

先進原子力システムのための 基礎研究課題

－ 米国DOEレポートの概要紹介 －

平成18年11月21日

日本原子力研究開発機構

湊 和生

目 次

- 先進原子力システムのための基礎研究関連のワークショップ
- Basic Research Needs for Advanced Nuclear Energy Systems
 - 基礎研究と先進原子力システム技術
 - マルチスケールモデリングの概念 – 第一原理計算から構造計算まで –
 - 基礎研究課題、研究の方向
 - 科学的に大きな挑戦課題
 - 優先的に行うべき研究の方向
 - 横断的研究テーマ
- Nuclear Physics and Related Computational Science R&D for Advanced Fuel Cycles Workshop
- Workshop on Simulation and Modeling for Advanced Nuclear Energy Systems
- JAEAでの取り組み

先進原子力システムのための基礎研究 関連のワークショップ

- 基礎科学関連

- Workshop on Basic Research Needs for Advanced Nuclear Energy Systems
 - 主催 DOE/SC (Office of Basic Energy Sciences)
 - 2006年7月31日～8月2日(ワシントン郊外のノースベセスダにて開催)
 - 参加者 約230名 日本から3名(原子力機構2名、電中研1名)

- 原子核物理関連

- Physics and Related Computational Science R&D for Advanced Fuel Cycles Workshop
 - 主催 DOE/SC (Office of Basic Energy Sciences, Office of Advanced Scientific Computing Research)
 - 2006年8月10日～ 8月12日(ワシントン郊外のベセスダにて開催)
 - 参加者 約130名 日本から3名(原子力機構2名、日本大使館1名)

- 計算科学関連

- Workshop on Simulation and Modeling for Advanced Nuclear Energy Systems
 - 主催 DOE/NE, DOE/SC (Office of Advanced Scientific Computing Research)
 - 2006年8月15日～ 17日(ワシントンD.C.)
 - 参加者 約160名 日本から8名(原子力機構7名、日本大使館1名)

