri

SiC, TiC ve ZrC karbür bileşiklerin termodinamik özellikleri (Debye sıcaklığı, Debye sıcaklık dağılımı, ısı kapasitesi, entalpi, entropi ve serbest enerji) sabit basınç ve 0-2500 K sıcaklık aralığında Bölüm 4.2'de verilen quasi-harmonik yaklaşımı ve eşitlikler kullanılarak hesaplandı. Elde edilen sonuçlar Şekil 5.3-5.12'de verildi.

Eş. 4.15-4.19 kullanılarak kübik yapılı SiC, TiC ve ZrC karbür bileşiklerin enine dalga hızı ( $v_s$ ), boyuna dalga hızı ( $v_l$ ) ve ortalama dalga hızı ( $v_m$ ) hesaplandı. Elde edilen hız değerleri kullanarak Debye sıcaklığı ( $\theta_D$ ) hesaplandı. Elde edilen sonuçlar Çizelge 5.5'de listelendi. Çizelge 5.5'de görüldüğü gibi elde edilen Debye sıcaklık değerleri teorik ve deneysel sonuçlar ile uyumludur.

Çizelge 5.5. Karbür bileşiklerin enine, boyuna, ortalama dalga hızları ve Debye sıcaklığı

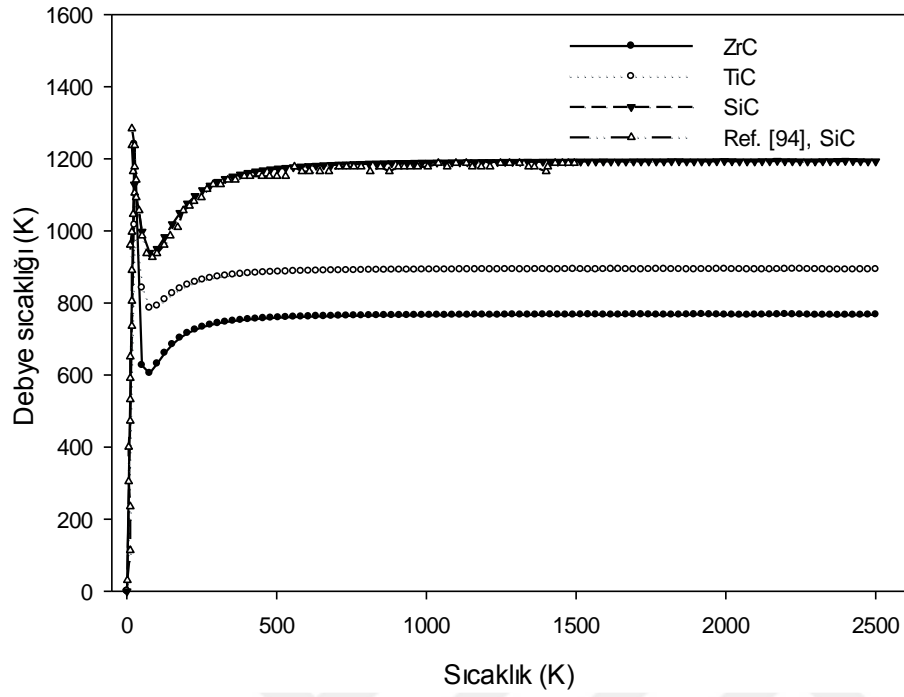
Bileşik	Yoğunluk $\rho$ (g/cm <sup>3</sup> )	$v_s$ (m/s)	$v_l$ (m/s)	$v_m$ (m/s)	$\theta_D$ (K)	Referans $\theta_D$ , (K)
SiC	3.21	7926,84	12419,62	8711,73	1190,6	1126; 1123 [89, 90]
TiC	4.889	5619,7	9453,96	6222,34	854,05	919,2; 946,3 [19, 91]
ZrC	6.556	4906,07	8198,83	5428,72	686,25	669,6; 699 [92, 93]

Çizelge 5.5'te görüldüğü gibi SiC en yüksek ve ZrC en düşük Debye sıcaklık değerine sahiptir. Düşük Debye sıcaklığına sahip malzemeler, daha zayıf kimyasal bağlanma ve daha yüksek termal genişleme katsayısına sahiptir [62]. Elde edilen sonuçlardan kimyasal bağlanma;  $SiC > TiC > ZrC$  ve termal genişleme katsayısı ise  $ZrC > TiC > SiC$  şeklinde sıralanır.

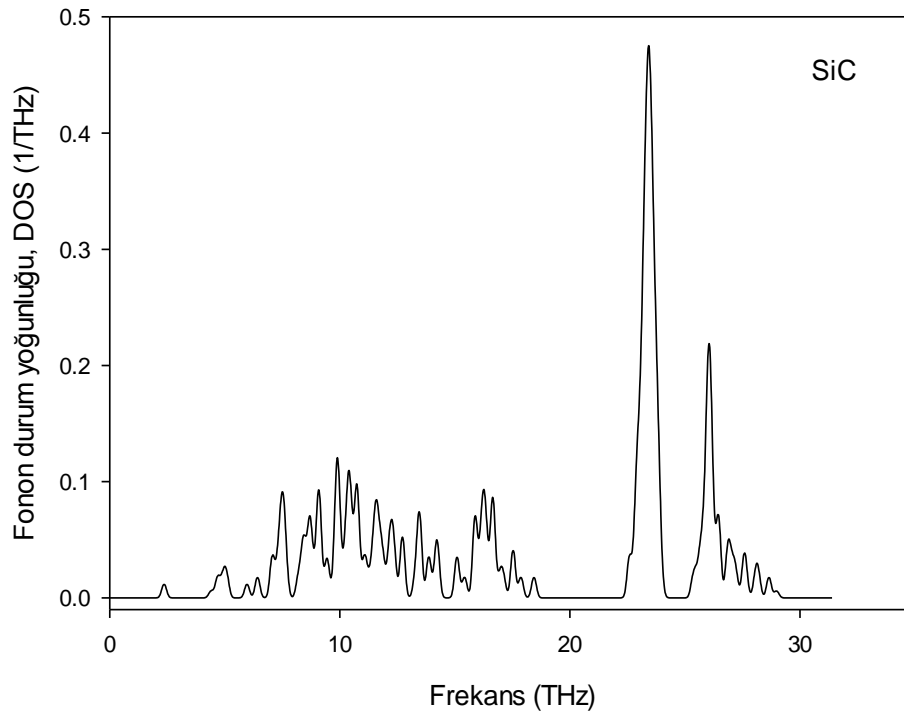
Kristallerin en yüksek titreşim modu olan Debye sıcaklık dağılımı, sıcaklığın bir fonksiyonu olarak beklenen davranışı göstermektedir. Başlangıç  $T=0$  sıcaklığından itibaren hızlı bir şekilde artmakta ve belli bir doyum sıcaklık değerinden sonra azalıp belli bir sıcaklık değerinden sonra sıcaklığa bağlı sabit kalmaktadır. SiC, TiC ve ZrC bileşiklerin sıcaklığa bağlı elde edilen Debye sıcaklık dağılımı Şekil 5.3'de gösterildi. Grafikte gösterildiği gibi sadece SiC bileşiğinin Debye sıcaklık dağılımı değerleri literatürde sonuçlar ile karşılaştırıldı. TiC ve ZrC için elde edilen değerleri karşılaştırabilecek deneysel veya teorik sonuçlar bulunamadığında bu sonuçlar gelecek araştırma çalışmalarını için referans niteliğindedir.

Şekil 5.3'de gösterilen Debye sıcaklık dağılımları incelendiğinde SiC için elde edilen sonuçlar literatürdeki sonuçlar ile uyumlu olduğu görülmektedir. TiC ve ZrC bileşiklerinin hesaplanan değerleri, SiC bileşiğinin Debye sıcaklık dağılımına göre benzer bir davranış göstermesine rağmen elde edilen sonuçlar SiC bileşiğine göre oldukça küçüktür.

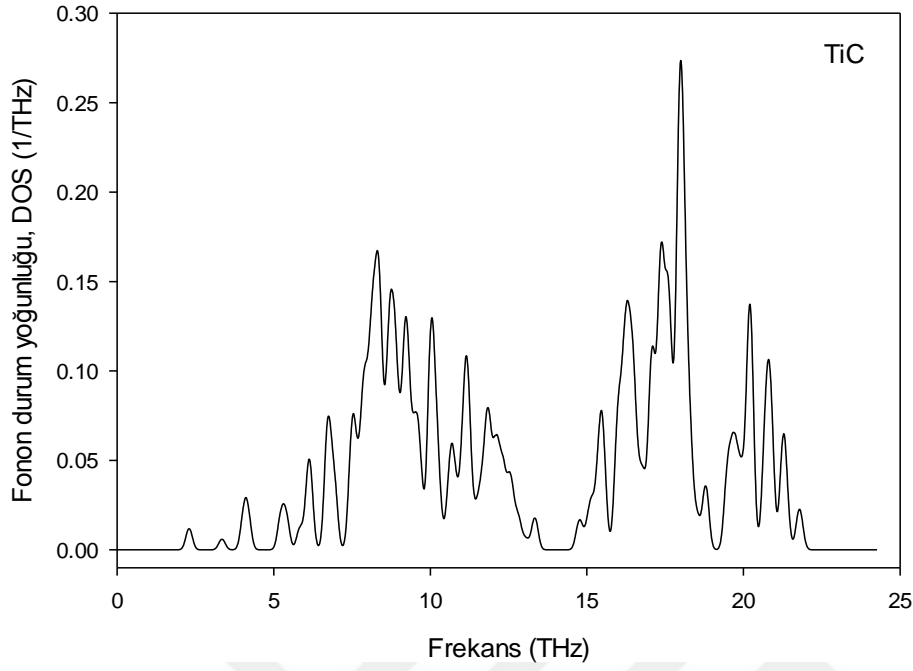
Karbür bileşiklerin ısı kapasitesi ( $C_v$ ), entalpi (H), entropi (S) ve serbest enerji (F) termodinamik parametreler, fononların durum yoğunlukları yardımıyla yarı-harmonik (quasi-harmonic) yaklaşımı kullanarak hesaplanabilir. Kübik karbür bileşiklerin fonon durum yoğunluklarının frekansa bağlı değişim eğrileri Bölüm 4.2'de verilen eşitlikler kullanılarak elde edildi. SiC, TiC ve ZrC bileşikler için elde edilen eğriler Şekil 5.4-5.6'da gösterildi.



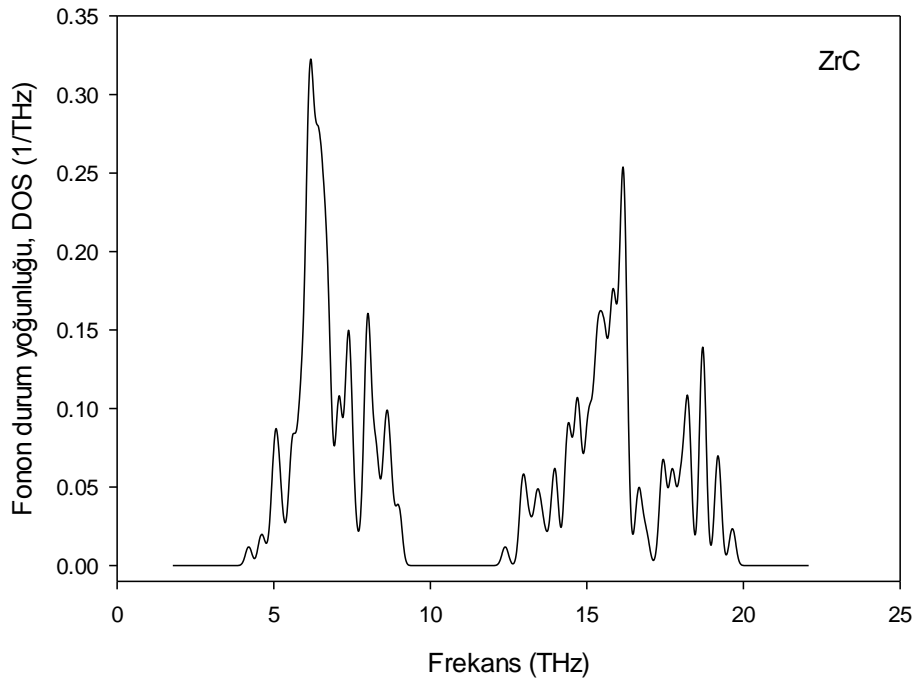
Şekil 5.3. SiC, TiC ve ZrC bileşiklerin Debye sıcaklık dağılım eğrileri



