直接シミュレーションモンテ・カルロ法による

原子ビーム中における原子間散乱の

数値シミュレーション

燕木 英雄*・西村 昭彦*・大場 弘則*

山本 浩康*・柴田 猛順*

(受付1991年4月22日, 掲載決定1991年8月3日)

Direct Numerical Simulation of Scattering Atoms in an Atomic Beam by Monte-Carlo Method

Hideo KABURAKI, Akihiko NISHIMURA, Hironori OHBA

Hiroyasu YAMAMOTO and Takemasa SHIBATA

(Japan Atomic Energy Research Institute, Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken)

(Received April 22, 1991, Accepted August 3, 1991)

はじめに

原子法レーザー同位体分離では、電子ビーム加熱蒸発で生成した原子ビームにレーザーを照射して目的同位体原子のみを選択的に励起、イオン化し、このイオンを電場により回収板に付着させ目的同位体原子の濃縮を行なうことが考えられている。この濃縮過程を効率良く行なうためにレーザー照射部の原子ビームの密度を増加させると、中性原子の流れから原子同士の衝突により中性原子が回収板に付着すると言われている¹⁾。中性原子の付着が増大すると濃縮度を低下させるため、回収板への中性原子の付着量を正しく評価する必要がある。ところが、中性原子の付着量をどの様にすれば評価できるかについての報告はこれまでなされていない。一方、棚沢等²⁾は電子ビーム加熱蒸発で生成した重金属原子ビームの速度分布をレーザードップラー法で測定し、重金属原子ビームの速度は加熱用電子ビームの電流値の増加と共に速くなり1000 m/sに達すること及び蒸気速度分布の広がりはほとんど変化しないことを明らかにした。

ここでは、回収板間に入る原子がすべて回収板に平行に入った場合でも、それが速度分布を持つために、回収板間で原子同士の玉突き衝突が起り、これにより原子が散乱されて回収板に付着すると考えた。これを、直接シミュレーションモンテ・カルロ法を用いて数値シミュレーションを行ない回収板への付着量の評価を行なった。その結果、原子蒸気密度が 10^{13} cm^{-3} 程度になると回収板への中性原子の付着量が急激に増大することが明らかになった。

2. 数値計算法

数値計算は、直接シミュレーションモンテ・カルロ法を用いた^{3,4)}。計算は以下の手順に従って行なった。まず、模擬粒子の初期条件と境界条件を設定する。十分短い時間間隔 Δt で、模擬粒子の持っている速度により粒子を移動させる。クヌーセン数が大きい時は衝突セルの大きさ以下の移動をするように Δt を設定する。次に、新しいセルへの模擬粒子の割当てをするソーティングを行なう。その新しい衝突セル内の模擬粒子同士で確率的に衝突をおこさせ、速度の交換を行なう。速度の交換は、剛体球モデルを用いて運動量及び運動エネルギー保

* 日本原子力研究所 (〒319-11茨城県那珂郡東海村)

存則に従うように行なう。この新しい速度で再び模擬粒子の移動を行なう。以上の過程を定常状態に達するまで繰返す。定常状態に達したら、各セルで時間平均をとって場の量（速度、密度等）の平均値を計算する。定常状態の判定は、計算を行なっている場中の粒子数および各セルにおける種々の量の平均値が一定になることを確認することにより行なう。

模擬粒子の衝突過程では、バード法^{3,4)}を用いた。バード法では、衝突セル内の模擬粒子の衝突を以下の様な棄却法で行なう。はじめに、2つの一様乱数を用いて衝突ペアを衝突セルの内から選び出す。予め、それぞれの衝突における最大相対速度 $g_{\max}$ を決めておく。選んだ衝突ペアの相対速度と $g_{\max}$ の比をとり、これが別に選んだ一様乱数 (R^*) より大きければこの衝突ペアは衝突するものとする ($R^* < g_{ij}/g_{\max}$)。この際、最大相対速度は、新しい値で置き換えていく。最大相対速度の値は、非常に短い繰返し計算により収束する。衝突が起こらない時は、次に衝突ペアを選ぶ。衝突が起こる時は、次の式に従いタイムカウンタ τ を進める。

$$\tau = \frac{2}{Nn\sigma_T g_{ij}}$$

ここで、 N は衝突セル内の模擬粒子の数、 n は原子の数密度、 σ_T は衝突断面積、 g_{ij} は衝突ペア (i, j) の相対速度である。このタイムカウンタの積算値が Δt を越えた時衝突を終了して粒子の移動を行なう。

3. 計算条件

数値計算は、原子間散乱のみによる回収板への付着の影響を調べるため、以下の様な簡単な形状及び初期条件を用いて計算を行なった。回収板は、幅 5 cm の空間を持ち、長さは 1.0 m とする。原子は、片方の入口から回収板に平行にすべて同じ速度 1000 m/s で $6.7 \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ の密度で入射すると仮定する。重金属原子同士の衝突断面積を評価するため Stern 等⁵⁾ がウランとクリプトンの

衝突実験から求めたウラン原子の有効半径 2.43 Å を用いる。このとき、原子の衝突断面積は $7.4 \times 10^{-15} \text{ cm}^2$ で、クヌーセン数を回収板間の幅で定義すると、入口部でのクヌーセン数は 2.83 である。また、流れ方向の分布は棚沢等²⁾ のデータと同程度の 1300 K の平衡分布に対応する速度のゆらぎを設定し、流れと垂直方向の速度のゆらぎはゼロと仮定した。

