

## Electronic Structure of Uranium Dioxide

Younsuk Yun, Kwangheon Park and Hunhwa Lim  
Kyung Hee University  
Suwon 449-701, Korea

Kun Woo Song  
Korea Atomic Energy Research Institute  
150 Dukjin-Dong, Yusong-Gu, Taejon 305-353, Korea

### Abstract

The details of the electronic structure of the perfect crystal provides a critically important foundation for understanding the various defect states in uranium dioxide. In order to understand the local defect and impurity mechanism, we carry out the calculation of electronic structure of UO<sub>2</sub> in the one-electron approximation, using a semi-empirical tight-binding formalism with and without f-orbitals. The local density of states for both spin are calculated from the spectral representation of Green's function. We discussed the bonding mechanism in perfect lattice of UO<sub>2</sub> based upon the calculations of band structure, local and total density of states.

.....

### MCNP 분석을 이용한 이산화우라늄내 핵분열기체 확산계수 측정 Fission Gas Diffusion Coefficient Calculation of Irradiated Urania Fuel Using MCNP Code

김희문, 박광현  
경희대학교

김봉구, 송근우, 김건식, 주용선, 홍권표, 강영환  
한국 원자력 연구소

### 요 약

핵분열기체 기체확산 계수값을 계산하기위해 시편을 하나로 원자로에 조사하고 Annealing 시험을 하여 시험후 20 분 간격으로 1 시간동안 Xe-133 방출량을 측정기로 계수하였다. 계수값을 통해 실제 방사능량을 정량계산하기 위해, 측정기의 효율을 계산한 결과 37.6%이며 에너지에 따른 효율은 배제하였다. 정량분석으로 방출된 Xe-133의 방사능량을 구하고 이를 토대로 방출비를 구하였다. 그러나 시간에 따른 온도변화로 인해 Booth 모형을 적용하지 않고 온도변화에 따른 과도 확산 방정식을 정립하였다. 과도 확산 방정식을 이용하여 실험 방출비값에 근사하는 확산 계수식의 활성화 에너지(activation Energy)와 계수인자(Pre-Exponential factor)분포를 구하여 Turnbull의 식과 비교분석하였다.