

# 放射性希ガスによる被ばくを防止するフィルタベントシステムの開発

## (3) 分子シミュレーションによるフィルタ材料の寿命予測

Development of a Filter Venting System to Reduce Exposure Dose from Radioactive Noble Gases

### (3) Lifetime Prediction by Molecular Simulation

矢野 資<sup>1</sup>, 松崎 隆久<sup>1</sup>, 木藤 和明<sup>1</sup>, \*富永 和生<sup>1</sup>

<sup>1</sup>日立 GE ニュークリア・エナジー (株)

水蒸気と水素を選択的に透過する希ガスフィルタの候補材料の一つであるポリイミドに対し、試験と分子シミュレーションを用いて、フィルタ寿命に影響する主反応はOH<sup>-</sup>を触媒とする加水分解反応であることを解明した。また、公開文献の実験値と分子シミュレーションの結果からフィルタの寿命を予測可能とした。

**キーワード：安全システム、フィルタベント、希ガス、ポリイミド**

#### 1. 緒言

現行のフィルタベントシステムは大半の放射性物質を除去できるが、化学的に不活性な放射性希ガスは除去できない。一方、ポリイミド製フィルタ（希ガスフィルタ）を用いれば、水蒸気と水素を選択的に透過して希ガスを閉じ込めることができ、放射性物質の放出量（被ばく量）を低減できることが分かった。ここで、フィルタ寿命が長ければ、長期にわたり希ガスを閉じ込めることができ、被ばく量の低減効果を向上できる。本報ではフィルタ寿命の予測のために、寿命に影響する主反応を解明し、寿命の温度依存性を定式化した。

#### 2. 希ガスフィルタの寿命、および、その予測方法

ポリイミド製希ガスフィルタの寿命を予測する目的で、放射線照射試験、高温ばく露試験、高温水蒸気ばく露試験を行った。その結果、高温水蒸気にはく露した場合に寿命が最も短く、ポリイミド製希ガスフィルタの寿命に影響する主反応は加水分解反応であり、本反応の抑制がフィルタの長寿命化につながる事が分かった。そこで、加水分解反応の律速段階を特定するため、市販芳香族ポリイミドを対象として、分子シミュレーションを行った。その結果、ポリイミドの加水分解の主経路はOH<sup>-</sup>を触媒とする2段階の反応であり、律速段階はポリアミド構造の加水分解であることが分かった。分子シミュレーションから求めた活性化エネルギーと1ケースの既報実験値（図中■）[1]に対しアレニウス則を適用した。結果を図1に示す。寿命を支配する反応速度定数を予測したところ、予測値（図中の実線）と4ケースの既報実験値（図中●）[1]の誤差は最大で28%であった。得られた反応速度の逆数を求めることで高温水蒸気下の寿命に換算できる。これら手法により、少数の試験結果と分子シミュレーションを組み合わせることによりフィルタの寿命を予測可能とした。

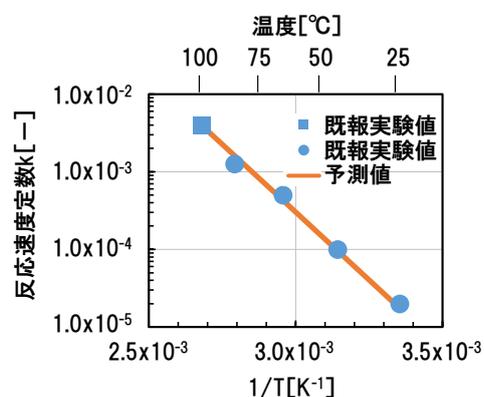


図1 反応速度定数の温度依存性  
 ■の実験値は予測に使用、  
 ●の実験値は精度評価に使用

#### 3. 結論

ポリイミドの寿命予測には分子シミュレーションの適用が有効であることが分かった。今後、高温水蒸気に対する耐性が高いポリイミド製希ガスフィルタを開発・選定することにより、本希ガスフィルタシステムの設置箇所や使用方法の自由度拡大を見込む。

#### 参考文献

[1] R. DeIasi and J. Russell, J. Appl. Polym. Sci. 15, 2965 (1971)

Tasuku Yano<sup>1</sup>, Takahisa Matsuzaki<sup>1</sup>, Kazuaki Kito<sup>1</sup> and \*Kazuo Tominaga<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Hitachi-GE Nuclear Energy, Ltd.