

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検討(18) 理論検討（その5）

Study on safety enhancement of the fast reactor by using nanoparticle suspension sodium (18)

Theoretical study (No.5)

*稲葉 賢二¹, 佐藤 愛美¹, 石澤 由紀江¹, 小原 幸子¹, 佐藤 亮¹, 大串 巧太郎¹,
三浦 隆治¹, 鈴木 愛¹, 宮本 直人¹, 畠山 望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

ナノ流体の反応抑制メカニズムを解明するために、独自に開発した超高速量子分子動力学計算手法(UA-QCMD)を用いて、 O_2 による酸化反応を純 Na、ナノ流体それぞれに対して行いその違いを確認した。

キーワード: 計算化学, ナノ流体, 安全性

1. 緒言

ナノ流体の燃焼抑制には反応の自己終息性にあると推定されている。その燃焼抑制・自己終息メカニズムの解明のため、量子分子動力学法を用いナノ流体の酸化反応過程を計算しメカニズムの検討を行った。

2. 計算手法

パラメータ化によって、従来の密度汎関数法に基づく第一原理計算プログラムと比べ約 1000 万倍の高速化を達成化した UA-QCMD を用いて、純 Na、ナノ流体それぞれ表面モデルを作成し、500°C NVE の条件で O_2 分子を一定時間置きに表面上方から衝突させ、それぞれの酸化の様子を UA-QCMD によって再現した。

3. 計算結果

純 Na では、表面に衝突した O_2 はまず解離せずにそのまま表面内部に侵入し、全ての O_2 が解離せず、 Na_2O_2 、 Na_2O が混在した状態になる。 O_2 は表面全体に均一に降らせているが、計算を進めていくと徐々に Na 酸化物の塊が出来るように集まってくる事が確認出来た(Fig.1)。ナノ流体では、内部に入り込んで解離した O がナノ粒子に捕まり、O を介した強い化学結合で繋がっていくことでナノ粒子周辺の Na が固定化される結果になった。そのため表面への Na の拡散が制限され、ナノ流体の反応抑制効果となって現れる事が理論計算からも確認出来た(Fig.2)。

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 26 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。

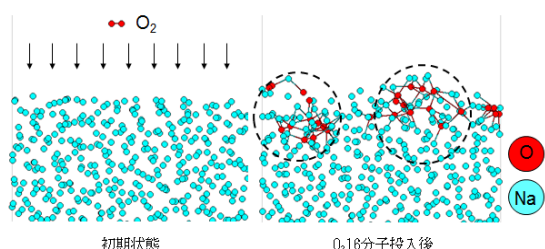


Fig.1 ナトリウム酸化 UA-QCMD 結果

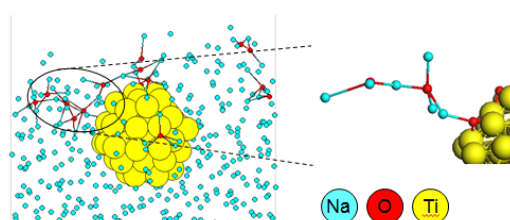


Fig.2 ナノ流体酸化 UA-QCMD 結果

*Kenji Inaba¹, Manami Sato¹, Yukie Ishizawa¹, Yukiko Obara¹, Ryo Sato¹, Kotaro Okushi¹, Ryuji Miura¹, Ai Suzuki¹, Naoto Miyamoto¹, Nozomu Hatakeyama¹, Akira Miyamoto¹, Junichi Saito² and Kuniaki Ara²

¹Tohoku Univ., ²Japan Atomic Energy Agency.