Şekil 5.4. SiC bileşiğinin fonon durum yoğunluğu frekansa bağlı değişimi



Şekil 5.5. TiC bileşiğinin fonon durum yoğunluğu frekansa bağlı değişimi

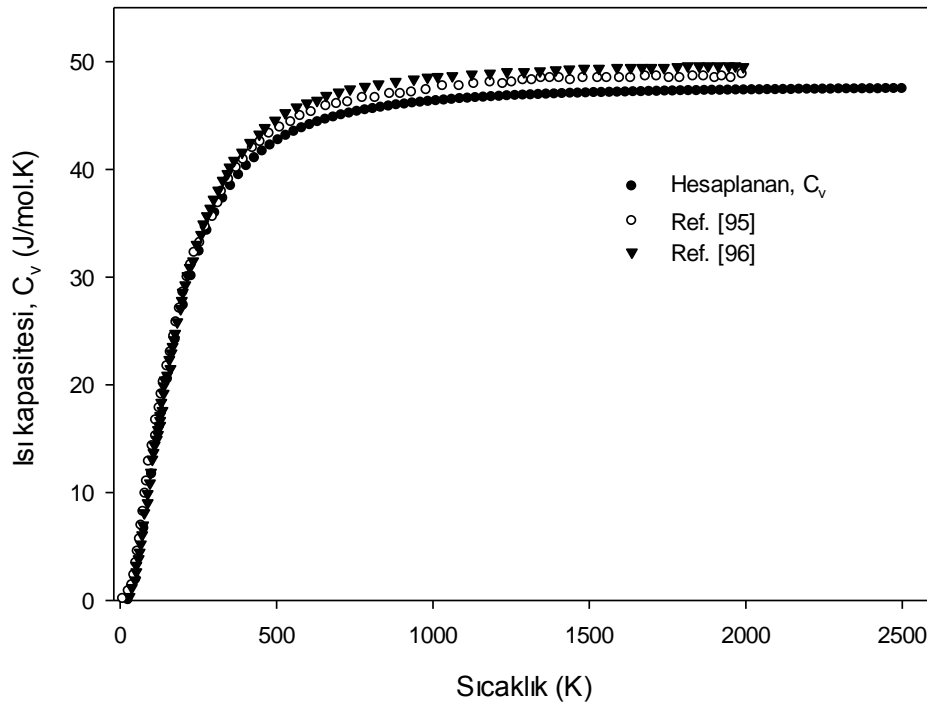


Şekil 5.6. ZrC bileşiğinin fonon durum yoğunluğu frekansa bağlı değişimi

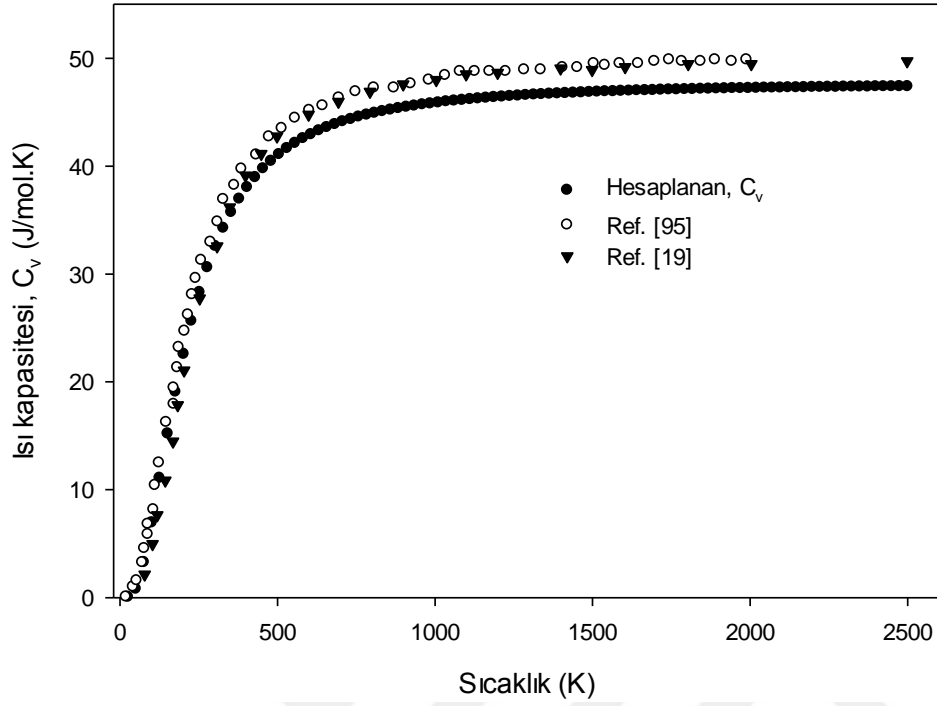


En önemli termodinamik özelliklerden biri olan ısı kapasitesi ( $C_v$ , sabit hacim) SiC, TiC ve ZrC kübik yapılu bileşikler için hesaplandı. Elde edilen sonuçlar Şekil 5.6, Şekil 5.7 ve Şekil 5.8’de gösterildi. Grafiklerde kübik yapılu karbür bileşikler için gösterilen  $C_v$ , başlangıçtan ( $T=0$  K)  $T<500$  K değerlerinde keskin bir artış göstermekte iken,  $T>500$  K değerlerinde yavaşça artmaktadır.  $T=1000$  K sıcaklığından sonra  $C_v$  değeri karbür bileşikler için neredeyse sabit kalmaktadır. Yüksek sıcaklıklarda  $C_v$  Dulong-Petit limiti olarak bilinen sabite yaklaşma eğilimindedir. Karbür bileşiklerin  $C_v$  değerleri, yüksek sıcaklıklarda ( $T>1000$  K) benzer davranış gösterirken düşük sıcaklıklarda ( $T<1000$  K) farklı artış oranları olduğu görülmektedir.

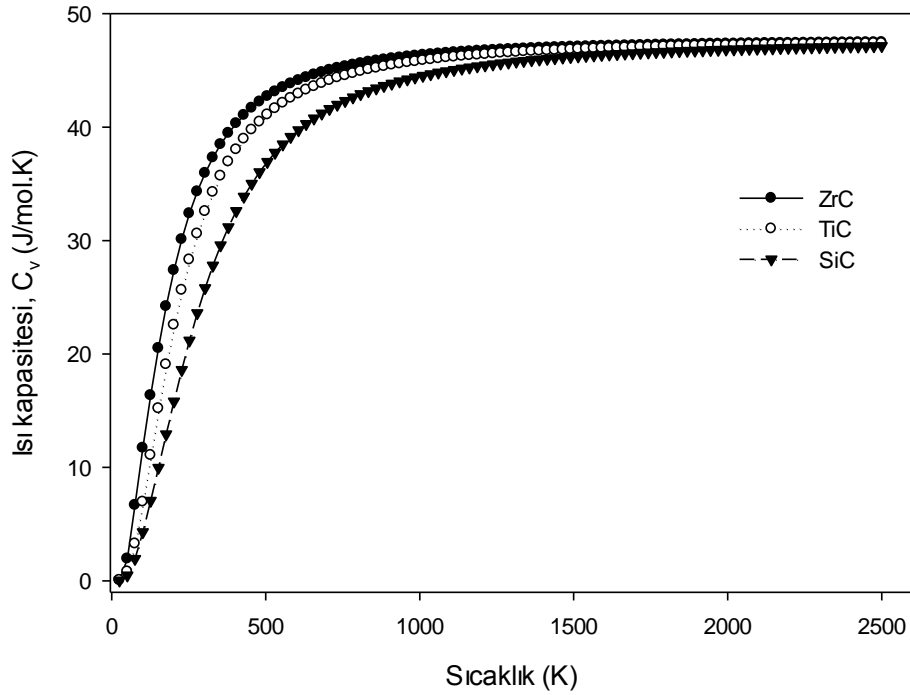
TiC ve ZrC bileşikler için hesaplanan ısı kapasitesi değerlerinin diğer çalışmalar [19, 95, 96] ile karşılaştırılması Şekil 5.7 ve Şekil 5.8’de gösterildi. Grafikler incelendiğinde elde edilen sonuçların diğer sonuçlar ile uyumlu olduğu görülmektedir. SiC, TiC ve ZrC için elde edilen  $C_v$  değerleri Şekil 5.8’de karşılaştırıldı. İncelenen bileşiklerin  $C_v$  değerlerinin sıcaklığa bağlı benzer bir davranış göstermektedir. Sıcaklık artışı ile başlangıçta ani artış gösterip yüksek sıcaklıklarda Dulong-Petit limitine yaklaşan karbür bileşiklerin  $C_v$  değerlerinin artış oranı,  $ZrC > TiC > SiC$  şeklinde olduğu görüldü.



Şekil 5.7. ZrC bileşiğinin sıcaklığa bağlı  $C_v$  değişim eğrisinin referans değerlerle karşılaştırılması



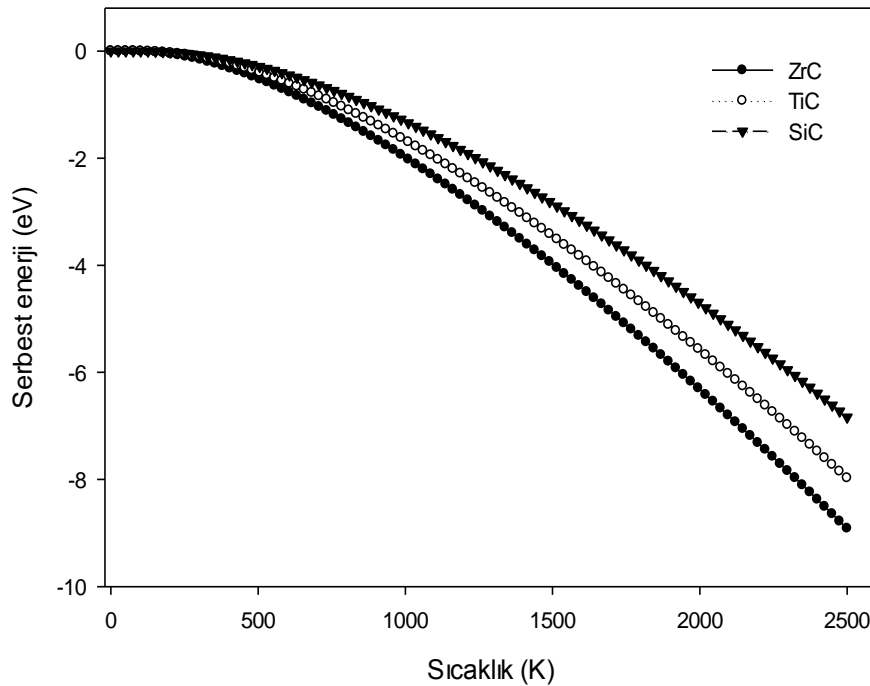
Şekil 5.8. TiC bileşiğin sıcaklığa bağlı  $C_v$  değişim eğrisinin referans değerler ile karşılaştırılması



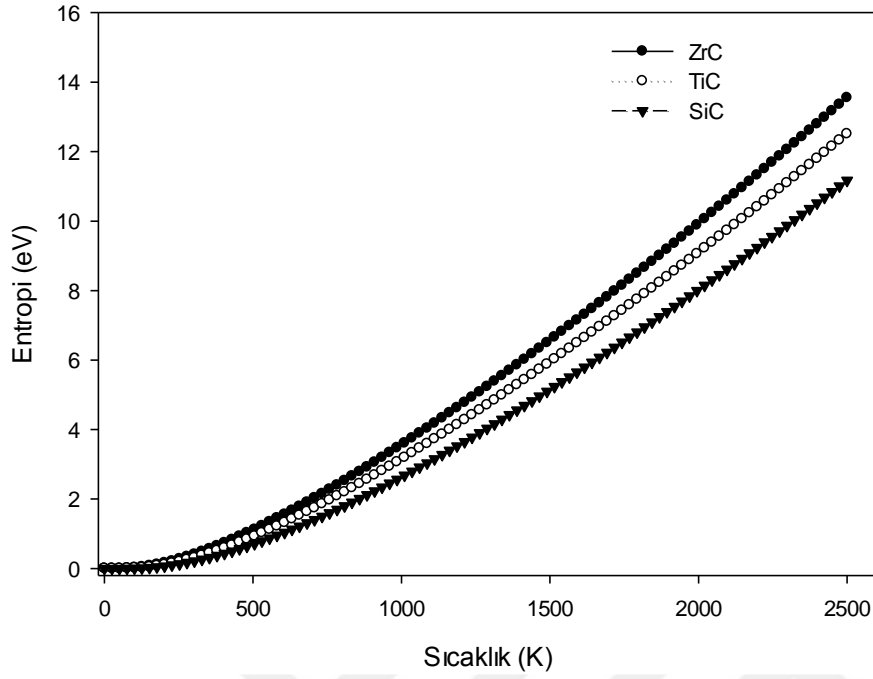
Şekil 5.9. SiC, TiC ve ZrC bileşiklerin sıcaklığa bağlı ısı kapasitesi değişim eğrilerinin karşılaştırılması

Bileşiklerin enerji dağılımları olarak tanımlanan entropi ve serbest enerji, sıcaklığa bağlı beklenen eğilimleri göstermektedir. 0-2500 K sıcaklık aralığında entropi ve serbest enerji değişim eğrileri Şekil 5.10 ve Şekil 5.11’de verildi. Artan sıcaklığa bağlı olarak karbür bileşiklerin serbest enerjisi azalırken entropi değerleri artmaktadır. Artan sıcaklığa bağlı bu durum, entropi ve iç enerjinin artmasından kaynaklanmaktadır. Serbest enerjideki bu davranış, belirtilen sıcaklık aralığında termodinamik olarak kararlılığını göstermektedir.

