

難燃性低気化熱希釈剤と CHON 抽出剤を用いたプロセスによる MA 分別保管技術の開発

(6) 計算科学を用いた MA 分別保管プロセスの評価手法の構築

Development of Minor Actinides separation and storage technology by process using flame-retardant and low heat of vaporization diluent and CHON extractant

(6) Development of Evaluation Method of MA Separation and Storage Process Using Computational Science

*塚本泰介¹, 濱口涼吉¹, 小川尚樹¹, 柿木浩一¹, 島田隆¹, 山村朝雄², 田端千紘², 中瀬正彦³
¹三菱重工業株式会社, ²京都大学, ³東京工業大学,

マイナーアクチノイド (MA) を高レベル廃棄物から回収し, 安定保管を行うプロセスの実機適用の推進を目的として, 計算科学を用いたプロセス全体及び個々のプロセスの評価手法のコンセプトについて報告する。
キーワード: マイナーアクチノイド, 分離, 保管, 廃棄物処理, 直接固化, 蒸留, 水熱処理, 溶媒抽出, 計算科学, 分子シミュレーション

1. 緒言

MA を高レベル廃棄物から回収し, 安定保管を行うプロセスを実現するためには, 溶媒抽出-固化処理-保管といった一連のプロセス全体の成立性や適用性を評価したうえで, 個々のプロセス条件を策定する必要がある。加えて, 高レベル廃棄物中には MA 以外にも多種多様な化学種が含まれており, 種々の化学種がプロセス全体に与える影響も評価する必要がある。しかし, 全ての化学種に対して, 試験のみにより評価することは, 対象となる化学種が多く, 個々のプロセスに加えて, プロセス間の結節点への影響も評価が必要なため, 容易ではない。そこで, 試験を最小限とし, 効率的な実機適用の推進を目的とした, 計算科学を用いたプロセス全体及び個々のプロセスの評価手法のコンセプトを構築した。

2. MA 分別保管プロセスの評価手法コンセプト

計算科学を用いた MA 分別保管プロセスの評価手法コンセプトを Fig.1

に示す。高レベル廃棄物中には, 多数の化学種が含まれている。それらを実験するために, 抽出分離プロセス (青枠) では, 第一原理計算や分子動力学により夾雑物の影響や高酸濃度下における溶媒効果の評価を行い, 統計解析等のデータ科学を用いて抽出性能の予測を行う。また, 保管に向けた酸化物化・安定化プロセス (緑枠) では, 最低限の試験により固溶体データベースを構築し, 熱力学計算により, 多数の化学種が含まれた系における固体中の各相の存在比, 結晶構造の予測を行う。そして, 個々のプロセス評価で推算した抽出性能や固溶体物性を用いて, 化学工学計算により全体プロセス (赤枠) の評価を行い, 設備規模や二次廃棄物を極限まで小さくするためのケーススタディを行う。これにより, 社会実装に向けたステークホルダとの協議の早期実施と, プロセスの実用化に向けた開発期間の短縮に貢献することが期待できると考える。

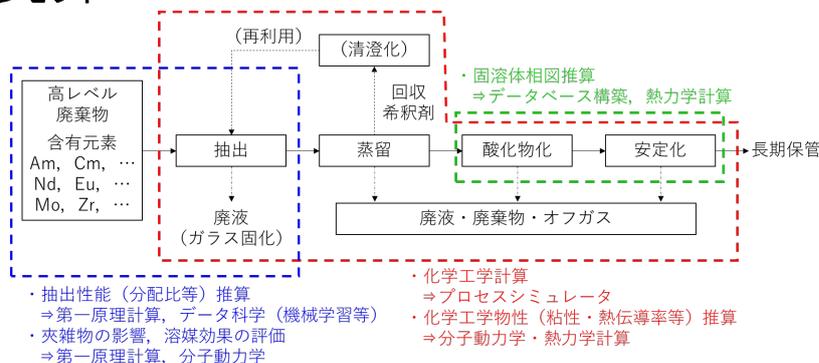


Fig.1 MA 分別保管プロセスの評価手法コンセプト

抽出性能の予測を行う。また, 保管に向けた酸化物化・安定化プロセス (緑枠) では, 最低限の試験により固溶体データベースを構築し, 熱力学計算により, 多数の化学種が含まれた系における固体中の各相の存在比, 結晶構造の予測を行う。そして, 個々のプロセス評価で推算した抽出性能や固溶体物性を用いて, 化学工学計算により全体プロセス (赤枠) の評価を行い, 設備規模や二次廃棄物を極限まで小さくするためのケーススタディを行う。これにより, 社会実装に向けたステークホルダとの協議の早期実施と, プロセスの実用化に向けた開発期間の短縮に貢献することが期待できると考える。

*Taisuke Tsukamoto¹, Ryokichi Hamaguchi¹, Naoki Ogawa¹, Koichi Kakinoki¹, Takashi Shimada¹, Tomoo Yamamura²,
Chihiro Tabata², Masahiko Nakase³

¹Mitsubishi Heavy Industries, Ltd., ²Kyoto Univ., ³Tokyo Tech