

## 計算科学技術部会セッション

## 計算科学技術に基づいた福島第一原子力発電所事故に関する最新知見

Latest knowledge about the Fukushima Daiichi accident obtained by computational science and technology

## (1) 福島環境回復及び廃炉に向けた放射性セシウムの原子スケール動態計算

(1) Numerical simulations of radiocesium dynamics at the atomic scale for environmental recovery and decommissioning in Fukushima

\*奥村 雅彦<sup>1</sup><sup>1</sup>JAEA

## 1. 背景

2011年3月11日の東北地方太平洋沖地震に起因する東京電力福島第一原子力発電所事故（1F事故）によって、いくつかの放射性核種が原子力発電所内外に放出され、その中でも特に、放射性セシウムは比較的質量が小さいため、広範囲に散布される結果となった。住民や廃炉作業従事者の安全のためには、その分布を正しく把握し、変化を予測する事が重要であるため、放射性セシウムの動態研究が活発に行われ、その知見が環境回復等に活かされてきた。例えば、地表に到達した放射性セシウムは土壌中の粘土鉱物に強く吸着し、表層土壌が放射線源となってしまったため、住民避難が余儀なくされた。一方で、この性質を利用して表層土壌を剥ぐことによって高効率で除染する事が可能となり、現在では多くの住民の帰還が実現している。また、土壌等が風雨によって河川に流れ込む事によって海まで到達するなど、これまでに多くの放射性セシウムの環境動態の知見が得られている。このように、主に自然環境中の放射性セシウム動態に加えて、廃炉作業を安全に行うためには、原子炉や建屋などの人工物及び人工環境における放射性セシウム動態の把握が必要であり、現在も調査及び研究が続けられている。

事故由来の放射性セシウムは自然環境中及び人工環境中で主にイオンとして存在しており、様々な物質に脱着して環境中を動いていく。よって、自然環境中及び人工環境中の放射性セシウム動態を把握するためには、様々な長さスケールにおける物理的・化学的現象を考える必要がある。特に、自然環境も人工環境も水が存在するケースが多いため、水和した放射性セシウムの動態を把握する事が重要であるが、その脱着反応は本質的に原子スケールの現象である。様々な物質における放射性セシウムの脱着反応研究は実験研究が主流であり。最近ではX線を用いる実験によって原子スケールの現象を捉える事が可能になってきている。しかし、実験は基本的に観測する研究手法であるため得られる情報が限られており、実験研究の結果だけから現象の機構を解明することは難しい。

近年の計算機の急速な発展だけでなく、手法及びプログラムの発展により、数値シミュレーションによる原子スケールシミュレーションは現実的な現象解析の手段になりつつある。とは言え、数値シミュレーションは計算可能な形の大きさに限界があるため、実験と同程度の大きさの系についての計算は難しい。そこで、通常、系のモデル化を行い、限られた条件下におけるシミュレーションを行う。このように、対象系は実験に比べてかなり限定されるが、シミュレーション上では原子一つ一つを制御する事が可能であったり、原子一つ一つの動きなどを詳細に観測する事が可能であるといった優れた特徴がある。本講演では、福島環境回復及び廃炉に関係した放射性セシウムの原子スケール動態研究について、モデリング及び原子制御による物理量評価に関する我々の研究結果を中心として紹介し、さらに、今後の発展の方向性の一つを示したい。

## 2. 計算科学による原子スケール放射性セシウム動態研究

## 2-1. 土壌中粘土鉱物

放射性セシウムは、土壌中の粘土鉱物に強く吸着する事が知られていたが、その吸着様態、吸着機構は明らかにされていなかった。そこで、我々は、古典分子動力学法と第一原理計算（密度汎関数法）を用いて、

粘土鉱物におけるセシウム吸着現象のシミュレーションを行った。前述の通り、計算コストから、粘土鉱物全体についてシミュレーションを実施するのは困難である。そこで、粘土鉱物に存在する全ての吸着サイトをモデル化し、セシウム吸着強度等の評価を行った。それらの評価において、モデル化のポイントやシミュレーション上での原子制御がどのように現象理解に役立つのかを示す。さらに、古典分子動力学法と密度汎関数法の問題点や限界を論じ、それらを克服する可能性がある新手法「機械学習分子動力学法」を概説し、粘土鉱物への適用例を示す。

## 2-2. コンクリート

コンクリートは骨材とセメントから成る物質であるが、主にセシウムが吸着するセメントについてのシミュレーション研究について紹介する。セメントは、珪素、カルシウム、水素、酸素からなる粘土鉱物に似た固体部分とそれらに挟まれた水和部分から構成されている。このような複雑な構造を持つため、セメントの構造の特徴をモデル化するためには、多くの原子を必要とする。そのため、主に計算コストが低い古典分子動力学法によってシミュレーション研究が行われており、セシウムの拡散、吸着過程なども調べられている。しかし、古典分子動力学法では調べられない吸着過程も存在する。例えば、セメントの固体部分表面のヒドロキシ基のプロトンの脱着によって固体部分表面の電荷が変化し、セシウム吸着現象に大きな影響を与えると考えられるが、古典分子動力学法によるシミュレーションでは化学反応過程を記述できないため、このような電荷の変化を記述する事ができない。一方で、第一原理計算はこのような化学反応を記述可能であるが、原子数が多いセメント系のシミュレーションが難しい。つまり、このような、多数の原子からなる複雑な系において化学反応を伴う現象の記述には、新しいシミュレーション手法が必要である。我々は、機械学習分子動力学法をコンクリート系に適用し、固体表面電荷の変化を取り入れたシミュレーションを行った。講演では、シミュレーションの結果と実験結果及び他のシミュレーション結果との比較を論じる。

## 3. まとめ

計算科学を用いた福島第一原子力発電所事故によって原子炉から放出された放射性セシウムの原子スケール動態研究について、最新のシミュレーション手法を用いて解析を行った。具体的には、自然環境中の土壤中粘土鉱物による吸着現象解析と、人工環境中のコンクリート中のセシウム拡散、吸着現象について、古典分子動力学、第一原理計算、機械学習分子動力学法を用いて数値シミュレーションを実施した。いずれのシミュレーションも実験研究の結果を基にモデルを構築し、実験では不可能な原子の制御や原子スケールの観測を行うことによって、実験では得られない知見を得た。今後、ハードウェア及びソフトウェアの発展により、原子スケール数値シミュレーションはますます重要な解析手法となると予想され、特に、今後数年間は機械学習を利用したシミュレーション手法の発展が期待される。

---

\*Masahiko Okumura<sup>1</sup>

<sup>1</sup>JAEA