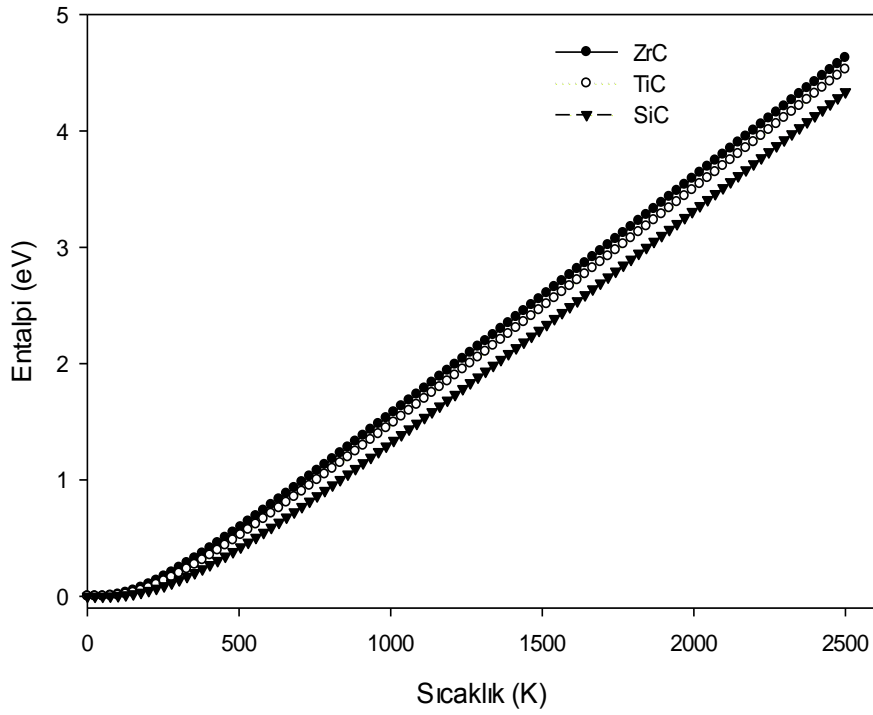
Yaklaşık 300 K sıcaklık değerine kadar serbest enerji sıcaklığa karşı değişim göstermeyip sabit kalmaktadır. 300 K sıcaklık değerinden sonra serbest enerji yavaş yavaş azalma eğiliminde olup 500 K değerinden sonra hızlıca azalmaktadır. Diğer taraftan sıcaklık ile çarpılan karbür bileşiklerin entropi değerleri, sıcaklığa bağlı 500 K üzerinde hızlı bir artış göstermektedir. Bu sıcaklık artışıyla entalpi değeri de Şekil 5.12’de görüldüğü gibi 300 K üzerinde lineer olarak artmaktadır. 0-2500 K aralığında sıcaklık artışı ile serbest enerji, entropi ve entalpi değerlerinin değişim oranı,  $ZrC > TiC > SiC$  şeklinde olduğu görülmektedir.



Şekil 5.10. SiC, TiC ve ZrC bileşiklerinin sıcaklığa bağlı serbest enerji değişim eğrileri



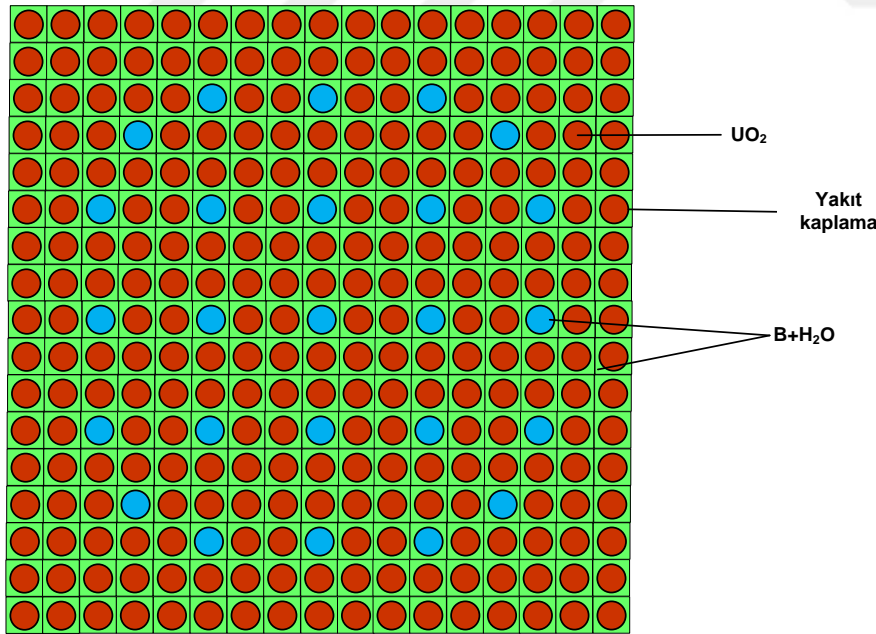
Şekil 5.11. SiC, TiC ve ZrC bileşiklerin sıcaklığa bağlı entropi değişim eğrileri



Şekil 5.12. SiC, TiC ve ZrC bileşiklerin sıcaklığa bağlı entalpi değişim eğrileri

### 5.3. Karbür Yakıt Zarf Malzemelerin Nötronik Özellikleri

Yüksek erime sıcaklığı, düşük nötron yakalama tesir kesitine sahip SiC, TiC ve ZrC yakıt zarf malzemelerin nötron özellikleri incelendi. Yakıt demetinin modellenmesi yapılırken Çizelge 5.6'de bileşenleri ve yoğunlukları verilen karbür malzemeler [29-31] kullanıldı. Çizelge 4.4'de verilen değerleri kullanılarak 900 K yakıt sıcaklığı, 600 K yakıt zarf malzemelerin sıcaklığı ve moderator/soğutucu sıcaklığı 600 K olacak şekilde bir PWR tipi 17x17 yakıt demeti modelendi (Şekil 5.13). DRAGON nötronik program, yakıt demetinin nötronik hesaplamalarında 1/8 simetrik geometrisi kullanıldı. Yakıt zenginleştirme oranı farklı olan üç durum için hesaplamalar yapıldı (Çizelge 5.9). Karbür malzemelerin elde edilen sonuçlarını karşılaştırmak için yakıt zarf malzemesi olarak aktif olarak Zr-II, 304SS, 310SS, FeCrAl, APMT™ malzemelerin modellenmesi ve nötronik özellikler hesaplandı. Alternatif yakıt zarf malzemesi olarak kullanılması amaçlanan SiC, TiC ve ZrC karbür malzemeler, özellikler Zr-II ve diğer zarf malzemeleri ile karşılaştırıldı. Elde edilen sonuçlar Şekil 5.13-Şekil 5.20 verildi.



Şekil 5.13. PWR tipi 17x17 yakıt demeti

Çizelge 5.6. Yakıt zarf malzemelerinin bileşenlerinin yoğunluk değerleri [29-31]

Bileşen	Zr-II	304SS	310SS	FeCrAl	APMT <sup>MT</sup>	TiC	ZrC	SiC
<sup>56</sup> Fe	0,16	71,35	52,55	75,00	69,79	0,014	0,01	0,65
<sup>52</sup> Cr	0,11	18,9	25,22	20,00	21,60	-	-	-
<sup>nat</sup> B	0.00031	-	-	-	-	-	-	-
<sup>91</sup> Zr	99,71	-	-	-	0,1	0,027	84,8	0,005
<sup>27</sup> Al	-	-	-	5,00	4,9	0,009	0,01	1,44
<sup>58</sup> Ni	0,06	8,35	19,51	-	-	-	-	-
<sup>55</sup> Mn	-	0,7	1,9	-	-	-	-	-
<sup>96</sup> Mo	-	0,27	0,122	-	2,8	-	-	-
<sup>12</sup> C	-	-	-	-	-	19,40	12,979	29,6
<sup>28</sup> Si	-	0,42	0,7	-	0,53	0,005	0,001	67,08
<sup>179</sup> Hf	-	-	0,16	-	0,16	0,014	1,91	0,005
<sup>89</sup> Y	-	-	-	-	0,12	-	-	-
<sup>47</sup> Ti	-	-	-	-	-	79,2	0,19	0,025
<sup>183</sup> W	-	-	-	-	-	0,029	0,1	0,05
<sup>14</sup> N	-	-	-	-	-	0,057	-	0,35
<sup>16</sup> O	-	-	-	-	-	0,051	-	0,58

Çizelge 5.7. Yakıt zarf malzemelerin fiziksel özellikleri

Malzeme	$\rho(\text{g/cm}^3)$	Nötron soğurma Tesir kesiti (barn)	Termal iletkenlik ( $\text{W m}^{-1}\text{K}^{-1}$ )	Erime sıcaklığı ( $^{\circ}\text{C}$ )	Termal genleşme katsayısı ( $\text{K}^{-1}$ )
Zr-II <sup>[97]</sup>	6,44	0,20	13,8	1830	
304SS <sup>[98]</sup>	7,90	2,86	16,3	1450	
310SS <sup>[98]</sup>	8,03	3,21	14,2	1450	
FeCrAl <sup>[99]</sup>	7,10	2,43	11,54	1500	
APMT <sup>TM</sup> <sup>[99]</sup>	7,30	2,47	11,54	1500	
TiC <sup>[100, 101]</sup>	4,91		21,0; 21,00	3140	$7,4 \times 10^{-6}$
ZrC <sup>[100, 101]</sup>	6,55		21,0; 20,5	3530	$6,7 \times 10^{-6}$
SiC <sup>[102, 103]</sup>	3,21	0,086	51,9	2730	$4,8 \times 10^{-6}$

TiC, ZrC ve SiC malzemeler önemli fiziksel özelliklere sahiptir. Çizelge 5.7’de karbür malzemelerin ve diğer yakıt zarf malzemelerin sahip olduğu nötron soğurma tesir kesiti, termal iletkenlik, erime sıcaklığı ve termal genleşme katsayısı gibi önemli fiziksel özellikler listelenmiştir [99, 105]. Çizelge 5.8’de ise yakıt zarf malzemelerini oluşturan elementlerin soğurma tesir kesiti değerleri verildi.

Normal koşullarda, fisyon sonucu oluşan nötronlar soğutucu ve moderator etkisiyle yavaşlar ve ortamdaki diğer yakıt atomları ile etkileşir. Bu nötronlar, bir sonraki fisyon reaksiyonunu başlatabilmesi için soğutucu/moderator ve zarf malzemesinin etkisini geçip yakıt atomlarına ulaşması gerekmektedir. Bundan dolayı nötron yakalama tesir kesiti yakıt demeti içerisindeki nötron dengesi için önemli bir parametredir. UO<sub>2</sub> yakıt bölgesinde, yakıt zarf malzemesi tarafından daha fazla nötronun yakalanması, toplam nötron sayısı üzerinde önemli bir etkisi vardır. Nötron ekonomisinin çok önemli olduğu nükleer reaktörlerde, düşük yakalama tesir kesitlerine sahip malzemeler büyük avantaj sağlamaktadır.

