

MHD 電解フィルタ開発に向けたフッ化物溶融塩中における溶存水の挙動評価

Evaluation of the behavior of impurity water dissolved in a molten fluoride salt for developing an MHD electrolytic filter

*宍戸 博紀¹, 橋爪 秀利¹

¹東北大

磁場中を横切ることによって生じる起電力を利用した電解フィルタの開発に向け、電子状態計算に基づいた分子動力学計算により、溶融塩中に溶存する不純物としての水の構造および輸送特性について評価する。

キーワード：電気分解, 分子動力学法, 密度汎関数理論, 腐食, 溶融塩炉

1. 背景 溶融塩は第4世代原子炉における燃料および冷却材として利用が検討されている[1]。これら工学利用において構造材との共存性は重要な問題であり、溶融塩中に溶存する水分等の不純物が腐食を引き起こす大きな要因といわれている[2]。これを受けて著者らは、外部から磁場を印加し、これを横切ることによって生じる起電力により、運転しながら溶融塩中の水分等を電解除去する MHD (Magnetohydrodynamics) 電解フィルタを提案している。当該システムの開発に向けて、電気分解に必要な電位や拡散律速と思われる中での電極反応速度などを評価するために、溶融塩中における不純物の挙動を明らかにする必要がある。以上から本研究では、電子状態計算に基づいた分子動力学 (MD) 計算により、溶融塩中に溶存する不純物としての水の構造および輸送特性について評価する。

2. 数値解析手法 計算対象は原子力利用において一般的な LiF-BeF₂ 混合塩 (BeF₂ モル比 33%) とする。計算セル中のイオン数は、LiF-BeF₂ が 63 個、水分子が 1 個である。計算においては VASP.6.4.3 を使用した[3]。PAW 型擬ポテンシャルを用い、PBE 交換相関汎関数を使用した。MD 計算は NVT アンサンブルにて行い、時間ステップ 0.5 fs とした。MD 計算中の全エネルギーのドリフトは 0.6 meV atom⁻¹ ps⁻¹ 程度であった。MD 計算結果より平均二乗変位を算出し、アインシュタインの関係式に基づいて自己拡散係数を評価する。

3. 数値解析結果 図1に各元素の平均二乗変位を、図2に自己拡散係数のアレニウスプロットを示す。水分子の拡散挙動はO原子の拡散係数として評価する。アレニウスの関係の通り、酸素の拡散係数の対数値は T^{-1} に対して線形性を示しており、さらにその傾き、すなわち活性化エネルギーは他元素よりも大きい結果が得られた。BeF₄²⁻の連鎖したガラス状の構造に捕捉されながら水は運動するであろうことが予想されたが、それに束縛されずに運動している可能性が示された。

参考文献

- [1] R. Scarlat et al., Prog. Nucl. Energy 77 (2014) 406-420. [2] M. Kondo et al., Fusion Eng. Des. 85 (2010) 1430-1436.
[3] G. Kresse et al., Phys. Rev. B 47 (1993) 558-561.

*Hiroki Shishido¹, Hidetoshi Hashizume¹

¹Tohoku Univ.

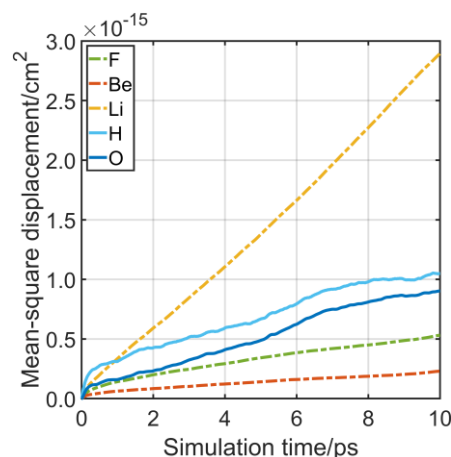


図1 各元素の平均二乗変位 (973 K)

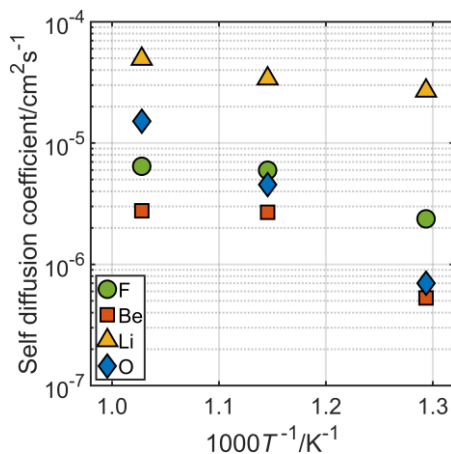


図2 自己拡散係数の温度依存性