Basic Research Needs for Advanced Nuclear Energy Systems



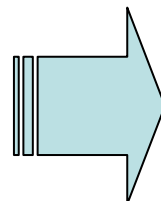
基礎研究と先進原子力システム技術

原子力エネルギーの効果的利用においては
極限条件(放射線、温度、腐食)での
材料や化学プロセスの性能が制限因子

基礎研究

実験: 材料を原子・分子レベルから観測
理論: 原子・分子レベルからバルクの状
態を予測

新材料
新プロセス
予測モデル



先進原子力システム技術

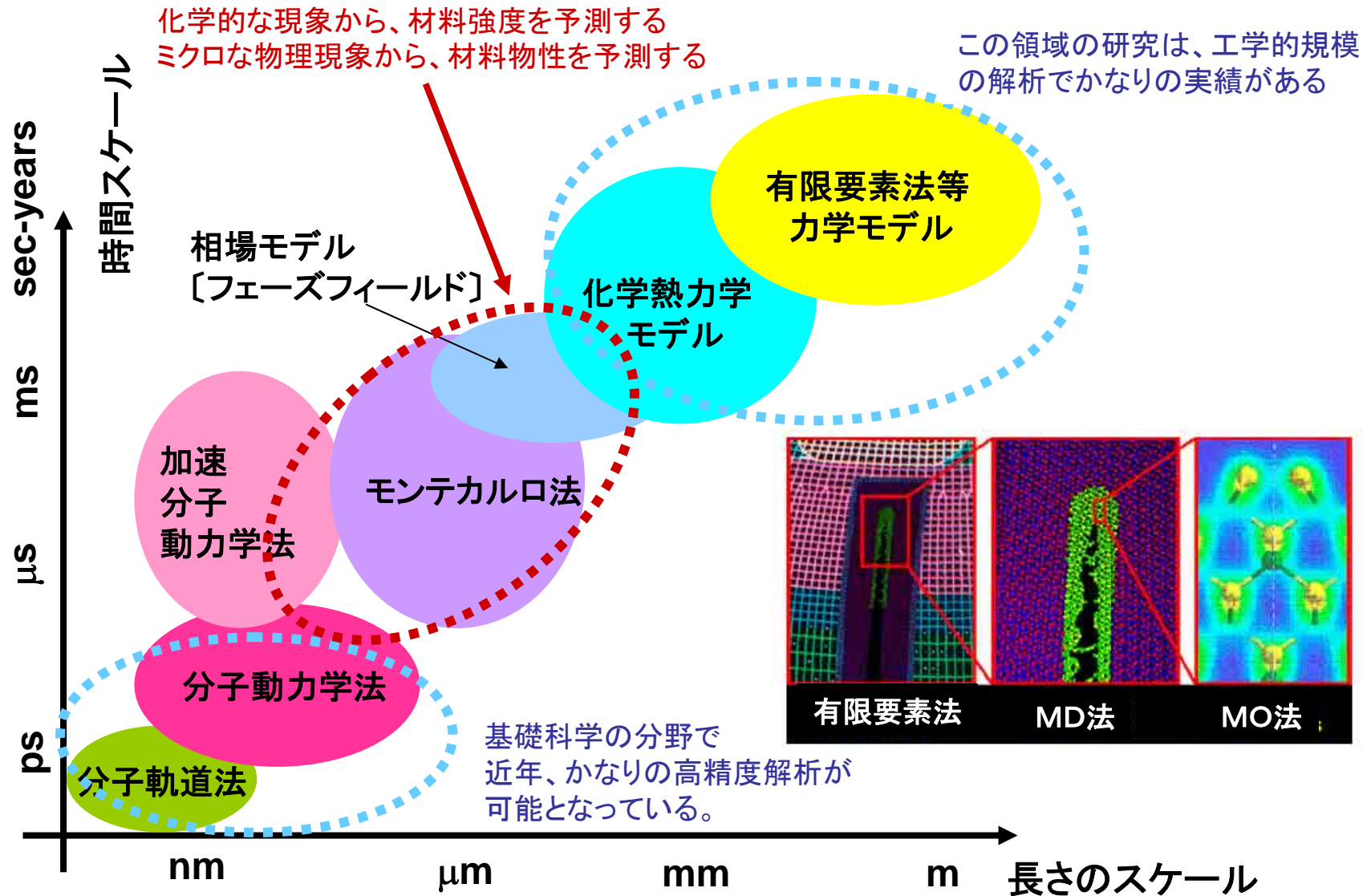
(放射線・温度・腐食の厳しい環境)

材料
燃料
分離技術
廃棄物固化体

基礎研究の成果により
先進原子力システムの科学技術を劇的に変える可能性
性能の向上、開発時間の短縮

マルチスケールモデリングの概念

— 第一原理計算から構造計算まで —



基礎研究課題、研究の方向

- 科学的に大きな挑戦課題
 - 関連する科学分野を変化させうる基本的理解をもたらすもの
 - 先進原子力システムにおける、放射線、温度及び腐食環境の極限状態の材料及びプロセスの性能を支える物質及び化学の基礎科学
 - 3つの課題を選定
- 優先的に行うべき研究の方向
 - ある特定の研究または技術分野へのインパクトが最も高い可能性のある基礎研究分野
 - 9つの課題を選定
- 横断的研究テーマ
 - ある特定の研究分野または学問分野を超えて、広範囲の分野の基礎科学の進展の基礎を与える基礎研究
 - 4つの課題を選定

科学的に大きな挑戦課題

- f 電子系の解明によるアクチニド及びアクチニド含有物質の化学と物理の理解
 - 先進原子力システムの燃料では、新しい化学分離戦略、燃料及び廃棄物体の製造と性能についての予測と理解が必要
 - 現状のモデルでは、燃料、溶液、廃棄物固化体の挙動を予測できない
- 第一原理、マルチスケールモデルによる極限条件下の多成分材料の物性予測
 - 構造材料、燃料、被覆管、廃棄物体の長期安定性や健全性は、照射、高温及び応力の複合環境下での微細構造及び界面の進展の動力学が支配
 - 機械的及び化学的性質を制御するには、相安定性や機械的挙動を、欠陥生成、拡散、捕獲、相互作用について第一原理に基づく理解が必要
- 分離プロセスにおける化学的選択性を制御する新規の分子システムの理解と設計
 - 再処理における先進分離技術では、複雑な系における化学的選択性の制御が必要

優先的に行うべき研究の方向

- PRD 1: 極限照射環境での性能限界を急激に向上させる材料及び界面のナノスケールでの設計
- PRD 2: アクチニド含有物質の物理と化学、ならびに f 電子系解明
- PRD 3: 極限環境下でのミクロ構造と特性の安定性
- PRD 4: 種々の化学環境におけるアクチニドと核分裂生成物の化学の理解
- PRD 5: ナノからマクロスケールにわたる分離化学
- PRD 6: 極限化学条件に順応する材料－環境界面
- PRD 7: 化学プロセスにおける放射線や放射線分解の基礎的影響
- PRD 8: 燃料の製造と性能に係る多成分系における基本的な熱力学的及び速度論的プロセス
- PRD 9: 材料のマルチスケールモデリング予測と極限環境における多成分系化学現象の理解

