

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(20) 理論検討 (その7)

Study on safety enhancement of the fast reactor by using nanoparticle suspension sodium (20)

Theoretical study (No.7)

*小原 幸子¹, 稲葉 賢二¹, 石澤 由紀江¹, 三浦 隆治¹, 鈴木 愛¹, 宮本 直人¹, 畠山 望¹,
宮本 明¹, 齊藤 淳一², 荒 邦章²

¹東北大学, ²日本原子力研究開発機構

独自に開発した量子分子動力学計算手法により、液体ナトリウムおよびナノ粒子分散ナトリウムにおける各原子間相互作用を解析し、実測による各物性値との相関関係から物性評価予測を行った結果を報告する。

キーワード: 計算化学, ナノ流体, 安全性

1. 緒言

本研究では超高速化量子分子動力学法(UA-QCMD)を高速炉の冷却材として使用するナトリウム液体、およびナノ粒子分散させたナトリウムのモデルに適用し、得られた原子間相互作用から物性評価予測への応用を検討する。

2. 計算手法

UA-QCMD は、パラメータ化によって従来の密度汎関数法(DFT)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し大規模な系のシミュレーションが可能である。適切なパラメータを構築する事で金属や化合物において DFT の結果や実測に基づく熱力学データを精度よく再現する事が可能である。

3. 計算結果

200°C、300°C、500°Cの温度ごとに作成したナノ粒子分散ナトリウムのモデルを Fig.1 に示す。これらのモデルから得られる原子間相互作用をもとに凝集エネルギー密度を算出し、横軸に凝集エネルギー密度、縦軸に実測の表面張力をとった図を Fig.2 に示す。この結果、原子レベルのモデルを構築しそこで得られる原子間相互作用によって表面張力の予測を行うことが可能であることを示した。

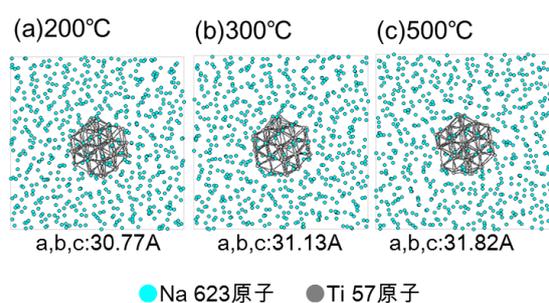


Fig.1 (a)200°Cでの計算モデル,(b)300°C,(c)500°C

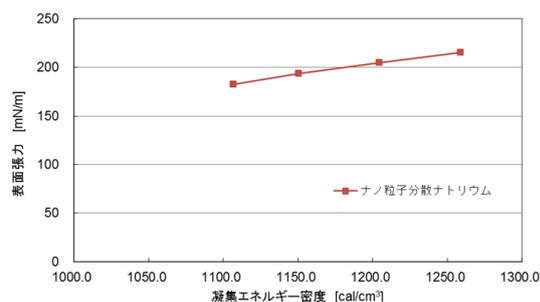


Fig.2 凝集エネルギー密度の表面張力

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。

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

¹Tohoku Univ., ²Japan Atomic Energy Agency.