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(19)
理論検討（その６）

Study on safety enhancement of the fast reactor by using nanoparticle suspension sodium (19)
Theoretical study (No6)

*大串巧太郎 [1], 佐藤　愛美 [1], 石澤　由紀江 [1], 小原　幸子 [1], 佐藤　亮 [1], 稲葉　賢二 [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

液体ナトリウムやナノ流体液滴に関する現象は、液滴の運動のみならず、蒸発、表面反応（結晶成長）、着火、気相反応、液滴の温度予測等複雑な現象が絡んでいると予測される。これらを計算化学の観点でモデル化し、実験値と比較して、ナノ流体の反応抑制メカニズムを定量的に評価することを試みた。

キーワード：計算化学，ナノ流体，反応抑制

1. 緒言

液体ナトリウムとナノ流体における燃焼速度の違いは、着火後の気相での反応において反応物であるナトリウム原子の供給速度差によると考えられ、よって両者の蒸発速度の差と、液滴表面での反応によって生じたナトリウム酸化物の構造差に起因すると考えられる。液滴表面の反応において、液体ナトリウム表面では柱状反応物が生成し、ナトリウムが表面に拡散して、さらなる酸化が進む。一方、ナノ流体表面では液滴中のナノ粒子の表面が酸化されることでナトリウムが固定化されるため、ナトリウムの酸化が抑制される（自己終息性）。　以上を元に今回、計算化学の観点でモデル化し、シミュレーションを実施した。

2. 計算手法

本計算では三次元の等間隔格子の中央に球状の液体ナトリウムもしくはナノ流体の液滴を配置する。流入する酸素や生成されるナトリウムの運動は、離散化したナビエ-ストークス方程式を用いて計算する（Fig.1）。液滴の表面にある格子点で物質収支と熱収支の計算を行い、表面反応量と蒸発量の計算を行う。自己終息性のモデルについて、反応酸化物が表面を覆った割合（被覆率）を定義し、液体ナトリウムは構造上被覆率が１（反応物であるナトリウムが曝露されないので反応量が０）にならないが、ナノ流体の場合は１となり反応が収束するとした。

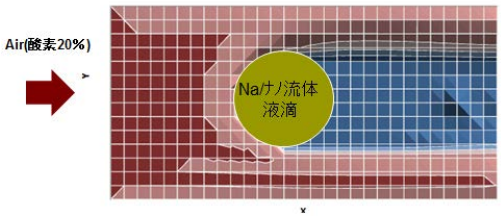

Fig.1 本ｼﾐｭﾚｰｼｮﾝの計算ﾓﾃﾞﾙ

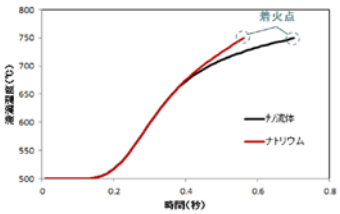

Fig.2 液体ﾅﾄﾘｳﾑとﾅﾉ流体の着火予測

3. 計算結果

着火遅れの実験データを再現することができた（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。

---

*Kotaro Okushi[1], Manami Sato[1], Yukie Ishizawa[1], Yukiko Obara[1], Ryo Sato[1], Kenji Inaba[1], Nozomu Hatakeyama[1], Akira Miyamoto[1], Junichi Saito[2] and Kuniaki Ara[2]
[1]Tohoku Univ., [2]Japan Atomic Energy Agency.