PRD 1: 極限照射環境での性能限界を急激に向上させる 材料及び界面のナノスケールでの設計

- 欠陥とナノ構造の相互作用の基礎的理解が、欠陥挙動を制御し照射損傷を軽減する材料及び界面の設計を可能とする
- 極限照射環境での多結晶、多相、多成分の材料及び界面の複雑な挙動を描写する新しいモデルが必要
 - ナノ構造材料及び界面の設計、合成、ナノスケールの特性評価
 - 極限環境下での超高密度界面構造の応答を決定する基本の物理的メカニズムの発見が重要
 - 高密度のナノスケール界面や第二相を含有させることによる耐照射性の向上
- 先進原子力システムへのインパクト
 - 劣化しにくい材料の開発は、構成要素の性能向上及び寿命延伸に貢献し、信頼性、安全性、経済性の向上につながる
 - 照射損傷の影響を軽減する材料
 - 燃料-被覆管相互作用、応力腐食割れ、表面酸化等を軽減する材料

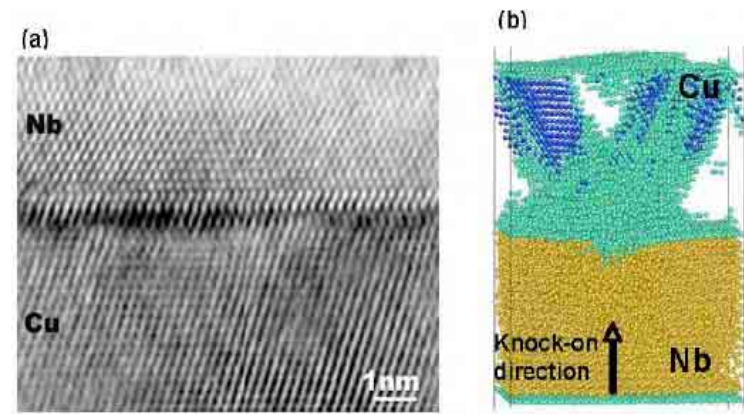


Figure 1: (a) High resolution TEM image of an interface in a Cu-Nb nanolayered composite following irradiation with 150-keV He ions to 7 dpa show no sign of damage despite (b) significant disruption of the interface by displacement cascades, as shown in this MD simulation. (Figures provided courtesy of Richard Hoagland, Los Alamos National Laboratory.)

PRD 2: アクチニド含有物質の物理と化学、 ならびに f 電子系解明

- 燃料の性能及びふるまいは、化学的、物理的及び機械的特性が支配
 - UO_2 については信頼できるデータベースが存在するが、それ以外のアクチニド化合物についてのデータは限定的
 - f 電子の挙動を理論的に描写できないため、燃料等の特性を予測する信頼できる方法はない
- アクチニドの電子構造理論に基づく物性の基本的理解が必要
 - 経験的パラメーター等を含まない f 電子系の状態を描写する理論を発展させ、アクチニド化合物の物性予測、さらには欠陥構造の予測
 - 測定技術の革新により、ベンチマーク計算に用いるためのアクチニド化合物の物性データの取得
- 先進原子力システムへのインパクト
 - アクチニド化合物(5f 電子)の基礎特性データの利用により、革新的燃料及びその分離プロセス開発に直接的効果
 - － 候補燃料の予備選定に科学的根拠を与え、開発期間・費用を削減
 - － 目的に合わせた設計(tailored-design)を可能とし、経験に基づく解釈を凌ぐ
 - － 運転/安全余裕の不確定性を減少し、アクチニド装荷量や原子炉運転の最適化

PRD 3: 極限環境下でのミクロ構造と特性の安定性

- 極限環境下でのミクロ構造及び物性の変化を理解し予測することは、構造材料、燃料、廃棄物固化体の合理的な設計に不可欠
 - 極限温度・環境での材料使用を可能にするメカニズムの解明
- 欠陥特性及びミクロ構造変化と機械的挙動及び相安定性との関係の第一原理による理解が必要
 - 計算科学的材料モデリングと革新的実験を組み合わせたマルチスケールのアプローチが必要
 - 脆性－延性遷移現象の基本的理解
- 先進原子力システムへのインパクト
 - 極限環境下でのミクロ構造及び物性の変化の機構論的理解により、燃料及び材料開発に効果
 - － 抜群の性能を持つ燃料の開発と挙動予測
 - － 高照射量及び高温ですぐれた性能を持つ構造材料の開発と挙動予測