Çizelge 5.8. Bazı yakıt zarf malzemeleri oluşturan elementlerin nötron soğurma tesir kesitleri [26]

Element	Nötron soğurma tesir kesiti (1/cm)
Zr	0,185
Si	0,160
C	0,004
Ti	5,60
Fe	2,550
Cr	3,050
Ni	4,430
Al	0,231
Mo	2,48
V	5,04
Sn	0,063
Nb	1,15

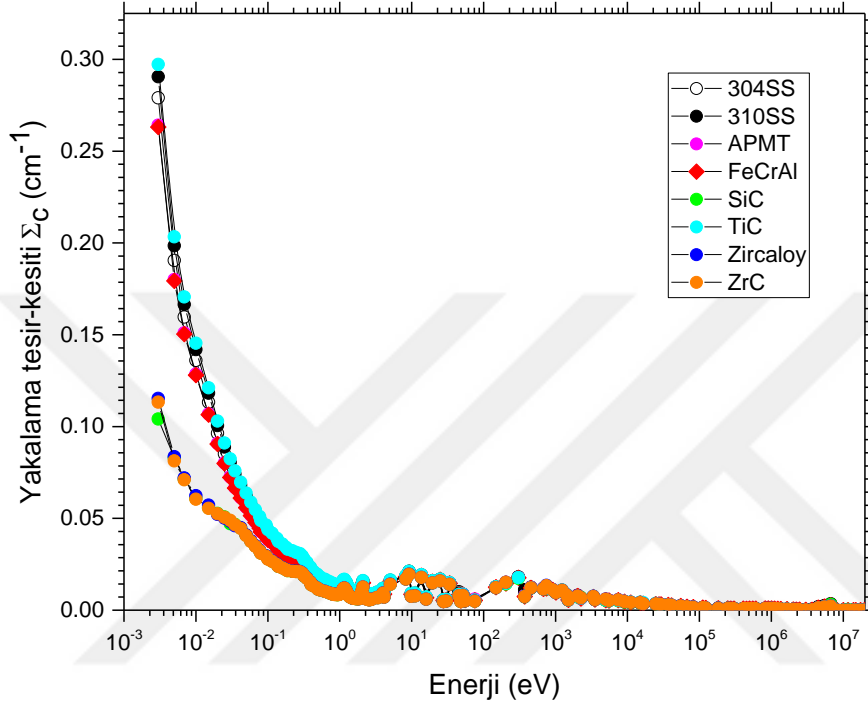
Çizelge 5.9. Yakıt demetlerini oluşturan yakıt hücrelerinin konfigürasyonu

Durum	Yakıt birim hücre yarıçapı [cm]	Yakıt zarfı dış yarıçapı [cm]	Ağırlıkça <sup>235</sup> U [%]	Zenginleştirme oranı [%]
c <sub>1</sub>	0,4025	0,475	2,6444	3,0
c <sub>2</sub>	0,4025	0,475	3,5255304	4,0
c <sub>3</sub>	0,4025	0,475	4,318775	4,9

Şekil 5.14'de karbür malzemeler ve diğer yakıt zarf malzemeleri için elde edilen nötron yakalama tesir kesiti ( $\Sigma_c$ ) değerleri karşılaştırılmıştır. Şekilde görüldüğü gibi termal enerji bölgesinde ( $E < 0,25$  eV), incelenen yakıt zarf malzemelerinin nötron enerjine bağlı davranışı göstermektedir. TiC, 304SS, 310SS, FeCrAl ve APMT™ için elde edilen yakalama tesir kesiti sonuçları SiC, ZrC ve Zr-II değerlerinden daha yüksektir. Çizelge 5.8'de verildiği gibi yüksek soğurma tesir kesitine sahip Ti, Fe, Cr ve Ni atomlarını içeren yakıt zarf TiC (%79,2 Ti), 304SS (%71,35 Fe; %18,9 Cr; %8,35 Ni), 310SS (%52,55 Fe; %25,22 Cr; %19,51 Ni), FeCrAl (%75,00 Fe; %20,00 Cr) ve APMT™ (%69,79 Fe; %21,6 Cr) malzemelerin yakalama tesir kesitleri de yüksek olduğu görüldü.

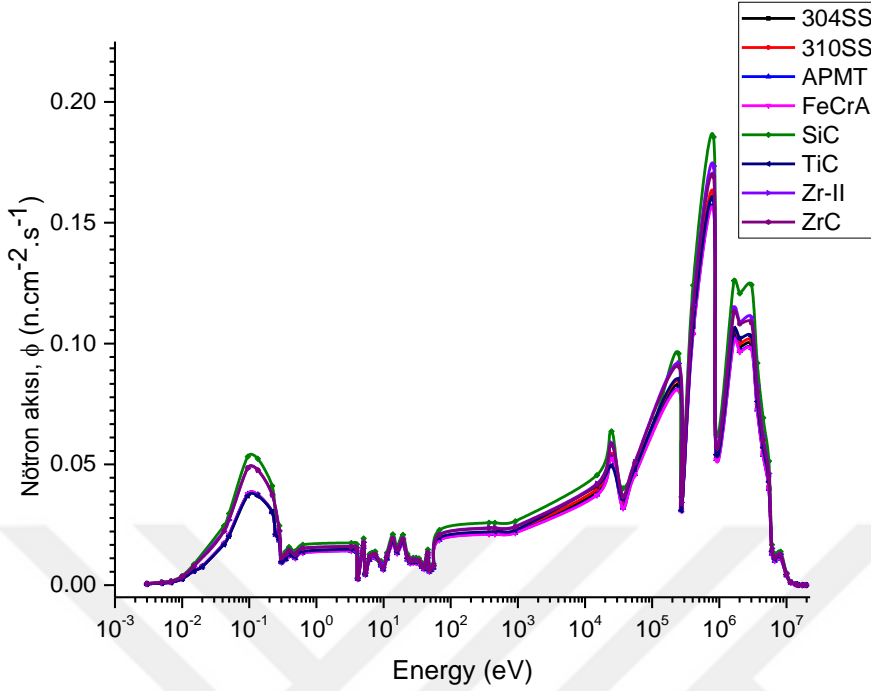


Görüldüğü gibi SiC, ZrC ve Zr-II çok düşük nötron yakalama tesir kesiti değerine sahiptir. Bu üç malzeme de nötron enerjisi değişimine karşı termal enerji bölgesinde benzer bir davranış göstermektedir.



Şekil 5.14. SiC, TiC ve ZrC ile diğer yakıt zarf malzemelerinin varlığında yakalama tesir kesitinin nötron enerjisine göre değişimi

Nötron tesir kesitleri; yakıt, yakıt zarf, soğutucu/moderatör üzerinden her bir yanma oranı basamağında homojen olarak kabul edildi. 172 enerji grup için fisyon başına nötron akısı hesaplandı. Başlangıç durumunda ( $t=0$ ) zarf malzemelerin nötron akı spektrumu farklı zarf malzemeleri için elde edildi. Elde edilen nötron akı spektrum eğriler termal, epitermal ve hızlı nötron bölgesinde Şekil 5.15'de gösterildi. Yüksek nötron yakalama tesir kesitine sahip zarf malzemeleri, daha düşük sayıda nötron nükleer yakıt ile temasa geçip fisyon reaksiyonlarını gerçekleştirebilir. Şekilde görüldüğü gibi termal bölgesinde TiC, 304SS, 310SS, FeCrAl ve APMT™ zarf malzemelerinin pik değerleri SiC, ZrC ve Zr-II malzemelerine göre daha düşüktür. Hızlı nötron bölgesinde de benzer bir durum olmakla beraber bu bölgede nötronların katkısı süperpozisyonu (üst üste binme) görülmektedir. Hızlı nötron kesrinin olduğu bölgede, nötron akı spektrumu arasında daha da etkisini göstermektedir.



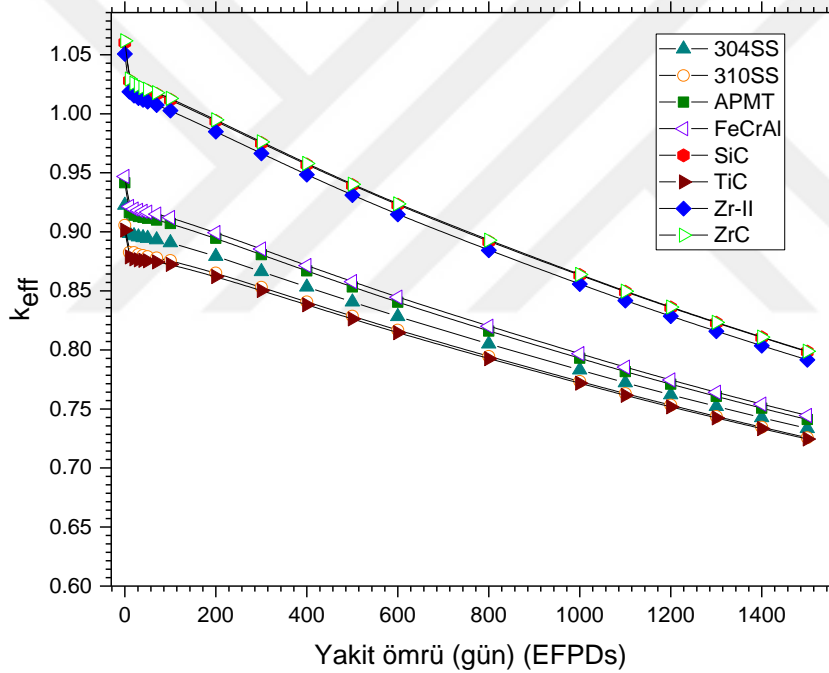
Şekil 5.15. Başlangıç durumunda çarpışma başına nötron akı spektrumu ( $t=0$ )

Şekil 5.16'da 17x17 PWR geometrisinde ve farklı zarf malzemelerinin yakıt demetindeki yakıt çubuklarının etkin çoğaltma faktörü ( $k_{eff}$ ) eğrileri yakıt ömrünün (EFPDs) bir fonksiyonu olarak gösterildi. Tüm zarf malzemeler için kullanılan modellemelerde yakıtın tüketilmesi 1500 gün (EFPDs) olarak sınırlandırıldı. İncelenen SiC, TiC ve ZrC karbür malzemeler ile beraber diğer beş zarf malzemesinin etkisinde  $k_{eff}$  değerleri referans duruma ( $c_1$ ) göre hesaplandı ve Şekil 5.16'da karşılaştırıldı.

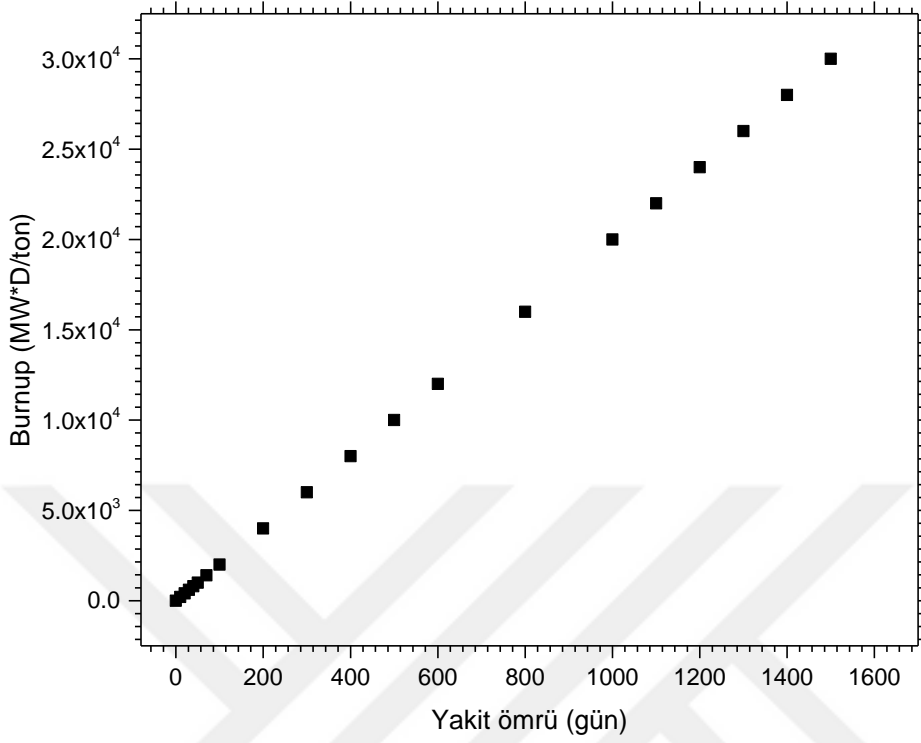
İncelenen malzemelerin varlığında  $k_{eff}$  çoğaltma faktörlerin yakıt ömrüne göre değişimi nötron yakalama tesir kesitinin değişimine benzer iki tür davranış gözlemlendi. SiC, ZrC ve Zr-II birinci grup, TiC, 304SS, 310SS, FeCrAl ve APMT<sup>TM</sup> ise ikinci grup davranış göstermektedir. Başlangıçta  $t_0=0$  durumunda, yakıt demetleri sadece yanmamış yeni yakıt içermektedir. Yakıtın yanmaya başlaması ( $t>t_0$ ) ile zarf malzemelerin nötron yakalama tesir kesitine bağlı olarak yakıtın yapısında farklı değişimler oluşur. İlk olarak tüm zarf malzemelerin etkisinde  $k_{eff}$  değerlerinde ani keskin bir düşüş görülmektedir. Daha sonra  $k_{eff}$  değerlerin yakıt ömrüne bağlı olarak azalma hızı düşmektedir.

