

液体リチウム鉛合金(Pb-17Li)の物理的特性に関する分子動力学的研究

Molecular Dynamics Study on Physical Properties of Liquid Lead-17lithium Alloy

*高 雲^{1,2}, Guido RAOS², Carlo CAVALLOTTI², 高橋 実³

¹東工大院原子核, ²Politecnico di Milano, ³東工大先導原研

核融合炉の液体金属ブランケットの候補材とされているリチウム鉛(Pb-17Li)の密度, 比熱及び粘性係数などの物理的特性を埋め込み原子法 (EAM) を応用した分子動力学解析によって求めた. この解析結果を過去の実験結果と比較し, 液体リチウム鉛の物性について理論的に明らかにした.

キーワード: リチウム鉛, 分子動力学法, 原子埋め込み法, 密度, 熱膨張率, 熱容量, 粘性係数

1. 緒言 高い化学的活性度のリチウムと重金属鉛との共晶鉛であるリチウム鉛 (Pb-17at%Li) は, 化学的活性度が抑制され, 核融合炉の液体金属ブランケットの候補材とされている. しかし, その密度, 熱膨張率, 熱容量および粘性係数等の物理的特性については, 実験データ^[1]はあるものの, 理論的研究は十分とはいえない. そこで, 本研究では, 分子動力学法 (Molecular Dynamics method, MD) 解析を用いて, 理論的に液体リチウム鉛の物理的特性を求め, 実験結果と比較することにより, 液体リチウム鉛の物理的特性を理論的に明らかにした.

2. 解析方法

2-1. EAM ポテンシャルモデル 液体合金の成分である Pb 原子と Li 原子間のポテンシャルエネルギーを再現するため, 電子密度汎関数に基づく埋め込み原子法 (Embedding Atom Method, EAM^[2,3]) を適用した. EAM は Daw 及び Baskes によって最初に提案され多体汎関数ポテンシャルの一種であり, 電子密度汎関数近似理論から導出されている^[2]. そのポテンシャルエネルギーは式 $E = \sum_i \left[F(\rho_i) + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \phi(r_{ij}) \right]$ から求められ, 第1項の埋め込みエ

ネルギーと第2項のペアポテンシャルエネルギーの和である. また,

原子密度 ρ は中心原子のまわりに存在する電子の量を表し, 中心原子の配位数と密接な関係がある.

2-2. 分子動力学法解析 古典的分子動力学法オープン解析コード LAMMPS^[4] を用いて, 温度 573K~873K におけるカノニカルアンサンブル (NPT) モデル化したリチウム鉛の密度, 熱膨張率および熱容量を求めた. 一方, リチウム鉛の粘性係数の解析にはマイクロカノニカルアンサンブル (NVT) を用いた. 解析結果を実験結果^[1]と比較し, 解析モデルの妥当性について検討し, 実験結果の補強も行った.

3. 解析結果および考察

解析によって求めた密度や熱膨張率等は実験と良く一致することがわかった. その一例としてリチウム鉛の粘性係数を Fig.1. に示す. 低い温度において, 解析結果は実験結果とよく一致するが, 温度が 800K を超えると, 解析結果は実験結果より 10% 程大きいことがわかった. 次式のような粘性係数のアレニウス式が得られた.

$\eta = 3.83 \times 10^{-4} \exp(7.682 \times 10^3 / RT)$ (573K \leq T \leq 873K). 密度, 熱膨張率および熱容量の物理的特性の結果については講演で述べる.

4. 結論 多原子間ポテンシャルモデルとして EAM を応用した古典的分子動力学法解析によって, 温度が 573K~873K における密度, 熱膨張率, 熱容量および粘性係数の物理的特性について求めることができ, 実験結果とよく一致し, 実験結果を補強することができた. また, 本解析を通して, 原子レベルで液体リチウム鉛の物性について評価することができた. 今後, 本解析方法を液体リチウム鉛の金属不純物の拡散係数の解析にも適用する予定である.

参考文献

[1] B. Schulz, Fusion Eng. Design 14 (1991) 199, [2] M.S.Daw and M. I. Baskes, phys. Rev. B 29, 6443(1984), [3] S. M. Foiles, Phys. Rev. B 37, 6121 (1988), [4] <http://lammps.sandia.gov/>

^{*}Yun Gao^{1,2}, Guido Raos², Carlo Cavallotti² and Minoru Takahashi³

¹Dept. Nucl Eng., Tokyo Tech., ²Politecnico di Milano, ³LANE Tokyo Tech.

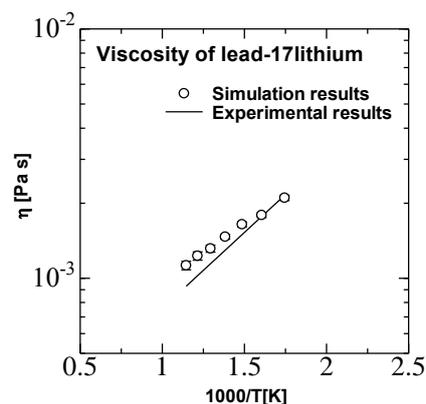


Fig.1. Simulation results of viscosity of Pb-17Li.