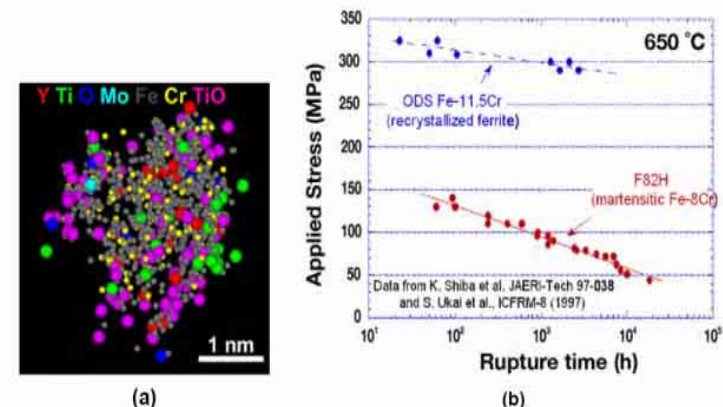


Figure 1: Atom map of a nanosized Y-Ti-O feature in an advanced nanostructured ferritic alloy (NFA) and demonstration of the improved creep performance of a representative NFA at 650°C, as compared to a conventional ferritic-martensitic alloy (Miller, M. K., E. A. Kenik, K. F. Russell, L. Heatherly, D. T. Hoelzer, and P. J. Maziasz. 2003. "Atom Probe Tomography of Nanoscale Particles in ODS Ferritic Alloys." *Materials Science and Engineering A* 353, 140; Alinger, M. J., G. R. Odette, and D. T. Hoelzer. 2004. "The Development and Stability of Y-Ti-O Nanoclusters in Mechanically Alloyed Fe-Cr Based Ferritic Alloys," *Journal of Nuclear Materials* 329–333, 382).

PRD 4: 種々の化学環境における アクチニドと核分裂生成物の化学の理解

- f 電子を取扱うことのできる計算化学的手法の開発により、アクチニド及びFPの化学的挙動を予測することが可能
- アクチニドとその周辺の配位構造の第一原理計算とバルクの物性との関連をモデル化することが重要
 - f 電子系の構造と化学結合に関する定量的な理解
 - イオン液体のような新規溶媒による新しい化学分離系の探索
 - 2相系、多相系の熱力学や分子シミュレーション
- 先進原子力システムへのインパクト
 - 新規アクチニド分離系の開発により、より経済的で核拡散抵抗性に優れた分離プロセスが開発できる
 - 高選択性抽出剤の開発
 - 簡素化されたプロセス設計

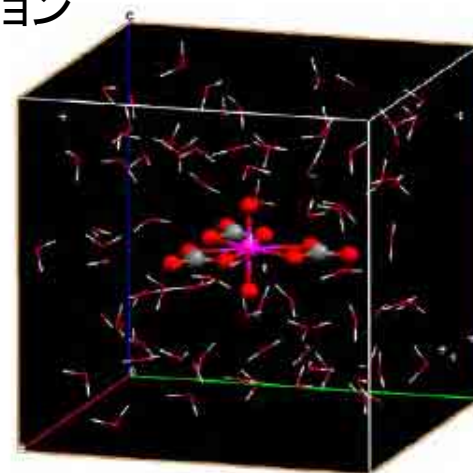


Figure 3: More accurate structural and spectroscopic fits are achieved by including the effects of successive “shells” of solvation.

PRD 5: ナノからマクロスケールにわたる分離化学

- 局所構造をナノレベルで解析する手法を応用することにより、化学分離系プロセスの問題点を理解することができる
- アクチニドの周辺のミクロ構造変化と分離特性との関係の中性子散乱などによる実験と計算化学的手法による理解が重要
 - 中性子散乱などの構造解析手法による溶媒の凝集化のメカニズム解明
 - 相分離特性などに関する分子動力学計算手法