$t_0=0$  başlangıç durumunda ve yakıt ömrüne bağlı ilk 100 gün (EFPDs), birinci grup yakıt zarf malzemelerinin  $k_{eff}$  değerleri kritiküstü ( $k \approx 1,05$ ,  $k > 1$ ) davranış gösterirken ikinci grup zarf malzemeleri ise kritikaltı ( $k \approx 0,95$ ,  $k < 1$ ) davranışı göstermektedir.  $k_{eff}$  değişimlerine bakıldığında incelenen karbür malzemelerden SiC ve ZrC malzemeler referans olarak gösterilen Zr-II alaşım değerleri ile hemen hemen aynı sonuçlar verirken TiC için ise daha düşük değerler elde edildi. Yakıt ömrüne bağlı tüm zarf malzemelerin  $k_{eff}$  değerleri Şekil 5.16'da gösterildi.

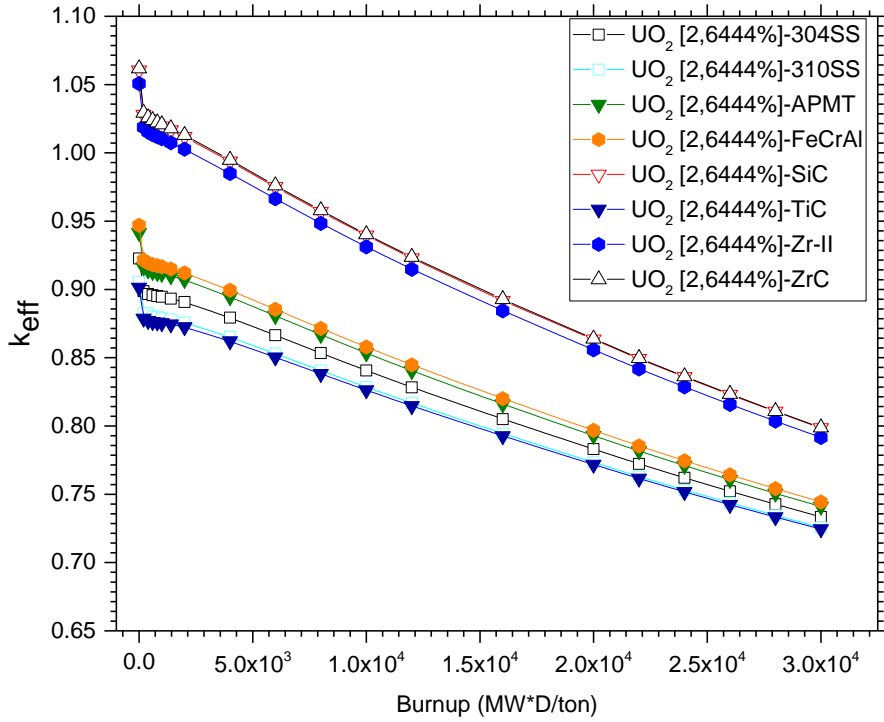
Yakıt ömrü ile yanma (burnup) arasında linear olarak bir ilişki vardır. Şekil 5.17'de yakıt ömrü ile yanma (burnup) oranı arasındaki ilişki gösterildi.



Şekil 5.16. Referans durumunda  $k_{eff}$ -yakıt ömrü değerlerinin değişim eğrileri



Şekil 5.17. Yakıt yanma (burnup)'ın yakıt ömrüne göre değişimi

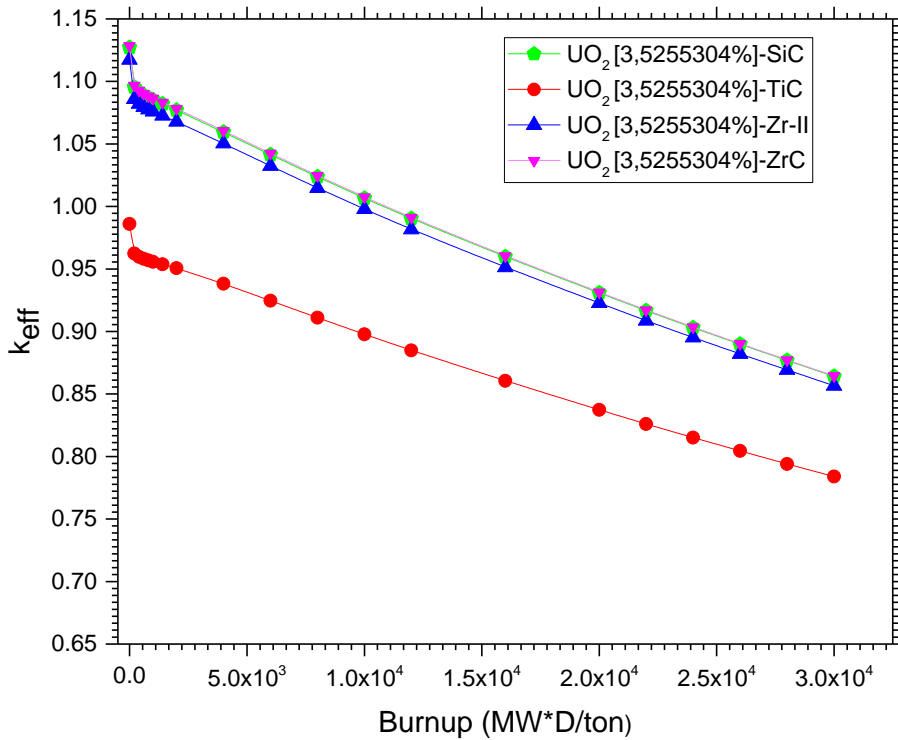


Şekil 5.18. Referans durumunda yakıt zarf malzemelerinin  $k_{eff}$  değişim eğrileri

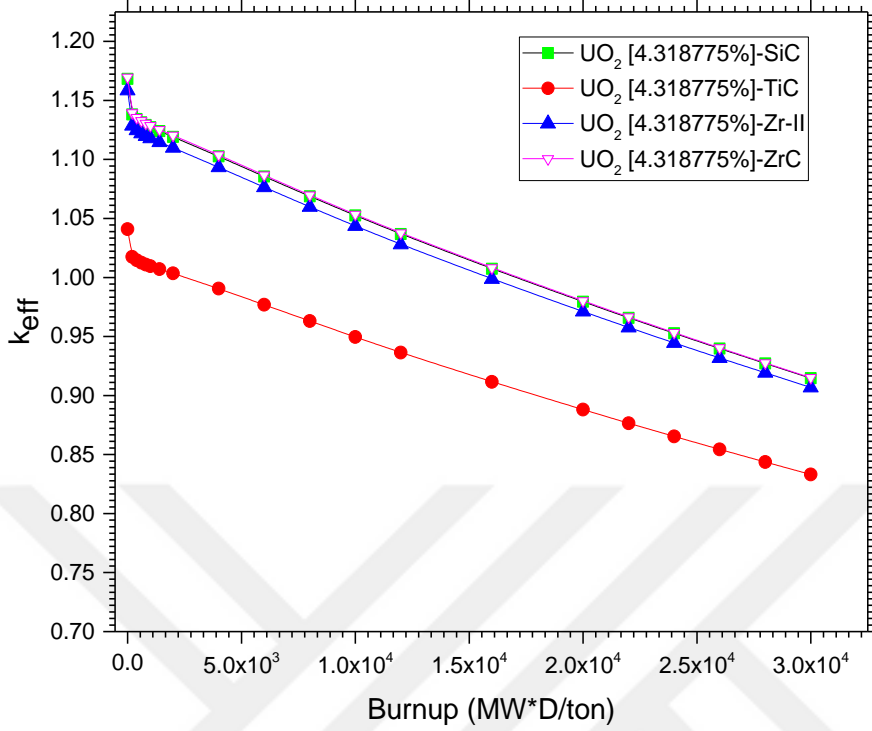
Yanma oranının yakıt ömrüne göre değişimleri elde edildikten sonra referans durumunda incelenen yakıt zarf malzemelerinin  $k_{eff}$  değerleri yakıt yanma (burnup)'a göre değişimleri Şekil 5.18, Şekil 5.19 ve Şekil 5.20'de gösterildi.

$c_2$  ve  $c_3$  durumlarında aynı yakıt birim hücre yarıçap ve farklı ağırlıkça  $^{235}\text{U}$  ile zenginleştirme (%) kullanılarak karbür malzemeler ile referans Zr-II alaşımının  $k_{eff}$  değerlerinin yakıt yanma (burnup)'a göre değişimleri incelendi.

$c_2$  durumunda  $^{235}\text{U}$  izotopunun ağırlıkça konsantrasyonu arttıkça başlangıçta ( $t_0=0$ )  $k_{eff}$  değerlerinin de referans duruma göre arttığı Şekil 5.19'de görülmektedir. İncelenen karbür malzemelerden SiC ve ZrC yakıt yanma (burnup)'a göre referans alınan Zr-II alaşımıyla hemen hemen aynı  $k_{eff}$  değerlerine sahip olup yaklaşık  $1 \times 10^4$  MW\*D/ton yanma değerine kadar kritiküstü ( $k_{eff} \approx 1,13$ ,  $k > 1$ ) durumundadır. Diğer taraftan TiC karbür malzeme incelendiğinde diğer karbür malzemeler ve Zr-II alaşımına göre aynı sürelerde daha düşük  $k_{eff}$  değerine sahip olup kritikaltı ( $k_{eff} \approx 0,99$ ,  $k < 1$ ) durumundadır. Yakıt yanması arttıkça zarf malzemelerinin  $k_{eff}$  değerlerinin azaldığı görülmektedir.



Şekil 5.19.  $c_2$  durumunda SiC, TiC, ZrC ve Zr-II malzemelerin  $k_{eff}$  değişim eğrileri



Şekil 5.20.  $c_3$  durumunda SiC, TiC, ZrC ve Zr-II malzemelerin  $k_{eff}$  değişim eğrileri

$c_3$  durumunda yakıt zarf malzemesi olarak kullanılan SiC, TiC ve ZrC karbür ile Zr-II alaşımının başlangıçta  $k_{eff} > 1$  olup kritiküstü ( $k > 1$ ) durumundadır. Yakıtın etkin çoğaltma faktörü  $k_{eff}$ , yanma (burnup)  $2 \times 10^3$  olduğunda TiC karbür malzeme için  $k_{eff} \approx 0.99$  olup kritikaltı ( $k < 1$ )'dır. SiC, ZrC ve Zr-II malzemeler için ise yakıtın  $k_{eff}$  değeri, yakıt yanma  $2 \times 10^4$  değerinde sonra  $k_{eff} \approx 0.98$  olup kritikaltı duruma geçmektedir.

$c_1$ ,  $c_2$  ve  $c_3$  durumları incelendiğinde incelenen zarf malzemelerinin kullanımında  $k_{eff}$  değerinin yakıt zenginleştirme oranının artışı ile arttığı görüldü. Yine yakıt zarf malzemelerinin varlığında nötron etkin çoğaltma faktörünün yakıt yanma oranına bağlı olarak azaldığı görüldü. Başlangıç durumunda bu azalma ani bir düşüş gösterirken belli bir yanma değerinden sonra çoğaltma faktörünün düşme hızı azalmaktadır.

