

ナノ粒子分散ナトリウムによる高速炉の安全性向上に関する研究 (25) 理論検討 (8)

Study on Safety Enhancement of the Fast Reactor by Using Nanoparticles Suspension Sodium

(25) Theoretical Study (8)

* 畠山 望¹, 三浦 隆治¹, 鈴木 愛¹, 宮本 明¹, 斉藤 淳一², 荒 邦章²

¹東北大学, ²原子力機構

ナトリウムに金属ナノ粒子を分散させたナノ流体の反応抑制メカニズムを理論的に解明するために、人工知能融合超高速化量子分子動力学法に基づくマルチスケール・マルチフィジックス計算化学手法を用いて、物性予測、プール燃焼、液滴落下燃焼について、実測と比較しながら検討を行った。

キーワード：ナノ流体，計算化学，超高速化量子分子動力学法，人工知能

1. 緒言

高速炉の冷却材として使用するナトリウムを化学的に安定化させるために、金属ナノ粒子を分散させたナノ流体の研究を進めている。ナノ流体の反応抑制効果を理論的に解明し、適用性評価に必要な基礎知見を整備する目的で、超高速化量子分子動力学法（UA-QCMD）に基づいた計算化学による検討を行った。

2. 計算方法

ナノ流体の物性予測には、UA-QCMD に必要となる密度汎関数理論（DFT）精度のパラメータ構築に人工知能手法を適用して、これを利用した。プール燃焼については、動的モンテカルロ法に基づくメソシミュレータを開発した。液滴落下燃焼は、マクロレベルの化学反応連続体方程式系を差分法で解いた。

3. 計算結果

ナノ流体による反応抑制には、ナトリウム蒸発速度の低下が寄与している。ナノ金属の粒径と数密度を原子レベルでモデル化し（図 1(a)）、UA-QCMD による凝集エネルギーの計算値と実測の相関を求めた。また、ナノ流体でプール燃焼が自己終息する現象の計算に成功し（図 1(b)）、蒸発速度の低下と酸素濃度が液滴落下燃焼にもたらす影響についても、連続体レベルの計算により実験と同様の結果を得た（図 1(c)）。

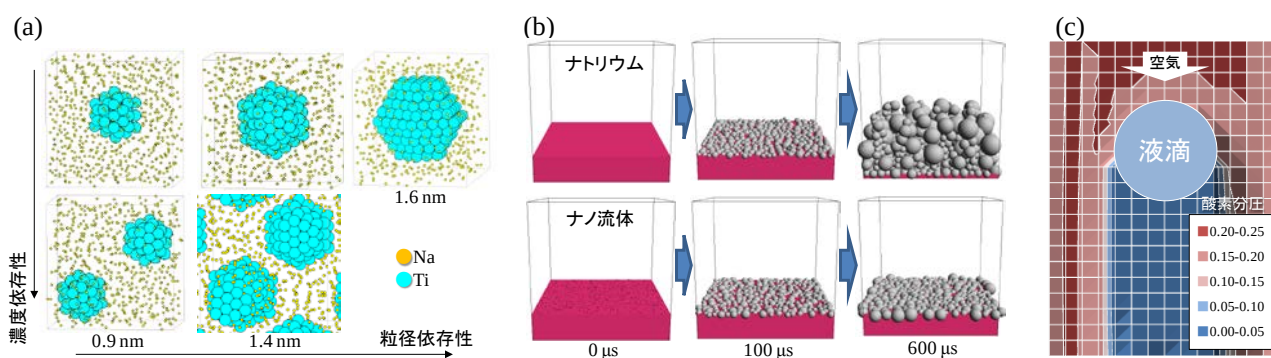


図 1 (a) 物性予測、(b) プール燃焼反応、(c) 液滴落下燃焼の各シミュレーション

本研究は、特別会計に関する法律（エネルギー対策特別会計）に基づく文部科学省からの受託事業として、日本原子力研究開発機構が実施した平成 27 年度「ナノ粒子分散ナトリウムによる高速炉の安全性向上技術の開発」の成果です。

*Nozomu Hatakeyama¹, Ryuji Miura¹, Ai Suzuki¹, Akira Miyamoto¹, Junichi Saito² and Kuniaki Ara²

¹Tohoku Univ., ²Japan Atomic Energy Agency