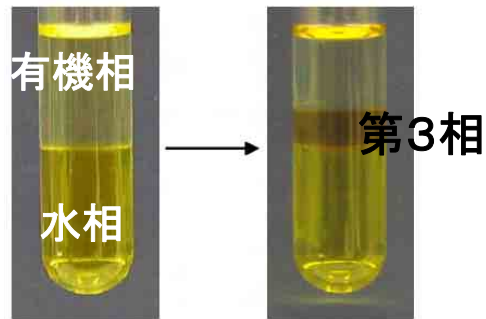
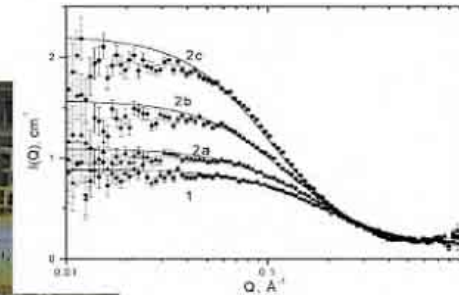


Figure 1: Third-phase formation in a solvent extraction system upon changes in solute concentration or temperature is shown at right; the original biphasic system from which the middle, brown phase forms is shown at left.



- 先進原子力システムへのインパクト
 - 高選択性の分離システムの構築により、プロセス簡素化、経済性向上
 - 界面反応の理解により、抽出分離系のシステム改良が可能となる(第3相の生成抑制)

PRD 6: 極限化学条件に順応する材料－環境界面

- 界面の化学は、材料の製造、性能及び安定性において非常に重要な役割を担っている
 - 燃料、被覆管、圧力容器から、燃料再処理、さらには長期の廃棄物貯蔵
- 半経験的ではない新しいモデル及びその場実験技術の開発をとおした材料界面化学の理解の画期的進展が必要
 - 腐食のメカニズムを理解するためには、現象論的アプローチから新しいその場観察手法を用いる基礎的アプローチへの変更が必要
 - 照射損傷を受ける材料特性に及ぼす粒界や欠陥等の効果の基礎的理解が重要
- 先進原子力システムへのインパクト
 - 広い条件範囲において、動的で普遍的安定性を持つ界面の設計を可能とする
 - － より高い燃焼度の燃料
 - － より高い温度に耐える材料
 - － 耐腐食性の再処理用材料

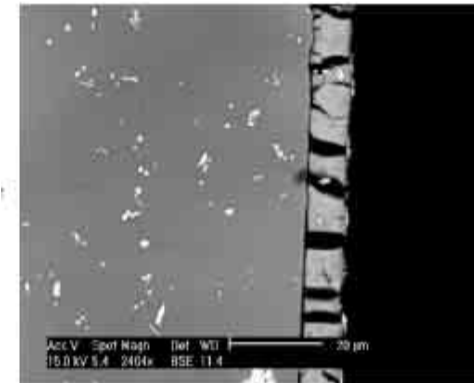
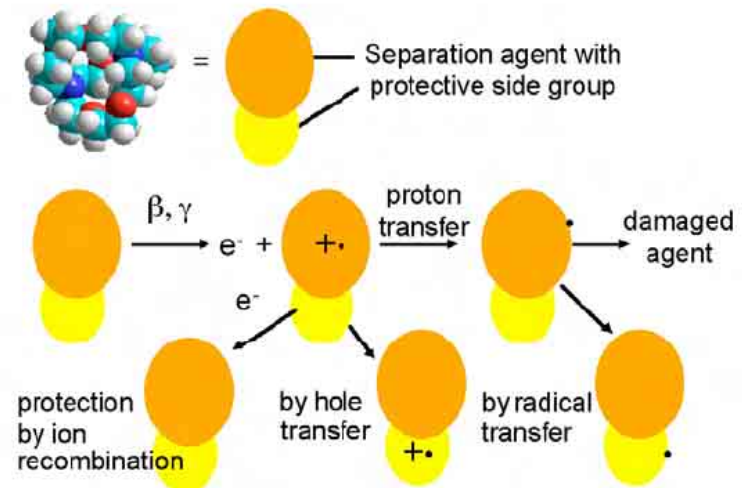


Figure 2: Growth of interface layer on borosilicate glass waste form (left) in contact with water (Courtesy T. Advocat, CEA France).

PRD 7: 化学プロセスにおける 放射線や放射線分解の基礎的影響

- 効率的な分離プロセスや効果的な廃棄物固化体の処分のためには、高放射線場、高温、酸化・還元環境での化学プロセスの理解と予測をすることが重要
- ラジカルの生成や照射損傷の蓄積を支配する基礎的プロセスを理解する必要
 - この放射線化学的なメカニズムを解明することが、新規分離系の開発には不可欠
 - γ 線源や α 放射体を用いた放射線分解に関する研究が必要
- 先進原子力システムへのインパクト
 - 再処理における高放射線場の影響を分子レベルで理解することにより、耐放射線性、分離性能、経済性により優れた分離試薬の開発が可能