## 6. SONUÇLAR VE ÖNERİLER

Bu tez çalışmasında yoğunluk fonksiyoneli teorisi (DFT)'deki ab-initio metotları kullanılarak kübik yapıdaki SiC, TiC ve ZrC bileşiklerin yapısal mekanik ve yüksek sıcaklıklarda termodinamik özellikleri ile nötron difüzyon yaklaşımı kullanılarak karbür malzemelerin nötronik özellikleri hesaplandı. Karbür yapılar için elde edilen sonuçlar kendi içerisinde ve literatürdeki teorik ve deneysel sonuçlar ile karşılaştırarak sonuçlar ayrıntılı olarak tartışıldı. Sonuçlar aşağıda özetlendi.

- Kübik yapılı SiC, TiC ve ZrC için elde edilen örgü parametresi diğer teorik ve deneysel sonuçlar ile uyumlu olduğu görüldü.
- Benzer kristal yapıdaki kübik yapılı karbür bileşikler farklı bağ uzunluklarına sahip olduklarından radyasyon altında farklı mekanik etki gösterebilirler.
- Elde edilen sonuçlarda, bileşikleri oluşturan bağların davranışına göre karbür bileşiklerin kovalent ve iyonik bağların kombinasyonu olduğunu gösterir. SiC bileşiğin güçlü kovalent, geçiş metalleri olan TiC ve ZrC bileşiklerin ise iyonik bağ yapısında olduğu görüldü.
- Kübik yapılı TiC, ZrC ve SiC karbür bileşiklerin için hesaplanan elastik sabitlerin born mekanik kararlılık koşullarını sağladığı görüldü.
- TiC, ZrC ve SiC bileşikler için hesaplanan poisson oranı ve G/B değerlerinden SiC bileşiğindeki Si-C bant yapısının kovalent, TiC ve ZrC bileşiklerindeki Ti-C ve Zr-C bantlarında ise iyonik karakterin baskın olduğu görüldü.
- B/G (<1.75) oranı ve  $H_v$  (>20 GPa) değerleri hesaplanan karbür bileşiklerin kırılma ve sert malzemeler oldukları görüldü. Elde edilen sonuçlardan karbür malzemelerin sert olduğu ve sertlik değerleri; SiC > ZrC > TiC şeklinde sıralandı.
- Kübik yapılı TiC, ZrC ve SiC karbür bileşiklerin mekanik özellikleri; elastik sabitleri, elastik modülleri (Bulk modül, Shear modül ve Young modül), C.P., B/G oranı, G/B oranı, sıkıştırılabilirlik, poisson oranı ve sertlik değerleri deneysel ve teorik sonuçlar ile uyumlu olduğu görüldü.
- Karbür bileşiklerin enine dalga hızı ( $v_s$ ), boyuna dalga hızı ( $v_l$ ), ortalama dalga hızı ( $v_m$ ) ve bunlara bağlı Debye sıcaklığı hesaplandı. Elde edilen sonuçlardan Debye sıcaklığı; SiC > TiC > ZrC olduğu görüldü.
- Yüksek sıcaklıklarda, ısı kapasitesi, entropi, entalpi ve serbest enerji termodinamik özellikleri fonon durum yoğunluğu kullanılarak hesaplanıp yorumlandı.

- Kübik yapılı karbür bileşiklerin artan sıcaklığa bağlı ısı kapasitesi, entropi, serbest enerji ve entalpi değişim oranları  $ZrC > TiC > SiC$  iken Debye sıcaklık dağılımının sıcaklık karşısında değişim oranı  $SiC > TiC > ZrC$  olduğu görüldü.
- TiC ve ZrC bileşikleri, SiC ile karşılaştırıldığında Bulk modül, ısı kapasitesi, entropi, entalpi gibi daha iyi mekanik ve termodinamik özelliklere sahiptir. Buna rağmen ZrC ve TiC bileşikler daha düşük Debye sıcaklığına sahip olduğu görüldü.
- ZrC ve TiC daha düşük Debye sıcaklığına sahip olduğundan, bu bileşikler daha zayıf kimyasal bağlanma ve daha yüksek termal genleşme katsayısına sahiptir. Kimyasal bağlanma  $ZrC < TiC < SiC$  ve termal genleşme katsayısı  $ZrC > TiC > SiC$  şeklinde sıralandığı görüldü.
- Bir 17 x 17 PWR yakıt demeti için yüksek sıcaklığa dayanıklı ( $>1000^{\circ}C$ ) SiC, TiC ve ZrC karbür yakıt zarf malzemelerin bazı nötronik davranışı diğer yakıt zarf malzemesi olan zirkonyum-temelli alaşım (Zr-II), paslanmaz çelik alaşımları (310SS ve 304SS), ferritik alaşımlar (FeCrAl ve APMT<sup>TM</sup>) ile karşılaştırıldı ve elde edilen sonuçların uyumlu olduğu görüldü.
- SiC ve ZrC karbür yakıt malzemelerin nötron enerjisine bağlı nötron yakalama tesir kesiti ( $\Sigma_c$ ) değerleri daha düşük ve Zr-II alaşımına benzer bir davranış gösterdiği görüldü. TiC malzemenin ise nötron yakalama tesir kesiti değeri daha yüksek ve nötron enerjisine bağlı 310SS, 304SS, FeCrAl ve APMT<sup>TM</sup> alaşımlarına benzer bir davranış gösterdi.
- Nötron yakalama tesir kesiti, nötron akısı üzerine direk olarak etki ettiğinden  $\Sigma_c$  değeri yüksek olan malzemelerin nötron akısı düşük iken,  $\Sigma_c$  değeri düşük olan malzemelerin nötron akısı da daha yüksek olduğu görüldü. İncelenen karbür malzemelerin nötron akısı değerleri;  $SiC > ZrC > TiC$  şeklinde olduğu görüldü.
- Alternatif yakıt zarf malzemesi olarak incelenen karbür bileşiklerin yakıt ömrü ve yanma oranı artışına bağlı olarak  $t_0$  ve  $t > t_0$  durumlarında nötron etkin çoğaltma faktörü ( $k_{eff}$ );  $SiC > ZrC > TiC$  şeklinde sıralandığı görüldü.
- Yeni yakıtın kullanıldığı yakıt demetinde başlangıç ( $t_0=0$ ) durumunda yakıt zarf malzemesi olarak SiC ve ZrC karbür malzemeler kullanıldığında reaktör kritiküstü ( $k_{eff}>1$ ) iken, TiC kullanılması durumunda ise reaktörün kritikaltı ( $k_{eff}<1$ ) olduğu görüldü.
- Nükleer yakıt zenginleştirme oranı arttıkça yakıt zarf malzemelerin etkisinde etkin nötron çoğaltma faktörü ( $k_{eff}$ ) de arttığı görüldü.



- İncelenen karbür malzemeleri ve diğer alaşımların varlığında yakıt demeti için yakıt zenginleştirme oranı arttıkça nötron etkin çoğaltma faktörü ( $k_{eff}$ ) değerleri de artmaktadır. Aynı koşullarda farklı yakıt zenginleştirme oranının uygulanması durumunda incelenen karbür malzemelerinin varlığında  $k_{eff}$  değerlerinin  $SiC > Zr > TiC$  şeklinde olduğu görüldü.
- Alternatif yakıt zarf malzemesi olarak nötronik özellikleri incelenen karbür malzemelerin diğer referans yakıt zarf malzemeler ile karşılaştırıldığında uyumlu oldukları görüldü. Özellikle SiC ve ZrC malzemelerin varlığında yakıt demeti daha üstün nötronik davranış sergilemektedir. TiC malzemesi ise Zr-II alaşımı dışındaki diğer malzemeler ile benzer nötronik özelliklere sahip olduğu görüldü.

Sonuç olarak tez çalışmasında, kübik yapılu TiC, ZrC ve SiC bileşiklerin mekanik, yüksek sıcaklıklarda termodinamik ve nötronik özellikleri ayrıntılı bir şekilde incelendi. Dayanıklı ve yüksek mekanik özellikleri ile yüksek sıcaklıklardaki termodinamik ve nötronik davranışı karbür bileşiklerin alternatif yakıt zarfı olarak kullanılmasında avantaj sağlamaktadır. SiC, TiC ve ZrC karbür bileşiklerin elde edilen mekanik, termodinamik ve nötronik özellikleri referans niteliğinde olup hesaplanan parametreler bu tez çalışmasında rapor edildi. Elde edilen sonuçların, tam reaktör kor modellenmesinde kullanılması gelecek çalışmalarımızın temelini oluşturmaktadır.



## KAYNAKLAR

1. Fenici, P., Rebelo, A. J. F., Jones, R. H., Kohyama, A. & Snead, L. L. (1998). Current status of SiC/SiC composites. *Journal of Nuclear Materials*. 258, 215–225.
2. Katoh, Y., Vasudevamurthy, G., Nozawa, T. and Snead, L. L. (2013). Properties of zirconium carbide for nuclear fuel applications. *Journal of Nuclear Materials*, 441, 718–742.
3. Audren, A., Benyagoub, A., Thome, L. & Garrido, F. (2008). Ion implantation of iodine into silicon carbide: Influence of temperature on the produced damage and on the diffusion behaviour. *Nuclear Instruments & Methods in Physics Research Section B beam interactions with materials and atoms*, 266, 2810–2813.
4. Zinkle, S. J. and Was, G. S. (2013). Materials challenges in nuclear energy. *Acta Materialia*. 61, 735–758.
5. Pellegrino, S., Thomé, L., Debelle, A., Miro, S., Trocellier, P. (2014). Radiation effects in carbides: TiC and ZrC versus SiC”. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*, 327, 103–107.
6. Kanicki, J. (1991). *Amorphous and Microcrystalline Semiconductor Devices*. Artech House, Boston, I and II, 241-295
7. Calcagno, L., Hallen, A., Martins, R., and Skorupa, W. (2001). Amorphous and Crystalline Silicon Carbide. *Materials and Applications, Proceedings of the E-MRS*, Elsevier, Amsterdam, 528.
8. Kimoto, T. (2015). Material science and device physics in SiC technology for high-voltage power devices. *Japanese Journal of Applied Physics*, 54, 040103-1–040103-27.
9. Jackson, H. F. and Lee, W. E. (2012). *Properties and Characteristics of ZrC*. Imperial College London, London, UK, 340-371.
10. Rashed, A. H. (2002). *Properties and Characteristics of Silicon Carbide*. Poco Graphite, Inc.
11. Ahuja, R., Eriksson, O., Wills, J. M. and Johansson, B. (1996). Structural, elastic, and high-pressure properties of cubic TiC, TiN, and TiO. *Physical Review B*, 53, 6.
12. Storms, E. K. (1967). *The Refractory Carbides*. Academic Press, New York/London, 11.
13. Toth, L. E. (1971). *Transition Metal Carbides and Nitrides*. Academic Press, New York/London, 280.
14. Schwarzkopf, P., Kieffer, R., Benesousky F. (1953). *Refractory hard metals: borides, carbides, nitrides and silicides*. Macmillan, New York, 158.

15. Pintschovius, L., Reichardt, W. and Scheerer, B. (1978). Lattice dynamics of TiC. *Journal of Physics C*, 11, 1557.
16. Elliott, R. O. and Kempter, C.P. (1958). Thermal expansion of some transition metal carbides. *Journal of Physics and Chemistry*, 62, 630–631.
17. Ivashchenko, V. I., Turchi, P. E. A., and Shevchenko, V. I. (2007). Simulations of the mechanical properties of crystalline, nanocrystalline, and amorphous SiC and Si. *Physical Review B*, 75, 085209.
18. Yichen, M., Yingying, L., Yangheng, X., Wei, X. (2018). Point defect effects on the thermal conductivity of  $\beta$ -SiC by molecular dynamics simulations. *Computational Materials Science*, 152 300–307.
19. Jiwoong, K. and Shinho, K. (2012). Elastic and thermo-physical properties of TiC, TiN, and their intermediate composition alloys using ab initio calculations. *Journal of Alloys and Compounds*, 528 (2012) 20– 27.
20. Roger, C. and Graham, L. J. (1966). Low Temperature Elastic Properties of ZrC and TiC. *Journal of Applied Physics*, 37, 3778.
21. Thomas, L. H. (1927). The calculation of atomic fields. *Proceeding Cambridge Philosophical Society*, 23, 542-550.
22. Fermi, E. (1928). A statistical method for the determination of some properties of atoms II. Application to the periodic system of the elements. *Zeitschrift für Physics*, 48, 73-79.
23. Hohenberg, P. and Kohn, W. (1964). Inhomogeneous Electron Gas. *Physical Review*, 136, B864-B871.
24. Kohn, W. And Sham, L. J. (1965). Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Physical Review*, 140, A1133-A1138.
25. Segall, M. D., Lindan, P. J. D., Probert, M. J., Pickard, C. J., Hasnip, P. J., Clark, S. J. and Payne, M. C. (2002). First-principles simulation: ideas, illustrations and the castep code. *Journal of Physical Condensed Material*, 14, 2717-2744.
26. Azevedo, C.R.F. (2011). Selection of fuel cladding material for nuclear fission reactors. *Engineering Failure Analysis*, 18, 1943–1962.
27. Zeses, K., Jeffery, B., Andrew, A., Lars, H., Edward, L., Sumit, R. and Jeffrey, B. (2017). The maturing of nuclear fuel: Past to Accident Tolerant Fuel. *Progress in Nuclear Energy*, 1-11.
28. Kim, H.-G., Yang, J.-H., Kim, W.-J. and Koo, Y.-H. (2016). Development Status of Accident tolerant Fuel for Light Water Reactors in Korea. *Nuclear Engineering and Technology*, 48, 1–15.