数値計算は、対称軸から半分の領域について行なった。クヌーセン数が大きく希薄気体領域にあるので回収板の幅の半分の 2.5 cm を一辺とする衝突セルを用い、これを Fig. 1(a) に示すように流れ方向に 40 個並べて計算を行なった。計算は、2 次元的に行ない衝突セルの下部は対称軸、上部は回収板を表している。対称軸では、模擬粒子は鏡面反射を行ない、回収板では、それぞれの位置 (x) において境界を横切った模擬粒子の数 ($N(x)$) をカウントしながら抜き取る事とした。模擬粒子は、計算領域に一ステップ当り 2000 個 (N_0) 投入した。回収板出口を横切った粒子は抜き取る事とした。場の総粒子数を各ステップ毎数えて定常になったことを確認した後、1000 回サンプリングを行ない平均値（速度、密度、各セルにおいて回収板に到達した原子数等）の計算を行なった。この計算は入口部の原子密度 $6.7 \times 10^{11} \text{ cm}^{-3}$ の場合についても行なった。

また、回収板入口部に Fig. 1(b) のように遮蔽用突起を設けて、回収板への中性原子の付着を減らす試みが数多くなされている¹⁾。この様な遮蔽用突起の影響を調べるため、回収板入口の両側それぞれに 10 mm の突起を設定した場合についても計算を行なった。他の条件は、上記の場合と全て同じとした。

4. 計算結果

回収板入口部で原子蒸気密度 $6.7 \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ の場合の付着粒子分布を Fig. 2 に示す。この図の左側の縦軸は一ステップ当りの入射原子数に対する回収板各点にお

Fig. 1 Collision cells for numerical simulation. The shielding plate at the inlet is also shown in the figure.

Fig. 2 Distribution of the number of collected atoms on the collector plate. These values are normalized in terms of the number of particles injected into the computational field per time step (N_0).

る付着原子数の比 ($N(x)/N_0$) を%で、右側の縦軸は一ステップ当りの入射原子数に対する回収板先端からその点 (x) までの付着原子総数の比 ($N^{\text{sum}}(x)/N_0$) を%で、横軸は回収板先端からの距離 (x) を示している。この結果から、各点における付着原子の割合は回収板先端から23.25 cm の距離で入射原子の1.0%程度になり、41.25 cm で最大値1.18%に達してその後はゆっくり減少して出口付近で0.8%程度となることが分かった。回収板先端からの付着原子総数を Table 1 に示す。この表には入口部で仮定した原子蒸気密度 $6.7 \times 10^{11} \text{ cm}^{-3}$ と $6.7 \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ の両方の計算結果を示した。密度 $6.7 \times 10^{11} \text{ cm}^{-3}$ の場合は先端から21.25 cm の距離で付着する原子総数は入射原子数の0.57%に過ぎないが、密度を $6.7 \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ にするとほぼ密度に比例して4.59%に達することが明らかになった。この数値シミュレーションでは、回収板の入口部で速度をそろえて入射しているため第一番目のセルでは原子間散乱があまり起こっていないが、実際の実験では回収板入口で散乱原子の割合が計算結果より増加するものと思われる。次に、原子蒸気密度 $6.7 \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ の場合について回収板先端における遮蔽用突起 (片側10 mm) を設置した時 (Fig. 1(b) 参照) の計算結果を表1の () の中に示す。この結果によると、入口部付近で散乱原子数はやや減少するが、先端部から21.25 cm の距離で3%程度の散乱原子があることが分かった。これにより、遮蔽用突起を設置しても回収板への中性原子の付着量を大きく減少させることができないことが明らかになった。

Table 1

Distance from the inlet of the collector plates [cm]	Ratio of the number of collected atoms to that of injected atoms ($N^{\text{sum}}(x)/N_0$)	
	Atomic density assumed at the inlet of the collector plates	
	$6.7 \times 10^{11} \text{ cm}^{-3}$	$6.7 \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$
11.25 cm	0.16%	1.34% (0.50%)*
21.25 cm	0.57%	4.59% (3.16%)
31.25 cm	1.17%	8.90% (7.36%)
41.25 cm	1.86%	13.59% (12.08%)
51.25 cm	2.62%	18.26% (16.87%)
98.75 cm	6.34%	36.24% (35.47%)

* The values in the parentheses indicate the case in which the shielding plate is placed at the inlet of the collector plate

以上の結果より、原子蒸気密度 $6.7 \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ の場合では、中性原子間の散乱によって回収板に中性原子の付着がおこることが確かめられた。文献 (1) で述べられている中性原子の回収板への付着が10%程度という値は、今回の数値シミュレーションの結果より原子ビーム中の中性原子間の散乱で説明できることが分かった。付着原子の割合は原子密度に比例して増大することから、レーザー同位体分離での光反応部で原子密度の上限を決める一つの要因になるものと思われる。今回の数値シミュレーションでは回収板に入る原子ビームがすべて回収板に平行に入るとしたが、実際には回収板に入るまで衝

突により回収板とは平行になっていない。今後は、回収板入口部の初期条件として回収板に垂直方向の速度分布を考慮して中性原子間の散乱による回収板への中性原子付着のシミュレーションを行なう。

[文 献]

- 1) D. N. Travis and D. J. H. Wort: Separation Phenomena in liquids and gases, Second Workshop, (Vol. 2, edited by P. Louvet, P. Noe, and Soubbaramayer), (1989), p. 637-651.
- 2) 棚沢武, 館林雄一, 吉田俊文, 足立肇, 松田泰彦: レーザードップラー法による蒸気特性の測定, 日本原子力学会 (1990年秋の大会) 予稿集 J21.
- 3) G. Bird, *Molecular Gas Dynamics*, Clarendon Press, (1977).
- 4) H. Kaburaki, H. Yamamoto, M. Yokokawa and T. Arisawa: Proceeding of the First International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications, (1990) 51.
- 5) R. C. Stern and N. C. Lang: J. Chem. Phys., **70** (04) 15 (1979) 1802.