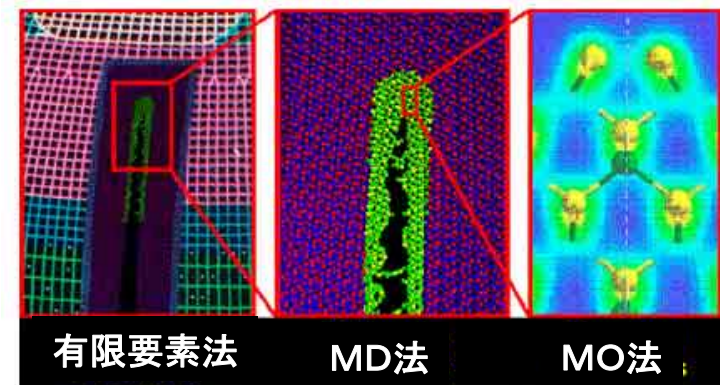


PRD 8: 燃料の製造と性能に係る多成分系における 基本的な熱力学的及び速度論的プロセス

- 多成分物質である燃料、とくにマイナーアクチニド含有燃料の製造及び性能に係る基本的なプロセスの理解は十分ではない
 - 核変換による相の不安定、ヘリウム生成や核分裂ガスによるバブルの形成、照射による体積膨張、拡散の促進など
 - 燃料製造のプロセスにおいても、物質中で複雑な変化
- 燃料の製造及び性能に係る予測能力を高めるには、相安定性、両立性、及びそれらの微細組織や物性への影響を支配する、熱力学的及び速度論的因子の基本的理解が必要
 - 原子・分子レベルの相挙動及び欠陥構造の予測と輸送及び結晶成長、究極的にはバルクの性能にまで結びつけるマルチスケールモデルの開発
- 先進原子力システムへのインパクト
 - 現在の燃料開発は試行錯誤の繰り返しであるが、燃料の製造及び性能を正確に描写するモデルの開発により、燃料開発に効果
 - － 燃料性能の向上、目的に合致した燃料性能
 - － 開発期間・費用の削減、放射性廃棄物発生量の削減

PRD 9: 材料のマルチスケールモデリング予測と 極限環境における多成分系化学現象の理解

- これまでの PRD 1 から 8 に関するテーマを総合して、複雑な過酷条件下における物理現象、化学現象を理解するためには実験とシミュレーションの相補的な関係が重要
- マルチスケールモデリング予測手法を確立するために
 - 実験的にはマクロスコピックからナノレベルの構造、物性評価に
 - 計算化学的には、数原子規模の第一原理計算から大規模シミュレーション
- 先進原子力システムへのインパクト
 - 照射条件下の物性の基礎的理解に基づき、先進燃料の合理的な設計
 - 酸化還元電位や平衡定数の不確かさを最小化することにより、放射線場におけるアクチニド分離システムの合理的な設計
 - 実験が困難な条件でのアクチニド化合物の性能予測



横断的研究テーマ (1/2)

- 耐照射性の機能材料及び構造材料のためのナノ構造
 - 特殊なナノ構造や欠陥集合体の設計・制御により、照射欠陥や不純物のシンクを形成でき、これにより耐照射性材料の開発が可能
 - 新材料の合成・製造、照射効果、ナノスケールでの特性評価、計算シミュレーション等に係る
 - 材料、燃料、廃棄物固化体への応用
- 4f 及び 5f 電子系の溶液及び固体化学
 - 固体及び溶液における 4f 及び 5f 電子系の基礎科学は、広い範囲にわたる固体物理及び反応化学の進展をもたらす
 - アクチニド含有物質及び溶液の基礎的理解の鍵
 - 燃料、廃棄物固化体、分離技術への応用

横断的研究テーマ (2/2)

- 界面及び極限環境での物理と化学
 - 材料、燃料、及び廃棄物固化体の長期安定性を確保するには、界面の構造及び組成を制御することが必須
 - 界面の科学ならびに関連する極限環境における輸送及び化学現象の基礎的理解には、多くの科学及び技術分野に係る
 - 材料、燃料、及び廃棄物固化体への応用
- 多成分系における物理及び化学の複雑さ
 - 先進燃料、廃棄物固化体、及び分離技術は、相互に密接に関連しているとともに多成分系のものである
 - これらの複雑な系ならびに関連する極限環境における構造・相安定性及び化学反応性の基礎的理解は、先進燃料、廃棄物体、及び分離技術の開発と性能予測に必須
 - 燃料、廃棄物固化体、及び分離技術への応用