29. Demkowicz, P. A., Karen, W., Jian, G., David, A. P., Todd, A., Jake, B. (2006). *Evaluation of Alternate Materials for Coated Particle Fuels for the Gas-Cooled Fast Reactor*. Laboratory Directed Research and Development Program FY 2006 Final Report, INL/EXT-06-11749, ID.
30. George, N. M., Terrani, K., Powers, J., Worrall, A., Maldonado, I. (2015). Neutronic analysis of candidate accident-tolerant cladding concepts in pressurized water reactors. *Annals of Nuclear Energy*, 75, 703–712.
31. Naceur, A. and Marleau, G. (2018). Neutronic analysis for accident tolerant cladding candidates in CANDU-6 Reactors. *Annals of Nuclear Energy*, 113, 147–161.
32. Yueh, K., Carpenter, D. and Feinroth, H. (2010). Clad in clay. *Nuclear Engineering International*, 55 (666), 14–16.
33. Yueh, K. and Terrani, K.A., 2014. Silicon carbide composite for light water reactor fuel assembly applications. *Journal of Nuclear Materials*, 448, 380–388.
34. Yutai, K., Gokul, V., Takashi, N. and Snead, L. L. (2013). Properties of zirconium carbide for nuclear fuel applications. *Journal of Nuclear Materials*, 441, 718–742.
35. Zheng, M. J., Szlufarska, I. and Morgan, D. (2016). Ab initio prediction of threshold displacement energies in ZrC. *Journal of Nuclear Materials*, 471, 214–219
36. Born, M. and Oppenheimer, R. (1927). .Zur Quantentheorie der Molekeln. *Annalen der Physik*, 84: 457-460.
37. Fock, V. (1930). Näherungsmethode zur Lösung des quantenmechanischen Mehrkörperproblems. *Zeitschrift für Physics*, 61: 126-148.
38. Li, B. (2009). *Density-Functional Theory and Quantum Chemistry Studies on “dry” and “wet” NaCl (001)*. M.Sc. Thesis, der Fakultät II of Mathematik und Naturwissenschaften der Technischen Universität Berlin zur Erlangung des akademischen Grades Doctorrerum Naturalium, Berlin.
39. Sholl, D. S. and Steckel, J. A. (2009). Density Functional Theory. *Wiley: A John Wiley and Sons, Inc.*, Publication, 10-39.
40. Axel, D. B. (1988). Density-functional exchange-energy approximation with correct asymptotic behavior. *Physical Review A*, 38(6), 3098–3100.
41. Hammer, B., Hansen, L. B. and Nørskov, J. K. (1999). Improved dsorption energetics within density-functional theory using revised perdew-burke-ernzerhof functionals. *Physical Review B*, 59(11), 7413–7421.
42. Dreizler, R. M. and Gross, E. K. U. (1990). *Density Functional Theory*. Springer, Berlin, 242-300.
43. Parr, R.G. and Yang, W. (1989). *Density-Functional Theory of Atoms and Molecules*. Oxford University Press, Oxford, 198-400.

44. Ceperley, D. M. and Alder M. J. (1980). Ground State of the Electron Gas by a Stochastic Method. *Physical Review Letters*, 45, 566-569.
45. Perdew, J. P., Burke, K. and Ernzerhof, M. (1996). Generalized Gradient Approximation Made Simple. *Physical Review Letters*, 77, 3865-3868.
46. Perdew, J. P. and Wang, Y. (1992). Accurate and simple analytic representation of the electron-gas correlation energy. *Physical Review B*, 45, 13244-13249.
47. Vanderbilt, D. (1990). Soft self-consistent pseudopotentials in a generalized eigenvalue formalism. *Physical Review B*, 41, 7892-7895
48. Troullier, N. and Martins J. L. (1991). Efficient pseudopotentials for plane-wave calculations. *Physical Review B*, 43, 1993-2006.
49. Hamann, D. R., Schlüter, M. and Chiang, C. (1989). Norm-Conserving Pseudopotentials. *Physical Review Letters*, 43, 1494.
50. Head, J. D. and Zerner, M. C. (1985). A Broyden—Fletcher—Goldfarb—Shanno optimization procedure for molecular geometries. *Chemical Physics Letters*, 122, 3, 264-270.
51. Habetler, G. J. and Matkowsky, B. J. (1975). Uniform asymptotic expansions in transport theory with small mean free paths, and the diffusion approximation. *Journal of Mathematical Physics*, 16, 4.
52. Oka, Y. (2014). Nuclear Reactor Design. *An Advanced Course in Nuclear Engineering 2. Springer*, 327-337.
53. Lamarsh, J. R. and Baratta, A. J., (2015). *Nükleer Mühendisliğe Giriş* (çev. Okan Zabunoğlu). Ankara: Palme Yayıncılık.
54. Bandini, B. (1990). *A Three-dimensional Transient Neutronics Routine for the TRAC-PF1 Reactor Thermal Hydraulic Computer Code*. Ph.D. Thesis, Pennsylvania State University.
55. Lewis, E. and W. Miller. (1984). *Computational Methods of Neutron Transport*. Wiley, 420.
56. Marleau, G., Hebert, A. and Roy, R. (2013). *A User Guide for DRAGON*. Technical report IGE-174 Rev. 4, Ecole Polytechnique de Montréal, September.
57. Marleau, G., Hebert, A. and Roy, R. (2013). *A User Guide of Dragon, release 3.06L*. Technical report IGE-174 Rev. 12.
58. Dahmani M., Marleau, G. and Tellier R. L. (2008). Modeling reactivity devices for advanced CANDU reactors using the code DRAGON, *Annals of Nuclear Energy*, 35, 804-812.
59. Marleu, G. Hebert A., and Roy, R.. (2010). *A User Guide for DRAGON 3.06*. 'Ecole Polytechnique de Montr' eal, rev. 1 ed., 2010. Report BNL-90365-2009.

60. Davison, B. (1957). *Neutron Transport Theory*. Clarendon Press, Oxford, 450.
61. Sanchez, R., (1997). Approximate solutions of the two-dimensional integral transport equation by collision probabilities methods. *Nuclear Science and Engineering*, 64, 384–404.
62. Jiang, M., Zheng, J. W., Xiao H. Y., Liu Z. J., Zu, X. T. (2017). A comparative study of the mechanical and thermal properties of defective ZrC, TiC and SiC. *Scientific Reports*, 7: 9344. DOI:10.1038/s41598-017-09562-x.
63. Grimvall, G. (1986). *Thermophysical Properties of Materials*. North-Holland, Amsterdam, 28.
64. Li, Y. F., Gao, Y. M., Xiao, B., Min, T., Fan, Z. J., Ma, S. Q., Xu, L. L. (2010). Theoretical study on the stability, elasticity, hardness and electronic structures of W–C binary compounds. *Journal of Alloys and Compounds*, 502, 28–37.
65. Wang, J., Yip S., Phillpot, S. R. and Wolf, D. (1993). Crystal instabilities at finite strain, *Physical Review. Letter*, 71, 4182–4185.
66. Wu, Z. J., Zhao, E. J., Xiang, H., Hao, X., Liu, X. and Meng, J. (2007). Crystal structures and elastic properties of superhard IrN<sub>2</sub> and IrN<sub>3</sub> from first principles. *Physical Review B*, 76: 054115(1)–054115(15).
67. Duan, Y. H., Sun, Y., Peng, M. J. and Zhou, S. G. (2014). Anisotropic elastic properties of the Ca-Pb compounds, *Journal of Alloys and Compounds*, 595, 14–21.
68. Pugh, S. F. (1954). XCII. Relations between the elastic moduli and the plastic properties of polycrystalline pure metals. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, 45, 823–843.
69. Fine, M. E., Brown, L. D. and Marcus, H. L. (1984). Elastic constants versus melting temperature in metals. *Scripta Metallurgica*, 18, 951–956.
70. Wang, J., Zhou, Y., Liao, T. and Lin, Z. (2006). First-principles prediction of low shear-strain resistance of Al<sub>3</sub>BC<sub>3</sub>: A metal borocarbide containing short linear BC<sub>2</sub> units. *Applied. Physics Letters*, 89, 021917
71. Bao, W., Liu, D. and Duan, Y. (2018). A first-principles prediction of anisotropic elasticity and thermal properties of potential superhard WB<sub>3</sub>. *Ceramics International*.
72. Chen, K. and Zhao, L. (2007). Elastic properties, thermal expansion coefficients and electronic structures of Ti<sub>0.75</sub>X<sub>0.25</sub>C carbides. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 68, 1805–1811.
73. Pang, M., Zhan, Y., Wang, H., Jiang W. and Du, Y. (2011). Ab initio study of AlCu<sub>2</sub>M (M = Sc, Ti and Cr) ternary compounds under pressures. *Computer Material Science*, 50, 2930–2937.198
74. Tohei T., Kuwabara, A., Oba, F. and Tanaka, I. (2006). Debye temperature and stiffness of carbon and boron nitride polymorphs from first principles calculation. *Physics Review B*, 73 (2006) 064304.

75. Yi, G., Zhang, X., Qin, J., Ning, J., Zhang, S., Ma, M. and Liu, R. (2015). Mechanical, electronic and thermal properties of Cu<sub>5</sub>Zr and Cu<sub>5</sub>Hf by first-principles calculations. *Journal of Alloys and Compounds*, 640, 455–461.
76. CASTEP Guide, (2019). *BIOVIA Materials Studio*. Dassault Systèmes Customer Support, 10, Rue Marcel Dassault, France.
77. Ashcroft, N.W. and Mermin, N.D. (1976). *Solid State Physics*. Saunders College Philadelphia, 116, 217.
78. Krane, K. S. (2002). *Nükleer Fizik*. (Çeviri: Başar Şarer). 2. Cilt, Ankara, Palme Yayıncılık, 392-395.
79. Marleau, G., Hebert, A. and Roy, R. (2013). *A User Guide of Dragon, release 3.06L*. Technical report IGE-174 Rev. 12.
80. Jones, C. L., Bernstein, A., Conrad, J. M., Djurcic, Z., Fallot, M., Giot, L., Keefer, G., Onillon, A. and Winslow, L. (2012). Reactor simulation for antineutrino experiments using DRAGON and MURE. *Physical Review D*, 86, 012001.
81. Xiao, H. Y., Gao, F., Zu, X. T. and Weber, W. J. (2009). Ab initio molecular dynamics simulation of a pressure induced zinc blende to rocksalt phase transition in SiC. *Journal of Physics.:Condensed Matter*, 21, 245801.
82. Feldman, D. W., Parker, J. H., Choyke, W. J. and Patrick, L. (1968). Phonon Dispersion Curves by Raman Scattering in SiC, Polytypes 3C, 4H, 6H, 15R, and 21R. *Physical Review*, 173, 787-793.
83. Razumovskiy, V. I., Popov, M. N., Ding, H. and Odqvist, J. (2015). Formation and interaction of point defects in group IVb transition metal carbides and nitrides. *Computational Materials Science*, 104, 147-154.
84. Gilman, J. J. and Roberts, B. W. (1961). Elastic Constants of TiC and TiB<sub>2</sub>. *Journal of Applied Physics*, 32, 1405-1405.
85. Weber, W. (1973). Lattice Dynamics of Transition-Metal Carbides. *Physical Review B*, 8, 5082-5092.
86. Brown, H. L. and Kempter, C. P. (1966). Elastic properties of zirconium carbide. *physica status solidi (b)* 18, 21-23.
87. Chen, K., Zhao, L. R., Rodgers J. and Tse, J. S. (2003). Alloying effects on elastic properties of TiN-based nitrides. *Journal of Physics D*, 36, 2725-2729.
88. Simunek, A. and Vackar, J. (2006). Hardness of Covalent and Ionic Crystals: First-Principle Calculations. *Physical Review Letters*, 96 (2006) 085501.
89. Zywiez, A., Karch, K. and Bechstedt, F. (1996). Influence of polytypism on thermal properties of silicon carbide. *Physical Review B*, 54, 1791–1798.
90. Gurvich, L. V. and Veyts, I. V. (1972). *Thermodynamic Properties of Individual Substances*. Hemisphere Publishing Corporation, New York, 2, 256.