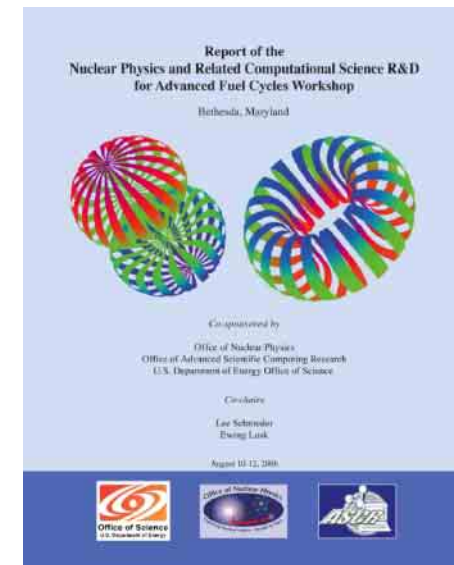
Nuclear Physics and Related Computational Science R&D for Advanced Fuel Cycles Workshop

- 目的

- 原子核物理(核データ)研究の分野に対するAFC(GNEP)からのニーズを整理し、必要な研究開発項目を提言する

- 概要

- AFC (GNEP) を支援するために、原子核物理 (核データ)研究の分野に対して、ニーズが何かを明らかにするための議論がなされた。これに貢献するために、核データ測定及び施設、評価済核データライブラリ及び核物理理論の各観点から、今後必要な研究開発項目が討議され、提言がなされた。
- 核データR&Dニーズ
 - － 断面積共分散データ(最優先)
 - － 断面積評価
 - － 断面積、共分散処理ツール
 - － 感度解析ツール
 - － アクチニド核種断面積
 - － 構造材(非弾性散乱(鉄、ナトリウム、鉛))
 - － 核物質検出に必要な核データ (光核反応データなど)



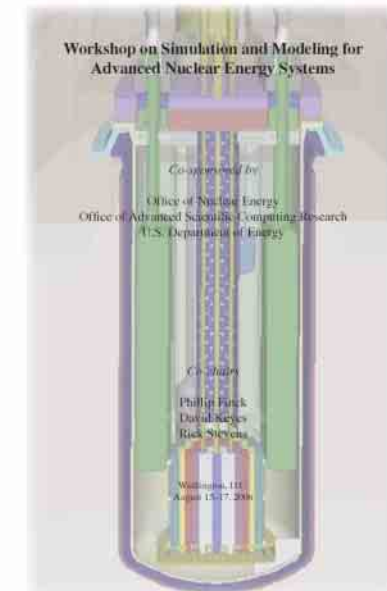
Workshop on Simulation and Modeling for Advanced Nuclear Energy Systems

- 目的

- GNEPにおける次世代炉開発、核燃料設計及び材料挙動、燃料サイクル（分離化学、プラント最適化を含む）、廃棄物処分に対するシミュレーション及びモデリング技術の短長期的役割について議論し、提言を行う

- 概要

- 原子力局の主導により、6つの技術分野について、どのようなシミュレーション及びモデリングが必要であることを議論
 - － 炉心、材料及び燃料、分離化学、廃棄物処分、耐震・構造、検証
- 科学局の主導により、計算科学技術分野における6分野について、計算科学技術の立場から、どのような計算科学技術基盤が必要かを議論
 - － 数学及び幾何学モデリング
 - － スケール化/マルチスケールアルゴリズム
 - － 確証/検証/不確かさ定量化
 - － 計算環境/データ/ネットワーク
 - － データ解析及び可視化
 - － ソフトウェアツールとエンジニアリング

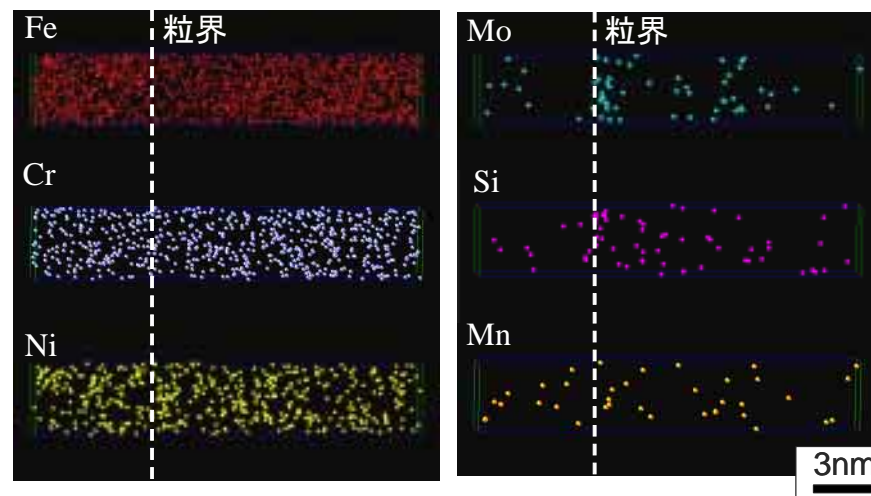


JAEAでの取り組み (1/3)

- 材料

- 原子レベルでの高精度実験(分析)技術の適用と計算科学シミュレーションによる基本的メカニズムの解明
- 3次元アトムプローブによる原子レベルの粒界近傍の化学組成分析

実機炉心シュラウド材の
分析結果



- 燃料

- MA含有MOX燃料の物性評価手法の一つとして、放射光を用いたMA酸化物の電子状態解析
- Pu酸化物の第一原理計算による酸素欠陥構造の解明

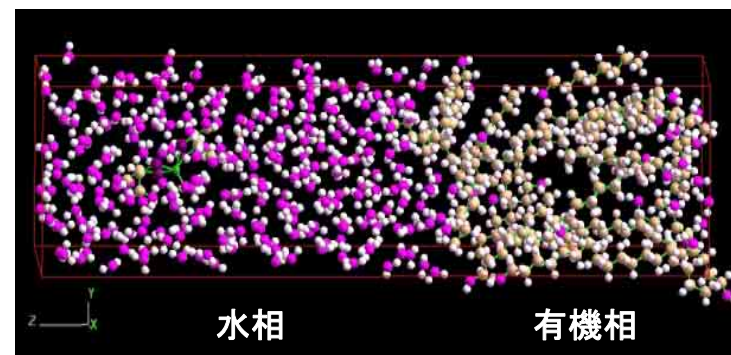
JAEAでの取り組み (2/3)

● 分離技術

- アクチニド分離用抽出剤開発と計算化学的評価
 - 抽出剤とアクチニドで構成される錯体の安定性評価
 - 第一原理計算から得られたポテンシャルをもとにした分子動力学計算

水相－有機相の2相分配挙動に関する
分子動力学シミュレーション

水相に存在するイオンと有機相に移動した時のイオンの自由エネルギー差から、抽出反応の起こりやすさを予測する



● 核データ

- JENDL-4の作成
 - FP核種やMA核種を中心とした核データ評価
 - 誤差データ(共分散データ)の充実
- アクチニド核種断面積
 - MA核種断面積測定
 - 測定結果に基づく断面積・共分散の評価

JAEAでの取り組み (3/3)

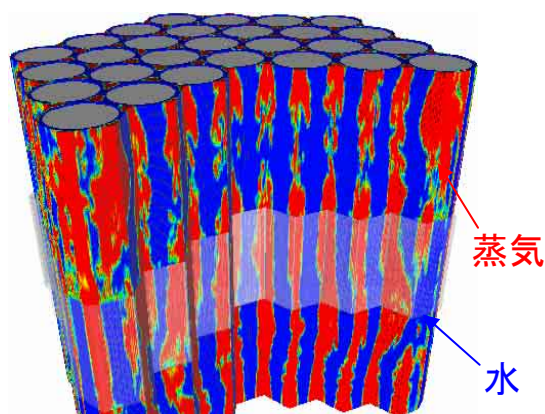
● 熱流動

➤ 詳細二相流解析手法の開発

- 機構論的モデルによる詳細メカニズムの解明
- 大規模シミュレーション技術との融合による大規模試験を必要としない炉心熱設計技術の実現

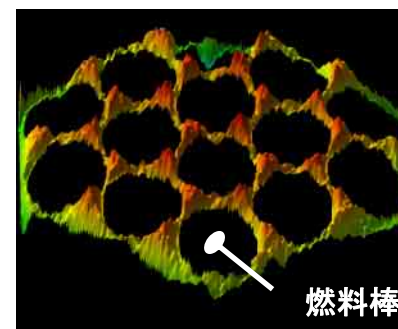
➤ 3次元熱流動計測技術の開発

- 3次元中性子トモグラフィによる燃料集合体内ボイド率分布計測
- 解析手法検証用データの取得



地球シミュレータによる
燃料集合体内熱流動解析例

0 ボイド率 1
(水のみ) (蒸気のみ)



中性子トモグラフィによる
ボイド率分布測定例