91. Chang, R. and Graham, L. J. (1966). Low-temperature elastic properties of ZrC and TiC. *Journal of Applied Physics*, 37, 3778–3783.
92. Liu, Y. Z., Jiang, Y. H., Zhou, R. and Feng, J. (2014) .First principles study the stability and mechanical properties of MC (M = Ti, V, Zr, Nb, Hf and Ta) compounds. *Journal of Alloy and Compounds*, 582, 500–504.
93. Ajami, F. I. and MacCrone, R. K. (1974). Thermal expansion, Debye temperature and Gruneisen constant of carbides and nitrides. *Journal of the Less Common Metals*, 38, 101–110.
94. Qiang, Z., Zheng, Z., Yang, L. and Xiaoping, O., (2017). The mechanical and thermodynamic properties of  $\beta$ -Si<sub>1-x</sub>C. *Royal Society of Chemistry*, 7, 28499–28505.
95. Li H., Zhang, L., Zeng, Q., Ren, H., Guan, K., Liu, Q. and Cheng, L. (2011). First-principles study of the structural, vibrational, phonon and thermodynamic properties of transition metal carbides TMC (TM = Ti, Zr and Hf). *Solid State Communications*, 151, 61–66.
96. Abdollahi, A. (2013). First-principle calculations of thermodynamic properties of ZrC and ZrN at high pressures and high temperatures. *Physica B*, 410, 57–62.
97. Rebak, R. B. (2015). Alloy Selection for Accident Tolerant Fuel Cladding in Commercial Light Water Reactors. *Metallurgical and Materials Transactions E*, 2, 4,197-207.
98. Eddy, S. P., Alfredo, Y. A. and Claudia, G. (2015). The Quest For Safe And Reliable Fuel Cladding Materials. *2015 International Nuclear Atlantic Conference, INAC-2015*, São Paulo, SP, Brazil.
99. Allison, C. M., Berna, G. A., Chambers, R., Coryell, E. W., Davis, K. L., Hagrman, D. L., Hagrman, D. T., Hampton, N. L., Hohorst, J. K., Mason, R. E., McComas M. L., McNeil, K. A., Miller, R. L., Olsen, C. S., Reymann, G. A., Siefken, L. J. (1993). *Scdap/RELAP5/MOD3. 1 code manual, volume IV: MATPRO-A library of materials properties for light-water-reactor accident analysis*. Technical Report NUREG/CR-6150, EGG-2720, Idaho National Engineering Laboratory, 289-350.
100. Peter, E. and Lengauer, W. (1994). *Carbides: Transition Metal Solid State Chemistry*. (Ed. King, R. B.), Encyclopedia of Inorganic Chemistry, John Wiley and Sons, 2.
101. Pierrat, B. (2010). *Oxidation of an ultra high temperature-zirconium carbid*. Lulea University of Technology, 159 CIV.
102. Li, J., Porter, L. and Yip, S. (1998). Atomistic modeling of finite-temperature properties of crystalline  $\beta$ -SiC II. Thermal conductivity and effects of point defects. *Journal of Nuclear Materials*, 255, 139-152.
103. Ahmoye, D., Bucevac, D. and Krstic, V. D. (2018). Mechanical Properties of Reaction Sintered SiC-TiC Composite. *Ceramics International*, 44, 12, 14401-14407.



## ÖZGEÇMİŞ

### Kişisel Bilgiler

Soyadı, adı : AKBAŞ, Sabahattin  
 Uyuğu : T.C.  
 Doğum tarihi ve yeri : 06.06.1984, Savur/Mardin  
 Medeni hali : Evli  
 Telefon : 0 539 780 62 85  
 e-mail : sabahattinakbas35@gmail.com



### Eğitim

Derece	Eğitim Birimi	Mezuniyet Tarihi
Doktora	Gazi Üniversitesi / Fizik Ana Bilim Dalı	Devam ediyor
Yüksek lisans	Gazi Üniversitesi / Fizik Ana Bilim Dalı	2012
Lisans	Gazi Üniversitesi / Fizik Bölümü	2010
Lise	Vali Erol Çakır Yabancı Dil Ağırlıklı Lise	2006

### İş Deneyimi

Yıl	Yer	Görev
2014-2015	University of Idaho	Araştırmacı
2014-2015	Center for Advanced Energy Studies (CAES)	Araştırmacı
2012-2017	Bozok Üniv. Merkezi Araştırma Lab.	Araştırmacı
2011-2012	Ulusal Ajans	Proje Uzmanı

### Ödüller

- TÜBİTAK Yurt Dışı Doktora Araştırma Bursu (2014-2015, University of Idaho/USA)
- TÜBİTAK Yurt İçi Doktora Bursu (2012-2017)

### Yabancı Dil

İngilizce

### Hobiler

Kitap okuma, Futbol, Yüzme

## Yayınlar

1. Akbas, S. and Ozturk, M. K. (2019). Comparative study of neutronic, mechanical and thermodynamic properties of accident tolerant cladding materials: SiC, TiC and ZrC. *Materials Science and Engineering B*, ( hakemlerde inceleme aşamasında).
2. Akbas, S., Quiroga, V.M., Aydogan, F., Allison, C. and Ougouag, A.M. (2019). Thermal-Hydraulics and Neutronic Code Coupling for RELAP/SCDAPSIM/MOD4.0. *Nuclear Engineering and Design*, 344:174-182.
3. Akbas, S., Okuducu, S. and Akti, N.N. (2016). The study on nuclear level density of some deformed Dy radionuclides using collective model approach. *Nuclear Science and Techniques*, 27, 121.
4. Quiroga, V. M., Allison, C., Wagner, R. J., Aydoğan, F. and Akbas S. (2016). NIRK3D and 3DKIN: General Description and Current Status of the New 3D Kinetics Capabilities of RELAP5/SCDAPSIM/MOD4.0. *NUTHOS-11: The 11th International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal Hydraulics, Operation and Safety*, Gyeongju, Korea, 9-13.
5. Akbas, S., Quiroga, V.M., Aydogan, F., Ougouag, A.M. and Allison, C. (2015). Survey of Coupling Schemes in Traditional Coupled Neutronics-Thermal-Hydraulics Codes. *IMECE2015-52990, IMECE2015, Proceedings of the ASME 2015 International Mechanical Engineering Congress & Exposition*, Houston, Texas/USA, 13, 19.
6. Quiroga, V.M., Akbas, S., Aydogan, F., Ougouag, A.M. and Allison, C. (2015). Coupling of RELAP5/SCDAPSIM/MOD4.0 and Neutronic Codes. *IMECE2015-52990, IMECE2015, Proceedings of the ASME 2015 International Mechanical Engineering Congress & Exposition*, Houston, Texas/USA, 12, 18.
7. Okuducu, S., Akti, N.N., Akbas, S. and Kansu, M. O. (2012). Nuclear level density parameters of 203-209Pb and 206-210Bi deformed target isotopes used on accelerator-driven system in collective excitation modes. *Science and Technology of Nuclear Installations*, 2012, 915496.

## Uluslararası kongre sunumları

1. İbiş, H., Akbaş, S., Büyük, U. and M. Erol, (2016). Investigation of Microstructural and Mechanical Properties of Ti-Ni Binary Eutectic Alloys Prepared by Arc-Melting. *International Conference on Material Science and Technology in Cappadocia (IMSTEC 2016)*, Cappadocia, Nevsehir/Turkey

2. Quiroga, V. M., Allison, C., Wagner, R. J., Aydoğan, F. and Akbas S. (2016). NIRK3D and 3DKIN: General Description and Current Status of the New 3D Kinetics Capabilities of RELAP5/SCDAPSIM/MOD4.0. *NUTHOS-11: The 11<sup>th</sup> International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal Hydraulics, Operation and Safety*, October 9-13, 2016 Gyeongju/Korea.
3. Akbas, S., Quiroga, V.M., Aydogan, F., Ougouag, A.M. and Allison C. (2015). Survey of Coupling Schemes in Traditional Coupled Neutronics-Thermal-Hydraulics Codes. *IMECE2015-52990, IMECE2015, Proceedings of the ASME 2015 International Mechanical Engineering Congress & Exposition*, November 13-19, 2015, Houston, Texas/USA.
4. Quiroga, V.M., Akbas, S., Aydogan, F., Ougouag, A.M. and Allison C. (2015). Coupling of RELAP5/SCDAPSIM/MOD4.0 and Neutronic Codes. *IMECE2015-52991, IMECE2015, Proceedings of the ASME 2015 International Mechanical Engineering Congress & Exposition*, November 13-19, 2015, Houston, Texas/USA.
5. Akbas, S., Okuducu, S., Aydoğan, F. (2016). Few-Group Cross Section Generation for PWR Reactor Assembly. *Turkish Physical Society 32<sup>nd</sup> International Physics Congress*, September 6-9, 2016, Muğla/Turkey.
6. Akbas, S., Okuducu, S., Aktı, N. N. (2016). Nuclear Level Densities of Some Deformed Nuclei in the Collective Excitation Modes. *Turkish Physical Society 32<sup>nd</sup> International Physics Congress*, September 6-9, Muğla, Turkey.
7. Akbas, S., Okuducu, S., Aktı, N. N. and Kansu, M. O. (2012). Symmetry Properties of Ground State Rotational Bands for Some Even-Even Deformed Large Nuclei. *Turkish Physical Society 29<sup>th</sup> International Physics Congress*, Bodrum/Turkey.
8. Akbas, S., Okuducu, S., Aktı, N. N. and Kansu, M. O. (2012). Symmetry Properties of Even-Even Deformed  $^{156-164}\text{Dy}$  Isotopic Nucleus by Using Collective Excitation Modess. *2<sup>nd</sup> International Conference on Computation for Science and Technology (ICCST-2)*, Niğde University, Niğde/Turkey.

#### **Katıldığı Uluslararası/Ulusal Konferans, Seminer, Çalıştay**

1. The 11<sup>th</sup> International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal Hydraulics, Operation and Safety, 2016, Gyeongju/Korea.
2. International Conference on Material Science and Technology in Cappadocia (IMSTEC 2016), 2016, Cappadocia, Nevsehir/Turkey.
3. Isıl-Nötronik Etkileşimli Reaktör Fiziği Çalıştayı-Hacettepe Üniversitesi, 2016, Ankara/Turkey.
4. ASME 2015 International Mechanical Engineering Congress & Exposition, (2015), Houston, Texas/USA.
5. 2023 Vizyonunda Üniversitelerin Araştırma Laboratuvarları Çalıştayı-II, 2015, Kutahya/Turkey.

6. Thermal Hydraulics Division ANS 2014 Annual Meeting, American Nuclear Society, 2014, Reno/USA,
7. The Multiphysics Object-Oriented Simulation Environment (MOOSE) Training Workshop, 2014, Idaho Falls-Idaho/USA.
8. Micro XRF, Mapping and Spotting analysis, Spectrometer user training, Thermo Fisher Scientific, 2014, Lausanne/Switzerland.
9. Turkish Physical Society 29<sup>th</sup> International Physics Congress, 2012, Bodrum/Turkey.
10. Third Bozok Science Workshop Computational Studies on Structure and Dynamics from Nuclei to Biological Molecules, 2012, Bozok University, Yozgat/Turkey.
11. 17. Yoğun Madde Fiziği Ankara Toplantısı -Ankara Üniversitesi, 2010, Ankara.
12. 16. Yoğun Madde Fiziği Ankara Toplantısı-Gazi Üniversitesi, 2009Ankara
13. Hızlandırıcıların Günümüzdeki Önemi semineri- Gazi Üniversitesi, 2009, Ankara.
14. Bozok-BİLTEM Tanıtım ve Bilgilendirme Çalıştayı, 2013,Yozgat.



*GAZİ GELECEKTİR..*